

Фотолюминесцентные свойства модулированно-легированных структур $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ с напряженными нановставками InAs и GaAs в квантовой яме

© Г.Б. Галиев[†], И.С. Васильевский*, Е.А. Климов⁺, А.Н. Клочков⁺,
Д.В. Лаврухин⁺, С.С. Пушкарёв⁺, П.П. Мальцев⁺

⁺ Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники Российской академии наук,
117105 Москва, Россия

* Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
115409 Москва, Россия

(Получена 17 февраля 2015 г. Принята к печати 25 февраля 2015 г.)

Исследованы спектры фотолюминесценции модулированно-легированных гетероструктур с квантовыми ямами $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$, содержащими тонкие напряженные вставки InAs и GaAs. Обнаружено, что введение в квантовую яму парных слоев InAs и (или) переходных барьеров GaAs толщиной 1 нм приводит к изменению формы и энергетического положения спектров фотолюминесценции по сравнению с однородной квантовой ямой $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Путем моделирования зонной структуры показано, что эти изменения происходят за счет вариации энергий и волновых функций дырок. Показано, что использование вставок InAs приводит к локализации тяжелых дырок в области слоев InAs и понижению энергии оптических переходов, а использование переходных барьеров GaAs может привести к инверсному положению подзон легких и тяжелых дырок в квантовой яме. Предложен способ раздельного управления состояниями легких и тяжелых дырок за счет варьирования толщины и положения вставок GaAs и InAs в квантовой яме.

1. Введение

Модулированно-легированные наногетероструктуры с квантовой ямой (КЯ) $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ на подложках InP являются перспективной базой для полевых транзисторов СВЧ электроники [1], а также изготовления детекторов и генераторов терагерцового диапазона частот [2]. В последние годы широко исследуется возможность модификации транспортных характеристик электронного газа в гетероструктурах путем введения различных функциональных слоев-вставок в составные квантовые ямы (СКЯ). Так, введение в КЯ $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ нанометровых слоев InAs позволяет увеличить подвижность и максимальную дрейфовую скорость [3,4], а также уменьшить эффективную массу электронов [5,6]. Другой возможностью улучшения характеристик электронного транспорта является уменьшение электрон-фононного рассеяния в КЯ за счет изменения спектра фононов при помощи слоев GaAs, AlAs и InAs [7–11].

Несмотря на разнообразие работ по оптимизации электронного транспорта в СКЯ $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$, данные о модификации спектра электронных и дырочных состояний в СКЯ при введении напряженных субслоев довольно скудны. В работе [12] обнаружено смещение линии фотолюминесценции (ФЛ) от квантовой ямы $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}$ при вариации толщины центральной вставки InAs, связанное с изменением энергии размерного квантования электронов и дырок в СКЯ. В работе [13] различия формы и положения спектров ФЛ от СКЯ со

вставками InAs связывались с вариацией технологических режимов получения гетероструктур. Насколько мы знаем, оптические свойства СКЯ $\text{InAlAs}/\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ с субслоями GaAs не были исследованы.

Цель данной работы — исследование фотолюминесцентных свойств наногетероструктур $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ для НЕМТ (high electron mobility transistor), содержащих тонкие вставки InAs и GaAs в КЯ. В работе проводится подробный анализ изменения положения и формы линий ФЛ при модификации конструкции КЯ введением тонких полупроводниковых субслоев.

2. Образцы и методы исследований

Исследуемые образцы 2–5 были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на полуизолирующих подложках InP, легированных Fe, с ориентацией $(100) \pm 0.1^\circ$. В табл. 1 представлено схематически технологическое описание образцов с указанием толщины слоев и температуры роста. Образцы представляли собой односторонне δ -легированные кремнием наногетероструктуры $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{КЯ}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{InP}$. Для сравнительного анализа влияния введения в КЯ тонких субслоев InAs и (или) GaAs был изготовлен базовый образец с однородной квантовой ямой $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ толщиной 160 Å (образец 2). Образцы с СКЯ от базового образца отличались тем, что внутрь КЯ были введены две вставки InAs толщиной 12 Å (образец 3), переходные барьеры GaAs толщиной 11 Å (образец 4) и комбинация барьеров GaAs и вставок InAs (образец 5) при сохранении суммарной толщины СКЯ, равной 160 Å. Пере-

[†] E-mail: galiev_galib@mail.ru

Таблица 1. Конструкция образцов 2–5

Слой	2	3	4	5	$d, \text{Å}$	$T_g, ^\circ\text{C}$
Сар-слой	$i\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$				60	490
Барьер	$i\text{-In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$				300	490
Легирование	$\delta\text{-Si}, N_{\text{Si}} = 1.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$				–	490
Спейсер	$i\text{-In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$				64	490
Составная квантовая яма	InGaAs (160 Å)	InGaAs (45 Å)	InGaAs (138 Å)	GaAs (11 Å)	160	430 (460*)
		InAs (12 Å)		InGaAs (34.5 Å)		
		InGaAs (45 Å)		InAs (12 Å)		
		InAs (12 Å)		InGaAs (45 Å)		
		InGaAs (45 Å)		InAs (12 Å)		
Буфер	$i\text{-In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$				2400	500
Подложка	InP				–	–

Примечание. * Температура выращивания слоев GaAs 460°C.

ходные барьеры GaAs выращивались на границах СКЯ между слоями $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ и барьерными областями $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$. Вставки InAs выращивались внутри слоев $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ и располагались симметрично относительно центра СКЯ.

Предростовая подготовка подложек проводилась путем отжига в потоке молекулярного мышьяка As_4 в эпитаксиальной камере при постепенном повышении температуры подложки со скоростью 5°C/мин до 530°C. Суммарное время отжига подложек при температурах 470–530°C с последующим снижением до температуры роста буферного слоя $T_g = 500^\circ\text{C}$ составляло 15 мин. Структуры выращивались при парциальных давлениях молекулярных потоков мышьяка $P_{\text{As}} = 1.35 \cdot 10^{-5}$, алюминия $P_{\text{Al}} = 2.82 \cdot 10^{-8}$, галлия $P_{\text{Ga}} = 7.2 \cdot 10^{-8}$ и индия $P_{\text{In}} = 1.82 \cdot 10^{-7}$ Торр. Температура роста составной квантовой ямы для всех образцов была одинаковой и равнялась $T_g = 430^\circ\text{C}$. Температура подложки при выращивании барьеров GaAs (образцы 4 и 5) равнялась 460°C.

Фотолуминесцентные исследования проводились в комбинированном оптическом криостате при температурах $T = 300$ и 87 К, при этом образцы находились в атмосфере азота. Для накачки использовался He–Ne-лазер с энергией фотонов излучения 1.96 эВ и плотностью мощности 250 мВт/см². Для регистрации сигнала от исследуемых образцов в инфракрасной области использовался неохлаждаемый фотодиод Hamamatsu G8372-01 на основе InGaAs, а в области видимого света — охлаждаемый фотоэлектронный умножитель ФЭУ-79(S1). Установка регистрации спектров ФЛ позволяла определить положение спектрального пика с точностью не хуже 0.005 эВ.

3. Результаты исследований и их обсуждение

3.1. Спектроскопия фотолюминесценции

Длина волны и интенсивность возбуждающего лазерного излучения позволили регистрировать спектры ФЛ от всех активных слоев в исследуемых образцах. На рис. 1 представлены обзорные спектры ФЛ исследуемых образцов при $T = 87$ К в диапазоне энергий фотонов $0.6 < \hbar\omega < 1.7$ эВ, на которых проявляются четыре диапазона с отчетливыми особенностями в спек-

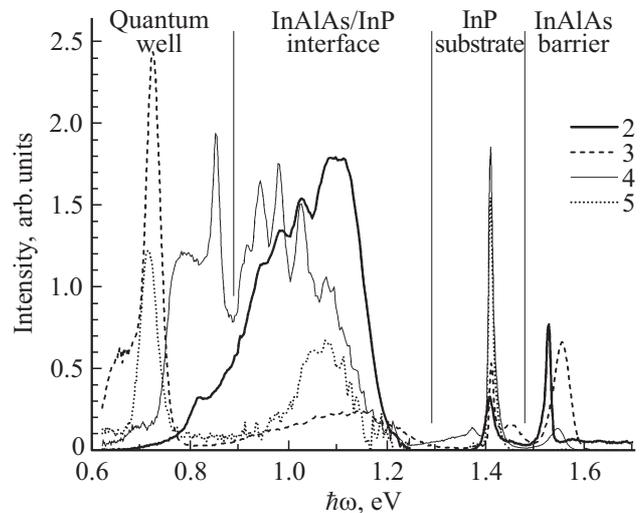


Рис. 1. Спектры ФЛ образцов 2–5 при 87 К. Вертикальные линии разделяют области спектра от различных слоев наноструктур.

Таблица 2. Положение и полуширина пиков ФЛ от СКЯ

Номер образца	$(\hbar\omega)_{\max}$, эВ	$\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$, мэВ
2	0.820	110
3	0.678	113
	0.726	33
4	0.794	83
	0.852	24
5	0.717	40

трах ФЛ. Сопоставление данных диапазонов с энергиями запрещенной зоны в различных слоях и с расчетными энергиями переходов между подзонами КЯ позволяет определить происхождение групп пиков: диапазон 0.6–0.9 эВ относится к оптическим переходам в КЯ/СКЯ, 0.9–1.3 эВ — к рекомбинации электронов и дырок на гетерогранице InAlAs(буферный слой)/InP(подложка), 1.35–1.45 эВ — к межзонной люминесценции в подложке InP и переходам с участием примесей в InP, 1.5–1.6 эВ — к буферному слою InAlAs.

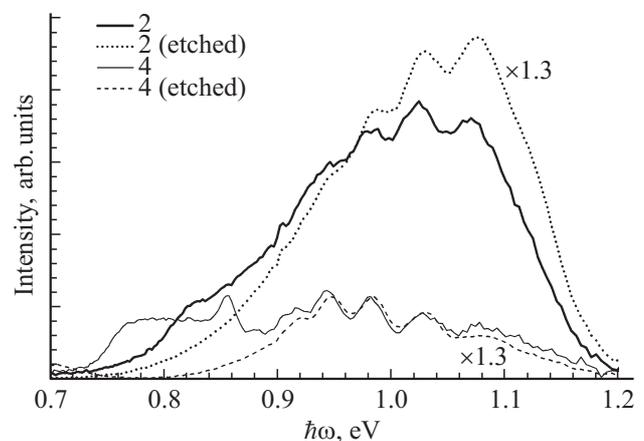
Рассмотрим более подробно оптические переходы в диапазоне 0.6–0.9 эВ, соответствующем рекомбинации двумерного электронного газа и фотовозбужденных дырок в СКЯ. В табл. 2 представлены энергетические положения пиков ФЛ, $(\hbar\omega)_{\max}$, а также значения ширины на полувысоте (полуширины) этих пиков $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$, определенные путем разложения спектров на гауссовы функции аналогично работам [14,15]. Как видно из рис. 1, спектры ФЛ для образцов различаются интенсивностью, формой, а также количеством пиков и энергетическим положением максимумов. Эти различия, скорее всего, обусловлены конструктивными особенностями СКЯ, так как технологические режимы роста для всех образцов были одинаковыми. Так, образцы 4 и 5, содержащие нанослой GaAs по краям СКЯ, имеют меньшую толщину узкозонного слоя InGaAs ($\sim 138 \text{ \AA}$) по сравнению с образцами 2 и 3 соответственно. Ширины запрещенных зон GaAs (1.51 эВ) и $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ (1.52 эВ) близки, поэтому слои GaAs служат переходными барьерами для электронов в СКЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs. Модификации конструкции СКЯ путем введения субслоев GaAs должны приводить к увеличению энергии размерного квантования электронов и дырок и вызывать синее смещение линий фотолюминесценции, однако экспериментально наблюдается противоположное: пик ФЛ от СКЯ при сравнении в парах образцов 2–4 и 3–5 сдвигается в сторону меньших энергий.

Положение основной полосы в спектрах ФЛ от СКЯ образцов 3 и 5, содержащих парные вставки InAs, сдвигается на $\sim 100 \text{ мэВ}$ в сторону меньших энергий по сравнению с образцами 2 и 4 соответственно, как видно из рис. 1. Меньшее значение энергий переходов в образцах со вставками InAs, по нашему мнению, связано с увеличением среднего содержания индия в СКЯ и

уменьшением эффективной ширины запрещенной зоны, что согласуется с данными [16]. В следующем разделе, посвященном расчету зонной структуры и квантовых состояний носителей заряда в СКЯ, более подробно будет обсуждаться природа смещений пиков ФЛ при вариации конструкции СКЯ.

Рассмотрим спектры ФЛ в диапазоне энергий фотонов от 0.9 до 1.3 эВ. Этот диапазон может соответствовать излучательной рекомбинации электронов и дырок вблизи границы раздела буфер InAlAs/подложка InP, зонная структура которой — гетеропереход II рода. Согласно опубликованным данным [17–21], энергия оптических переходов на гетерогранице InAlAs/InP может варьироваться в широком диапазоне энергий фотонов от 0.9 до 1.35 эВ, а пики ФЛ могут иметь ширину порядка нескольких десятых эВ. Значительный разброс опубликованных значений энергии данного перехода объясняется неидеальностью гетерограницы InAlAs/InP, обусловленной образованием переходных субслоев из полупроводниковых твердых растворов со сложным элементным профилем, который зависит от технологических условий формирования интерфейса InAlAs/InP во время предэпитаксиальной подготовки подложки InP и начального процесса эпитаксиального роста буфера InAlAs.

Из рис. 1 видно, что наблюдаемые в диапазоне энергий 0.9–1.3 эВ полосы ФЛ имеют значительную ширину и частично перекрываются с переходами от СКЯ. Для точного определения природы и идентификации данных полос было проведено последовательное жидкостное селективное травление слоев наногетероструктур до подложки и измерение спектров ФЛ после каждого этапа. На рис. 2 представлены спектры ФЛ при $T = 87 \text{ К}$ образцов 2 и 4 до и после удаления слоев СКЯ. Различие спектров на рис. 1 и 2 (до травления СКЯ) объясняется измерениями на различных участках эпитаксиальной пластины. Исчезновение из спектров ФЛ после удаления слоев InGaAs линий, приведенных в табл. 2, подтверждает, что переходы в диапазоне 0.7–0.9 эВ связаны с рекомбинацией захваченных в СКЯ носителей заряда.

**Рис. 2.** Спектры ФЛ образцов 2 и 4 до и после травливания квантовой ямы. $T = 87 \text{ К}$.

После травли СКЯ фотогенерированные носители в основном захватываются и термализуются в области гетерограницы и интенсивность полосы ФЛ 0.9–1.3 эВ увеличивается приблизительно в 3 раза. После полного травли буферного слоя InAlAs и переходных слоев на гетерогранице InAlAs/InP до подложки InP из спектров ФЛ всех исследованных образцов исчезала полоса 0.9–1.3 эВ и сохранялись только линии в области 1.35–1.45 эВ, связанные с рекомбинацией носителей заряда в подложке.

На рис. 3 представлены зависимости интенсивности в максимуме сигнала ФЛ (I_{max}) от мощности лазерной накачки (P) для оптических переходов в КЯ ($\hbar\omega \approx 0.82$ эВ) и вблизи гетерограницы InAlAs/InP ($\hbar\omega \approx 1.09$ эВ) для базового образца 2. Видно, что максимальная интенсивность обоих пиков растет линейно с увеличением мощности возбуждения P . При этом ширина на полувысоте пика при 1.09 эВ почти не зависит от P (240 и 230 мэВ при $P = 62.5$ и 250 Вт/см²

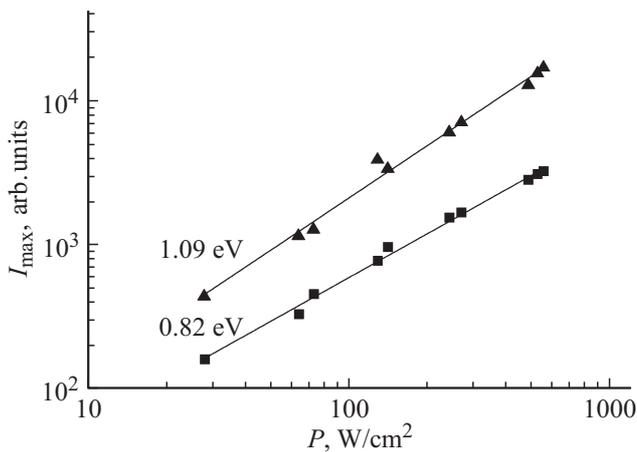


Рис. 3. Зависимость интенсивности линий ФЛ с энергиями $\hbar\omega = 0.82$ и 1.09 эВ от плотности мощности накачки для образца 2.

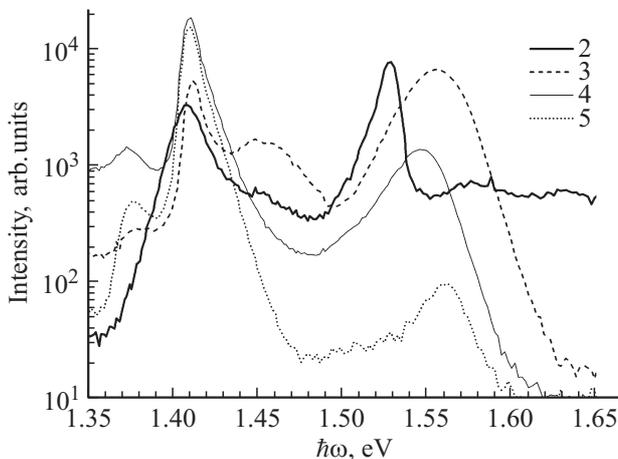


Рис. 4. Спектры ФЛ подложки и буферных слоев образцов 2–5.

Таблица 3. Положение и полуширина пиков в спектрах ФЛ от буферного слоя $In_xAl_{1-x}As$

Номер образца	$(\hbar\omega)_{max}$, эВ	$\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$, мэВ	x
2	1.535	25	0.513
3	1.556	39	0.504
4	1.546	35	0.508
5	1.562	30	0.502

соответственно), а положение максимумов пиков не изменяется. Подобное поведение энергии и интенсивности сигнала ФЛ для диапазона 0.9–1.3 эВ от мощности лазерного возбуждения наблюдалось для всех образцов и характерно для пространственно прямых межзонных переходов в квантовых ямах.

Наблюдаемые в спектрах ФЛ особенности в области энергий фотонов 1.33–1.65 эВ (рис. 4) относятся к оптическим переходам в подложке InP и буферном слое InAlAs. Узкий пик при $\hbar\omega = 1.41$ эВ соответствует экситонной рекомбинации в InP, „плечо“ в области более высоких энергий (пик при $\hbar\omega = 1.45$ эВ для образца 3) — межзонной рекомбинации свободных электронов и дырок в InP, а пик при 1.38 эВ — переходу с участием примесного уровня Fe, так как подложки InP были намеренно легированы Fe для придания им полуизолирующих свойств.

В энергетическом положении межзонного перехода от слоя InAlAs при 1.5–1.6 эВ от различных образцов наблюдается небольшой разброс, связанный с точностью и воспроизводимостью технологических условий роста. В табл. 3 представлены энергетические положения максимумов пиков $(\hbar\omega)_{max}$, значения ширины пиков на полувысоте $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$ и доли индия x в тройном растворе $In_xAl_{1-x}As$, определенные по зависимости ширины запрещенной зоны (в эВ) $In_xAl_{1-x}As$ от состава [22]:

$$E_g(In_xAl_{1-x}As) = 3.089 - 3.402x + 0.72x^2.$$

Представленные в табл. 3 результаты показывают, что доля x в $In_xAl_{1-x}As$ отличалась от значения в решеточно-согласованном к подложке InP твердом растворе $In_{0.52}Al_{0.48}As$ не более чем на 0.02, а в процессе эпитаксиального роста состав твердого раствора $In_xAl_{1-x}As$ выдерживался с точностью $\Delta x < 0.01$. Наблюдаемое различие доли x в буферных слоях $In_xAl_{1-x}As$ и связанное с этим изменение энергетического положения пиков мы связываем с дрейфом парциальных давлений источников In и (или) Al в течение проведения процесса эпитаксиального роста, который в некоторых случаях может достигать 3% [23].

3.2. Моделирование зонной структуры

Для анализа энергий оптических переходов рассчитывались состояния электронов и дырок в СКЯ на

основе решения самосогласованной системы уравнений Шредингера–Пуассона в приближении эффективной массы [24,25]. Из-за трансляционной инвариантности огибающие волновые функции (ВФ), описывающие движение носителей заряда вдоль плоскости структуры (оси x и y), являются плоскими волнами. Уравнение Шредингера в поперечном направлении z для огибающих ВФ $\psi_{ai}(z)$ электронов, тяжелых и легких дырок имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m_\alpha^*(z)} \frac{d}{dz} \right) + V_\alpha(z) \right] \psi_{ai}(z) = E_{ai} \psi_{ai}(z),$$

где индексы $\alpha = e, hh, lh$ обозначают электроны, тяжелые дырки и легкие дырки соответственно, $m_\alpha^*(z)$ — эффективная масса, E_{ai} — энергия i -й подзоны размерного квантования, $V_\alpha(z)$ — потенциальная энергия носителей заряда, которая для электронов имеет вид

$$V_e(z) = -e\varphi_N(z) + V_{XC}(z) + \Delta E_e(z),$$

где $\varphi_N(z)$ — электростатический потенциал Хартри в одноэлектронном приближении, $V_{XC}(z)$ — обменно-корреляционная поправка в кулоновском взаимодействии электронов, учитывающая многочастичные эффекты, рассчитываемая в приближении локальной плотности [26], $\Delta E_e(z)$ — слагаемое, описывающее разрывы края зоны проводимости на гетерограницах.

Потенциальная энергия тяжелых и легких дырок описывается пространственным профилем краев валентных зон:

$$V_{hh,lh}(z) = e\varphi_N + \Delta E_{hh,lh}.$$

Концентрация и пространственное распределение электронной плотности определялись из следующего выражения:

$$n(z) = kT \sum_i \frac{\langle m_{ei}^* \rangle}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_{ei}}{kT} \right) \right] |\psi_{ei}(z)|^2,$$

где E_F — уровень Ферми, $\langle m_{ei}^* \rangle$ — усредненная между различными слоями СКЯ эффективная масса электронов i -й подзоны [27],

$$\frac{1}{\langle m_{ei}^* \rangle} = \int \frac{1}{m_e^*(z)} |\psi_{ei}(z)|^2 dz,$$

k — постоянная Больцмана.

Потенциал Хартри $\varphi_N(z)$ является решением уравнения Пуассона

$$\frac{d}{dz} \left[\epsilon_0 \epsilon(z) \frac{d}{dz} \varphi_N(z) \right] = e[n(z) - N_D(z)],$$

где $N_D(z)$ — распределение плотности заряда ионизованных доноров.

В табл. 4 приведены использованные при расчете значения материальных параметров полупроводников для

Таблица 4. Параметры полупроводников, используемые при моделировании

Параметр	In _{0.52} Al _{0.48} As	In _{0.53} Ga _{0.47} As	InAs	GaAs
E_g , эВ	1.52	0.80	0.41	1.51
$E_C - E_{V,hh}$, эВ	1.52	0.80	0.45	1.32
$E_C - E_{V,lh}$, эВ	1.52	0.80	0.61	0.94
ΔE_e , эВ	0.51	0	-0.18	0.32
m_e/m_0	0.069	0.043	0.026	0.067
m_{hh}/m_0	0.38	0.293	0.26	0.33
m_{lh}/m_0	0.10	0.057	0.027	0.09
ϵ	12.7	14.1	15.2	12.9
a_c , эВ	—	—	-6.67	-9.3
a_v , эВ	—	—	-1	-1.21
b , эВ	—	—	-1.8	-2
d , эВ	—	—	-3.6	-4.8
a , Å	5.861	5.861	6.0583	5.6533

температуры $T = 87$ К [22,28]. Непараболичность зоны проводимости, которая может быть существенной для узкозонных полупроводников InAs и In_{0.53}Ga_{0.47}As [29], не учитывалась. Для дырок использовались значения эффективных масс вдоль кристаллографического направления [001], параллельного оси z . Изменение ширины запрещенной зоны, а также величина расщепления краев валентных зон для легких и тяжелых дырок под действием упругих напряжений в тонких слоях InAs и GaAs рассчитывались в приближении деформационных потенциалов по методике, описанной в [30]. Использовавшиеся значения деформационных потенциалов a_c , a_v , b и d приведены в табл. 4. Расчет проводился для температуры 87 К.

На рис. 5 представлены рассчитанные пространственные профили краев зон $E_C(z)$, $E_{V,hh}(z)$ и $E_{V,lh}(z)$, а также энергии E_{ai} и квадраты огибающих ВФ $|\psi_{ai}(z)|^2$ основных состояний электронов и дырок в СКЯ для образцов 2–5 (энергия отсчитывается от уровня Ферми $E_F = 0$ эВ). Концентрация легирующей примеси выбиралась такой, чтобы плотность электронного газа в СКЯ была равна $1.4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ в соответствии с экспериментальными измерениями эффекта Холла и электропроводности. При такой плотности электронов для всех образцов ниже уровня Ферми располагается только один электронный уровень размерного квантования E_{e1} и в основном электроны заполняют первую подзону, меньшая часть заполняет вторую подзону за счет тепловой активации.

Действие переходных барьеров GaAs и вставок InAs на состояния электронов и дырок характеризуется величиной разрывов зоны проводимости и валентных зон на границах этих слоев с InGaAs и InAlAs. Существенное влияние на положение краев зон в тонких вставках GaAs и InAs оказывают тетрагональные упругие напряжения, которые приводят к изменению ширины запрещенной зоны по сравнению с объемным значением и к расщеплению валентной зоны. Так, слой InAs,

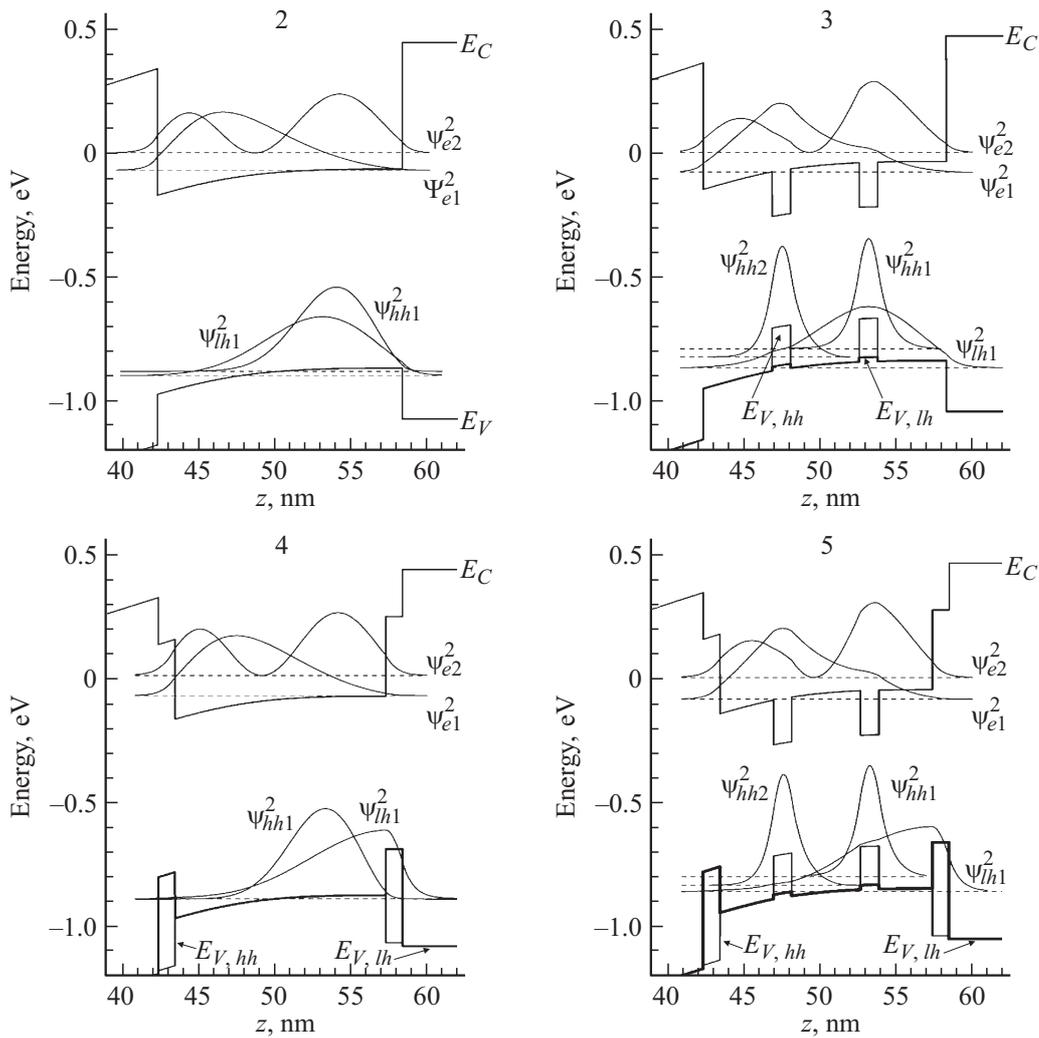


Рис. 5. Зонные диаграммы СКЯ образцов 2–5: показаны профили краев зон, квадраты волновых функций $|\psi_{ai}|^2$, уровни энергии обозначены пунктиром.

параметр решетки которого больше, чем подложки InP, оказывается подвержен двухосному сжатию в плоскости роста и одноосному растяжению в поперечном направлении. Под действием деформаций расстояние от зоны проводимости до валентных зон в InAs увеличивается и край валентной зоны тяжелых дырок оказывается выше по энергии на 0.16 эВ края зоны легких дырок. Параметр решетки GaAs, напротив, меньше, чем подложки InP, поэтому смещение краев зон под действием деформаций противоположное — ширина запрещенной зоны уменьшается, и выше по энергии оказывается край зоны легких дырок. Таким образом, потенциальный профиль $V_\alpha(z)$ в СКЯ для легких и тяжелых дырок за счет расщепления валентной зоны во вставках InAs и GaAs различается.

Рассмотрим влияние введения слоев InAs и GaAs на волновые функции и энергии носителей заряда в СКЯ. В табл. 5 приведены рассчитанные энергии и вероятности межзонных оптических переходов для СКЯ

различных конструкций. Энергии оптических переходов оценивались как разность энергий электронных (E_{ei}) и дырочных (E_{hj}) уровней. Вероятность соответствующих переходов оценивалась как квадрат интеграла перекрытия $|M|^2$ огибающих волновых функций электронов и дырок [31]:

$$M_{ij} = \int \psi_{ei} \psi_{hj} dz.$$

На симметрию ВФ электронов и дырок существенное влияние оказывает изгиб зон в области СКЯ, связанный с потенциалом δ -слоя ионизованных доноров (рис. 5). Электрическое поле доноров приводит к наклону зон в СКЯ, в результате чего электроны локализируются вблизи верхней границы СКЯ ближе к δ -слою примесей, а дырки — вблизи нижней. В результате ограничение по четности на разрешенные межзонные оптические переходы, которое накладывается в прямоугольных КЯ с симметричным потенциалом, в односторонне-легированных структурах снимается. Переходы между электронными

Таблица 5. Рассчитанные энергии и интегралы перекрытия оптических переходов в СКЯ

Номер образца	$E_{ei}-E_{hj}$, эВ	$ M ^2$	Тип перехода
2	0.811	0.390	$e1-hh1$
	0.828	0.640	$e1-lh1$
	0.881	0.584	$e2-hh1$
	0.899	0.353	$e2-lh1$
3	0.713/0.745	0.303/0.516	$e1-hh1/e1-hh2$
	0.788	0.677	$e1-lh1$
	0.793/0.825	0.524/0.172	$e2-hh1/e2-hh2$
4	0.815	0.476	$e1-lh1$
	0.820	0.514	$e1-hh1$
	0.897	0.374	$e2-lh1$
	0.902	0.468	$e2-hh1$
5	0.716/0.750	0.330/0.523	$e1-hh1/e1-hh2$
	0.776	0.502	$e1-lh1$
	0.804/0.838	0.516/0.228	$e2-hh1/e2-hh2$

и дырочными уровнями с номерами различной четности становятся разрешенными.

Рассчитанная энергия перехода из основной подзоны электронов ($e1$) в подзоны легких ($lh1$) и тяжелых ($hh1$) дырок для базового образца 2 без вставок (см. табл. 5) находится в хорошем согласии с экспериментом (табл. 2). Энергия краев подзон тяжелых и легких дырок различается из-за различия эффективных масс и энергий размерного квантования. Основным состоянием дырок является подзона $hh1$, уровень которой практически совпадает с дном валентной зоны в КЯ. В спектрах может присутствовать полоса с участием второй подзоны электронов, $e2-hh1$ и $e2-lh1$, но из-за перекрытия спектров ФЛ от гетерограницы InAlAs/InP и КЯ (рис. 2) невозможно установить, присутствует ли она.

При введении вставок InAs в СКЯ для электронов образуются дополнительные потенциальные ямы, которые приводят к перераспределению электронной плотности, появлению локальных максимумов ВФ электронов в слоях InAs и понижению энергии основного уровня в СКЯ. Для тяжелых и легких дырок вставки InAs также формируют дополнительные потенциальные ямы по отношению к InGaAs. Наиболее существенное влияние слои InAs оказывают на состояния тяжелых дырок, которые благодаря большой эффективной массе могут локализоваться внутри вставок InAs толщиной $\sim 10 \text{ \AA}$. В спектре тяжелых дырок образуются два уровня квантования, энергии которых выше края зоны проводимости в InGaAs. Из рис. 5 видно, что волновые функции основного и первого возбужденного состояний тяжелых дырок локализованы соответственно в нижней и верхней вставках и почти не перекрываются между собой. Отсутствие связанных гибридных состояний

тяжелых дырок в системе двух вставок объясняется электрическим полем доноров, приводящим к снижению симметрии потенциальной энергии дырок в СКЯ.

Парный характер состояний тяжелых дырок в слоях InAs, на наш взгляд, является важным фактором при рассмотрении спектров ФЛ образцов 3 и 5. Из табл. 5 видно, что ВФ состояния $e1$ значительно сильнее перекрывается с ВФ тяжелых дырок $hh2$, локализованной в верхней вставке InAs, чем с ВФ $hh1$, поэтому вероятность излучательной рекомбинации, которая пропорциональна $|M|^2$, с участием состояния $hh2$ больше. С другой стороны, подзона $hh2$ расположена выше по энергии для дырок, чем подзона $hh1$, поэтому она обладает меньшей концентрацией дырок. Можно ожидать, что из-за слабой туннельной связи состояний $hh1$ и $hh2$ время перехода дырки из подзоны $hh2$ в подзону $hh1$ будет значительно больше, чем время внутривозонной релаксации дырок в состояние с наименьшей энергией за счет испускания фононов. В этих условиях концентрация дырок в подзоне $hh2$ будет сравнима с подзоной $hh1$, и в спектрах ФЛ будут наблюдаться переходы с участием дырок обеих подзон. Таким образом, пик ФЛ образца 3 при 0.68 эВ, обладающий значительной полушириной, является суммой оптических переходов $e1-hh1$ и $e1-hh2$.

В результате локализации тяжелых дырок внутри слоев InAs в образцах со вставками 3 и 5 энергия оптического перехода $e1-hh1$ снижается по сравнению с наблюдаемой в образцах без InAs (табл. 5). Однако рассчитанная энергия ФЛ образцов 3 и 5 недостаточно точно описывает спектры ФЛ. Полученное расхождение расчетов с экспериментом могло возникнуть либо из-за недостатков модели, т.е. из-за проблемы применимости приближения огибающей функции к слоям толщиной в несколько монослоев, либо из-за несоответствия реального элементного профиля (толщин слоев) в гетероструктурах технологически заданному. В работе [32] исследовались оптические свойства нелегированных КЯ InGaAs/InAs/InGaAs с различной толщиной слоя InAs и было обнаружено увеличение расхождения экспериментальных и рассчитанных энергий оптических переходов при уменьшении толщины InAs до нескольких монослоев, что связано с увеличением влияния шероховатости гетерограниц и, следовательно, флуктуаций толщины слоя InAs на энергии состояний носителей заряда по мере снижения толщин слоев гетероструктур. Мы провели моделирование зонных диаграмм СКЯ образца 3 при вариации толщин вставок InAs, на рис. 6 приведена соответствующая зависимость энергий межзонных переходов. Сдвиг линий оптических переходов при изменении толщины InAs в основном происходит за счет зависимости энергий размерного квантования состояний $hh1$ и $hh2$ тяжелых дырок внутри слоев InAs. Рассчитанные энергии переходов хорошо описывают эксперимент при толщине вставок InAs 18–21 \AA , что на 2–3 монослоя больше технологически заданной толщины.

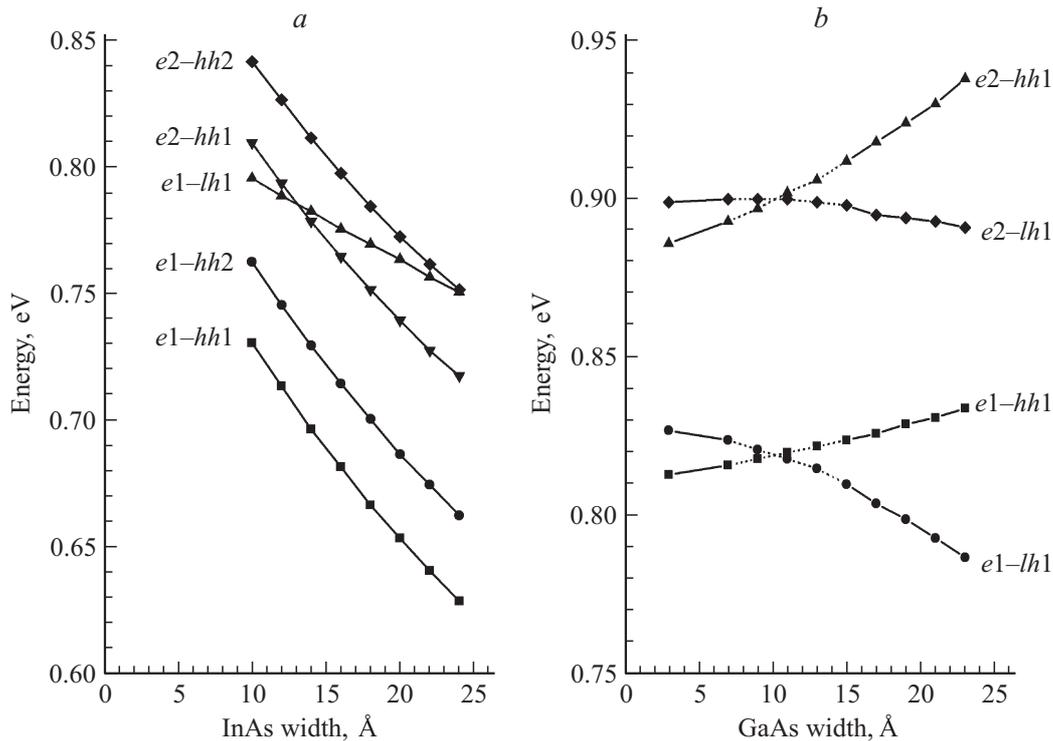


Рис. 6. Зависимость энергий межзонных оптических переходов от толщин вставок InAs (a) и GaAs (b) в СКЯ образцов 3 и 4 соответственно.

Переходные слои GaAs в образцах 4 и 5 являются барьерами для электронов и тяжелых дырок, они уменьшают ширину потенциальной ямы от 160 до 138 Å и увеличивают энергию размерного квантования для этих носителей заряда, что приводит к увеличению энергии перехода $e1-hh1$ на 10 мэВ. Для легких дырок GaAs формирует потенциальную яму по отношению к InGaAs на границах СКЯ. В результате уровень энергии легких дырок $lh1$ поднимается выше $hh1$ и становится основным уровнем для дырок, т.е. происходит инверсия взаимного положения краев подзон легких и тяжелых дырок. На рис. 6 приведена рассчитанная зависимость энергий межзонных переходов образца 4 при вариации толщины переходных барьеров GaAs. Видно, что при увеличении толщины слоя GaAs энергия оптических переходов с участием тяжелых дырок возрастает, а легких дырок, наоборот, уменьшается. Инверсия положения уровней $lh1$ и $hh1$ происходит при толщине слоев GaAs > 10 Å, и основным оптическим переходом становится $e1-lh1$. На рис. 6 кривые вблизи пересечения энергий переходов $e1-hh1$ и $e1-lh1$, $e2-hh1$ и $e2-lh1$ обозначены пунктиром. В окрестности точек пересечения из-за совпадения рассчитанных уровней энергии тяжелых и легких дырок должны образовываться гибридные состояния из линейной комбинации ВФ легких и тяжелых дырок. В этом случае должен происходить антикроссинг подзон размерного квантования дырок и для определения зависимости энергий переходов от толщин слоев приближение независимых дырочных зон неприменимо,

должно использоваться многозонное приближение огибающей ВФ.

Таким образом, сдвиг спектров ФЛ для образца 4 в сторону меньших энергий по сравнению с образцом 2 объясняется образованием потенциальной ямы для легких дырок в слое GaAs. Рассчитанные энергии переходов близки к экспериментальным при толщине вставок GaAs ~ 20 Å.

3.3. Обсуждение

На основе анализа состояний носителей заряда в СКЯ и экспериментальных спектров ФЛ показано, что использование тонких вставок GaAs и InAs позволяет эффективно управлять энергией и ВФ дырок в наногетероструктурах InGaAs/InAlAs на подложках InP и, следовательно, оптическими свойствами гетероструктур. Введение вставок InAs приводит к увеличению амплитуды ВФ электронов и локализации тяжелых дырок в области вставок. При этом энергия ФЛ снижается (в основном за счет сдвига вверх энергии тяжелых дырок), а интенсивность ФЛ возрастает за счет усиления перекрытия электронной и дырочной ВФ. Парный характер уровней тяжелых дырок из-за раздельной локализации состояний в каждой из вставок при слабой туннельной связи приводит к уширению линии фотолюминесценции СКЯ.

Введение переходных слоев GaAs создает барьеры для тяжелых дырок. Вставки GaAs, помещенные на

гетерогранице InGaAs/InAlAs, уменьшают ширину КЯ для тяжелых дырок, но оказывают незначительное влияние на энергию подзон тяжелых дырок. Для легких дырок слои GaAs, напротив, создают потенциальную яму и приводят к сдвигу вверх краев подзон. Интересно отметить, что в СКЯ с переходными барьерами GaAs ширина и глубина потенциальной ямы для легких дырок может быть заметно выше, чем для тяжелых дырок. Это приводит при достаточной толщине вставки (10 Å, если вставка расположена на границе InGaAs/InAlAs) к инверсному положению дырочных подзон в СКЯ, при котором основной является подзона легких дырок. Идея получения инвертированного расположения подзон легких и тяжелых дырок при помощи упругих напряжений в КЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs предлагалась в нескольких работах [33,34]. Для этого доля x индия в слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ уменьшалась по сравнению с решеточно-согласованным к подложке InP значением ($x = 0.53$), и из-за двухосного растяжения слоя $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ край валентной зоны легких дырок сдвигался вверх относительно зоны тяжелых дырок. Основное отличие нашей работы состоит в том, что для изменения состояний дырок используются тонкие (1 нм) напряженные вставки InAs и GaAs в КЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs.

Таким образом, расщепление потолка валентной зоны в упругонапряженных наноямах InAs и нанобарьерах GaAs позволяет отдельно управлять энергией оптических переходов от подзон тяжелых и легких дырок в гетероструктурах на основе InGaAs/InAlAs на подложках InP за счет изменения толщины и положения вставок. Высокая чувствительность энергий дырок к толщине вставок (рис. 6) указывают на то, что особое внимание необходимо уделять технологии получения гетероструктур со вставками, контролю толщин слоев с точностью до 1 монослоя. Также толщина вставок не должна превышать критическую толщину, при которой происходит релаксация упругих напряжений с образованием дефектов. Размытие гетерограниц вставок, их уширение могут привести к ослаблению описанных эффектов размерного квантования легких и тяжелых дырок в наногетероструктурах, а образование дефектов — к снижению интенсивности ФЛ.

Рассмотрим природу спектров ФЛ от границы раздела InAlAs/InP в диапазоне энергий 0.9–1.3 эВ. Можно выделить несколько особенностей наблюдаемых спектров ФЛ. Во-первых, наблюдается тонкая структура полосы 0.9–1.3 эВ, причем форма спектров в исследуемых образцах существенно различается. Во-вторых, максимальная интенсивность сигнала ФЛ для некоторых образцов (2, 4 и 5) превышает или сравнима с интенсивностью сигнала ФЛ от СКЯ. В третьих, наблюдается линейная зависимость интенсивности ФЛ от мощности накачки (рис. 3). Указанные особенности не характерны для гетеропереходов II рода и указывают на формирование дополнительной квантовой ямы между слоями InAlAs и InP с гетеропереходом I рода. Подобные спектры ФЛ возможны в случае наличия тонкого слоя

InAs на границе раздела InAlAs/InP [19]. В нашем случае тонкий слой InAs на интерфейсе InAlAs/InP мог сформироваться во время предростового отжига подложки InP в результате замещения атомов P атомами As и сегрегации атомов In, которая привела к обогащению индием приповерхностного слоя. При этом в результате случайных процессов могла образоваться нерезкая гетерограница, содержащая переходный слой InAs между InAlAs и InP неопределенной толщины [35]. Толщина и латеральная однородность этого субслоя зависят от таких параметров, как температура и время отжига, давление мышьяка при отжиге подложки. При этом, возможно, замещение атомов P атомами As на поверхности подложки было неполным и образовался твердый раствор InAsP со сложным пространственным профилем состава. Также возможна сегрегация In из субслоя InAs в InAlAs на начальном этапе роста буфера, приводящая к обогащению индием нижних слоев буферного слоя.

Образование на границе раздела InAlAs/InP переходной квантовой ямы приводит к увеличению интенсивности оптических переходов за счет увеличения перекрытия электронных и дырочных ВФ и к сдвигу соответствующего пика в спектре ФЛ в сторону меньших энергий по сравнению с идеальным гетеропереходом II рода. Наблюдаемая тонкая структура полосы 0.9–1.3 эВ и распределение пиков по энергиям, мы полагаем, вызваны флуктуациями толщины тонкого слоя InAs или же образованием островков InAs разных размеров на границе InAlAs/InP. Изменения энергии оптических переходов за счет эффектов размерного квантования при последовательном изменении толщины InAs на 1 монослой наблюдаются в виде отдельных пиков в спектрах ФЛ.

4. Заключение

Исследованы спектры ФЛ модулированно-легированных гетероструктур с СКЯ InAlAs/InGaAs/InAlAs, содержащими парные нановставки InAs толщиной ~ 1 нм, симметрично расположенные относительно центра КЯ, и (или) переходные барьеры GaAs на границах КЯ. В диапазоне энергий фотонов $0.9 < \hbar\omega < 1.3$ эВ обнаружена полоса излучения с высокой интенсивностью и тонкой структурой. Показано, что происхождение этой полосы связано с ненамеренным образованием переходного полупроводникового слоя, обогащенного InAs, на границе буфера InAlAs и подложки InP в процессе предростового отжига подложки. Этот узкозонный слой формирует КЯ для электронов и дырок, что приводит к увеличению перекрытия электронных и дырочных состояний и к сдвигу соответствующего пика в спектре ФЛ в сторону меньших энергий по сравнению с идеальным гетеропереходом II рода InAlAs/InP. Наблюдаемая тонкая структура полосы 0.9–1.3 эВ и распределение пиков по энергиям объясняются неоднородностью толщины переходного слоя по площади гетероструктуры.

Обнаружено, что положение максимумов и форма спектров ФЛ от СКЯ в диапазоне $0.6 < h\omega < 0.9$ эВ существенно изменяются при введении в структуру тонких вставок InAs и GaAs толщиной ~ 1 нм. Путем моделирования зонной структуры СКЯ показано, что эти изменения в основном происходят за счет вариации энергий и ВФ носителей заряда в валентной зоне. Использование вставок InAs приводит к локализации тяжелых дырок в области слоев InAs и понижению энергии оптических переходов. Использование барьеров GaAs может привести к инверсному положению дырочных подзон в СКЯ, при котором наименьшей энергией в СКЯ обладает подзона легких дырок. Потенциальный профиль для тяжелых и легких дырок в СКЯ отличается из-за расщепления потолка валентной зоны в упругонапряженных слоях InAs и GaAs. Это дает возможность разделять энергиями и ВФ легких и тяжелых дырок за счет варьирования толщины и положения вставок GaAs и InAs. Предложенный способ управления оптическими свойствами гетероструктур, содержащих КЯ InGaAs/InAlAs на подложках InP, может быть использован для разработки оптических и фотоэлектрических устройств.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, соглашение № 14.604.21.0003 (уникальный идентификатор RFMEFI60414X0003).

Список литературы

- [1] D.-H. Kim, J.A. del Alamo. IEEE Electron Dev. Lett., **31** (8), 806 (2010).
- [2] W. Knap, S. Romyantsev, M.S. Vitiello, D. Coquillat, S. Blin, N. Dyakonova, M. Shur, F. Teppe, A. Tredicucci, T. Nagatsuma. Nanotechnology, **24**, 214002 (2013).
- [3] T. Akazaki, K. Arai, T. Enoki, Y. Ishii. IEEE Electron Dev. Lett., **13**, 325 (1992).
- [4] А. Шиленас, Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, С.С. Пушкарев, Е.А. Климов. ФТП, **47** (3), 348 (2013).
- [5] T. Akazaki, J. Nitta, H. Takayanagi, T. Enoki, K. Arai. J. Electron. Mater., **25**, 745 (1996).
- [6] Д.С. Пономарев, И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, Р.А. Хабибуллин, В.А. Кульбачинский, Н.А. Юзева. ФТП, **46** (4), 500 (2012).
- [7] K. Požela, A. Šilenas, J. Požela, V. Jucienė, G.B. Galiev, I.S. Vasil'evskii, E.A. Klimov. Appl. Phys. A, **109** (1), 233 (2012).
- [8] V.A. Kulbachinskii, N.A. Yuzeva, G.B. Galiev, E.A. Klimov, I.S. Vasil'evskii, R.A. Khabibullin, D.S. Ponomarev. Semicond. Sci. Technol., **27**, 035021 (2012).
- [9] J. Požela, K. Požela, V. Jucienė, A. Shkolnic. Semicond. Sci. Technol., **26**, 014025 (2011).
- [10] X. Theodore Zhu, Herbert Goronkin. Appl. Phys. Lett., **60** (17), 2141 (1992).
- [11] И.С. Васильевский, Г.Б. Галиев, Е.А. Климов, К. Пожела, Ю. Пожела, В. Юцене, А. Сужделис, Н. Жураускаене, С. Кершулис, В. Станкевич. ФТП, **45** (9), 1214 (2011).
- [12] Г.Б. Галиев, И.С. Васильевский, Е.А. Климов, А.Н. Клочков, Д.В. Лаврухин, С.С. Пушкарев, П.П. Мальцев. ФТП, **49** (2), 241 (2015).
- [13] X. Wallart, J. Lastennet, D. Vignaud, F. Mollot. Appl. Phys. Lett., **87**, 043504 (2005).
- [14] H. Choi, J. Cho, M. Jeon, Y. Jeong. J. Korean Phys. Soc., **54** (2), 643 (2009).
- [15] X.Z. Shang, Jing Wu, W.C. Wang, W.X. Wang, Q. Huang, J.M. Zhou. Solid-State Electron., **51**, 85 (2007).
- [16] X. Wallart, B. Pinsard, F. Mollot. J. Appl. Phys., **97**, 053706 (2005).
- [17] M.J.S.P. Brasil, R.E. Nahory, W.E. Quinn, M.C. Tamargo, H.H. Farrell. Appl. Phys. Lett., **60** (16), 1981 (1992).
- [18] S.M. Olsthoorn, F.A.J.M. Driessen, L.J. Giling. J. Appl. Phys., **73** (11), 7804 (1993).
- [19] D. Vignaud, X. Wallart, F. Mollot. J. Appl. Phys., **76** (4), 2324 (1994).
- [20] D. Vignaud, X. Wallart, F. Mollot, B. Semage. J. Appl. Phys., **84** (4), 2138 (1998).
- [21] V. Duez, O. Vanbesien, D. Lippens, D. Vignaud, X. Wallart, F. Mollot. J. Appl. Phys., **85** (4), 2202 (1999).
- [22] S. Adachi. *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors* (Wiley, 2009).
- [23] Y. Liu, H. Wang. J. Appl. Phys., **100**, 034505 (2006).
- [24] T. Ando, S. Mori. J. Phys. Soc. Jpn., **47**, 1518 (1979).
- [25] H. Taguchi, H. Murakami, M. Oura. Jpn. J. Appl. Phys., **45** (11), 8549 (2006).
- [26] J.P. Perdew, A. Zunger. Phys. Rev. B, **23**, 5048 (1981).
- [27] G. Hendorfer, M. Seto, H. Ruckser. Phys. Rev. B, **48** (4), 2328 (1993).
- [28] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., **89**, 5815 (2001).
- [29] Y. Nishio, T. Tange, N. Hirayama. Phys. Status Solidi A, **210** (11), 2423 (2013).
- [30] M.P.C.M. Krijin. Semicond. Sci. Technol., **6**, 27 (1991).
- [31] L.P. Avakyants, P.Yu. Bokov, A.V. Chervyakov, G.B. Galiev, E.A. Klimov, I.S. Vasil'evskii, V.A. Kulbachinskii. Semicond. Sci. Technol., **21**, 462 (2006).
- [32] E. Tournie, K.H. Ploog, C. Alibert. Appl. Phys. Lett., **61**, 2808 (1992).
- [33] H. Xie, J. Katz, W.I. Wang. Appl. Phys. Lett., **59**, 3601 (1991).
- [34] Y.H. Wang, Sheng S. Li, J. Chu, Pin Ho. Appl. Phys. Lett., **64**, 727 (1994).
- [35] Г.Б. Галиев, А.Л. Васильев, Р.М. Имамов, Е.А. Климов, П.П. Мальцев, С.С. Пушкарев, М.Ю. Пресняков, И.Н. Трунькин. Кристаллография, **59**, 990 (2014).

Редактор Л.В. Шаронова

Photoluminescent properties of the modulation-doped structures $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ containing strained InAs and GaAs nanoinserts in the quantum well

G.B. Galiev⁺, I.S. Vasil'evskii^{}, E.A. Klimov⁺, A.N. Klochkov⁺, D.V. Lavruhin⁺, S.S. Pushkarev⁺, P.P. Malcev⁺*

⁺ Institute of Ultrahigh Frequency Semiconductor Electronics, Russian Academy of Sciences, 117105 Moscow, Russia

^{*} National Nuclear Research University „MEPHI“, 115409 Moscow, Russia

Abstract The photoluminescence spectra of the modulation-doped InAlAs/InGaAs/InAlAs heterostructures with quantum wells containing thin strained inserts InAs and/or GaAs have been studied. The inclusion of thin (~ 1 nm) InAs and GaAs sublayers in the quantum well led to the drastic changes of the shape and the energy position of the photoluminescence spectra as compared with the uniform InGaAs quantum well. The band structure modeling has shown that this effect originated from the strong influence of the InAs and GaAs layers on the hole quantum states. Thin InAs sublayers result in the heavy hole localization and photoluminescence peak energy decrease. The GaAs inserts result in the inverse order of the heavy and light hole subbands in the quantum well. The method of independent control of the heavy and light hole quantum states by variation of the width and the position of InAs and GaAs sublayers was proposed.