

© 2003р. І.М.Фодчук, О.П.Кройтор, В.Б.Гевик, О.Г.Гімчинський,
В.Б.Молодкін*, Є.М.Кисловський*, С.І.Оліховський*,
М.Песса**, Е.М.Павелеску**

Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича, Чернівці

*Інститут металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України, Київ,

**Оптоелектронний дослідницький центр, Технологічний університет, Тампере, Фінляндія

МІЖШАРОВА ВЗАЄМОДИФУЗІЯ У БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ ЗА ДАНИМИ ДВОКРИСТАЛЬНОЇ Х-ПРОМЕНЕВОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ

Методом високороздільної Х-променевої дифрактометрії проведено дослідження багатошарових напівпровідникових структур із квантовою ямою. Шляхом моделювання отриманих кривих дифракційного відбивання визначено ступінь міжшарової взаємодифузії до і після відпалу. Встановлено вміст азоту в квантовій ямі і зміну його концентрації в залежності від умов вирощування.

The systematical investigation of multilayered semiconductor structures with quantum well has been performed by using the high-resolution X-ray diffractometry. The nitrogen content in quantum well and barrier layers has been determined by the simulation of measured rocking curves. Also, the influence of smearing the indium content profile in quantum well on rocking curves has been established. The high sensitivity of rocking curves to these structural parameters has been demonstrated.

Вступ

Багатошарові напівпровідникові з'єднання A^3B^5 – найперспективні для розвитку наступного покоління сонячних елементів з очікувано великим ККД $\sim 40\%$. Першорядне поліпшення ККД, у порівнянні з існуючими пристроями збереження інформації на основі $\text{GaInP}_2/\text{GaAs}$ [1], полягає у додатковому напівпровідниковому шарі з енергетичною щільністю ~ 1 еВ і, крім того, із ґраткою, яка узгоджується з GaAs . Розрахований ККД для такої системи з потрібним переходом становить $\sim 38\%$ [2]. Сьогодні для реалізації найбільш придатною є четверна система $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ [3].

Відомо, що додавання атомів In у GaAs збільшує постійну ґратки і зменшує ширину забороненої зони E_g , тоді як впровадження атомів N у GaAs зменшує і постійну ґратки і заборонену зону [4,5,6]. Шляхом легування взаємодіючих In і N у GaAs , можна змоделювати області заборонених зон і постійні ґраток, які потрібні для одержання кращих фотогальванічних властивостей. Наприклад, для з'єднання $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ можна одержати ґратки, які відповідають GaAs з $E_g \approx 1$ еВ, при $x=3y$ і $y \approx 3\%$.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$, особливо перспективний для

виробництва довгохвильових лазерних діодів із надійним високотемпературним функціонуванням при використанні в оптоволоконних передавальних системах. Така характеристика – результат великого енергетичного стрибка в зоні провідності. Однак, поки залишаються значні труднощі в отриманні сполук $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ потрібної якості. Структурна досконалість даних матеріалів поки що досить швидко погіршується зі збільшенням вмісту N . Збільшення вмісту N приводить до швидкого збільшення локальної деформації і кластеризації у деформованих шарах [4,7-11].

Потужним інструментом для структурної діагностики напівпровідникових багатошарових сполук є Х-променева двокристална дифрактометрія [12]. На даний час існують високоефективні Х-променеві експериментальні і теоретичні методи дослідження процесів взаємодифузії та релаксації напруг в ультратонких епітаксійних шарах шаруватих структур [13,14].

Мета даної роботи – дослідження процесів взаємодифузії атомів In та Ga у багатошарових системах на основі GaAs , що містять квантову яму типу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ (КЯ) за допомогою високороздільної Х-променевої двокристалної дифрактометрії.

1. Теоретичні співвідношення. Дифракція Х-променів

На протязі останніх 20-ти років високороздільна Х-променева дифракція стала важливим інструментом для визначення структурних параметрів епітаксійних напівпровідникових шарів [15]. Для структур з одним шаром такі параметри як невідповідність ґратки, хімічний склад, товщину можна легко визначити неруйнівними методами. Однак, для багатошарових систем інтерференція Х-променів, розсіяних різними шарами, як правило, проявляється у складних дифракційних кривих, які не можна однозначно проаналізувати традиційними підходами. Тому, для визначення градієнтів деформацій, зміни хімічного складу та параметрів атомної шорсткості поверхні на границях розділу необхідно проводити комплексні комп'ютерні моделювання процесів розсіяння Х-променів з врахуванням прямих і обернених розв'язків поставлених задач.

Для моделювання процесів Х-променевої дифракції використовуються кінематична і динамічна теорії. У кінематичній теорії при розрахунку кривих гойдання за Брегом від шарів, товщиною значно менших екстинкційної товщини, нехтується багатократним розсіянням [16]. Динамічна теорія розсіяння ці ефекти враховує, і тому не має обмеження на товщину шарів кристалу. Це ефективно використовується для аналізу кривих гойдання від гетероструктур з узгодженими або майже узгодженими ґратками [17,18].

Розглянемо деякі випадки розсіяння Х-променів багатошаровими системами – двошаровими ($\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ або $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$) і тришаровими ($\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ або $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$) і їх різними комбінаціями у, так званій, одномірній моделі, яка допускає зміну міжплощинних віддалей тільки за глибиною кристалу.

Коли Х-пучок дифрагує у багатошаровій структурі, то хвилі, розсіяні в буферному шарі GaAs і в захисному шарі GaAs, поширюються не у фазі через деформовані $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ і $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ шари, а це приводить до спотворення інтерференційних модуляцій інтенсивності (маятникових смуг). Відповідно до кінематичної теорії розсіяння відбивна здатність двошарової системи описується виразом

$$R_2 = \Phi_1^2 + \Phi_2^2 + 2\Phi_1\Phi_2 \cos(\phi_2 - \phi_1), \quad (1)$$

а відбивна здатність сандвіч-структури (тришарової системи) –

$$R_3 = \Phi_1^2 + \Phi_2^2 + \Phi_0^2 + 2[\Phi_1\Phi_0 \cos(\phi_0 - \phi_1) + \Phi_1\Phi_2 \cos(\phi_2 - \phi_1) + \Phi_0\Phi_2 \cos(\phi_2 - \phi_0)], \quad (2)$$

де індекси 0, 1, 2 означають – $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ ($\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$) шар, захисний і буферний шари GaAs, Φ_j – амплітуда відбивання j -го шару, а ϕ_j містить фазове співвідношення хвильових полів відповідно до виразу

$$\phi_j = A_j Y_j + 2 \sum_{i=1}^{j-1} (A_i Y_i), \quad (3)$$

де $A_j Y_j = \pi \sin(2\theta_B) t_j \omega / (\gamma_H \lambda)$, t_j – товщина j -го шару, λ – довжина Х-хвилі, θ_B – кут Брега, ω – кутове відхилення від кута Брега, $\gamma_{0,H}$ – напрямляючі косинуси хвильових векторів.

Різниця між дифракційними картинками, які описуються виразами (1) і (2), обумовлена тонким деформованим шаром – КЯ. Для простоти допускаємо, що буферний і захисний шари GaAs мають ту ж саму товщину $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_c$. Це не буде сильно впливати на точність розрахунків, якщо товщина шару $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$, $\delta \ll \Delta_c$, і, відповідно, інтенсивність розсіяння шаром $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ є незначною ($|\Phi_0| \ll |\Phi_d|$). Тоді різниця відбивної здатності двошарової і тришарової систем може бути представлена так

$$\Delta R = R_3 - R_2 = \quad (4)$$

$$= 4\Phi_c^2 [\sin(A_0 Y_0 + 2A_c Y_c) + \sin(A_0 Y_0)].$$

Оскільки другий синусоїдальний доданок у (4) – функція, яка повільно змінюється, то відстань між двома максимумами смуг далеко від кута Брега описується виразом [16]

$$\Delta\omega = \lambda \gamma_H / [\sin(2\theta_B) \Delta_c], \quad (5)$$

Кутову відстань $\Delta\omega_{\pm 1}$ між маятниковими смугами, суміжними з піком від підкладки GaAs, отримаємо з похідної виразу (4). У випадку $|A_0 Y_0| \ll 1$ використано функцію $(A_0 Y_0)$ замість функції $\sin(A_0 Y_0)$.

Залежність $\Delta\omega$ від напруги і товщини шару в структурах $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$, як правило, розраховується чисельним розв'язком системи рівнянь Такагі-Топена [18]. Відповідно до теорії Такагі-Топена диференціальне рівняння для амплітудного відношення $D_{0,H}/D_a$ розсіяних $D_{0,H}$ і падаючої D_a хвиль запишемо у вигляді [17]:

$$i \frac{dX}{dA} = (1 + ik)X^2 - 2(y + ig)X + (1 + ik), \quad (6)$$

де X – амплітуда розсіяння, яка пропорційна відношенню комплексних амплітуд заломленої і

дифрагованих хвиль D_0 і D_H $X=D_H/(\beta^{1/2}D_0)$, $\beta=|\gamma_0/\gamma_H|$, $A=(P\pi|\chi'_H(z)|/\lambda|\gamma_0\gamma_H|^{1/2})$, λ – довжина хвилі, z – товщина шару, P – коефіцієнт поляризації, $g=(1+\beta)\chi''_0/(2P|\chi'_H|\beta^{1/2})$, $k=\chi''_H/\chi'_H$. Кутове відхилення $\Delta\theta$ від брегівського кута θ_B входить у рівняння (6) через параметр $\nu=[(1+\beta)\chi'_0-\beta\alpha_H]/(2P|\chi'_H|\beta^{1/2})$, $\alpha_H=-2\Delta\theta\sin 2\theta_B-\alpha_\varepsilon$, $\alpha_\varepsilon=C\varepsilon(z)$, $\varepsilon(z)$ – деформація кристалічної ґратки, $C=\cos^2\varphi\text{tg}\theta_B\pm\sin\varphi\cos\varphi$, де верхній знак вибирається при ковзаючих кутах падіння $\theta_B-\varphi$ відносно поверхні зразка, нижній – при кутах $\theta_B+\varphi$; φ – кут розорієнтації відбиваючої площини від поверхні зразка, $\chi_0=\chi'_0+i\chi''_0$, $\chi_H=\chi'_H+i\chi''_H$.

Крива гойдання (КГ) являє собою залежність коефіцієнта відбивання X -променів R від $\Delta\theta$ $R=X(\Delta\theta)X^*(\Delta\theta)$ ("*" – комплексно спряжене).

На даний час найбільше розповсюдження отримало чисельне інтегрування рівняння (6) методом Рунге-Кутта четвертого і п'ятого порядків. Відомі також менш строгі підходи, які, як правило, використовуються для майже кінематичних наближень [2,20-22].

Аналітичний розв'язок рівняння (6) для шару $j+1$ з постійним значенням деформації $\varepsilon(z_j)=\text{const}$ записується у вигляді

$$X_{j+1}(A_{j+1}) = \frac{SX_j + i(B + FX_j)\text{tg}[S(A_{j+1} - A_j)]}{S - i(F + BX_j)\text{tg}[S(A_{j+1} - A_j)]}, \quad (7)$$

де $X_j=X(A_j)$ – амплітуда розсіяння нижнього шару j , $B=-(1+ik)$; $F=\nu+ig$; $S=(F^2-B^2)^{1/2}$.

Вираз (7) – рекурентна формула розрахунку амплітуди розсіяння X_{j+1} на виході з кожного $j+1$ шару по відомому значенню X_j на границі з шаром j . Враховуючи, що на границі між останнім шаром і "підкладкою" амплітуда розсіяння відповідає розв'язку для ідеального кристалу [19], то

$$X_{j=0} = \frac{-F \pm (F^2 - B^2)^{1/2}}{B}. \quad (8)$$

Послідовно використовуючи процедуру (7) для довільної кількості гетерошарів, можна визначити величину $X(\Delta\theta)$ на поверхні кристалу.

Основною складністю в чисельному розв'язанні (6) є неоднозначне визначення параметра S для різних значень $\Delta\theta$ і ε . Амплітуда розсіяння повинна прямувати до нуля при $\Delta\theta \rightarrow \infty$, а залежність $X(\Delta\theta)$ повинна бути неперервною [18]. При цьому, ордината кожної точки КГ є функцією всього профілю деформації $\varepsilon(z)$, який знаходиться шляхом розв'язання оберненої задачі X -промене-

вої дифракції. Метод розв'язку оберненої задачі – визначення профілю деформації по відомій кривій гойдання, базується на мінімізації невід'ємної нев'язки між експериментальною і теоретичною КГ [3,20-22,23-26]. Для визначення внеску у функціонал невід'ємної нев'язки бокових ділянок і сателітних максимумів КГ використано функціонал, що має вигляд

$$\Phi = \sum_n g(\theta_n)(R_n^{\text{теор}} - R_n^{\text{експер}})^2, \quad (9)$$

де $g(\theta_n)=1-(\theta_n-\theta_0)^2W)^{-1}$ – вагова функція, θ_n – абсциса n -ї точки кривої гойдання, θ_0 – абсциса основного максимуму, який відповідає розсіянню від об'єму кристалу, W – величина, обернена напівширині кривої гойдання для ідеального кристалу.

За описаним алгоритмом написана програма для розрахунку (6) на мові Фортран-90 (20 Кбайт), що дозволяє використовувати ЕОМ, яка забезпечує час розрахунку однієї кривої гойдання біля 40-60 с.

2. Об'єкт досліджень

Досліджені зразки отримані на підкладках GaAs (001) за допомогою технології МПЕ в оптично-електронному дослідницькому центрі технологічного університету м.Тампере (Фінляндія). Товщина шарів багатошарової структури визначалася за осциляціями відбивної здатності при дифракції високоенергетичних електронів на відбивання. Розподіл N у структурі визначали шляхом моделювання експериментальних X -променевих КГ. Для оцінки оптичної якості зразків були проведені виміри спектрів фотолюмінесценції (ФЛ) з використанням He-Ne лазера.

Не зважаючи на невідповідність ґраток між тонкою КЯ і товстим бар'єрним матеріалом, КЯ – псевдоморфна і постійна ґратки однорідна для всієї структури. Невідповідність спричиняє тетрагональну деформацію ґратки і виявляється як деформація, перпендикулярна границі гетеропереходу. Якщо напрям росту Oz проходить вздовж $\langle 001 \rangle$, то на шар GaInNAs з КЯ впливають біаксіальні деформації стиску паралельно вісі Ox вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$ і напрямку Oy вздовж $\langle 010 \rangle$. Площинні деформації поперек ями змінюються при зміні складу після взаємодифузії. Біаксіальні площинні деформації і одноосні деформації зсуву після взаємодифузії даються виразом

$$\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}=\varepsilon_{\text{нев}}(x), \quad (10a)$$

$$\varepsilon_{zz}=-2[c_{12}(x)/c_{11}(x)]\varepsilon_{\text{нев}}(x), \quad (10б)$$

де $\epsilon_{нев}(x)$ – фактор невідповідності між ямою і бар'єром, для напруг стиску він від'ємний. Параметри $c_{12}(x)$ і $c_{11}(x)$ – константи жорсткості. Узагальнений параметр a для чотирикомпонентних сполук $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ виведений з параметрів чотирьох бінарних сполук AB, AD, BC, CD (параметри для бінарних сполук дані у таблиці 1):

$$a(x,y)=(1-x)ya_{BC}+xya_{AC}+x(1-y)a_{AD}+(1-x)(1-y)a_{BD}. \quad (10в)$$

У випадку $x,y \ll 1$, з формули (10в) випливає, що параметр a шару майже лінійно залежить від значень y та x . Очевидно, що така ж залежність повинна спостерігатись і для параметрів невідповідності ґраток шару і підкладки.

Для того щоб, розрахувати Х-променеві КГ за допомогою описаного вище формалізму Такагі-Топена, повинні враховуватись напруги, обумовлені невідповідністю ґраток. Однак напруги навколо квантових точок [27] і на границях розділу шарів занадто складні для опису в рамках простих аналітичних виразів (10а,б). Як альтернативний метод, середня деформація наближено розглядається як константа:

$$\epsilon_{\parallel}^L = \frac{a_{\parallel}^L - a_0^S}{a_0^S}, \quad \epsilon_{\perp}^L = \frac{a_{\perp}^L - a_0^S}{a_0^S}, \quad (11)$$

де індекс L відноситься до гетероепітаксійного шару, S – до підкладки, \perp – до напрямку росту і 0 – до випадку відсутності напруги. Для тонкої когерентно вирощеної плівки на товстій сторонній підкладці $a_{\parallel}^L = a_0^S$ і, отже, $\epsilon_{\parallel}^L = 0$, a_{\perp}^L обчислюється так

$$a_{\perp}^L = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} (a_0^L - a_0^S) + a_0^S. \quad (12)$$

За даними Х-променевої топографії, дислокації невідповідності у досліджуваних зразках спостерігались рідко. Оцінка критичної величини деформації зародження дислокацій невідповідності $\epsilon_{кр}^{ДН}$ за формулою [20]

$$\epsilon_{кр}^{ДН} = \frac{b}{8\pi(1-\nu)h} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \right) \left(\ln \frac{2h}{b} - \frac{1}{2} \right), \quad (13)$$

дає при векторі Бюргерса $b=4$ нм ($b=a/2 < 110 >$), коефіцієнті Пуасона $\nu=0,352$ значення $\epsilon_{кр}^{ДН} = 6,17 \cdot 10^{-3}$ для товщини шару $h=6,8$ нм. Очевидно, для більшості зразків $\epsilon_{кр}^{ДН} < \epsilon_{нев}$.

Таблиця 1. Параметри ґратки, коефіцієнти жорсткості та енергія забороненої зони для деяких сполук.

	GaAs	GaN	InAs	InN
$a_0, \text{ \AA}$	5,6533	4,46	6,0583	5,02
$c_{11}, 10^{10} \text{ Н/м}^2$	11,9	29,6	8,329	18,4
$c_{12}, 10^{10} \text{ Н/м}^2$	5,38	15,4	4,526	11,6
$E_g, \text{ eV}$	1,424	3,1	0,354	1,9

3. Вплив відпалу на структурні зміни в GaInNAs

Взаємодифузія – це термічний процес, який сприяє руху атомів поблизу границі розділу гетероструктури. Такий рух може змінити і зонну структуру і властивості КЯ [28]. Як уже відзначалося GaInNAs є досить перспективним, оскільки його можна виростити з ґраткою, подібною до ґратки GaAs, з E_g в діапазоні $0,9 \div 1,4$ eV. Однак, недостатньо висока якість обмежує його потенційне використання. У багатьох роботах показано, що короточасний відпал даної сполуки може покращувати фотолюмінесцентні та інші фотоелектричні властивості, але повного пояснення цього факту поки що немає [29]. Краще розуміння структурних змін при відпалі і того, як вони пов'язані з електронними властивостями, можуть дати комплексні дослідження впливу технологічних факторів на покращення структурної досконалості матеріалу [5,6,30-35].

Під час відпалу відбуваються принаймні дві різні структурні зміни. Азот, зв'язаний з атомом індію, може релаксувати у напрямку атомів Ga, зменшуючи деформацію і збільшуючи частоту Ga-N зв'язку в NGa_3In кластері щодо кластера Ga_4N . Це пояснює зрушення фотолюмінесцентного піка в "блакитну" область спектра [27]. Під час росту атоми N розміщені, в основному, у вузлах ґратки і оточені чотирма атомами галію. При відпалі локальна деформація ослаблюється створенням In-N зв'язків. Це, ймовірно, – результат переміщення азоту, але не виключена можливість і руху індію.

Крім формування пар In-N, також має місце друга структурна зміна – виникнення нових зв'язків Ga-N. Після відпалу більша кількість атомів азоту може бути розташована в NGa_3In кластерах. Формування цього кластера, що містить зв'язок In-N повинно зменшувати напругу в системі [10].

4. Аналіз результатів

Виміри КГ виконані на двокристальному Х-променевому дифрактометрі фірми "Bede" з мідною трубкою ($\lambda=0,15405$ нм). Колімований монохроматичний Х-променевий пучок формувался

за допомогою симетричного монохроматора GaAs (001) для відбивання (004). Відбитий пучок детектувався сцинтиляційним лічильником з вузькою щільною скануванням θ - 2θ в області симетричного відбивання (004) протягом майже 16 годин.

За значенням кутової різниці між максимумами від КЯ та підкладки $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ на КГ можна розрахувати вміст N у $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$. Без врахування міжшарової взаємодифузії при заданому x параметр y можна оцінити за допомогою співвідношень [31]:

для когерентно напружених шарів

$$y=0,35x+(2,0 \cdot 10^{-5})\Delta\theta_{\text{КЯ}}, \quad (14)$$

для повністю релаксованих шарів

$$y=0,35x+(3,7 \cdot 10^{-5})\Delta\theta_{\text{КЯ}}. \quad (15)$$

Зазначимо, що (14) і (15) базуються на законі Вегарда.

4.1. Багатошарова структура з КЯ типу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Схема багатошарової структури з такою КЯ представлена на врізці до рис.1. Товщина КЯ – 6,8 нм (12 атомних шарів), $x=0,37$. Товщина шару значно менша критичної товщини утворення дислокацій невідповідності.

Експериментальні криві гойдання від багатошарової системи до і після відпапу представлені на рис.1.

Максимум інтенсивності відбивання від КЯ на КГ на рис.1а зміщений від головного максимуму (від підкладки GaAs) на $\Delta\theta_{\text{КЯ}}=5920 \pm 10$ кут.с. Для відпаленої структури спостерігається деяке збільшення $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$, приблизно на 50 кут.с, в порівнянні з не відпаленою структурою (рис.1б). Причиною цього може бути: міжшарова взаємодифузія $\text{In} \leftrightarrow \text{Ga}$; релаксація пружних напруг між шарами; поява квантових точок і дислокацій, тоді границя розділу стає більш шорсткою [36].

Розрахункова КГ без врахування процесу міжшарової взаємодифузії для процентного вмісту In у КЯ при $x=0,37$ представлена на рис.2. Зауважимо, що збільшення x на 0,01 приводить до збільшення кутової неузгодженості між максимумами від КЯ і підкладки у середньому на 180 кут.с. При цьому, найкращий кількісний збіг розрахункової та експериментальної КГ спостерігається при $x=0,35$.

При взаємодифузії елементів III-групи в процесі вирощування КЯ, атоми In дифундують в бар'єрний GaAs шар, а атоми Ga – у КЯ. Утворюється тонка і градуйована границя розділу. Краща відповідність між експериментальними

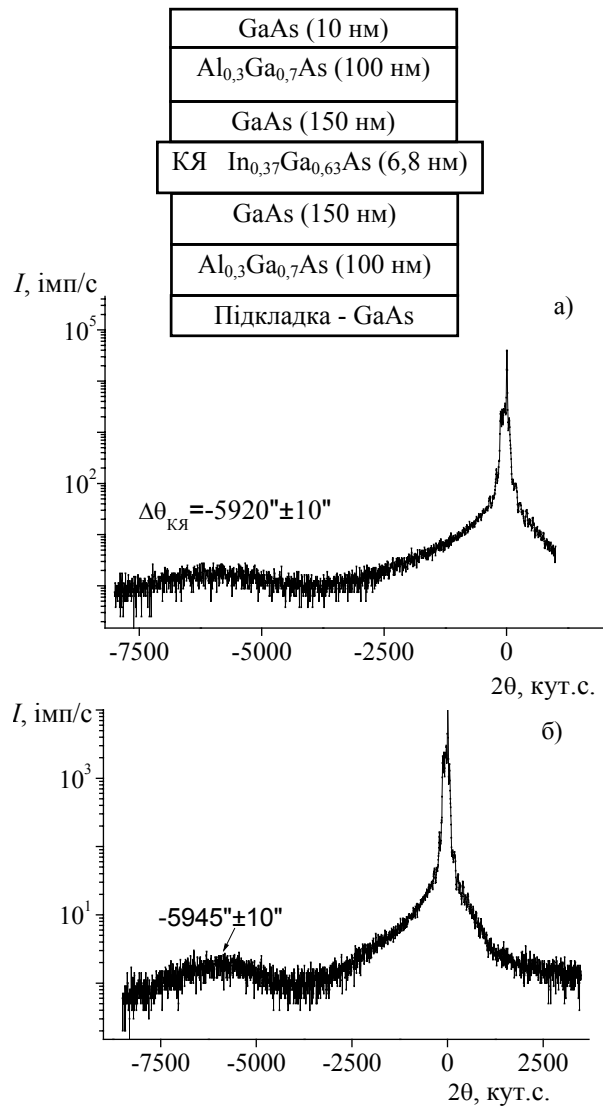


Рис.1. КГ (θ - 2θ сканування) від багатошарової структури з КЯ типу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: до (а) і після відпапу (б). $\delta_{\text{КЯ}}=6,8$ нм, $x=0,37$.

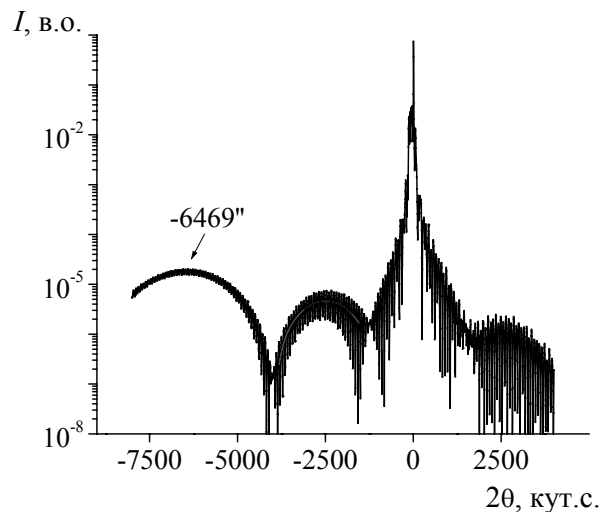


Рис.2. Теоретична КГ від структури з квантовою ямою $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\delta_{\text{КЯ}}=6,8$ нм, $x=0,35$.

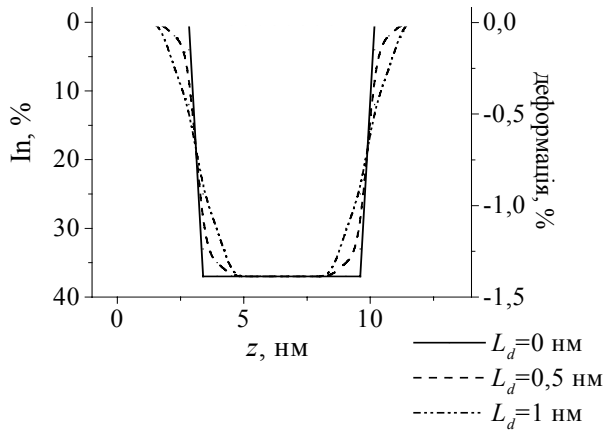


Рис.3. Діаграма розподілу напруг невідповідності внаслідок перерозподілу In у КЯ і поза нею у випадках різного ступеню розмиття. Товщина КЯ – 6,8 нм (12 моношарів $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}$). $L_d=0$ нм відповідає КЯ без розмиття, $L_d=0,5$ нм відповідає розмиттю КЯ - варіант 1, $L_d=1$ нм – варіант 2.

даними і моделюванням, для випадку щойно вирощеного зразка, досягається при розмитті КЯ на глибину 1,2 нм при загальному зменшенні In на 19%, чим на 7% (рис.3). Це вказує на те, що значне перемішування In-Ga на границі розділу трапляється, навіть у тільки що вирощених КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Під час швидкого термічного відпалу може відбуватися впорядкування розподілу атомів In-Ga в утвореному у такий спосіб міжшаровому прошарку, що також, приводить до зменшення сітки деформацій у структурі.

Ефективна товщина d_w (порівнянна з довжиною взаємодифузії In-Ga) шарів точок може також зростати зі збільшенням температури підкладки. Відповідно, товщина бар'єрних шарів d буде зменшуватися. Однак, d_w+d залишається незмінним протягом процесу нарощування наступних шарів [27].

У даному випадку вважається, що другий закон Фіка виконується у шарах з КЯ і для руху всіх атомів через гетероперехід. Дифузія, в основному, проводиться елементами III-групи, тобто атомами In і Ga. Припускаємо, що дифузія In і Ga – ізотропна, і коефіцієнт дифузії не залежить від концентрації In і Ga.

Профіль складу після взаємодифузії характеризується довжиною дифузії $L_d = \sqrt{Dt}$, D – коефіцієнт дифузії, t – час термічного процесу.

Для однієї КЯ $\text{GaInAsN}/\text{GaAs}$ з долею In x_0 , профіль складу In після взаємодифузії дається

$$x(z) = \frac{x_0}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{L_z + 2z}{4L_d} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{L_z - 2z}{4L_d} \right) \right], \quad (16)$$

де L_z – глибина щойно вирощеної КЯ, z – координату відстань вздовж напрямку росту кристалу, КЯ центрована при $z=0$. Наші результати узгоджуються з роботою [17]. Допускаючи, що d_w отримане з моделювання КГ дорівнює довжині дифузії Ga або In, ми можемо оцінити коефіцієнт дифузії D , використовуючи вираз [27]

$$\Delta d_w = d_w(T) - d_w(\text{щойно вирощеного}) = \sqrt{D(T)\tau},$$

де τ – час відпалу. Розрахований коефіцієнт дифузії – $1,58 \cdot 10^{-17} \text{см}^2\text{с}^{-1}$ при 650°C .

4.2. Багатшарова структура з КЯ типу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

У даному пункті нами досліджена серія зразків, які відрізняються товщиною КЯ δ і процентним вмістом азоту y . Відповідно до технологічних умов – $x \approx 0,37$. Експериментальні КГ від одного із зразків до і після відпалу представлені на рис.4, а від решти подані у таблиці 2.

Для даного випадку припускається, що більшість атомів N займають переважно As надгратку і атомам N може бути енергетично вигідно перейти з їх власних положень у сусідні, по мірі того як зв'язування N перевищує визначений рівень (це припущення підтверджується останніми експериментами по каналюванню [23,37]). Розрахунки показують, що утворення ізольованого міжвузольного N у GaNAs неможливо через високий енергетичний стан у ґратці [22]. Замість утворення комплексів N, таких як As-N і N-N, розміщених у міжвузлях, енергетично вигідно буде утворити одне ґраткове утворення [38]. Утворення N-As комплексів вносить напруги стиску в епішар, тоді як N-N комплекси розтягують його в порівнянні з атомом заміщення N_{As} , тому зв'язування цих не заміщених атомів N може призводити до відхилення від закону Вегарда [38] і вносити додаткові кутові розходження на КГ.

Різні технологічні умови одержання такого роду структур, наприклад, різна температура підкладок у процесі МПЕ, внаслідок деякого локального розупорядкування у проміжках між сусідніми поверхнями, можуть обумовлювати мікроструктурні флуктуації в плівках $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$. Іншими словами, тонкі шари $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ можуть насправді мати розмиту форму границь розділу з GaAs, даючи середню міжфазну шорсткість у межах $5\text{-}20\text{\AA}$ [9]. Оскільки, місцеположення максимумів відбивання від КЯ до і після відпалу майже не змінилось, то вважатимемо, що процес розмиття КЯ відбувається ще під час її вирощування. Незначний зсув піка від КЯ після відпалу

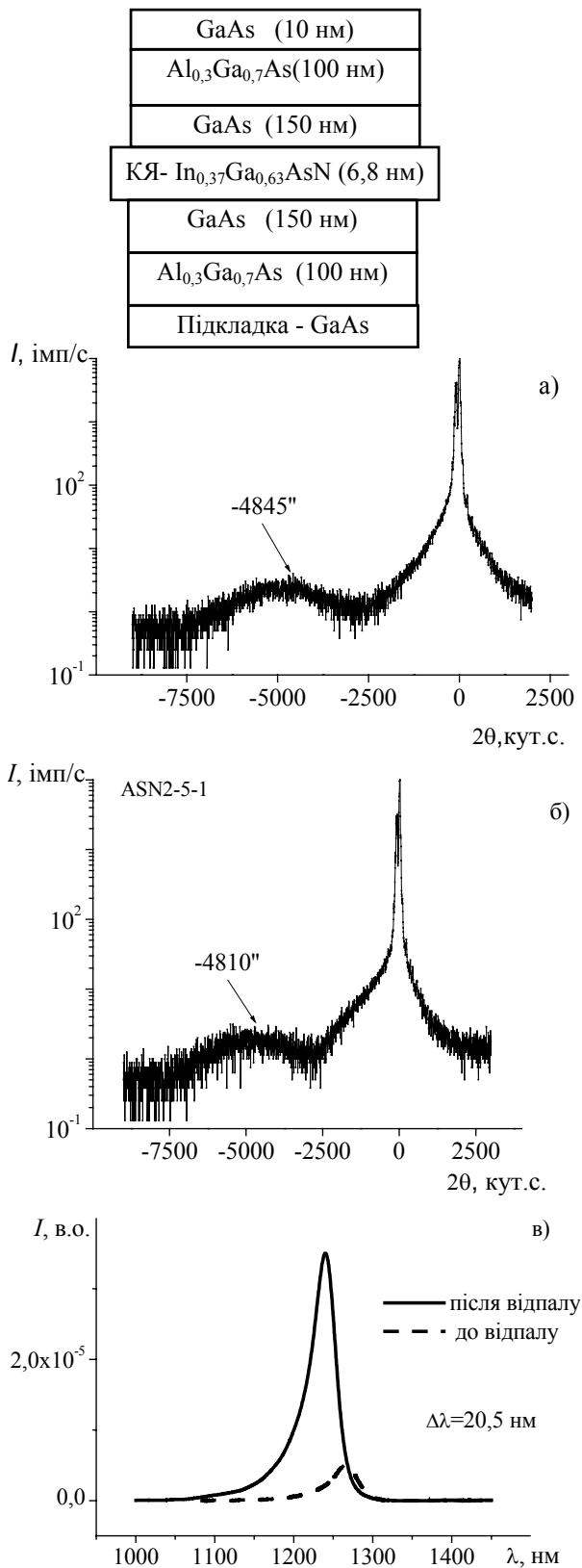


Рис.4. Експериментальні КГ від зразка ASN-2-5 (КЯ – $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$) до (а) і після (б) відпалу; ФЛ-спектр випромінювання багатошарової системи (в).

Таблиця 2. Параметри багатошарових структур з КЯ типу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ (товщина КЯ δ , вміст азоту y і кутові відстані між піками від КЯ і підкладки на КГ до ($\Delta\theta_{\text{КЯ}}$) і після ($\Delta\theta'_{\text{КЯ}}$) відпалу зразків (у дужках зазначені похибки).

Зразок	ASN-1-1	ASN-2-5	ASN-3-2	ASN-4-5	ASN-5-1
δ , нм	6,8	6,8	6,8	5,8	7,8
$\Delta\theta_{\text{КЯ}}$, кут.с ($\pm 5''$)	5920	4850	4460	4825	5100
$\Delta\theta'_{\text{КЯ}}$, кут.с ($\pm 5''$)	5945	4810	4430	4820	5080
y , % ($\pm 0,1$)	0	2,1	3,0	2,2	1,8

можна пов'язати з релаксацією напруг у системі або дифузією In з КЯ. У порівнянні з КЯ InGaAs (рис.1) спостерігається значне зменшення кутової розорієнтації між піками від КЯ InGaAsN і підкладки – на 1070 кут.с (рис.4).

Зауважимо також, що морфологія гетерограниці розділу відіграє активну роль у формуванні фізичних властивостей такої багатошарової структури. При цьому, незважаючи на те, що додавання N у InGaAs зменшує невідповідність ґратки між InGaAs і GaAs, можливий, так званий, 3D-ріст (острівковий) шару InGaAs [39].

Розподіл атомів In і Ga в КЯ, як і в попередньому випадку, описується функцією розподілу спотворень, оскільки концентраційний профіль As і N не змінюється. Атоми Ga поблизу поверхні розділу дифундують в КЯ, а атоми In – у бар'єр. Концентрація Ga в центральній області КЯ не змінюється, а довжина дифузії зростає від 0 до 1,1 нм.

Із аналізу експериментальних КГ дифузія атомів In у бар'єрний шар зменшує невідповідність ґраток на гетеропереході, тобто спричиняє релаксацію деформації у сусідніх шарах з КЯ. Для щойно вирощеного шару з КЯ деформація невідповідності складає 1,3 % в центрі КЯ. Взаємодифузія зменшує деформацію стиску до 0,98% на границі розділу з КЯ. У бар'єрній області напруги стиску зростають, оскільки концентрація атомів In зростає біля поверхні. Напруги стиску сягають 0,25% при довжині дифузії $L_d=0,565$ нм.

Для відпалених зразків спостерігається деяке зменшення кутової розорієнтації КЯ в порівнянні з невідпаленими зразками. Причиною цього може бути зменшення напруг на границях розділу між шарами внаслідок зв'язування атомів In атомами N.

Теоретичні моделювання КГ для різних концентрацій N у КЯ показало, що збільшення y на

0,01 приводить до зменшення кутової неузгодженості між КЯ і підкладкою GaAs у середньому на 505 кут.с незалежно від степеня розмитості КЯ. При цьому зі збільшенням вмісту N зникають перші осциляції інтенсивності по обидві сторони від основного максимуму, а відбивання від КЯ набувають більш вираженої асиметричної форми.

Отже, наявність азоту в КЯ зменшує кутову розорієнтацію $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ і відповідно параметри неузгодженості ґраток. Аналіз розрахункових КГ без врахування і з врахуванням розмиття КЯ (рис.5) дає можливість оцінити вміст азоту в КЯ з точністю $\sim 0,05\%$.

Відзначимо, що найбільш повна відповідність з експериментальними КГ, у випадку другого варіанта розмиття КЯ (рис.3) для зразка ASN-2-5 має місце при $y=2,1\%$, для зразка ASN-3-2 – при $y\sim 3\%$ (рис.5), для ASN-4-5 – при $y=2,2\%$, для ASN-5-1 – при $y\sim 1,8\%$ (див. таблицю 2).

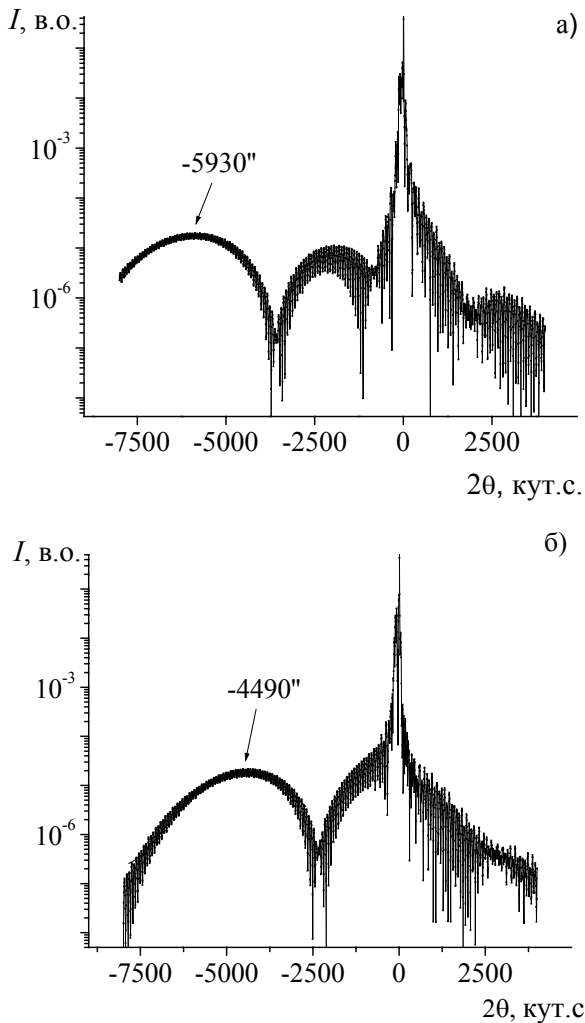


Рис.5. Розрахункові КГ із врахуванням розмиття КЯ $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$, $y=0,03$. Варіанти: 1 (а); 2 (б).

Отже, шойно вирощена структура з квадратною КЯ в результаті взаємодифузії атомів, змінюється від різкої границі розділу до розмитого профілю (рис.3).

У випадку першого варіанта розмиття дифузії індію з КЯ оціночне значення процентного вмісту N у середньому збільшиться на 0,2 % для кожного зразка.

4.3. Багатошарова структура з буферними шарами $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ і КЯ типу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

Відмінність даної структури від попередньої полягає у кількості допоміжних шарів, а також наявності буферних шарів $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ по обидві сторони від КЯ (див. врізку на рис.6).

Для покращення якості GaInNAs/GaAs вміст N у КЯ зменшують, хоча це призводить до збільшення деформації у квантових ямах. Вводячи компенсаційний бар'єр до цієї системи, можна виростити високодосконалі КЯ GaInNAs без деформацій невідповідності [34] і збільшити кількість КЯ у лазерній структурі (рис.9).

Розглянемо нову багатошарову систему з КЯ GaInNAs, що має деформаційно-компенсаційні бар'єрні шари GaAsN, вирощених МПЕ з газового джерела.

Досліджено серію зразків, які відрізняються температурними умовами утворення КЯ. Товщина КЯ у більшості зразків складає 6,8 нм (12 атомних шарів).

Характерні експериментальні КГ до і після відпаду однієї із багатошарових систем представлено на рис.6. КГ інших зразків, у цілому, дуже близькі за формою і відрізняються тільки місцеположенням максимумів інтенсивності від КЯ і буферних шарів.

На відміну від попереднього випадку багатошарової структури на експериментальних КГ спостерігається система максимумів інтенсивності, викликана відбиванням від підкладки GaAs, від буферних шарів $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ – у правій частині КГ від головного піка, а також від КЯ – у лівій частині КГ. Крім того, на піках від буферних шарів спостерігається тонка осциляційна структура, яка свідчить про високий ступінь когерентності шарів. При аналізі експериментальних КГ для даної багатошарової структури використано вищевведені варіанти можливого розмиття КЯ (рис.3). При цьому розглянуто різні варіанти наявності азоту в КЯ і буферних шарах, а також їх вплив на формування структури КГ.

Очевидно, що інтенсивність люмінесценції для структури з компенсованою деформацією вища ніж для структури з бар'єром GaAs, що свідчить

про кращу якість матеріалу (рис.4в, рис.6б). ФЛ максимуми від щойно вирощеної квантової ями $\text{GaInNAs}/\text{GaAsP}$ не значні, напевне, через дефекти, пов'язані з N і пошкодженнями, які вносяться іонами N у GaInNAs шар. Через зменшення міграції катіонів при нижчих температурах багато точкових дефектів втілюються у матеріал GaInNAs . Для покращення якості матеріалу зразки відпалювались при різних температурах з різним часом відпалу. Для структур $\text{GaInNAs}/\text{GaAsN}$ інтенсивність люмінесценції значно збільшувалась. На рис.4, 6 інтенсивність ФЛ зростає з ростом температури відпалу до 650°C протягом 10 с і потім падає. При збільшенні швидкості температурного відпалу ФЛ-піки зміщуються у "голубу" область для всіх КЯ, можливо, це зумовлюється дифузією In, Ga, N.

Аналіз розрахункових КГ без врахування і з врахуванням розмиття КЯ, дає можливість оцінити вміст азоту в буферних шарах і у КЯ.

Зазначимо, що в цілому має місце значне зменшення $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ (таблиця 2) у порівнянні з тим, коли система не містить азоту.

При цьому, розглянуто такі можливі ситуації:

1) КЯ не розмита, змінюється вміст In і N, причому процентний вміст N однаковий в КЯ і буферних шарах.

Зміна x на 0,01 (від 0,35 до 0,38) приводить до збільшення кутової неузгодженості між КЯ і підкладкою GaAs приблизно на 200 кут.с і зменшенню на 40 кут.с відстані між максимумом від підкладки й основним піком від буферного шару. Зі збільшенням процентного вмісту N з'являються нові осциляції на КГ як зліва, так і справа від головного піка. При цьому, якщо в лівих частинах розрахованої і експериментальної КГ положення піків від КЯ знаходяться в гарній відповідності, то в правих частинах – від буферних шарів істотно відрізняються. Це дозволяє вважати, що у КЯ і буферних шарах неоднакова концентрація азоту.

2) КЯ не розмита, $x=0,35-0,38$, процентний вміст N неоднаковий в КЯ і буферних шарах.

Збільшення вмісту N у КЯ на 1% приводить до збільшення $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ на 510-520 кут.с. Для двох буферних піків $\Delta\theta_{\text{БШ}}$ зменшується при $x=0,37$ на: 125-135 кут.с і 100-110 кут.с, а при $x=0,38$ на 115-120 кут.с і 110 кут.с, відповідно.

Як і в попередньому випадку, збільшення x на 1% приводить до збільшення $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ на 190-200 кут.с. Максимуми від буферних шарів зміщуються у бік головного піка на 35-40 кут.с. У цілому, має місце однаправлений зсув піків до голов-

ного максимуму: при збільшенні y (N) – зліва направо, і справа наліво при збільшенні x (In).

Висновок – у цьому випадку важко знайти кількісну відповідність між теоретичними й експериментальними КГ.

Наприклад, при вмісті азоту 1 % у буферних шарах і 2 % у КЯ у правих частинах КГ має місце непогана відповідність між теоретичними й експериментальними положеннями піків від буферних шарів. У той же час, у лівих частинах КГ від досліджуваної серії зразків такої відповідності між теоретичними й експериментальними положеннями піків від КЯ не має – розходження складає 200-800 кут.с.

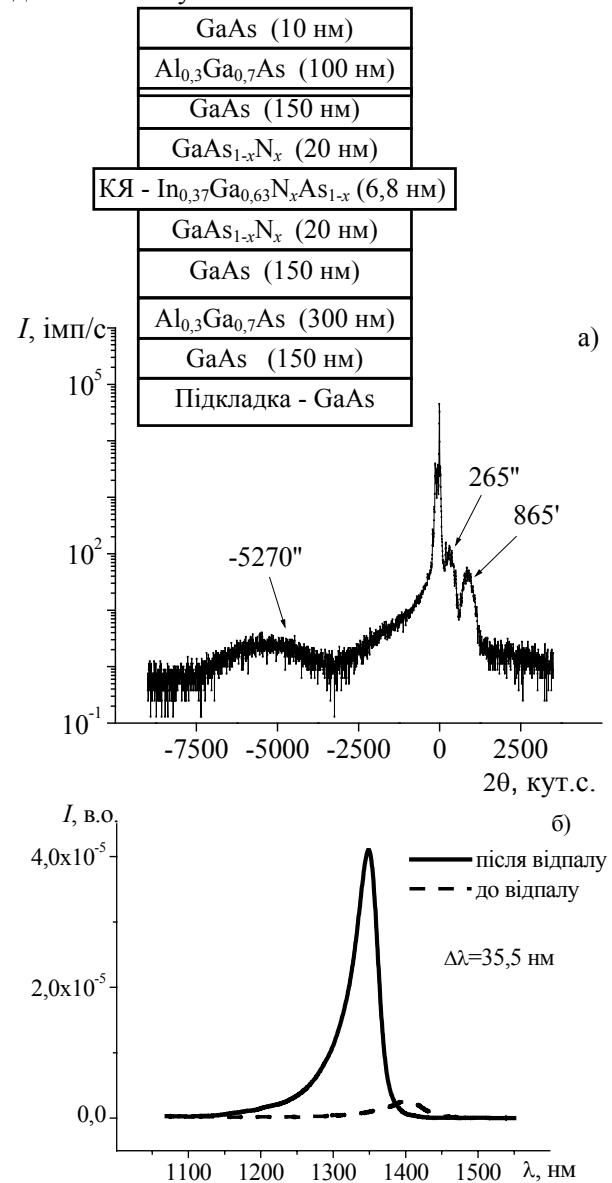


Рис.6. Експериментальна КГ зразка ASN-24-5 (товщина КЯ $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ – 6,8 нм або 12 моношарів) після відпалу (а). Крок сканування θ - 2θ – 5 кут.с. ФЛ-спектр до і після відпалу (б).

3) КЯ розмита, розглянуті два варіанти розмиття (рис.3), $x=0,37$ (In), процентний вміст N однаковий в КЯ і буферних шарах.

Розмитість, тобто взаємодифузія In-Ga в КЯ, покращує кількісну відповідність між деякими піками на теоретичних і експериментальних КГ, однак, як і в попередніх випадках, вона ще значна.

Наприклад, збільшення вмісту N приводить до формування на розрахункових КГ двох чітко виражених максимумів інтенсивності від буферних шарів. При цьому збільшення N на 1 % приводить до зменшення $\Delta\theta_{КЯ}$ на 480-490 кут.с. У той же час, збільшується кутова відстань між піками від буферних шарів і підкладки ($\Delta\theta_{БШ}$) – на 550-560 кут.с. Збільшення ступеню розмитості КЯ зменшує швидкість зміни положень піків від КЯ.

4) Щойно вирощена КЯ розмита. Розглянуті різні варіанти розмиття КЯ, $x=0,37$ (In), у (N) неоднаковий в КЯ і буферних шарах (рис.7).

В цьому випадку збільшення N у КЯ на 1% приводить до зменшення $\Delta\theta_{КЯ}$ на 510-520 кут.с і збільшенню її для буферних шарів на 100-110 кут.с. Ступенем розмитості КЯ в цьому випадку можна керувати зсувом піка від КЯ: для випадку а) розташування КЯ – $\Delta\theta_{КЯ}=-5345$ кут.с, для випадку б) $\Delta\theta_{КЯ}=-5265$ кут.с. Для 2-го варіанта розмиття КЯ – $\Delta\theta_{КЯ}=-5055$ кут.с. Інші піки не змінюють свого розташування.

Варто підкреслити, що тільки в цьому випадку можна найточніше підігнати розрахункові КГ до експериментальних за кількісними оцінками положень піків як справа, так і зліва від головного піка. Це обумовлено тим, що тут параметрами x, y і ступенем розмитості КЯ можна керувати швидкістю зміни положень піків у лівій і правій частинах КГ.

Таблиця 3. Параметри багатошарової структури з КЯ типу $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ (вміст азоту в КЯ $y_{КЯ}$ і у буферних шарах $y_{БШ}$).

зразок	ASN-23-5	ASN-24-5	ASN-25-5
$y_{КЯ}, \% (\pm 0,1)$	2,1	2,0	2,4
$y_{БШ}, \% (\pm 0,1)$	1,1	1,0	1,1
$\Delta\theta_{КЯ}, (\pm 5'')$	-5290	-5260	-4825
$\Delta\theta'_{КЯ}, (\pm 10'')$	-5240	-5285	-5000
$\Delta\theta_{БШ1}, (\pm 10'')$	250	275	295
$\Delta\theta'_{БШ1}, (\pm 10'')$	280	280	270
$\Delta\theta_{БШ2}, (\pm 5'')$	840	875	885
$\Delta\theta'_{БШ2}, (\pm 5'')$	850	870	860

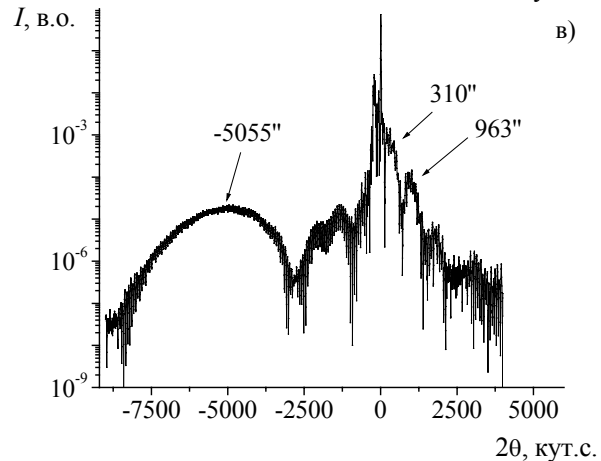
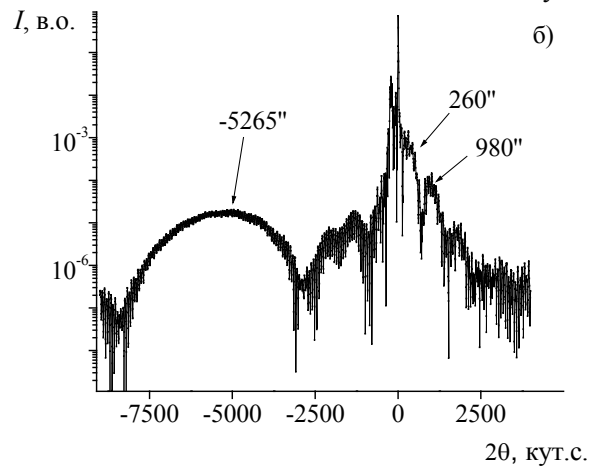
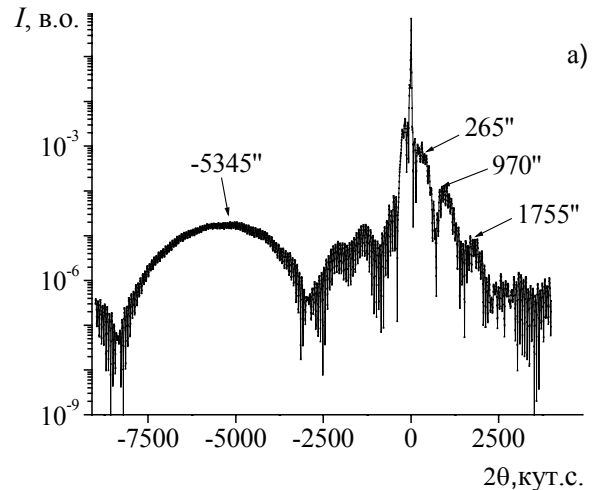


Рис.7. Теоретична КГ. КЯ $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$: КЯ не розмита (а); розмита: варіант 1 (б), варіант 2 (в). $\delta=6,8$ нм, $x=0,37\%$. У буферному шарі $y=1\%$ (N), в КЯ $y=2\%$ (N).

При підгонці теоретичних КГ до експериментальних аналізувалися всі можливі найімовірніші ситуації. Для знаходження більш повної відповідності між теоретичними й експериментальними КГ дослідження проводилися з використанням не тільки кінематичної, але й динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів. Максимально

повний збіг цих КГ досягається лише з урахуванням інструментальних факторів, що, у принципі, неважко, а також з врахуванням параметрів атомної шорсткості міжшарових границь розділу.

В кінцевому розрахунку отримано, що вміст азоту в КЯ для зразка на рис.6 – 2,0 %, а в буферних шарах ~1,0 % (див. таблицю 3).

4.4. Система $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$

На рис.8 представлені експериментальна крива даної системи (див. врізку на рис.8) та розрахована КГ. Товщина шару $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ – 4,8 нм. Зазначимо, що після короткочасного відпалу даної системи (~10 с) місцеположення максимуму відбивання від підкладки майже не змінилося.

Проведені моделювання КГ з врахуванням розмиття шару та міжшарової релаксації напруг показують, що в даній системі, напевне, відбулася також міжшарова взаємодифузія In-Ga. Врахування міжшарового розмиття на глибину 1,2 нм дає можливість достатньо точно визначити вміст азоту в шарі.

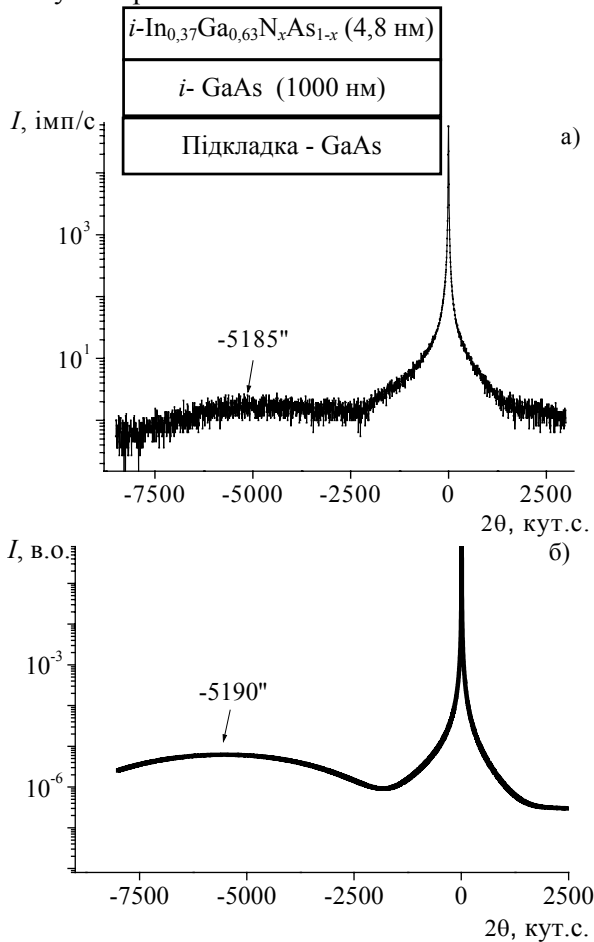


Рис.8. Система $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$. Експериментальна КГ (а). Товщина КЯ – 4,8 нм, вміст N ~3,0-3,2%. Теоретична КГ (б).

<i>i</i> - GaAs (10 нм)
<i>i</i> - $\text{Al}_{0,6}\text{Ga}_{0,4}\text{As}$ (100 нм)
<i>i</i> - GaAs (75 нм)
<i>i</i> - $\text{GaAs}_{0,98}\text{N}_{0,02}$ (30 нм)
<i>i</i> - $\text{In}_{0,31}\text{Ga}_{0,68}\text{N}_{0,016}\text{As}_{0,984}$ (1 нм)
КЯ - <i>i</i> - $\text{In}_{0,34}\text{Ga}_{0,66}\text{N}_x\text{As}_{1-x}$ (6,8 нм)
<i>i</i> - $\text{In}_{0,31}\text{Ga}_{0,68}\text{N}_{0,016}\text{As}_{0,984}$ (1 нм)
<i>i</i> - $\text{GaAs}_{0,98}\text{N}_{0,02}$ (80 нм)
<i>i</i> - $\text{In}_{0,31}\text{Ga}_{0,68}\text{N}_{0,016}\text{As}_{0,984}$ (1 нм)
КЯ - <i>i</i> - $\text{In}_{0,34}\text{Ga}_{0,66}\text{N}_x\text{As}_{1-x}$ (6,8 нм)
<i>i</i> - $\text{In}_{0,31}\text{Ga}_{0,68}\text{N}_{0,016}\text{As}_{0,984}$ (1 нм)
<i>i</i> - $\text{GaAs}_{0,98}\text{N}_{0,02}$ (20 нм)
<i>i</i> GaAs (75 нм)
<i>i</i> - $\text{Al}_{0,6}\text{Ga}_{0,4}\text{As}$ (200 нм)
Підкладка - <i>n</i> -GaAs

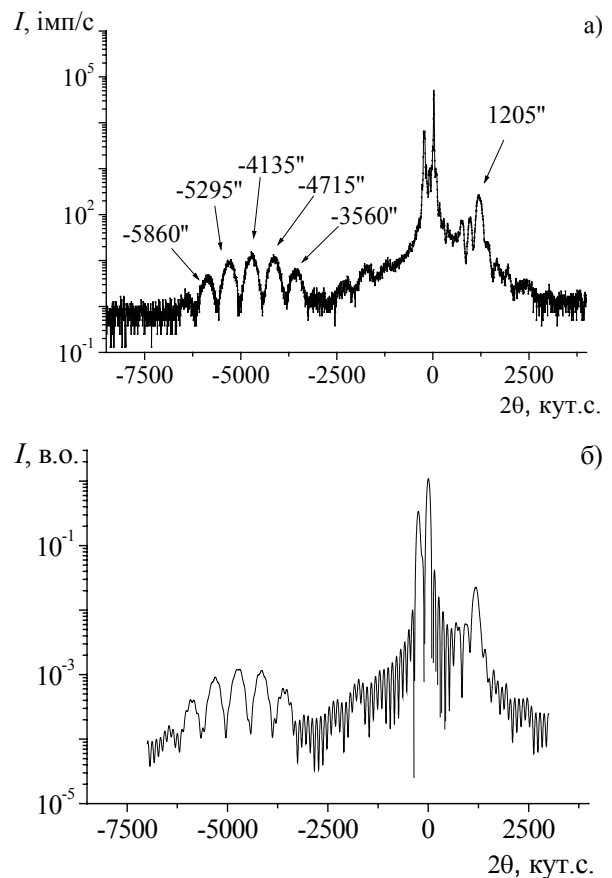


Рис.9. Багатошарова система, що містить дві квантові ями – $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ товщиною 6,8 нм. Експериментальна КГ (а), теоретична (б). $y=2,4\%$.

З аналізу розрахункових КГ для системи $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}$ слідує, що приріст товщини шару на 1-2 нм значно модифікує КГ – чіткіше проявляється тонка структура максимуму та мінімуму від шару, появляються нові інтерференційні осциляції інтенсивності. В той же час місцеположення максимуму не змінюється, а мінімуму рухається до максимуму (при $\Delta\delta=1$ нм на 700-800 кут.с.).

При збільшенні вмісту N на 1% кутова розорієнтація шар-підкладка зменшується на 500 кут.с.

Релаксація напруг на 1% змінює місцеположення максимуму відбивання від шару в середньому на 28-30 кут.с, тобто є зменшення напруг невідповідності на $4,5 \cdot 10^{-4}$.

Врахування ще можливого розмиття міжшарової границі також дає помітний внесок у $\Delta\theta$.

4.5. Багатошарова система з двома квантовими ямами – $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-x}\text{N}_x$

Як і в попередньому випадку аналіз розрахункових КГ без врахування і з врахуванням розмиття КЯ дає можливість оцінити вміст азоту в буферних шарах і у КЯ такої складної багатошарової системи (рис.9).

Чітко виражена осциляційна структура інтенсивності на експериментальних КГ в лівій частині від КЯ свідчить про високий ступінь когерентності і досконалості даної багатошарової системи.

Зазначимо, що для задовільного співпадання теоретичних і експериментальних КГ розглянуто всі можливі попередні ситуації, а також однакове і різне розмиття КЯ.

Найкраще кількісне і якісне співпадання розрахункових і експериментальних КГ має місце при $y=2,4\%$ (N) в обох КЯ.

Висновки

Двокристальна X-променева дифрактометрія є потужним неруйнівним інструментом дослідження ультратонких гетерофазних багатошарових систем.

1. Методами високороздільної X-променевої дифрактометрії досліджені багатошарові напівпровідникові системи, що містять одну або дві квантові ями. Шляхом підгонки розрахункових кривих гойдання до експериментальних визначено ступінь міжшарової взаємодифузії до і після відпалу.

Встановлено зміни вмісту азоту в КЯ в залежності від умов вирощування.

2. В щойно вирощених багатошарових структурах з КЯ проходять процеси взаємодифузії, які проявляються в розмитті КЯ внаслідок дифузії In в буферні або захисні шари, а Ga в КЯ. Коротко-

часний температурний відпал незначно змінює кутову розорієнтацію між КЯ і підкладкою, проте при цьому значно зростає максимум інтенсивності ФЛ і його зміщення в голубу область спектру.

3. Експериментально отримані і теоретично розраховані КГ свідчать про те, що багатошарова структура, створена на підкладці GaAs має досконалу кристалічну структуру, а границя розділу між захисними, буферними шарами і КЯ типу $\text{GaAs}/\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}$ є чітка і когерентна.

4. Кількість азоту в КЯ і буферних шарах залежить від багатьох технологічних факторів, наприклад, – температури підкладки. При цьому довільний розподіл домішок In і N у такого роду системах може приводити до збільшення або зменшення ступеню локального розупорядкування і деформації, що відповідно впливає на рухливість і довжину дифузії носіїв заряду.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R.* Band parameters for III-IV compound semiconductors and their alloys // *Journal of Applied Physics.* - 2001. - **89**, No.11. - P.5815-5875.
2. *Zah C.E., Bhat R., Pathak B.N., Favire F., Lin W., Wang M.C., Andreadakis N.C., Hwang D.M., Koza M.A., Lee T.P., Wang Z., Darby D., Flanders D., Heieh J.J.* High-performance uncooled 1.3- μm $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum-well lasers for subscriber loop applications // *Journal of Quantum Electronic.* - 1994. - **30**. - P.511-523.
3. *Mars D.E., Babic D.I., Kaneko Y., ChangY.-L.* Growth of 1.3 μm InGaAsN laser material on GaAs by molecular beam epitaxy // *Journal of Vacuum Science and Technology.* - 1999. - **17B**. - P.1272-1275.
4. *Harmand J.C., Ungaro G., Largeau L., Le Roux G.* Comparison of nitrogen incorporation in molecular-beam epitaxy of GaAsN, GaInAsN, GaAsSbN // *Applied Physics Letters.* - 2000. - **77**, No.16. - P.2482-2484.
5. *Al-Yacoub A., Bellaiche L.* Quantum mechanical effects in (Ga,In)(As,N) alloys // *Physical Review.* - 2000. - **62B**, No.16. - P.10847-10851.
6. *Lones E.D., Modine N.A., Allerman A.A., Kurtz S.R., Wright A.F., Tozer S.T., Wei X.* // Band structure of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ alloys and effects of pressure // *Physical Review.* - 1999. - **60B**, No.7. - P.4430-4433.
7. *Sato S.* Low Threshold and High Characteristic Temperature 1.3 μm Range GaInNAs Lasers Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition // *Japanese Journal of Applied Physics.* - 2000. - **39**. - P.3403-3405.

8. Yang X., He'roux J.B., Mei L.F., Wang W.I. In-GaAsNSb/GaAs quantum wells for 1.55 μm lasers grown by molecular- beam epitaxy // Applied Physics Letters. - 2001. - **78**, No.26. - P.4068-4070.
9. Soo Y.L., Huang S., Kao Y.H., Chen J.N., Hulbert S.L., Geisz J.F., Kurtz S., Olson J.M., Kurtz S.R., Jones E.D., Allerman A.A. Local structures and interface morphology of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ thin films grown on GaAs // Physical Review. - 1999. - **60B**, No.19. - P.13605-13611
10. Kurtz S., Webb J., Gedvilas L., Friedman D., Geisz J., Olson J., King R., Joslin D., Karam N. Structural changes during annealing of GaInAsN // Applied Physics Letters. - 2001. - **78**, No.6. - P.748-750.
11. Fewster P.F. Alignment of double-crystal diffractometers // Journal of Applied Crystallography. - 1985. - **18**. - P.334-338.
12. Chut X., Tanner B.K. Double crystal x-ray rocking curves of multiple layer structures // Semicond. Sci. Technol. - 1987. - **2**. - P.765-771.
13. Kondow M., Kitatani T., Nakahara K., Tanaka T. Temperature dependence of lasing wavelength in a GaInNAs laser diode // IEEE Photonics Technol. Lett. - 2000. - **12**. - P.777-779.
14. Pinault M.-A., Tournie E. On the origin of carrier localization in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ quantum wells // Applied Physics Letters. - 2001. - **78**, No.11. - P.1562-1565.
15. Fewster P.F. X-ray diffraction tools and methods for semiconductor analysis // Inst. Phys. Conf. - 1999. - **164**. - P.197-206.
16. Pan Z., Wang Y.T., Li L.H., Zhang W., Lin Y.W., Zhou Z.Q., Wu R.H. X-ray double-crystal characterization of the strain relaxation in $\text{GaAs}/\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}(001)$ sandwiched structures // Journal of Crystal Growth. - 2000. - **217**. - P.26-32.
17. Fewster P.F., Curling, C.J. Compositional lattice-mismatch measurement of thin semiconductor layers by x-ray diffraction // J. Appl. Phys. - 1987. - **62**. - P.4154-4158.
18. Takagi S. A. Dynamical theory of diffraction for a distorted crystal // J. Phys. Soc. Japan. - 1969. - **26**, No.5. - P.1239-1253.
19. Coldren C.W., Spruytte S.G., Harris J.S., Larson M.C. Group III nitride-arsenide long wavelength lasers grown by elemental source molecular beam epitaxy // Journal of Vacuum Science and Technology. - 2000. - **18B**. - P.1480-1483.
20. Li Wei, Pessa M., Ahlgren T., Decker J. Origin of improved luminescence efficiency after annealing of Ga(In)NAs materials grown by molecular-beam epitaxy // Applied Physics Letters. - 2001. - **79**, No.8. - P.1094-1096.
21. Livshits D.A., Egorov A.Yu., Riecher H. 8W continuous wave operation of InGaAsN lasers at 1.3 μm // Electronics Letters. - 2000. - **36**, No.16. - P.1381-1382.
22. Anan T., Nishi K., Sugou S., Yamada M., Tokutome K., Gomyo A. GaAsSb: A novel material for 1.3 μm VCSELs // Electron. Lett. - 1998. - **34**, No.22. - P.2127-2129.
23. Hoehnsdorf F., Koch J., Leu S., Stolz W., Borchert B., Druminsk M. Reduced threshold current densities of (GaIn)(NAs)/GaAs single quantum well lasers for emission wavelengths in the range 1.28-1.38 μm // Electron. Lett. - 1999. - **35**, No.7. - P.571.
24. Ungaro G., Le Roux G., Teissier R., Harmand J.C. GaAsSbN: a new low-bandgap material for GaAs substrates // Electronics. Lett. - 1999. - **35**, No.15. - P.1246-1247.
25. Yamada M., Anan T., Tokutome K., Kamei A., Nishi K., Sugou S. Low-threshold operation of 1.3- μm GaAsSb quantum-well lasers directly grown on GaAs substrates // IEEE Photonics Technol. Lett. - 2000. - **12**. - P.774-6.
26. Blum O., Klem J.F. Characteristics of GaAsSb single-quantum-well-lasers emitting near 1.3 μm // IEEE Photonics Technol. Lett. - 2000. - **12**. - P.771-773.
27. Xu S.J., Wang H., Li Q., Xie M.H., Wang X.C., Fan W.J., Feng S.L. X-ray diffraction and optical characterization of inter diffusion in self-assembled InAs/GaAs quantum-dot superlattices // Physics Letters. - 2000. - **77**, No.14. - P.2130-2132.
28. Chan M.C.Y., Surya C., Wai P.K.A. The effects of interdiffusion on the subbands in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{0.96}\text{N}_{0.04}/\text{GaAs}$ quantum well for 1.3 and 1.55 μm operation wavelengths // Journal of Applied Physics. - 2001. - **90**, No.1. - P.197-201.
29. Li Wei, Turpeinen J., Melanen P., Savolainen P., Uusimaa P., Pessa M. Effects of rapid thermal annealing on strain-compensated GaInNAs/GaAsP quantum well structures and lasers // Applied Physics Letters. - 2001. - **78**, No.1. - P.91-92.
30. Arora B.M., Chandrasekaran K.S., Gokhale M.R., Nair G., Venugopal Rao G., Amarendra G., Viswanathan B. Study of defects and strain relaxation in $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{0.96}\text{N}_{0.04}/\text{GaAs}$ heterostructures using photoluminescence, positron annihilation, and X-ray diffraction // Journal of Applied Physics. - 2000. - **87**, No.12. - P.8444-8450.
31. Geisz J.E., Friedman D.J., Olson J.M., Kurtz S.R., Keyes B.M. Photocurrent of 1eV GaInNAs lattice-matched to GaAs // Journal of Crystal Growth. - 1998. - **195**. - P.401-408.
32. Kim K., Zunger A. Spatial Correlations in GaInAsN Alloys and their Effects on Band-Gap Enhancement and Electron Localization // Physical Review Letters. - 2001. - **86**, No.12. - P.2609-2612.

33. *Chow W.W., Jones E.D., Modine N.A., Allerman A.A., Kurtz S.R.* Laser gain and threshold properties in compressive-strained and lattice-matched GaInNAs/GaAs quantum wells // *Applied Physics Letters*. - 1999. - **75**, No.19. - P.2891-2893.
34. *Kondow M., Kitatani T., Larson M.C., Nakahara K., Uomi K., Inoue H.* Gas-source MBE of GaInNAs for long-wavelength laser diodes // *Journal of Crystal Growth*. - 1998. - **188**. - P.255-259.
35. *Pereira S., Correia M.R., Monteiro T., Pereira E., Alves E., Sequeira A.D., Franco N.* // Compositional dependence of the strain-free optical band gap in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ // *Applied Physics Letters*. - 2001. - **78**, No.15. - P.137-139.
36. *Molodkin V.B., Pessa M., Pavelesku E.M., Fodchuk I.M., Kislovsky E.N., Olichovsky S.I., Vladimirova T.P., Gimchynsky O.G., Kroytor O.P., Skakunova E.S.* X-Ray diffraction investigations of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ Multilayered Structure // *Металлофизика и новейшие технологии*. - 2002. - **24**, №4. - С.477-495.
37. *Sato S., Osawa Y., Saitoh T., Fujimura I.* Room-temperature pulsed operation of 1.3 μm laser diode // *Electron. Lett.* - 1997. - **33**. - P.386.
38. *Li Wei, Pessa M., Likonen L.* Lattice parameter in GaNAs epilayers on GaAs: Deviation from Vegard's law // *Applied Physics Letters*. - 2001. - **78**, No.19. - P.2864-2866.
39. *Li J.H., Holy V., Zhong Z., Kulik J., Moss S.C., Normanand A.G., Mascarenhas A., Reno J.L., Follstaedt D.M.* X-ray analysis of spontaneous lateral modulation in $(\text{InAs})_n/(\text{AlAs})_m$ short-period superlattices // *Applied Physics Letters*. - 2001. - **78**, No.2. - P.219-221.