

# Структурные дефекты на гетерограницах и фотолюминесцентные свойства эпитаксиальных слоев GaN и AlGaN/GaN, выращенных на сапфире

© В.П. Кладько, С.В. Чорненко, А.В. Наумов<sup>¶</sup>, А.В. Комаров\*,  
М. Тасапо<sup>†</sup>, Ю.Н. Свешников<sup>‡</sup>, С.В. Витусевич, А.Е. Беляев

Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева Национальной академии наук Украины,  
03028 Киев, Украина

\* Институт физики Национальной академии наук Украины,  
03028 Киев, Украина

† AMRC, Meisei University, Hino,  
Токуо 191-8506, Japan

‡ ЗАО „Элма-Малахит“,  
124460 Зеленоград, Россия

(Получена 11 января 2006 г. Принята к печати 25 января 2006 г.)

Проведена комплексная рентгенодифрактометрическая и спектрально-оптическая характеристика эпитаксиальных слоев GaN и  $Al_xGa_{1-x}N$  ( $x = 0.25$ ), выращенных методом металлорганической газовой эпитаксии на подложках монокристаллического сапфира (0001). Определены значения компонентов деформаций и плотности дислокаций, изучено их влияние на интенсивность и спектры фотолюминесценции. Результаты исследования позволили лучше понять природу и объяснить механизмы дефектообразования в эпитаксиальных гетероструктурах AlGaN/GaN.

PACS: 61.10.Nz, 68.35.Ct, 68.55.Jk, 78.55.Cr

## 1. Введение

Прогресс современной полупроводниковой физики и техники, в частности квантовой электроники и оптоэлектроники, в значительной мере связан с технологией получения высококачественных полупроводниковых материалов и создания высокосовершенных эпитаксиальных гетероструктур с заданными физическими свойствами [1,2]. Качество таких гетероструктур (ГС) определяется в первую очередь минимальной упругой и отсутствием пластической деформации в активной (рабочей) области, а эффективность и надежность работы приборов на основе ГС зависит от локализации и концентрации активных примесных и структурных дефектов на гетерогранице и в рабочей области.

В процессе эпитаксиального выращивания гетерослоев и пленок возможно их когерентное и некогерентное сопряжение с технологической подложкой. При когерентном, так называемом псевдоморфном, росте зародышевого слоя несоответствие параметров решетки пленки и подложки не вызывает дислокаций несоответствия.

При отклонении от условий когерентного роста с увеличением толщины пленки релаксация упругих напряжений в системе приводит к появлению дислокаций несоответствия. Наряду с ростом плотности дислокаций возникают неоднородности их распределения в плоскости гетерограницы. Пластическая деформация системы в результате нескомпенсированных напряжений и образования линейных дефектов структуры является

окончательным следствием некогерентного роста. При этом изменяются полупроводниковые свойства системы, заданные исходной композицией твердого раствора, а значит, и величиной несоответствия параметров решетки. Поэтому для эпитаксиальных ГС существует определенная взаимосвязь между структурными характеристиками (несоответствие параметров решетки, упругие напряжения, пластическая деформация) и такими физическими величинами, как ширина запрещенной зоны, ширина и энергия максимума полосы краевой люминесценции, квантовый выход излучательной рекомбинации, поляризация излучения и др. [3].

В последние годы большой интерес вызывают ГС на основе нитридов элементов III группы, которые широко используются для создания инжекционных лазеров и светодиодов коротковолнового диапазона и считаются перспективными для применений в высоковольтной и высокочастотной микроэлектронике [4]. В частности, ГС на основе нитрида галлия (GaN) благодаря большим значениям ширины запрещенной зоны и дрейфовых скоростей рассматриваются как наиболее подходящие для создания полевых транзисторов на горячих электронах с высокой подвижностью (HEMT) [5].

Гетероструктуры типа GaN/AlGaN выращиваются обычно на сапфировых подложках методом газовой эпитаксии из металлорганических соединений (МОГФЭ) в реакторах с индукционным нагревом [6]. Источниками элементов Ga, Al, N служат триметилгаллий (ТМГ), триметилалюминий (ТМА) и аммиак ( $NH_3$ ), для легирования используется силан ( $SiH_4$ ), в качестве газа-носителя применяется водород. Сначала на подложке при температуре  $\sim 500^\circ C$  осаждается тонкий слой GaN или

<sup>¶</sup> E-mail: naumov@ifph.kiev.ua

GaN с добавкой Al. Далее после отжига зародышевого слоя при температурах 1000–1100°C производится последовательное эпитаксиальное выращивание слоев GaN и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , т.е. всей структуры  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  (содержание алюминия  $x = 0.1–0.35$ ). При давлении в реакторе 100–200 мбар скорость роста составляет 0.5–1.5 мкм/ч в зависимости от мольного расхода ТМГ и ТМА. Понятно, что техника МОГФЭ требует тщательного контроля ростового процесса и оценки влияния примесных и структурных дефектов, возникающих в эпитаксиальных слоях, на их базовые структурные, электрические и оптические свойства. Поэтому, несмотря на успехи нитридной технологии последних лет, некоторые свойства эпитаксиальных ГС AlGaN/GaN остаются еще недостаточно изученными и требуют всестороннего исследования различными методами.

В данной работе представлены результаты рентгенодифракционного анализа структуры эпитаксиальных гетерослоев GaN и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0.25$ ), выращенных методом МОГФЭ на подложках монокристаллического сапфира, а также результаты анализа спектров фотолюминесценции (ФЛ) таких структур, которые позволяют лучше понять природу и объяснить механизмы структурообразования в эпитаксиальных структурах на основе нитрида галлия для НЕМТ.

## 2. Методика исследований

Экспериментальные образцы эпитаксиальных структур на основе GaN выращивались стандартными методами газофазного химического осаждения паров металлорганических соединений низкого давления на подложках из сапфира. Использовались подложки оптически прозрачного монокристаллического сапфира  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ориентации (0001) толщиной 430 мкм. Были изготовлены образцы двух типов. Образец первого типа ( $S_1$ ) представлял собой эпитаксиальную НЕМТ-структуру AlGaN/GaN, содержащую базовый нелегированный слой GaN толщиной 2 мкм и барьерный слой  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0.25$ ), состоящий из трех подслоев: нелегированного слоя  $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$  толщиной 3 нм, промежуточного легированного кремнием слоя  $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$  толщиной 15 нм (концентрация доноров  $N_D = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) и покрывающего нелегированного слоя  $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$  толщиной 10 нм. Тестовый образец второго типа ( $S_2$ ) представлял собой эпитаксиальную пленку GaN толщиной 5 мкм. Концентрация неконтролируемых примесей в GaN была на уровне  $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  [6].

Рентгенодифрактометрические исследования образцов выполнялись аналогично [7] методами двух- и трехосевой дифрактометрии с учетом композиционных особенностей исследуемых структур. Применялись разные геометрии дифракции рентгеновских лучей: симметричная брэгговская (рефлексы 0002 и 0004), симметричная Лауэ (рефлексы  $10\bar{1}0$  и  $20\bar{2}0$ ) и асимметричная (рефлексы  $1\bar{1}04$  и  $11\bar{2}4$ ). Для каждого рефлекса измерялись ди-

фракционные кривые в двух направлениях сечения узлов обратной решетки: перпендикулярно вектору дифракции ( $\omega$ -сканирование) и параллельно ( $\omega/2\theta$ -сканирование).

Данные анализировались на основе мозаичной модели [8], согласно которой деформационное состояние и дефектная структура слоя характеризуются компонентами тензора дисторсии  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  и эффективными размерами областей когерентного рассеяния (ОКР) вдоль и поперек слоя,  $\tau_x$  и  $\tau_z$ . Связь между координатами в обратном пространстве ( $q$ ) и угловыми уширениями ( $w$ ) зависит от направления сканирования относительно дифракционного вектора  $\mathbf{H}$ : при сканировании вдоль вектора  $\delta\omega = \delta q_{\parallel}/k \cos \theta_B$ , в перпендикулярном направлении  $\delta\omega = \delta q_{\perp}/H$ . На форму узлов (уширение рефлексов) оказывают влияние как деформации, так и ограниченные размеры ОКР. Эти вклады можно разделить исходя из того, что компоненты дисторсии уширяют только те рефлексы, которые имеют соответствующие компоненты вектора дифракции  $\delta q_i = \langle \delta \varepsilon_{ij} \rangle H_j$ , а ограничение размера ОКР влияет на все узлы обратной решетки в данном направлении. В Лауэ-геометрии съемки, как и в брэгговской, сетки дислокаций вызывают уширение пиков отражения в направлении нормали к вектору дифракции, хотя направления вектора  $\mathbf{H}$  для этих геометрий различаются на  $90^\circ$ . Ограничение длины когерентности в нормальном к поверхности ( $\tau_{\perp}$ ) и тангенциальном ( $\tau_{\parallel}$ ) направлениях дает следующие вклады в ширину рефлексов:

для симметричной брэгговской геометрии

$$\delta\omega_{\parallel} = \lambda/(\tau_{\perp} \cos \theta_B), \quad \delta\omega_{\perp} = \lambda/(2\tau_{\parallel} \sin \theta_B), \quad (1)$$

для симметричной Лауэ-геометрии

$$\delta\omega_{\parallel} = \lambda/(\tau_{\parallel} \cos \theta_B), \quad \delta\omega_{\perp} = \lambda/(2\tau_{\perp} \sin \theta_B). \quad (2)$$

Использование асимметричной геометрии позволяет сочетать свойства симметричных дифракций Брэгга и Лауэ. Хотя дифракция Лауэ дает возможность измерить компоненту тензора деформации  $\varepsilon_{xx}$  в чистом виде, измерения в геометрии прохождения рентгеновских лучей могут быть осуществлены только для ограниченного круга слабо поглощающих материалов. Как известно, двухкристалльные кривые отражения, снятые при двух противоположных по азимуту положениях образца, дают возможность определения  $\varepsilon_{zz}$  и  $\varepsilon_{xx}$ . Угол между дифракционными максимумами пленки и подложки состоит в этом случае из двух частей,  $\Delta\theta$  и  $\delta\varphi$ , где первая из них характеризует изменение межплоскостного расстояния, а вторая характеризует разворот атомных плоскостей. Поскольку трехкристалльная дифрактометрия позволяет разделить эти эффекты, анализ распределения дифракции в системе координат  $(q_{\parallel}, q_{\perp})$  дает возможность определить каждое из этих слагаемых в отдельности [9].

Построение двумерного распределения около узла асимметричного брэгговского рефлекса в виде контуров равной интенсивности позволяет непосредственно зафиксировать положение центров отражения сло-

ев в плоскости рассеяния и определить координаты ( $q_{\parallel}$ ,  $q_{\perp}$ ) каждого из них. В случае когерентной границы между пленкой и подложкой соответствующие узлы обратной решетки лежат на оси  $q_{\perp}$ , проходящей через узел  $H_0$ . При полной компенсации напряжений ( $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xx}$ )  $q_{\perp} = 0$ , и точки  $H_1$  и  $H_0$  лежат на оси  $q_{\parallel}$ . В общем случае частичной релаксации узел должен располагаться в остроугольном секторе, образованном векторами дифракции и нормали к поверхности, проходящими через узел  $H_0$ . Однако при некоторых обстоятельствах точка  $H_1$  может выходить за пределы этого сектора. Во-первых, это может быть при наличии сдвиговых деформаций и разворотов. Во-вторых, это может быть в результате действия термоупругих напряжений, в частности, когда разница в коэффициентах теплового расширения пленки и подложки  $\Delta\alpha = \alpha_1 - \alpha_0$  того же знака, что и величина рассогласования параметров решетки  $\Delta a = a_1 - a_0$ . В-третьих, к возможным нестандартным сдвигам центра отражения могут приводить дефекты упаковки. При рассмотрении многослойной эпитаксиальной структуры приведенные рассуждения нужно относить к разнице координат узлов вышележащего и нижележащего слоев  $\Delta q = q(j+1) - q(j)$ . В большинстве практических случаев, однако, нет необходимости в получении полной картины распределения интенсивности, а достаточно построения двух зависимостей от координаты вдоль вектора дифракции (или углового положения анализатора): для интегральной интенсивности  $\omega$ -пиков  $J(q_{\parallel})$  и для угла тетрагональной дисторсии  $\delta\varphi$ . Функция  $J(q_{\parallel})$  не содержит влияния разворотов и изгибов и, как и в симметричной геометрии, отражает только изменение межплоскостного расстояния, что позволяет улучшить разрешение дифракционных максимумов от отдельных слоев и надежно зарегистрировать их угловое положение [3].

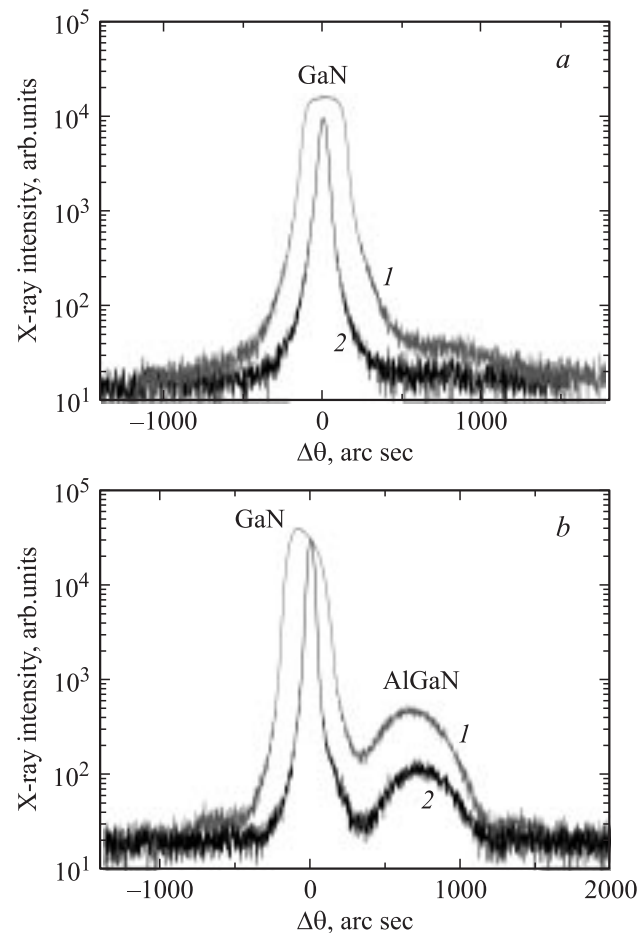
Спектрально-оптические исследования образцов проводились методом лазерно-индуцированной ФЛ аналогично [10]. Суть диагностики заключается в том, что при фотовозбуждении межзонных переходов ФЛ зависит от концентрации излучательных и безызлучательных состояний и транспорта носителей к ним. Поэтому слои с разной суммарной концентрацией структурных дефектов всегда различаются интенсивностью ФЛ, шириной полос и положением максимумов излучения.

Фотолюминесценция возбуждалась монохроматическим излучением He-Cd-лазера с длиной волны  $\lambda = 325.0$  нм (энергия фотонов  $h\nu = 3.815$  эВ), работавшего в режиме непрерывной генерации (мощность излучения 7 мВт), благодаря чему интенсивность фотовозбуждения поддерживалась постоянной. Спектры ФЛ регистрировались с помощью управляемой компьютером оптической системы, включающей сканирующий дифракционный монохроматор и фотоумножитель. Спектральное разрешение системы составляло 0.02 эВ. Возбуждение и регистрация ФЛ осуществлялись с разных сторон гетероэпитаксиальных слоев, как с лицевой стороны пленки, так и с тыльной стороны подложки.

Излучение лазера фокусировалось и направлялось под углом  $45^\circ$  к поверхности образцов, а фотолюминесцентное излучение собиралось с помощью линз в перпендикулярном направлении. Температура образцов в экспериментах варьировалась от 300 до 4.2 К, для чего образцы помещались в оптический криостат. Все оптические измерения проводились с соблюдением условий повторяемости и воспроизводимости эксперимента для обеспечения правильного соотношения интенсивностей ФЛ и корреляции спектров.

### 3. Экспериментальные данные и обсуждение результатов

Рентгенодифракционные измерения гетерослоев GaN и AlGaIn с применением разных геометрий сканирования показали различия их структурных свойств ввиду наличия разного рода неоднородностей и подтвердили напряженное состояние исследуемой гетероструктуры. На рис. 1 приведены рентгенодифракционные спектры



**Рис. 1.** Рентгенодифракционные кривые качания для направлений, перпендикулярного (1) и параллельного (2) вектору дифракции симметричного отражения 0002 структур GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0001) (a) и AlGaIn/GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0001) (b).

Характеристики кристаллической структуры: компоненты тензора дисторсии  $\delta\varepsilon_{ij}$ , размеры областей когерентного рассеяния  $\tau_z$ ,  $\tau_x$  и плотность дислокаций  $\rho$  в эпитаксиальных слоях GaN и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0.25$ ) на подложке  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0001)

Образец, слой	$10^4\delta\varepsilon_{zz}$	$10^4\delta\varepsilon_{zx}$	$10^4\delta\varepsilon_{xz}$	$10^4\delta\varepsilon_{xx}$	$\tau_z$ , нм	$\tau_x$ , нм	$\rho$ , $10^8 \text{ см}^{-2}$
S <sub>1</sub> , GaN	2.57	9.3	6.1	3.92	480	80	1.38
S <sub>1</sub> , AlGaN	5.7	65	23	25	30	15	6.31
S <sub>2</sub> , GaN	2.76	12.1	7.3	5.19	325	67	3.08

образцов S<sub>1</sub> (AlGaN/GaN) и S<sub>2</sub> (GaN), полученные для симметричного брэгговского отражения при качании вокруг узла обратной решетки 0002. Как видно из рисунка, контуры интенсивности вытянуты в направлении, перпендикулярном вектору дифракции, и имеют форму, типичную для релаксированных структур. Вытянутость распределения интенсивности в направлении, параллельном поверхности, связана с анизотропией полей упругих напряжений в гетерослоях. Уширение рефлексов вдоль нормали к поверхности намного меньше.

Тангенциальная зависимость трехкристалльных кривых  $\theta-2\theta$ -сканирования при переходе к более высоким порядкам отражения свидетельствует о том, что основной вклад в уширение рефлексов вносят деформации [8]. Характерной особенностью исследованных гетерослоев является то, что кривые отражения в асимметричной геометрии 1124 при скользящем падении значительно уже, чем при скользящем отражении. Такая картина характерна для случая вытянутости узла обратной решетки в направлении, параллельном поверхности. Поскольку для этих отражений компоненты дифракции в параллельном и перпендикулярном направлениях почти одинаковы, наблюдаемое поведение может быть объяснено анизотропией или компонент микродисторсии, или размеров зерен ОКР. Вытянутость для образца S<sub>1</sub> значительно больше, чем для S<sub>2</sub>, отношение полуширин кривых составляет соответственно 0.45 и 0.71.

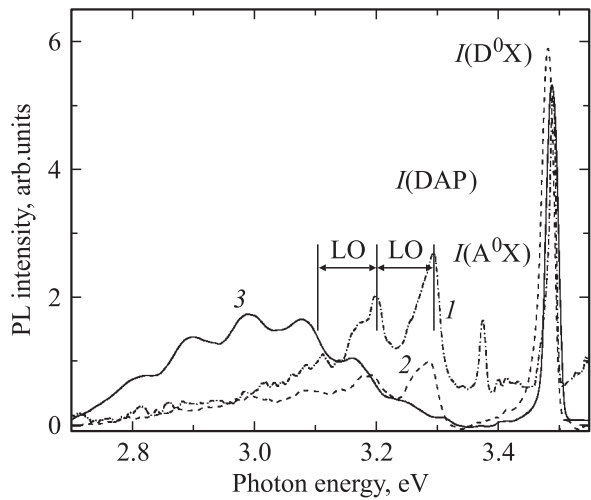
В таблице приведены значения компонент тензора микродисторсии  $\delta\varepsilon_{ij}$ , характеризующих разные типы искажений кристаллической решетки, которые были определены из полуширин кривых отражения для разных геометрий. Из этих данных следует, что дилатационная компонента  $\delta\varepsilon_{xx}$  намного больше  $\delta\varepsilon_{zz}$ , а ориентационная компонента  $\delta\varepsilon_{zx}$  больше  $\delta\varepsilon_{xz}$ . Неравенство  $\delta\varepsilon_{xx} > \delta\varepsilon_{zz}$  указывает на то, что локальные вариации межплоскостного расстояния для атомных плоскостей, перпендикулярных поверхности, значительно больше, чем для плоскостей, параллельных интерфейсу. Соотношение  $\delta\varepsilon_{zx} > \delta\varepsilon_{xz}$  (для образца S<sub>1</sub> это неравенство сильнее, чем для S<sub>2</sub>) свидетельствует о том, что плоскости, параллельные поверхности, имеют большие углы разориентации, чем перпендикулярные плоскости. Это позволяет связать компоненту  $\delta\varepsilon_{zx}$  с винтовыми прорастающими дислокациями, вызывающими сдвиговую деформацию, а компоненту  $\delta\varepsilon_{xx}$  с краевыми дислокациями, перпендикулярными к гетерогранице. Что касается плотности дислокаций, то она примерно одина-

кова как для краевых, так и для винтовых дислокаций. Размеры зерен (ОКР) вдоль нормали к поверхности значительно больше поперечных,  $\tau_z > \tau_x$ . Параметры структуры AlGaN значительно хуже, чем для GaN. Однако следует отметить, что вытянутость распределения интенсивности вокруг узла обратной решетки 0002 в направлении, параллельном поверхности, и в направлении, нормальном к поверхности, практически одинакова, что связано с однородностью деформации во всех направлениях.

Если предположить, что  $\tau_{\perp}$  равно расстоянию между этажами дислокационной сетки, а  $\tau_{\parallel}$  — расстоянию между линиями дислокаций в этих сетках, то уширения, вызванные этими величинами, рассчитанные по формулам (1) и (2), получаются заметно меньше, чем экспериментальные полуширины дифракционных пиков. Это говорит о том, что основным источником уширения рефлексов в слоях с дислокационными сетками является разориентация ОКР, а вклад, вносимый уменьшением размеров ОКР при линейной плотности сеток до  $10^5 \text{ см}^{-1}$ , значительно меньше. Кроме того, плоская конфигурация сеток не должна вызывать заметных изменений размеров ОКР в направлении, нормальном к гетерогранице. Все это приводит к общему выводу, что преобладающим влиянием дислокационных сеток является уширение дифракционной картины перпендикулярно вектору обратной решетки независимо от геометрии измерения. Это согласуется с результатами рентгеноструктурных измерений эпитаксиальных слоев  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  в [8]. Что касается влияния структуры подложек, то она слабо отражается на спектрах рентгенодифракционного сканирования, и этот эффект трудно здесь выделить, учитывая большую глубину проникновения рентгеновских лучей в матрицу и объемный характер формирования картины рентгеновской дифракции.

Измерения ФЛ гетерослоев GaN и AlGaN при различной геометрии лазерного облучения и при различных температурах подложки дополнили данные рентгеновского дифракционного анализа и подтвердили пространственно неоднородную структуру зон носителей и неоднородное распределение примесных и дефектных центров в исследуемых гетерослоях.

На рис. 2 приведены низкотемпературные (при 4.2 К) спектры ФЛ (на шкале энергий фотонов  $h\nu$  от 2.7 до 3.5 эВ) образцов S<sub>1</sub> (ГС AlGaN/GaN) и S<sub>2</sub> (пленка GaN). Общим для всех спектров является наличие высоко-



**Рис. 2.** Спектры фотолюминесценции (PL) образцов AlGaIn/GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (S<sub>1</sub>) и GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (S<sub>2</sub>) при температуре 4.2 К. 1 — образец S<sub>2</sub> при фотовозбуждении с лицевой стороны, образец S<sub>1</sub> при фотовозбуждении с тыльной (2) и лицевой стороны (3).

энергетической части ФЛ, обусловленной излучением в базовом слое GaN, и низкоэнергетической части ФЛ, связанной с излучением на гетерогранице AlGaIn–GaN. Природа основных полос ФЛ в GaN хорошо известна — она связана с излучательной рекомбинацией электронно-дырочных пар в экситонных комплексах [11–14].

На рис. 2 кривая 1 представляет собой спектр ФЛ образца S<sub>2</sub> (GaN), полученный при фотовозбуждении с лицевой стороны пленки. Основные особенности этого спектра следующие: 1) узкая линия излучения  $I(D^0X)$  с пиком при  $h\nu = 3.487$  эВ (ширина на полувысоте  $FWHM \approx 10$  мэВ), относящаяся к экситонам, связанным на нейтральный донорных центрах; 2) линия  $I(A^0X)$  с пиком при  $h\nu = 3.375$  эВ ( $FWHM \approx 10$  мэВ), отвечающая излучению экситонов, связанных на акцепторных центрах; 3) асимметричная полоса  $I(DAP)$  с максимумом в области  $h\nu = 3.29$  эВ ( $FWHM \approx 40$  мэВ), которая принадлежит донорно-акцепторной рекомбинации мелких донорно-акцепторных пар с небольшой примесью электронно-акцепторной рекомбинации ( $e, A$ ). На спектральных кривых видны пики при  $h\nu = 3.20$  и  $3.11$  эВ, соответствующие репликам оптических фононов LO и 2LO (энергия LO-фонона  $h\nu_{LO} \approx 90$  мэВ) вследствие электронных переходов в DAP. Кроме того, имеют место слабые линии экситонного излучения в области  $h\nu = 3.42$  эВ, связанные с примесными комплексами и структурными дефектами на дислокациях несоответствия эпитаксиальной пленки [8].

Кривой 2 на рис. 2 представлен спектр ФЛ образца S<sub>1</sub> (AlGaIn/GaN), полученный при фотовозбуждении с тыльной стороны подложки, т.е. со стороны слоя GaN. Как видно, этот спектр повторяет основные особенности ФЛ образца S<sub>2</sub> (GaN), за исключением экситонно-акцепторной линии  $I(A^0X)$ , которая

здесь отсутствует. Доминирующей линией здесь является экситонно-донорный пик  $I(D^0X)$  при энергии  $h\nu = 3.49$  эВ ( $FWHM \approx 17$  мэВ), соответствующей ширине запрещенной зоны GaN.

Кривой 3 на рис. 2 представлен спектр ФЛ образца S<sub>1</sub> (AlGaIn/GaN), полученный при возбуждении с лицевой стороны, т.е. со стороны слоя AlGaIn. Видно, что при такой геометрии фотовозбуждения картина ФЛ изменяется. В этом случае возникает широкая интенсивная полоса ФЛ в низкоэнергетической области спектра от 2.7 до 3.3 эВ ( $FWHM \approx 0.35$  эВ). Она имеет внутреннюю структуру (пики при  $h\nu = 2.90, 3.00, 3.08$  и  $3.17$  эВ), природа которой может быть связана с рекомбинацией донорно-акцепторных пар, порожденных структурными дефектами на гетерогранице AlGaIn–GaN и примесными центрами в гетерослое GaN. Полоса ФЛ  $I(D^0X)$  с пиком при  $h\nu = 3.49$  эВ в краевой области спектра при этом остается на месте, полоса  $I(A^0X)$  отсутствует.

Таким образом, при фотовозбуждении AlGaIn/GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с тыльной стороны гетероструктуры наблюдается спектр ФЛ, характерный для пленок GaN. Поскольку все поглощение лазерного излучения происходит в толще слоя GaN, форма спектров ФЛ для разных образцов мало отличается. Влияние структурных дефектов в слое GaN и на границе раздела Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–GaN примерно одинаково, поэтому интенсивность и положение максимума полосы ФЛ  $I(D^0X)$  ( $h\nu = 3.49$  эВ) остаются практически неизменными. Чуть большая ширина  $FWHM$  краевой полосы свидетельствует о меньшей степени структурного совершенства слоя в ГС по сравнению с одиночной эпитаксиальной пленкой. Фотолюминесценция через локализованные состояния на гетерогранице AlGaIn–GaN здесь не проявляется.

При фотовозбуждении AlGaIn/GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с лицевой стороны ГС форма спектра ФЛ существенно меняется, отражая кинетику носителей в легированном барьерном слое AlGaIn и формирование квазидвумерного электронного газа в области гетерограницы AlGaIn–GaN при большой концентрации примесных центров и большой плотности дислокаций в гетерослое GaN. Абсолютная интенсивность ФЛ становится на порядок выше. Это согласуется с известным фактом, что интенсивность краевой полосы ФЛ  $I(D^0X)$  в спектре легированного GaN всегда возрастает, а максимум смещается в коротковолновую сторону по сравнению с нелегированным GaN. В результате в запрещенной зоне создаются новые глубокие уровни, которые захватывают фотовозбужденные носители. Это значительно уменьшает время жизни свободных дырок, поэтому в спектре не видно особенностей, связанных с рекомбинацией квазидвумерных электронов и свободных дырок на гетерогранице. Однако концентрация фотовозбужденных дырок, связанных на дополнительных акцепторных центрах, значительно увеличивается, и это усиливает излучательную рекомбинацию DAP в низкоэнергетической части спектра.

С ростом температуры интенсивность высокоэнергетической части спектра ФЛ уменьшается, что свиде-



тельствует об ускорении процессов безызлучательной рекомбинации, а сама полоса уширяется вследствие термализации распределения электронов по энергиям. Низкоэнергетическая часть ФЛ смещается в область еще более низких энергий, что связано с увеличением подвижности носителей в легированной структуре AlGaIn/GaN по сравнению с нелегированным слоем GaN.

#### 4. Заключение

Таким образом, в данной работе с использованием методов рентгенодифрактометрии и оптической фотолюминесцентной спектроскопии проведено комплексное экспериментальное исследование свойств эпитаксиальных слоев в НЕМТ-гетероструктуре  $Al_xGa_{1-x}N/GaN$  ( $x = 0.25$ ), выращенной методом МОГФЭ на монокристаллическом сапфире ориентации (0001). Данные рентгеноструктурного анализа (по характеристикам дифракционного отражения) показали образование внутренних микронапряжений и структурных неоднородностей для слоев GaN и AlGaIn, вызванных особенностями технологии выращивания и композиционными особенностями структуры, в том числе связанными с наличием сильно легированного подслоя для барьерного слоя AlGaIn. Наибольшая плотность дислокаций (от  $1 \cdot 10^8$  до  $7 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ ), как и наибольшие напряжения, проявляются на гетерогранице AlGaIn–GaN. Неоднородное распределение напряжений и дислокаций может объяснить различие спектров ФЛ в GaN и AlGaIn/GaN (по энергетическому положению, ширине и интенсивности линий излучения). Фотовозбуждение GaN в обоих случаях носит межзонный характер, однако в AlGaIn/GaN, стекающие на дислокации примесные центры на гетерогранице AlGaIn–GaN создают новые глубокие уровни в запрещенной зоне, которые захватывают фотовозбужденные носители. В результате наряду с пиком ФЛ в краевой спектральной области ( $h\nu = 3.49 \text{ эВ}$ ) экситонной природы возникает интенсивная широкая полоса ФЛ в низкоэнергетической области спектра (от 2.7 до 3.3 эВ), связанная с рекомбинацией донорно-акцепторных пар с участием дополнительных акцепторных центров. Предполагается, что наблюдаемые эффекты связаны также с особенностями формирования квазидвумерного электронного газа в области гетерограницы.

Полученные результаты будут полезны при создании полупроводниковых приборов с использованием эпитаксиальных ГС на основе соединений типа AlGaIn/GaN.

Работа выполнена в рамках российско-украинской программы „Нанофизика и нанoeлектроника“ при частичной поддержке Министерства образования и науки Украины.

Авторы благодарны коллегам из фирмы „Элма-Малахит“ и AMRC, Meisei University за кооперацию и помощь в изготовлении тестовых образцов гетероструктур.

#### Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32**, 3 (1998).
- [2] V.A. Kochelap, V.V. Mitin, M.A. Strocio. *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics* (Cambridge Univ. Press, 1999).
- [3] Л.А. Даценко, В.Ф. Мачулин, В.П. Кладько, В.Б. Молодкин. *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии* (Киев, Академперіодика, 2002).
- [4] Н. Маркос. *Nitride Semiconductors and Devices* (Springer, Berlin, 1999).
- [5] B.A. Danilchenko, S.E. Zelensky, E. Drok, S.A. Vitusevich, S.V. Danylyuk, N. Klein, H. Luth, A.E. Belyaev, V.A. Kochelap. *Proc. 6th Int. Conf. Nitride Semicond.* (Bremen, Germany, 2005) [Appl. Phys. Lett., **85**, 5421 (2004)].
- [6] В.В. Лундин, Е.Е. Заварин, А.И. Бесюлькин, А.Г. Гладышев, А.В. Сахаров, М.Ф. Кокорев, Н.М. Шмидт, А.Ф. Цацульников, Н.Н. Леденцов, Ж.И. Алфёров, Р. Каканак. ФТП, **38**, 1364 (2004).
- [7] V.P. Kladyko, L.I. Datsenko, P.M. Litvin, J. Domagala, V.F. Machulin, I.V. Prokopenko, V.F. Molodkin, Z.V. Maksimenko. *Semicond. Phys. Quant. Electron. Optoelectron.*, **4**, 146 (2001).
- [8] V.V. Ratnikov, R.N. Kyutt, T.V. Shubina, T. Paskova, B. Monemar. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34** (10A), A30 (2001).
- [9] А.С. Усиков, В.В. Третьяков, А.В. Бобыль, Р.Н. Кютт, В.В. Лундин, Б.В. Пушный, Н.М. Шмидт. ФТП, **34**, 1300 (2000).
- [10] A.V. Naumov, A.E. Belyaev, A.V. Komarov. *Proc. 5th Int. Conf. Problems of Optics and High Tech. Material Science — SPO2004* (Kiev, Ukraine, 2004) p. 182.
- [11] B. Monemar. *Mater. Sci. Eng.*, **B59**, 122 (1999).
- [12] C.Y. Fang, C.F. Lin, E.Y. Chang, M.S. Feng. *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 742 (2002).
- [13] V.V. Ursaki, I.M. Tiginyanu, V.V. Zalamai, S.M. Hubbard, D. Pavlidis. *J. Appl. Phys.*, **94**, 4813 (2003).
- [14] P.P. Paskov, R. Schifano, B. Monemar, T. Paskova, S. Figge, D. Hommel. *J. Appl. Phys.*, **98**, 093 519 (2005).

Редактор Л.В. Шаронова

## Structural defects at the heterointerfaces and the photoluminescent properties of GaN and AlGaN/GaN epitaxial layers, grown on a sapphire substrate

V.P. Klad'ko, S.V. Chornen'ky, A.V. Naumov,  
A.V. Komarov\*, M. Tacano†, Yu.N. Sveshnikov‡,  
S.V. Vitusevich, A.E. Belyaev

V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
03028 Kiev, Ukraine

\* Institute of Physics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
03028 Kiev, Ukraine

† AMRC, Meisei University, Hino,  
Tokyo 191-8506, Japan

‡ JSC „Elma-Malakhite“,  
124460 Zelenograd, Russia

**Abstract** The complex X-ray diffraction structural analysis and spectral-optical characterization of the GaN and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0.25$ ) epitaxial layers grown by the metal-organic vapor-phase epitaxy (low pressure MOCVD) on the monocrystalline (0001) sapphire substrate, have been made. Values of the deformation components and the dislocation densities are determined, and their effects on the intensity and spectra of the photoluminescence are studied. The results obtained allowed us to better understand the nature and to explain mechanisms of the imperfection in epitaxial AlGaN/GaN heterostructures.