

Закон Вегарда и сверхструктурная фаза в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(100)$

© Э.П. Домашевская[¶], П.В. Середин, Э.А. Долгополова, И.Е. Занин, И.Н. Арсентьев*, Д.А. Винокуров^{*¶}, А.Л. Станкевич*, И.С. Тарасов*

Воронежский государственный университет,
394006 Воронеж, Россия

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 25 мая 2004 г. Принята к печати 7 июня 2004 г.)

Дифракционным и рентгенографическим методами определены параметры решетки эпитаксиальных твердых растворов $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с различным содержанием AlAs (x) в гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(100)$, выращенных методом МОС-гидридной эпитаксии. В эпитаксиальных гетероструктурах с $x \approx 0.50$ обнаружена фаза упорядочения (сверхструктурная фаза) AlGaAs_2 с постоянной решетки, меньшей, чем параметры решеток твердого раствора $\text{Al}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{As}$ и монокристаллической подложки GaAs .

1. Введение

Основной тенденцией в развитии современной электронной техники является использование функциональных объектов (элементов) субмикронных и нанометровых размеров. Уникальность свойств таких объектов (наноструктур) определяется атомными и электронными процессами, протекающими как в объеме, так и на границах гетероструктур [1]. В связи с этим в настоящее время происходит не только интенсивное развитие теории явлений в малых объектах, так называемых низкоразмерных системах, но и разработка новых методов их получения, а также прецизионных методов их исследования [2]. Хорошо известно, что изоморфные соединения, к которым относятся AlAs и GaAs , образуют непрерывные ряды твердых растворов [3]. При эпитаксиальном наращивании чрезвычайно важно, чтобы постоянные кристаллических решеток пленки и подложки, имеющих различный химический состав, были почти одинаковыми. Таким объектом является гетероструктура $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, которая имеет рассогласование решеток $\lesssim 0.15\%$ и наиболее широко используется в различных устройствах и приборах [4].

Если GaAs является наиболее изученным и широко применяемым материалом группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, то AlAs , напротив, — одно из наименее изученных соединений, что объясняется очень высокой температурой плавления AlAs (1700°C) и неустойчивостью из-за разложения на воздухе. GaAs и AlAs имеют кристаллическую решетку сфалерита с весьма близкими значениями постоянных решеток и ионности, что обуславливает простоту выращивания $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на подложках из GaAs и относительно высокое совершенство слоев получаемых твердых растворов. Особенностью этой системы является увеличение параметров кристаллической решетки

твердого раствора с увеличением содержания атомов Al , замещающих Ga в металлической подрешетке, ввиду больших размеров атомов алюминия.

При выращивании тонких гетероэпитаксиальных слоев на массивной подложке рассогласование постоянных решетки в ряде случаев не приводит к генерации дислокаций несоответствия, но происходит однородная упругая деформация эпитаксиального слоя в плоскости, параллельной гетерогранице [5]. В этом случае для определения постоянной решетки твердых растворов a^v с учетом упругих напряжений в гетероэпитаксиальном слое методами рентгеновской дифракции измеряют перпендикулярную и параллельную ее составляющие a^\perp и a^\parallel . В соответствии с теорией упругости эта постоянная может быть рассчитана как [6]:

$$a^v = a^\perp \frac{1 - \nu}{1 + \nu} + a^\parallel \frac{2\nu}{1 + \nu}, \quad (1)$$

где ν — коэффициенты Пуассона для эпитаксиальных слоев.

В работе [6] были получены выражения для параметров решетки эпитаксиальных слоев AlAs и AlGaAs

$$a_{\text{AlAs}}^v = a_{\text{AlAs}}^\perp \frac{1 - \nu_{\text{AlAs}}}{1 + \nu_{\text{AlAs}}} + a_{\text{GaAs}}^v \frac{2\nu_{\text{AlAs}}}{1 + \nu_{\text{AlAs}}}, \quad (2)$$

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^v = a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^\perp \frac{1 - \nu_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}{1 + \nu_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}} + a_{\text{GaAs}}^v \frac{2\nu_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}{1 + \nu_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}}, \quad (3)$$

где

$$\nu_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = x\nu_{\text{AlAs}} + (1 - x)\nu_{\text{GaAs}},$$

и соотношение (3) может быть записано как

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^v = a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}}^\perp \frac{1 - (x\nu_{\text{AlAs}} - (1 - x)\nu_{\text{GaAs}})}{1 + (x\nu_{\text{AlAs}} + (1 - x)\nu_{\text{GaAs}})} + a_{\text{GaAs}}^v \frac{2(x\nu_{\text{AlAs}} + (1 - x)\nu_{\text{GaAs}})}{1 + (x\nu_{\text{AlAs}} + (1 - x)\nu_{\text{GaAs}})}. \quad (4)$$

[¶] E-mail: phssd2@main.vsu.ru
Fax: (0732) 208363

^{*¶} E-mail: dmitry.vinokurov@mail.ioffe.ru
Fax: (812) 2471017

В нашей работе для вычисления постоянной решеток твердых растворов коэффициенты Пуассона были взяты из литературных данных: $\nu_{AlAs} = 0.255$ [6,7], $\nu_{GaAs} = 0.312$ [8]. При этом экспериментально определяемыми величинами оказывались лишь составляющие a^\perp постоянной решетки гетероэпитаксиальных структур, соответствующие измеренным величинам межплоскостных расстояний d^\perp .

Считается, что изменение постоянной решетки в зависимости от содержания алюминия в твердых растворах $Al_xGa_{1-x}As$ подчиняется закону Вегарда [9]. Однако литературные данные дают неоднозначные сведения о линейной или нелинейной зависимости параметров решетки от состава твердых растворов в системе $AlAs-GaAs$ [10,11].

Цель данной работы состоит в определении зависимости параметров решетки от состава эпитаксиальных слоев $Al_xGa_{1-x}As$, выращенных на монокристаллической подложке $GaAs(100)$ методом МОС-гидридной эпитаксии.

2. Результаты исследования, их анализ и обсуждение

2.1. Характеристики исследуемых эпитаксиальных структур

Исследовались образцы гетероструктур, изготовленных в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе, в которых на монокристаллических подложках $GaAs(100)$ выращены эпитаксиальные монокристаллические пленки $Al_xGa_{1-x}As$ методом МОС-гидридной эпитаксии. Технологические данные относительно содержания Al в твердых растворах $Al_xGa_{1-x}As$ и толщин пленок приведены в табл. 1.

Ввиду достаточно большой толщины пленок $Al_xGa_{1-x}As$ при определении их параметров оказалось возможным использовать методы рентгеноструктурного анализа. Слой половинного ослабления для $CuK\alpha_{1,2}$ -излучения, играющий основную роль в получении дифракции, в изучаемой системе $Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)$ составляет около 15 мкм. Следовательно, можно ожидать, по крайней мере на больших углах, две независимые дифракции различной интенсивности от пленки

Таблица 1. Характеристики исследованных образцов

Образцы	Гетероструктуры	Толщины эпитаксиальных слоев, мкм
EM28	$Al_{0.12}Ga_{0.88}As/GaAs$	1
EM29	$Al_{0.16}Ga_{0.84}As/GaAs$	1
EM135	$Al_{0.50}Ga_{0.50}As/GaAs$	1
EM49	$Al_{0.54}Ga_{0.49}As/GaAs$	1
EM77	$Al_{>0.80}Ga_{<0.20}As/Al_{0.30}Ga_{0.70}As/Al_{>0.80}Ga_{<0.20}As/GaAs$	$\sim 0.5/0.2/0.1$
EM72	$AlAs/GaInP/AlAs/GaAs$	$\sim 0.5/0.2/1$

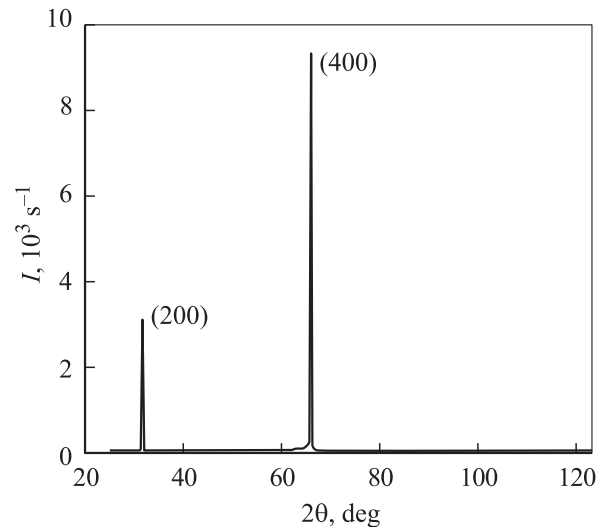


Рис. 1. Обзорная дифрактограмма эпитаксиальной гетероструктуры $Al_{0.50}Ga_{0.50}As/GaAs(100)$.

и от подложки, обусловленные различием параметров эпитаксиальной пленки твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ и подложки $GaAs(100)$. Определение межплоскостных расстояний и параметров кристаллических решеток эпитаксиальных пленок $Al_xGa_{1-x}As$ и подложек $GaAs(100)$ в исследуемых образцах проводили двумя методами рентгеноструктурного анализа: дифрактометрическим и рентгенографическим методом обратной съемки от плоского образца.

2.2. Результаты измерений параметров решетки дифрактометрическим методом

Все дифрактометрические исследования в данной работе проводились на дифрактометрах ДРОН-4-07 и ДРОН-3 с рентгеновским $CuK\alpha_{1,2}$ -излучением. Отличительной особенностью работы с монокристаллическими образцами является тот факт, что при проведении дифрактометрического анализа монокристаллов определенной ориентации мы можем получить лишь несколько рентгеновских дифракционных линий: 1–2, реже 3. Все зависит от того, как ориентирован монокристалл в процессе роста. Так, для исследуемых образцов $Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)$ мы получаем лишь две дифракционные линии: (200) в интервале от 31.10° до 31.80° и (400) в интервале от 65.40° до 66.40° . На рис. 1 приведена так называемая обзорная дифрактограмма образца EM135, снятая во всем интервале углов 2θ на ДРОН-4-07. Для определения параметров эпитаксиальных пленок была выбрана линия (400). Точность определения межплоскостных расстояний и параметров решетки на данном этапе исследований составляла $\sim 0.001 \text{ \AA}$.

При исследовании профилей дифракционных линий от многокомпонентных образцов рентгеновские линии от разных фаз могут накладываться друг на друга, что

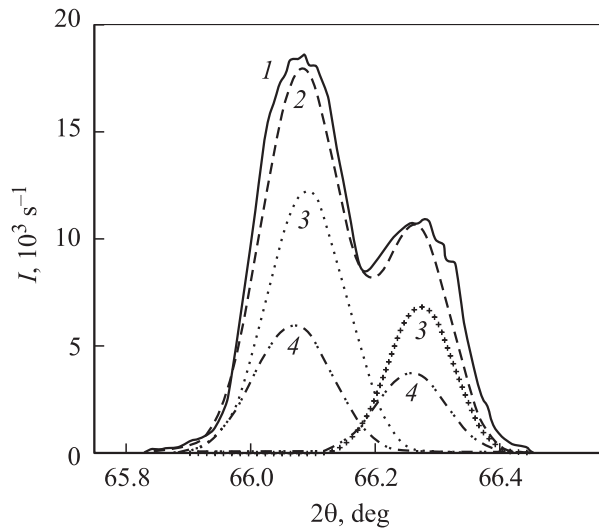


Рис. 2. Дифракционные линии (400) от гетероструктуры $\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}/\text{GaAs}(100)$. 1 — эксперимент, 2-4 — аппроксимация. Линии дифракции от: 1, 2 — гетероструктуры, 3 — GaAs, 4 — $\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}$.

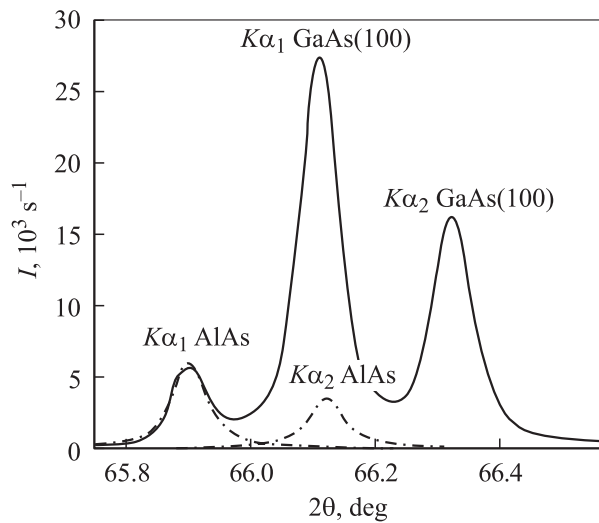


Рис. 3. Дифракционные линии (400) от гетероструктуры $\text{AlAs}/\text{GaAs}(100)$. Сплошная линия — эксперимент; штрихпунктирные — AlAs, аппроксимация.

и происходит в случае, когда $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ выращен на подложке GaAs(100). Так как атомные радиусы Ga и Al мало отличаются друг от друга, параметры кристаллических сфалеритных решеток GaAs и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ также отличаются незначительно.

На рис. 2 приведена дифракционная линия (400) от гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с относительно небольшим содержанием алюминия: $x = 0.16$. Из рисунка видно, что дифракция от эпитаксиального слоя $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с малым x практически сливается с дифракцией от подложки GaAs(100) и предстает в виде одного $K\alpha_{1,2}$ -дублета с искаженными линиями, форма которых

отличается от дисперсионных линий $K\alpha_{1,2}$ -дублета монокристаллической подложки, поскольку представляет результат наложения двух $K\alpha_{1,2}$ -дублетов. Это накладывает дополнительные сложности при определении точных параметров кристаллической структуры эпитаксиальных пленок. Результаты разложения линии (400) на два $K\alpha_{1,2}$ -дублета показывают (табл. 2), что в случае малых x достигается практически полное согласование решеток твердого раствора и подложки. При наибольших x (образцы EM72 и EM77) угловое расстояние между $K\alpha_{1,2}$ -дублетами пленки и подложки максимально. А поскольку толщина пленки твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ значительно больше толщины промежуточных слоев (GaInP в образце EM72 и $\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{As}$ в образце EM77), то дифракция от промежуточных слоев не привносит значительного вклада в общую картину дифракции (400). Это позволяет вести расчет параметров решетки для этих образцов без разложения линий на компоненты (рис. 3).

На рис. 4 сплошной линией представлена дифракционная линия (400) от образца EM135, представляющего собой гетероструктуру $\text{Al}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{As}/\text{GaAs}(100)$. Характерное отличие профиля линии (400) для этого образца состоит в наличии 5 особенностей в виде максимумов или так называемых „плечей“. Как видно из профиля линии, дифракция от эпитаксиальной пленки наложилась на дублет от подложки. Для того чтобы выделить дифракцию от пленки, необходимо из общего профиля экспериментальной линии гетероструктуры вычесть дублет линии (400) от подложки GaAs(100), поскольку в силу своей малой толщины ~ 1 мкм эпитаксиальная пленка незначительно ослабляет брэгговское отражение от подложки [12].

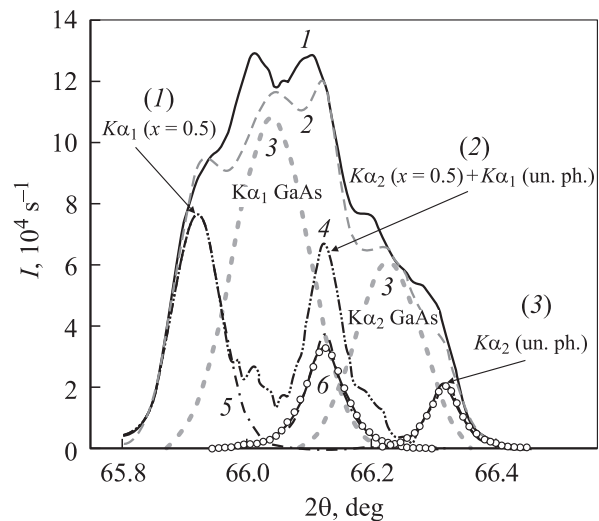


Рис. 4. Разложение дифракционной линии (400) от гетероструктуры $\text{Al}_{0.50}\text{Ga}_{0.50}\text{As}/\text{GaAs}(100)$. 1 — эксперимент, 2-6 — аппроксимация. Линии дифракции от: 1, 2 — гетероструктуры, 3 — подложки GaAs, 4 — пленки за вычетом дифракции от подложки, 5 — $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$, 6 — неизвестной фазы (un. ph.); (1), (2), (3) — компоненты кривой 4.

Таблица 2. Параметры решеток эпитаксиальных пленок $Al_xGa_{1-x}As$ в гетероструктуре $Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)$

№ образца	Значение x	Эксперимент		[11]
		$a^\perp, \text{Å}$	$a^\parallel, \text{Å}$	$a^\nu, \text{Å}$
GaAs(100)	0	5.654	5.654	5.653
EM28	0.12	5.655	5.655	5.654
EM29	0.16	5.655	5.655	5.655
EM135	0.50	5.661	5.658	5.657
EM49	0.54	5.661	5.658	5.658
EM77	> 0.80	5.665	5.660	5.660
EM72	1.00	5.667	5.661	5.661

Примечание. Точность определения a^\perp — $\pm 0.001 \text{ Å}$.

Таблица 3. Результаты разложения дифракционной линии (400) от гетероструктуры $Al_{0.50}Ga_{0.50}As/GaAs(100)$ (образец EM135)

Компоненты гетероструктуры	$d^\perp, \text{Å}$	$T(K\alpha_2/K\alpha_1)$	$a_{\text{expt}}^\perp, \text{Å}$	$a^\nu, \text{Å}$
GaAs(100) (подложка)	1.414	0.57	5.654	5.654
$Al_{0.50}Ga_{0.50}As$ (пленка)	1.415	0.54	5.661	5.658
Неизвестная фаза $Al-Ga-As$ (пленка)	1.412	0.54	5.646	5.650

Примечание. Точность определения d^\perp, a^\perp, a^ν составляет $\pm 0.001 \text{ Å}$; a_{expt}^\perp — экспериментальные значения.

В результате после вычитания из экспериментальной кривой линии, соответствующей $K\alpha_{1,2}$ -дублету подложки GaAs(100), вместо ожидаемого одного дублета от твердого раствора $Al_{0.50}Ga_{0.50}As$ осталось три линии: (1), (2), (3) (кривая 4 на рис. 4). Судя по соотношению интенсивностей трех оставшихся компонент дифракции от эпитаксиальной пленки, они в свою очередь представляют собой результат наложения двух $K\alpha_{1,2}$ -дублетов: одного от твердого раствора с $x = 0.50$ (линии (1) и (2)) с большим параметром решетки, чем параметр подложки $a_{x=0.5}^\perp > a_{\text{GaAs}}^\perp$, и неизвестной фазы (un.ph.) в той же пленке — с меньшим параметром решетки по сравнению с параметром подложки $a_{\text{un.ph.}}^\perp < a_{\text{GaAs}}^\perp$ (линии (2) и (3)). Используя программу регрессивного анализа Sigma Plot-8, получили, что линия (2) действительно представляет собой наложение двух компонент: $K\alpha_2$ от твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ с большим a^\perp и $K\alpha_1$ от неизвестной фазы с меньшим a^\perp , чем a_{GaAs}^\perp . Расхождение между экспериментальным и смоделированным профилями составляет порядка 10%. Таким образом, исследуемый профиль дифракционной линии (400) образца EM135 представляет собой наложение трех $K\alpha_{1,2}$ -дублетов от разных фаз с близкими параметрами кристаллической решетки: $a_{\text{GaAs}}^\perp = 5.654 \text{ Å}$ (подложка), $a_{x=0.5}^\perp = 5.661 \text{ Å}$ (пленка), $a_{\text{un.ph.}}^\perp = 5.646 \text{ Å}$ (пленка). В табл. 3 представлены ре-

зультаты разложения линии (400) от гетероструктуры $Al_{0.50}Ga_{0.50}As/GaAs(100)$: межплоскостные расстояния d^\perp , параметры a^\perp и рассчитанные по формуле (4) параметры a^ν . Аналогичный результат был получен и при разложении линии (400) на составляющие для образца EM49 с $x = 0.54$.

По результатам разложения на компоненты были определены параметры кристаллических решеток твердых растворов $Al_xGa_{1-x}As$, которые приведены в табл. 2 вместе со значениями параметров, ожидаемыми в соответствии с линейным законом Вегарда, приведенном на сайте ФТИ РАН [11]. Параметры a^\perp монокристаллических подложек GaAs(100), приведенные в первой строке табл. 2, имеют одинаковое значение $5.654 \pm 0.001 \text{ Å}$ как для всех исследованных гетероструктур, так и для монокристаллической пластины GaAs(100) соответствующей толщины. Поэтому в формулах (2)–(4) мы использовали эту величину, принимая $a_{\text{GaAs}}^\nu = a_{\text{GaAs}}^\perp$ для расчета a^ν эпитаксиальных пленок AlAs и AlGaAs.

2.3. Результаты измерений параметров решетки рентгенографическим методом

Ранее было показано, что фотографическим методом рентгеновской обратной съемки на больших углах дифракции на камере КРОС-1 можно проводить пре-

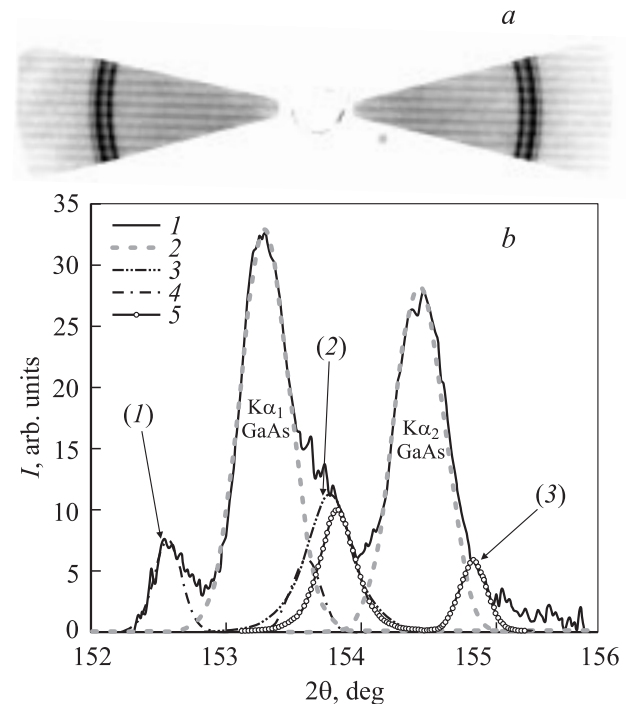


Рис. 5. Брэгговское отражение от плоскостей (711) гетероструктуры $Al_{0.50}Ga_{0.50}As/GaAs(100)$, зарегистрированное на рентгеновскую пленку методом обратной съемки на отражение (a) и результат оцифровки этой дифракции (b). 1 — эксперимент; линии дифракции от: 2 — подложки GaAs, 4 — $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$, 5 — неизвестной фазы (un.ph.). Кривая 3 — линии $K\alpha_2(x = 0.5) + K\alpha_1(\text{un.ph.})$; (1), (2), (3) — компоненты кривых 3 и 4.

Таблица 4. Межплоскостные расстояния и параметры решетки для гетероструктуры $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}(100)$, образец EM135, определенные по линии (711)

№ образца	Компоненты гетероструктуры	$d_{\text{expt}}^{\perp}, \text{Å}$	$a_{\text{expt}}^{\perp}, \text{Å}$	$a^{\nu}, \text{Å}$	$a^{\nu}, \text{Å}$ [7]
EM135	GaAs (подложка)	0.7916	5.6532	5.6532	5.6533
	$\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ (пленка)	0.7927	5.6612	5.6582	5.6572
	Неизвестная фаза (пленка)	0.7906	5.6465	5.6495	

Примечание. Величины d^{\perp} , a^{\perp} , a^{ν} определены с точностью 0.0001 Å.

ционные измерения межплоскостных расстояний и параметров решетки плоских монокристаллических образцов, вращая не только образец, но и кассету с рентгеновской пленкой относительно оси, перпендикулярной к поверхности образца [12]. При этом в отражающее положение могут попасть плоскости с наименьшими межплоскостными расстояниями, которые не могут быть зарегистрированы на дифрактометре ввиду ограничений гониометра со стороны больших брэгговских углов.

Для исследования образцов EM28, EM29, EM49 и EM135 камеру настраивали на съемку линии (711) GaAs с межплоскостным расстоянием $d = 0.7916 \text{ Å}$ [13]. Условия съемки: напряжение на аноде рентгеновской трубки 30 кВ, ток 15 мА, расстояние между образцом и кассетой с пленкой 104 мм, расстояние между кассетой и диафрагмой 26.3 мм, время экспозиции 1 ч.

Анализ эпиграмм образцов EM28, EM29, EM49 — рентгенограмм, полученных методом обратной съемки на камере КРОС-1 без вращения образца и кассеты с рентгеновской пленкой, — показал небольшое отклонение среза поверхности образца относительно (100). Поэтому на рентгенограммах этих образцов условиям брэгговской дифракции удовлетворяла лишь $K\alpha_2$ -линия подложки GaAs(100) и фотографическим методом получить данные о кристаллической структуре эпитаксиальных пленок этих образцов не представилось возможным. Однако полную дифракцию методом обратной съемки удалось получить для образца EM135. На рентгенограмме, полученной от этого образца, присутствуют два дублета: от подложки GaAs(100) (более интенсивный) и дублет от пленки $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ (рис. 5).

Обработку результатов дифракции от плоскости (711) на рентгеновскую пленку для этого образца проводили с использованием методики цифрового представления информации [12]. Результат оцифровки представлен на рис. 5. После разложения линии дифракции (711) на компоненты мы получили результат, аналогичный разложению дифрактометрической линии (400) для того же образца. Как видно из рис. 5, б, дифракция (711) представляет собой наложение трех дублетов: один, наиболее интенсивный $K\alpha_{1,2}$ -дублет от подложки; второй, $K\alpha_{1,2}$ -дублет от твердого раствора $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ с меж-

плоскостным расстоянием $d_{x=0.5}^{\perp} > d_{\text{GaAs}}^{\perp}$; третий, дублет от неизвестной фазы (un. ph.) с меньшим межплоскостным расстоянием $d_{\text{un.ph}}^{\perp} < d_{\text{GaAs}}^{\perp}$. Расчет межплоскостных расстояний плоскостей (711) и параметров решеток представлен в табл. 4.

3. Обсуждение полученных результатов

По данным, полученным дифрактометрическим и фотографическим методами рентгеноструктурного анализа, постоянная кристаллической решетки подложки GaAs(100) для всех образцов практически совпадает с значением, приведенным на сайте ФТИ им. А.Ф. Иоффе [11] с учетом погрешности эксперимента. Точное измерение постоянной решетки GaAs играет особое значение, так как данный параметр является реперной точкой при проведении дальнейших расчетов, и, кроме того, постоянство измеренного параметра для всех образцов свидетельствует о хорошей воспроизводимости результатов эксперимента. Наиболее точно постоянная решетки GaAs(100) была измерена нами рентгенографическим методом обратной съемки линии (711) и составила $5.6532 \pm 0.0001 \text{ Å}$. Данное значение совпадает с приведенным в [11].

Что касается закона Вегарда для эпитаксиальных гетероструктур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, то рассчитанная с учетом упругих напряжений постоянная решетки a^{ν} твердых растворов различных составов, для всех гетероструктур (табл. 2) удовлетворяет линейному характеру зависимости параметра решетки от состава твердого раствора в системе AlAs–GaAs, приведенному в [11] (см. рис. 6). На этом же рисунке линией 1 мы привели закон Вегарда и для величин a_{expt}^{\perp} , определенных экспериментально по измеренным d_{expt}^{\perp} .

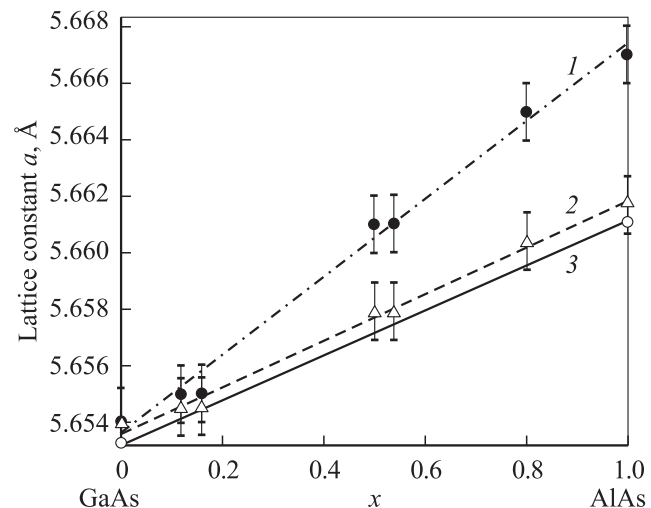


Рис. 6. Зависимости параметров решетки от состава (закон Вегарда) для системы AlAs–GaAs. 1 — a_{expt}^{\perp} , 2 — a^{ν} , 3 — a^{ν} [7].

Кроме того, при разложении дифракционной линии (400) для образцов EM49 и EM135 и линии (711) для образца EM135 на компоненты обнаружено появление дифракционных линий от неизвестной фазы с параметром решетки меньшим, чем параметр GaAs.

Возможное образование сверхрешеток в пленках $Al_xGa_{1-x}As$ при $x = 0.25-0.75$ уже обсуждалось ранее авторами работ [14–17]. Возникающая упорядоченная структура может иметь тетрагональную симметрию, аналогичную структуре сплава CuAu I и состоять из чередующихся монокристаллических слоев AlAs и GaAs [14,15]. Однако анализ полученных нами результатов позволяет сделать заключение о том, что обнаруженная нами неизвестная фаза представляет собой химическое соединение $AlGaAs_2$ и является сверхструктурой к решетке сфалерита, которую имеют как GaAs, AlAs, так и твердый раствор $Al_xGa_{1-x}As$. Решетку обнаруженной фазы $AlGaAs_2$ можно описать структурой типа $InGaAs_2$ („Layered Tetragonal“) [18] с направлением упорядочения [100]. В этой структуре элементарная ячейка соответствует двум ячейкам типа сфалерита, поставленным друг на друга вдоль оси c . Отношение $c/2a$, наблюдаемое в фазах с данной структурой, может быть как больше, так и меньше 1 [19].

Уменьшение параметра решетки у обнаруженной нами сверхструктуры $AlGaAs_2$ объясняется тем фактом, что в идеальном твердом растворе $Al_xGa_{1-x}As$ распределение атомов Al и Ga в подрешетке металла происходит статистическим образом и параметр решетки в твердом растворе представляет собой среднюю величину периода кристаллической решетки для множества ячеек. В случае же сверхструктуры образуется химическое соединение $AlGaAs_2$ и происходит так называемое тетрагональное сжатие слоев, заполненных различными атомами Ga или Al. В результате за счет слоевого упорядочения расположения атомов Al и Ga в подрешетке A^{III} параметр $c^\perp = 2a^\perp_{AlGaAs_2} = 11.292 \text{ \AA} < 2a^\perp_{x=0.5} = 11.322 \text{ \AA}$. При этом параметр c^\perp направлен по нормали к плоскости (100), т.е. тетрагональное сжатие элементарной ячейки происходит в направлении роста эпитаксиальной пленки и составляет величину $c^\perp_{AlGaAs_2}/2a^\perp_{x=0.5} = 0.997 < 1$ в области упорядочения.

Соотношение интенсивностей $K\alpha_{1,2}$ -дублетов сверхструктурной фазы $AlGaAs_2$ и твердого раствора у отражений (400) и (711) свидетельствует о значительном объеме ($\sim 15\%$) областей упорядоченного твердого раствора $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$ с образованием сверхструктурной фазы $AlGaAs_2$ в эпитаксиальных гетероструктурах с $x \approx 0.50$.

4. Заключение

В результате проведенных исследований можно сделать следующие выводы.

1. Для эпитаксиальных гетероструктур $Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)$, выращенных методом МОС-гидридной эпитаксии, выполняется закон Вегарда.

2. В гетероструктурах $Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)$ с $x \approx 0.5$ обнаружена сверхструктурная фаза, являющаяся химическим соединением $AlGaAs_2$, с параметром $c^\perp = 2a^\perp_{AlGaAs_2} = 11.292 \text{ \AA}$. Величина тетрагонального сжатия в направлении эпитаксиального роста составляет $c^\perp_{AlGaAs_2}/2a^\perp_{x=0.5} = 0.997$.

Авторы благодарят Д.Н. Николаева за помощь в проведении экспериментов и В.В. Шамахова за ценные советы при обсуждении результатов.

Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32** (1), 3 (1998).
- [2] Э.П. Домашевская, В.А. Терехов, В.М. Кашкаров, С.Ю. Туррищев, С.Л. Молодцов, Д.В. Вялых, Д.А. Винокуров, В.П. Улин, С.Г. Конников, М.В. Шишков, И.Н. Арсентьев, И.С. Тарасов, Ж.И. Алфёров. ФТП, **37** (8), 1017 (2003).
- [3] Zh.I. Alferov, V.M. Andreev, S.G. Konnikov, V.R. Larionov, G.N. Shelovanova. Kristall und Technik, **11**, 1013 (1976).
- [4] Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры. [Пер. с англ. под ред. Л. Ченга, К. Плога (М., Мир, 1989)].
- [5] И.Н. Арсентьев, Н.А. Берт, С.Г. Конников, В.Е. Уманский. ФТП, **14** (1), 96 (1980).
- [6] D. Zhou, B.F. Usher, J. Phys. D: Appl. Phys., **34**, 1461 (2001).
- [7] Z.R. Wasilewski, M.M. Dion, D. Lockwood, P. Poole, R.W. Streater, A.J. Spring Thorpe. J. Appl. Phys., **81**, 1683 (1997).
- [8] S. Adachi. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985).
- [9] М.А. Герман. Полупроводниковые сверхрешетки (Всесоюзный центр переводов, 1987).
- [10] Твердые растворы в полупроводниковых системах. Справочник, под ред. В.С. Земскова и др. (М., Наука, 1978).
- [11] Сайт ФТИ им. Иоффе, Спб. Характеристики полупроводниковых материалов: www.ioffe.ru.
- [12] П.В. Середин. Конденсированные среды и межфазные границы, **5**, № 1 (2003).
- [13] A.S.T.M. Diffraction Data Cards 1972.
- [14] T.S. Kuan, T.F. Kuech, W.I. Wang. Phys. Rev. Lett., **54**, 201 (1985).
- [15] B. Koiller, A.M. Davidovich. Phys. Rev. Lett., **41**, 3670 (1990).
- [16] E. Muller, B. Patterson et al. PSI annual report 2000. www.physik.unizh.ch/reports/report2000.html
- [17] B.D. Patterson et al. PSI annual report 1997. www.physik.unizh.ch/reports/report1997.html
- [18] Alex Zunger. MRS-IRS bulletin/ July 1997. http://www.sst.nrel.gov/images/mrs97
- [19] В. Пирсон. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов (М., Мир, 1977) ч. 1, 2.

Редактор Т.А. Полянская

Vegard's law and superstructure phase in epitaxial heterostructures of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(100)$

*E.P. Domashevskaya, P.V. Seredin, E.A. Dolgopolova,
I.E. Zanin, I.N. Arsentyev*, D.A. Vinokurov*,
A.L. Stankevich*, I.S. Tarasov**

Voronezh State University,
394006 Voronezh, Russia

* Ioffe Physicotechnical Institute
of Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The work is concerned with the study of the character of the changes in parameters of crystal lattice in epitaxial heterostructures of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(100)$ type with different values of x obtained by MOS-hybrid epitaxial growth. Using diffractometry and X-ray photographic analysis lattice parameters of epitaxial alloys in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ system were determined for different concentrations of aluminium x in the investigated heterostructures grown on single-crystalline substrates of $\text{GaAs}(100)$. Ordering phase (superstructure phase) with a parameter less than that one of the $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ alloy and single-crystalline GaAs substrate was found in epitaxial heterostructures for $x \sim 0.5$.