УДК 621.315.592

Экспериментально-аналитическое исследование проблемы компенсации механических напряжений в системе InGaAs множественных квантовых ям для излучателей ближнего инфракрасного диапазона

© Р.А. Салий[1,2], А.В. Малевская[1], Д.А. Малевский[1], С.А. Минтаиров[1], А.М. Надточий[2], Н.А. Калюжный[1]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алфёрова Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
E-mail: r.saliy@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 28 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 19 июля 2025 г.
Принята к публикации 27 июля 2025 г.

Рассмотрена применимость различных методов расчета оптимальной толщины компенсирующих слоев для InGaAs множественных квантовых ям, используемых в активной области (Al)GaAs-светодиодов ближнего инфракрасного диапазона, выращенных на вицинальных подложках. Экспериментально показана высокая точность методов для структур на подложках с малой разориентацией (до 2°). Для структур на сильно разориентированных подложках (6°+) применимость методов ограничена поиском толщины компенсирующих слоев в первом приближении. Созданы светодиоды с высокими кпд (62%), квантовой эффективностью (57%) и высокой оптической мощностью при токе до 1 А.

Ключевые слова: квантовые ямы, InGaAs, МОГФЭ, гетероструктуры, светодиод.

DOI: 10.61011/FTP.2025.04.61247.7907

Структуры с квантовыми ямами (КЯ) активно применяются в таких полупроводниковых приборах как лазерные диоды ближнего инфракрасного (ИК) диапазона [1], волоконно-оптические усилители и светоизлучающие диоды (СИД) [2]. Помимо управления длиной волны и энергетическим спектром излучения СИД, КЯ обеспечивают улучшение внутреннего квантового выхода прибора [1,2], а множественные КЯ (МКЯ) [3] позволяют получать высокую выходную оптическую мощность. Однако существуют два ограничения для термодинамически стабильной системы слоев МКЯ, обусловленные, во-первых, ограничением критической толщины отдельной напряженной (рассогласованной по параметру решетки с матрицей) КЯ и, во-вторых, тем, что в МКЯ каждая яма будет увеличивать общее напряжение всего массива, приведя к релаксации в верхних слоях [4]. Путем компенсации деформации сжатия одного напряженного слоя другим, „растягивающим“ (или наоборот), критическая толщина массива КЯ может быть значительно увеличена [5] без образования дефектов в активной области СИД. В литературе для поиска оптимальных параметров компенсирующих слоев (КС) представлен широкий набор расчетных моделей [6]. Среди них есть как оценочные модели, так и более точные, основанные, в том числе, на теории упругости сплошных сред [7,8]. Такие модели обоснованно применимы для структур, выращенных на точно ориентированных подложках. При этом в процессах роста тонких пленок на вицинальных поверхностях подложек надо учитывать возможное влияние кинетических барьеров, и применимость точных моделей при росте МКЯ на подложках с сильной разориентацией поверхности не доказана.

В данной работе мы исследуем InGaAs/AlGaAs-гетероструктуры (ГС), содержащие МКЯ, которые были использованы для формирования активной области ИК СИД, излучающих на длине волны 940 нм. Эти приборы имеют широкое применение в медицинской диагностике, оптической связи, системах ночного видения и пр. [9]. Их ГС выращиваются методом металлорганической газофазной эпитаксии (МОГФЭ), а следовательно, на вицинальных подложках. Задача данной работы — проверить экспериментально применимость как оценочных, так и более точных моделей расчета параметров КС для структур МКЯ, выращенных методом МОГФЭ на подложках с различной степенью разориентации поверхности (100).

При компенсации деформаций сжатия и растяжения, создаваемых напряженным и компенсирующим слоями, необходимо достигнуть условий, при которых напряжение в плоскости роста между каждым периодом МКЯ будет минимизировано. Для оценки среднего напряже-

ния (ε_a), создаваемого одним периодом МКЯ, удобно использовать выражение [10]

$$\varepsilon_a = \frac{t_1\varepsilon_1 + t_2\varepsilon_2}{t_1 + t_2}, \quad (1)$$

где t_i — толщины напряженного и компенсирующего слоев, ε_i — напряжение, создаваемое соответствующим слоем по отношению к подложке, которое определяется как

$$\varepsilon_i = \frac{a_0 - a_i}{a_i}, \quad (2)$$

где a_0 и a_i — постоянные решетки подложки и слоя соответственно.

В работе методом МОГФЭ выращены ГС, содержащие МКЯ с КС и излучающие на длине волны 940 нм при комнатной температуре. По описанным далее моделям был произведен расчет оптимальной толщины КС (t_2). Фиксированными величинами в расчетах были параметры кристаллической решетки матрицы, напряженного слоя КЯ и КС (a_0, a_1 и a_2 соответственно), а также толщина напряженного слоя КЯ (t_1).

1) Метод усредненной решетки (МУР) — это упрощенный метод, который основывается на том, что условие сбалансированности по напряжениям возникает в структуре при усреднении параметров решетки слоев сжатия и растяжения по толщине. Условие подразумевает выражение для параметра решетки матрицы, следующее из работы Метьюза и Блексли [11] с допущением, что слои растяжения и сжатия имеют идентичные параметры жесткости: $a_0 = (t_1a_1 + t_2a_2)/(t_1 + t_2)$. Так, выражение для искомой толщины КС:

$$t_2 = \frac{t_1(a_0 - a_1)}{a_2 - a_0}. \quad (3)$$

2) Метод с учетом деформации, взвешенной по толщине (МВТ), основывается на том, что сбалансированная структура возникает вследствие одинаковых произведений напряжений и толщин для слоев растяжения и сжатия:

$$t_1\varepsilon_1 + t_2\varepsilon_2 = 0. \quad (4)$$

Подставляя (2) в (4), можно получить выражение для соответствующего параметра решетки матрицы (a_0), а из него вывести выражение для толщины t_2:

$$t_2 = -\frac{a_2t_1(a_0 - a_1)}{a_1(a_0 - a_2)}. \quad (5)$$

3) Данная модель может быть уточнена путем учета различия параметров жесткости для материалов напряженного и компенсирующего слоев (метод МВТ+А):

$$A_1t_1\varepsilon_1 + A_2t_2\varepsilon_2 = 0, \quad (6)$$

где A_i — параметры жесткости, которые зависят от коэффициентов жесткости C_{i1} и C_{i2} следующим образом: $A_i = C_{i1} + C_{i2} - 2C_{i2}^2/C_{i1}$. В таком случае, подставляя (2) в (7), получим выражение для параметра решетки подложки и, соответственно, для толщины КС:

$$t_2 = -\frac{a_2A_1t_1(a_0 - a_1)}{a_1A_2(a_0 - a_2)}. \quad (7)$$

4) В методе нулевого напряжения (МНН), предложенного в работе [6] с использованием классической теории упругости [7], предлагается следующее условие нулевого среднего напряжения в плоскости поверхности роста: $A_1t_1\varepsilon_1a_2 + A_2t_2\varepsilon_2a_1 = 0$. Из этого могут быть получены как значения параметра решетки КС, так и его толщина:

$$t_2 = t_1\left[\frac{A_1a_2^2(a_0 - a_1)}{A_2a_1^2(a_2 - a_0)}\right]. \quad (8)$$

Расчет по вышеописанным моделям был проведен для пар слоев КЯ InGaAs и КС GaAsP, составляющих один период МКЯ в тестовых InGaAs/AlGaAs ГС, выращенных на подложках GaAs методом МОГФЭ. Основой ГС служил широкозонный материал $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, не поглощающий ИК излучение, в котором находилась активная область из пяти $In_{0.14}Ga_{0.86}As$ КЯ с $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ КС. Состав и толщина (70 Å) $In_{0.14}Ga_{0.86}As$-слоев КЯ были определены для формирования излучения 940 нм [12]. ГС были выращены на подложках GaAs (100) двух типов: „слабо разориентированных“, а именно на 2° в направлении (110) (далее такие ГС обозначены как W2), и характерных для МОГФЭ — разориентированных на 6° в направлении (111) (далее — W6).

Кристаллографические параметры для слоев InGaAs рассчитаны с использованием [13], а для $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ определялись с использованием закона Вегарда (см. табл. 1). Результаты расчета оптимальной толщины КС $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ по всем четырем моделям и соответствующего среднего напряжения по формуле (1) представлены в табл. 2.

Величина ε_a, равная нулю в результате расчета по МВТ, является следствием условия баланса по напряжениям для данного метода (выражение (4)). Результаты расчета предсказывают оптимальную толщину КС $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ в диапазоне от 23 до 25 нм. Согласно упрощенной модели (МУР), она должна составлять ~ 25 нм, в то время как самая точная модель МНН, учитывающая механические параметры обоих слоев, предсказывает оптимальную толщину в ~ 23 нм. Поэтому при росте описанных выше экспериментальных ГС толщины КС варьировалась в диапазоне, близком к расчетному, а именно в пределах 20–27 нм. Кроме того, для усиления сравнительного анализа были выращены ГС на обоих типах вицинальных подложек, толщины КС в которых сильно отклонялись от расчетных параметров и составляли 14 нм. Также была выращена реперная структура с пятью $In_{0.14}Ga_{0.86}As$ МКЯ, не содержащая никаких КС, в которой в качестве промежуточных слоев использован GaAs. Несмотря на то что толщина ямы меньше критической толщины слоя $In_{0.14}Ga_{0.86}As$ в матрице GaAs, при

Таблица 1. Кристаллографические параметры слоев МКЯ

Слой	a, Å	C_{11}, дин/см^2	C_{12}, дин/см^2	A, дин/см^2
$In_{0.14}Ga_{0.86}As$ (КЯ)	5.710	$1.140 \cdot 10^{12}$	$5.228 \cdot 10^{11}$	$1.184 \cdot 10^{12}$
$GaAs_{0.92}P_{0.08}$ (КС)	5.637	$1.207 \cdot 10^{12}$	$5.409 \cdot 10^{11}$	$1.263 \cdot 10^{12}$

Таблица 2. Результаты расчета параметров КС по четырем моделям

№ метода	Краткое название	Выражение для t_2	t_2, Å	ε_a, млн$^{-1}$ (ppm)
1	МУР	(4)	249	28
2	МВТ	(6)	246	0
3	МВТ+А	(8)	230	−146
4	МНН	(10)	227	−176

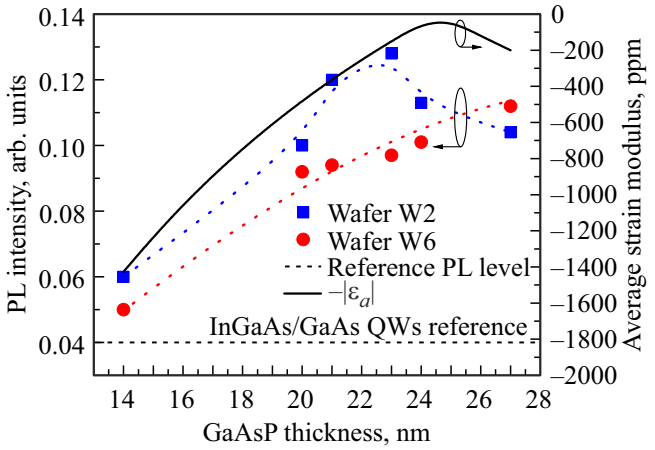

Рис. 1. Зависимость максимума интенсивности ФЛ, измеренной при комнатной температуре, от толщины $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ КС для InGaAs/AlGaAs-гетероструктур, выращенных на вицинальных подложках W2 (квадраты) и W6 (круги). Пунктиром отмечен уровень интенсивности ФЛ для реперного образца без КС, сплошная линия — расчетная зависимость значения ε_a (выражение (1)).

которой, согласно модели Мэтьюза–Блексли, происходит генерация дислокаций несоответствия и которая составляет ~ 10 нм, среднее напряжение в реперной структуре все равно достаточно высокое, $|\varepsilon_a| = 2326$ млн$^{-1}$.

Экспериментальные ГС с МКЯ исследовались путем анализа спектров фотолюминесценции (ФЛ), возбужденных твердотельным лазером DTL-413 с $\lambda = 527$ нм. На рис. 1 приведены зависимости интенсивностей пиков ФЛ, измеренной при комнатной температуре, от толщины КС $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ в случае обоих типов вицинальных подложек.

В первую очередь необходимо отметить, что результаты измерений полученных ГС с КС более чем в 2 раза превосходят реперный образец без КС по максимуму интенсивности ФЛ (на рис. 1 уровень репера отмечен пунктирной линией), что говорит о необходимости технологии компенсации механических напряжений для создания качественных МКЯ. При этом использование КС с достаточно произвольно выбранными параметрами (в данном случае с $t_2 = 14$ нм) очень незначительно улучшает излучательную способность структур.

Наоборот, для всех структур с толщинами КС, близкими к расчетному диапазону значений, интенсивность ФЛ заметно улучшилась и находилась на достаточно близком уровне. Тем не менее для W2 структур (рис. 1, квадраты) можно говорить о наличии четкого максимума на зависимости интенсивности ФЛ от толщины $GaAs_{0.92}P_{0.08}$ КС, который хорошо коррелирует с результатами расчета по модели МНН и уточненной модели МВТ (толщина КС ~ 23 Å), а также с расчетными значениями ε_a (рис. 1, сплошная линия). Таким образом, описанные модели могут быть, безусловно, применимы для оценки толщины КС, выращенных как на точно ориентированных, так и на подложках с малой разориентацией поверхности. При этом применение методов, учитывающих параметры жесткости A слоев МКЯ (таких как МВТ+А и МНН), позволяют получить самую точную оценку оптимальной толщины КС.

В случае W6 ГС (рис. 1, круги), т.е. характерных для МОГФЭ сильно разориентированных подложек, экспериментальный результат не столь однозначный. Интенсивность ФЛ продолжала незначительно расти при изменении t_2 от 20 до 27 нм. При этом стоит отметить, что расчет по модели МУР, наиболее простой из всех, не требующей табличных данных о коэффициентах жесткости материалов, предсказывает наибольшую толщину КС. Можно заключить, что для получения первого приближения величины толщины КС в ГС, выращенных на сильно разориентированных подложках, применение метода МУР оказывается достаточно. Затем оптимальная толщина КС может быть уточнена экспериментальным путем, как, например, было сделано в работе [14]. Более сложным способом определения оптимальной толщины КС в ГС на подложках с разориентацией $> 2^\circ$ может быть использование описанных методов, в которых деформация и напряжение рассмотрены как тензоры

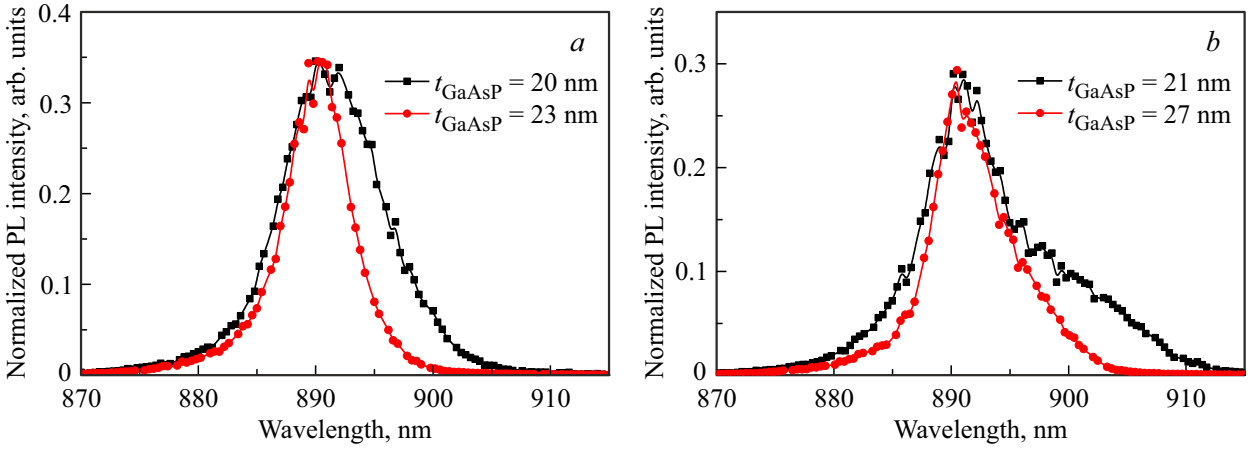

Рис. 2. Нормализованные спектры ФЛ для InGaAs/AlGaAs-гетероструктур, измеренные при пониженной температуре (77 K), для образцов с разной толщиной КС, выращенных на подложках W2 (*a*) и W6 (*b*).

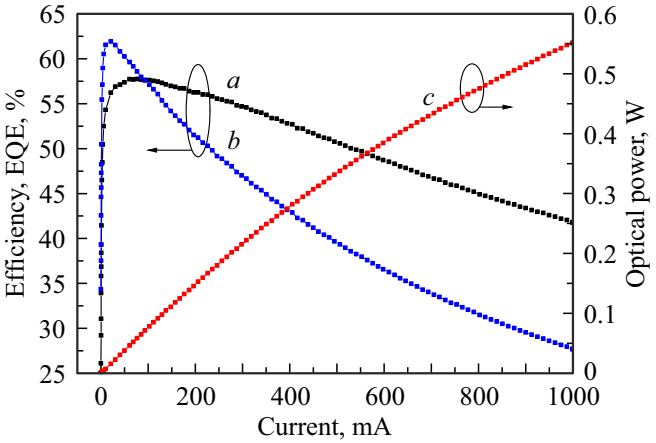

Рис. 3. Зависимости эффективности (*a*), внешнего квантового выхода (*b*) и оптической мощности (*c*) СИД, на базе InGaAs МКЯ, содержащих оптимизированные GaAsP КС.

второго ранга с соответствующими коэффициентами жесткости C (тензорами четвертого ранга) [8]. Однако, с учетом того что уже самый простой метод позволяет достаточно точно оценить параметры для ГС, демонстрирующей максимальную ФЛ, такой расчет может представлять исключительно академический интерес.

Дополнительное подтверждение того, что найденные значения t_2 для обеих гетероструктур близки к оптимальным, дает сравнение спектров ФЛ, измеренных при 77 K. Для удобства сравнения эти спектры ФЛ нормированы по интенсивности (рис. 2). В обоих случаях ГС с толщиной КС, близкой к оптимальной (23 нм для W2 и 27 нм для W6), сравниваются с ГС, толщина КС которой находится на границе исследуемого расчетного диапазона (20–21 нм). Спектры ФЛ от ГС с „краевыми“ толщинами КС имеют длинноволновое уширение спектра и общее увеличение полуширины пика ФЛ.

Исследованные структуры МКЯ с оптимизированными КС были использованы в активной области гетероструктур СИД с длиной волны 940 нм. Созданные с помощью разработанных постростовых технологий [15,16], СИД продемонстрировали высокую оптическую мощность (> 77 мВт при токе 100 мА) и высокие значения квантовой (57 %) и кпд ∼ 62 % (рис. 3). Благодаря бездефектному складированию КЯ показана работоспособность СИД при токе накачки до 1 A с высокой выходной мощностью (> 550 мВт).

Благодарности

Авторы благодарят за финансовую поддержку Министерство науки и высшего образования РФ (тематика FFUG-2025-0005). А.М. Надточий благодарит Министерство науки и высшего образования РФ (проект FSRM-2023-0010).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] L.J. Mawst, H. Kim, G. Smith, W. Sun, N. Tansu. Progr. Quant. Electron., **75**, 100303 (2021). DOI: 10.1016/j.pquantelec.2020.100303

[2] P.D. Nguyen, M. Kim, Y. Kim, J. Jeon, S. Park, C.S. Kim, Q.L. Nguyen, B.S. Chun, S.J. Lee. Heliyon, **10** (3), e25269 (2024). DOI: 10.1016/j.heliyon.2024.e25269

[3] W.-C. An, H.-G. Kim, L.-K. Kwac, J.-S. So, H.-J. Lee. J. Nanosci. Nanotechnol., **19**, 2224 (2019). DOI: 10.1166/jnn.2019.15974

[4] S. Tundo, M. Mazzer, L. Lazzarini, L. Nasi, G. Torsello, D. Diso, G. Clarke, C. Rohr, P. Abbott, K. Barnham, R. Ginige. Mater. Sci. Technol., **19** (7), 977 (2003). DOI: 10.1179/026708303225004341

[5] C.W. Tu, X.B. Mei, C.H. Yan, W.G. Bi. Mater. Sci. Eng. B, **35** (1–3), 166 (1995). DOI: 10.1016/0921-5107(95)01434-9
[6] N.J. Ekins-Daukes, K. Kawaguchi, J. Zhang. Cryst. Growth Des., **2** (4), 287 (2002). DOI: 10.1021/cg025502y
[7] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. 7th edn (John Wiley & Sons, Inc., N.Y., 1996).
[8] J.F. Nye. *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices* (Oxford University Press, N.Y., 1985).
[9] M. Vasilopoulou, A. Fakharuddin, F. Pelayo García de Arquer, D.G. Georgiadou, H. Kim, Abd. Rashid bin Mohd Yusoff, F. Gao, M.K. Nazeeruddin., H.J. Bolink., E.H. Sargent. Nature Photonics, **15**, 656 (2021). DOI: 10.1038/s41566-021-00855-2
[10] Y. Wang, R. Onitsuka, M. Deura, W. Yu, M. Sugiyama, Y. Nakano. J. Cryst. Growth, **312** (8), 1364 (2010). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2009.11.063
[11] J.W. Matthews, A.E. Blakeslee. J. Cryst. Growth, **32**, 265 (1976). DOI: 10.1016/0022-0248(76)90041-5
[12] Р.А. Салий, А.В. Малевская, Д.А. Малевский, С.А. Минтаиров, А.М. Надточий, Н.А. Калюжный. Опт. и спектр., **132** (11), 1146 (2024). DOI: 10.61011/OS.2024.11.59501.6568-24
[13] http://www.matprop.ru
[14] Р.А. Салий, А.В. Малевская, Д.А. Малевский, С.А. Минтаиров, А.М. Надточий, Н.А. Калюжный. Кристаллография, **69** (4), 743 (2024). DOI: 10.31857/S0023476124040214
[15] А.В. Малевская, Н.Д. Ильинская, Н.А. Калюжный, Д.А. Малевский, Ю.М. Задиранов, П.В. Покровский, А.А. Блохин, А.В. Андреева. ФТП, **55** (11), 1086 (2021). DOI: 10.21883/FTP.2021.11.51565.9679
[16] А.В. Малевская, Н.А. Калюжный, Р.А. Салий, Ф.Ю. Солдатенков, М.В. Нахимович, Д.А. Малевский. Письма ЖТФ, **50** (18), 22 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.18.58625.19946

Редактор Г.А. Оганесян

Experimental and analytical study of the mechanical stress compensation problem in the InGaAs multiple quantum wells for near-infrared light emitting diodes

R.A. Salii[1,2], *A.V. Malevskaya*[1], *D.A. Malevskii*[1], *S.A. Mintairov*[1], *A.M. Nadtochiy*[2], *N.A. Kalyuzhnyy*[1]

[1] Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia
[2] Alferov University,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The applicability of various methods for calculating the optimal thickness of compensating layers for InGaAs multiple quantum wells used in the active area of (Al)GaAs near-infrared light emitting diodes grown on vicinal substrates with different angle of misorientation is considered. High accuracy of the considered methods for structures, grown on substrates with small misorientation angle (up to 2°) is experimentally demonstrated. For structures on strongly misoriented substrates (6°+), the applicability of the methods is limited to finding the thickness of compensating layers in the first approximation. Light emitting diodes with high efficiency (62 %), quantum efficiency (57 %) and high optical power at a current of up to 1 A are created.