

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ ім. В.Є. ЛАШКАРЬОВА**

Сафрюк Надія Володимирівна

УДК: 539.213; 539.23+621.793.79; 539.26

**РЕНТГЕНОСТРУКТУРНА ХАРАКТЕРИЗАЦІЯ
БАГАТОШАРОВИХ СИСТЕМ $\text{Al}(\text{In})\text{GaN}$ НА ПОЛІАРНИХ
ПЛОЩИНАХ САПФІРУ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2011

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова
Національної академії наук України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор,
Кладько Василь Петрович,
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України (м. Київ),
завідувач відділом

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, ст. науковий
співр.,
Порошин Володимир Миколайович,
заст. директора Інституту фізики НАН України
(м. Київ)

доктор фізико-математичних наук, професор
Махній Віктор Петрович,
завідувач кафедри оптоелектроніки Чернівецького
Національного Університету ім. Юрія Федьковича
(м. Чернівці)

Захист відбудеться ”18” січня 2012 р. о 14¹⁵ годині на засіданні спеціалізованої вченої
ради Д26.199.01 при Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН
України за адресою: 03028, м. Київ, пр. Науки, 41.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту фізики напівпровідників ім.
В.Є. Лашкарьова НАН України (м. Київ, пр. Науки, 45), та на сайті відділу дифракційних
досліджень структури напівпровідників: <http://www.x-ray.net.ua/prints.php>.
Автореферат розісланий ”15” грудня 2011 р.

Вчений секретар
Спеціалізованої вченої ради Д 26.199.01
кандидат фізико-математичних наук

О.Б. Охріменко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми

Напівпровідникові сполуки A_3N завдяки їх унікальним властивостям, таким як велика ширина забороненої зони, великі значення: напруги пробою, рухливості носіїв заряду, теплопровідності тощо, є перспективними для створення на їх основі приладів для високо-температурної, – потужної, – частотної електроніки наступної генерації. Вже існуючі транзистори з високою рухливістю електронів (high electron mobility transistor – HEMT) на основі $Al_xGa_{1-x}N/GaN$, світловипромінюючі діоди (light-emitting diodes – LEDs), інжекційні діоди (lasing diodes – LDs), фотодетектори та ін. на основі $GaN/Al(In)_xGa_{1-x}N$ багат шарових систем (БШС) з квантовими ямами мають значну перевагу перед аналогічними на основі Si та GaAs. Більше того, змінюючи склад твердого розчину $In_xAl_{1-x}N$ можна змінювати його ширину забороненої зони від ~ 0.7 eV (InN) до ~ 6.2 eV (AlN), тим самим покриваючи оптичний діапазон від інфрачервоного до глибокого ультрафіолету. Це дозволяє створювати на їх основі сонячні елементи, актуальність потреби в яких не викликає сумнівів.

Одним із стримуючих факторів впровадження приладів на основі A_3N в сучасній електроніці, є їх структурна недосконалість, що зв'язано в першу чергу з відсутністю підкладок для їх росту. Як правило, епітаксійне осадження плівок A_3N здійснюється на підкладках з великою невідповідністю постійних кристалічних ґраток і коефіцієнтів термічного розширення (Al_2O_3 , SiC, Si та ін.), що приводить до істотних пружних деформацій в плівках. Найпоширенішим є синтез A_3N шарів на c -площині сапфірових підкладок. Деформації, які при цьому виникають приводять до появи спонтанного п'єзоелектричного поля, “колонкоподібної” структури шарів і високої концентрації структурних дефектів, таких як: флуктуації складу та поверхнева сегрегації In (в структурах $In_xGa_{1-x}N$), флуктуації товщини (в надґратках – НГ $GaN/Al(In)_xGa_{1-x}N$), компонентне змішування на гетерограниці (нечіткість інтерфейсів) а також великої кількості густини дислокацій (10^7 - 10^{12} $см^{-2}$). Для порівняння, технологія Si дозволяє отримувати так званий „бездислокаційний кремній”, в якому густина дислокацій 10 $см^{-2}$, а прилади на основі GaAs перестають функціонувати, коли густина дислокацій в них перевищує 10^4 - 10^5 $см^{-2}$. Незважаючи на приведені вище недосконалості структур на основі A_3N , вони вже досить широко використовуються в електроніці. Однак, наведені фактори сильно перешкоджають вирощуванню гетероструктур з наперед заданими властивостями, особливо у випадку коли досліджувані об'єкти мають нанометрові масштаби.

Тому структурна характеристика (склад і товщини шарів, деформаційний стан, густина дислокацій тощо) БШС на основі $Al(In)GaN$ для оптимізації технології їх росту є актуальною задачею. Підвищення ефективності праці приладів на основі $Al(In)GaN$ неможливе без прогнозування їх працездатності протягом тривалих часів експлуатації при різних температурних режимах. Тому, процеси релаксації пружних деформацій в даних матеріалах, які достатньо добре вивчені у випадку об'ємних структур, актуально вивчити і для нанометрових об'єктів, для яких ще багато питань залишаються відкритими, про що свідчить ріст кількості публікацій на цю тему за останні роки.

Високороздільна X-променева дифрактометрія (ВРХД) є потужним неруйнівним методом дослідження структурної досконалості матеріалів. Забезпечуючи висо-

ку точність вимірювання деформації (як в площині росту плівки так і в напрямку росту) $\sim 10^{-6}$ - 10^{-7} , вона дозволяє також визначати компонентний склад твердих розчинів, товщину шарів, різкість гетерограниць, структурні дефекти (їх густину та тип). Використовуючи саме цю, методику неруйнівної рентгеноструктурної характеристики, яка в деяких випадках вимагала адаптації до структур із складним базисом кристалічної ґратки, було досліджено багатошарові системи Al(In)GaN на полярних площинах сапфіру (*c*-площинах).

Таким чином з вищесказаного слідує, що проблеми висвітлені в роботі є актуальними як в науковому так і прикладному аспектах.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, і виконана у відповідності до тем:

- Державна цільова науково-технічна програма „Нанотехнології та наноматеріали” проект „Розроблення апаратури для високороздільної рентгенівської діагностики наноматеріалів, наноструктур та аморфних сплавів” (№ державної реєстрації 0110U006038) – (виконавець); .
- Державна цільова науково-технічна програма „Нанотехнології та наноматеріали” проект „Створення методу та апаратури для рентгено-ультраакустичної експресної багато параметричної діагностики наносистем” (№ державної реєстрації 0110U004656) – (виконавець);
- Цільова комплексна програма фундаментальних досліджень „Нанofізика, наноматеріали та нанотехнології” (№ державної реєстрації 0103U006315) – (виконавець).

Мета і завдання дослідження

Широке застосування матеріалів на основі A_3N в опто- та наноелектроніці визначає предмет та мету досліджень.

Метою дисертаційної роботи є встановлення фізичних механізмів релаксації деформацій в багатошарових системах (БШС) Al(In)GaN за допомогою ВРХД.

Для досягнення мети дисертації вирішувались наступні **наукові завдання**:

- розвиток відомих експериментальних X-променеви методик для аналізу параметрів багатошарових структур із складною гексагональною ґраткою (з карт розподілу інтенсивності дифрагованих X-променів в оберненому просторі та з високороздільних дифракційних сканів);
- дослідження впливу товщини сапфірової підкладки на структурні характеристики НЕМТ на основі $Al_xGa_{1-x}N/GaN$;
- вивчення впливу типу темплейта та залишкових деформацій в буферному шарі GaN на властивості НГ AlN/GaN;
- вивчення еволюції деформаційного стану НГ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ при зміні кількості квантових ям (КЯ) та композиційного складу КЯ;

Об'єкт дослідження – БШС нанометрового масштабу на основі A_3N , вирощені на *c*-площині сапфіру: НЕМТ на основі $Al_xGa_{1-x}N/GaN$, короткоперідні НГ AlN/GaN та $In_xGa_{1-x}N/GaN$.

Предмет дослідження – механізми релаксації деформацій та особливості дифракції X-променів в БШС Al(In)GaN.

Методи дослідження – високороздільна X-променева дифрактометрія, яка включає в себе: зйомку мап оберненого простору навколо вузлів оберненої ґратки, отримання кривих дифракційного відбивання (КДВ), комп'ютерне моделювання КДВ. Як додаткові використовувались методи атомно-силової мікроскопії, комбінаційного розсіяння світла, фотолюмінесценції.

Наукова новизна одержаних результатів У дисертаційній роботі застосовано комплексний експериментальний та теоретичний підхід до вивчення процесів релаксації деформацій в Al(In)GaN системах, що дозволило одержати такі нові наукові результати:

- для НЕМТ на основі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}/\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ встановлено новий механізм релаксації пружних деформацій, який полягає в різних кутових розворотах одиничних гексагональних комірок нітриду галію навколо *c*-осі сапфіру при варіації його товщини;
- встановлено вплив типу «темплейта» на структурні властивості НГ GaN/AlN. Показано, що НГ, вирощені на AlN/Al₂O₃-темплейті релаксують в основному за рахунок формування дислокацій невідповідності, в той час як НГ, вирощені на GaN/Al₂O₃-темплейті релаксують за рахунок утворення тріщин. Вперше це пояснюється різним впливом остаточних деформацій в системі GaN-буфер/темплейт на рівень деформації в шарах НГ при їх осадженні;
- виявлено, що товщина квантових бар'єрів (AlN) та квантових ям (GaN) в НГ є відмінною від технологічно заданої. Показано, що більш ефективне «потоншення» КЯ GaN і відповідне «потовщення» AlN бар'єрів спостерігається в НГ, вирощених на напруженому AlN/Al₂O₃-темплейті в порівнянні з НГ, вирощеними на товстому релаксованому GaN/Al₂O₃-темплейті. Дано пояснення механізму цього ефекту, який полягає у впливі деформацій на процеси заміщення атомами алюмінію атомів галію в шарі GaN;
- встановлено, вплив кількості квантових ям в НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ на співвідношення товщин яма/бар'єр і вміст індію в квантових ямах. Вперше показано, що ступінь релаксації деформацій зростає із збільшенням числа періодів в НГ, що приводить до росту концентрації індію в квантових ямах і супроводжується змінами товщин яма/бар'єр.

Практичне значення одержаних результатів

Проведені комплексні X-променеві дослідження (склад і товщина шарів, деформаційний стан, густина дислокацій тощо) систем Al(In)GaN. На основі отриманих результатів встановлені механізми релаксації деформацій в усіх досліджуваних наноструктурах, а також досліджено структурні особливості таких багат шарових систем в залежності від типу та геометрії підкладки. Результати досліджень можуть бути використані при відпрацюванні вітчизняних технологій виробництва елементної бази опто – та наноелектроніки.

Особистий внесок здобувача В усіх опублікованих працях, особистий внесок дисертантки полягає у проведенні високороздільних експериментальних вимірю-

вань [1-15], розрахунку деформаційних та геометричних параметрів багатошарових структур [1-15]. Здобувач також приймала участь у моделюванні дифракційних спектрів [2, 3, 6, 15] та розрахунках мап оберненого простору для нітридних структур в роботах [1, 4, 5, 7-15]. Окрім обробки отриманих результатів, в усіх роботах дисертантка приймала активну участь у аналізі та інтерпретації результатів досліджень, написанні статей.

Апробація результатів дисертації Основні результати досліджень, розглянутих в роботі, доповідались та обговорювались на наукових конференціях: XII міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем МКФТТІН-ХІІ.–Івано-Франківськ, Україна - 18-23 травня, 2009, IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН-4 Запоріжжя, Україна-15-19 вересня 2009, 7-я Всеросійська конференція: Нітриди галлія, індія і алюмінія-структури і прибори. Санкт-Петербург, Росія.-1-3 лютого 2010, Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарівські читання-2010». - Київ, Україна. -5-6 жовтня, 2010, 8-я Всеросійська конференція: Нітриди галлія, індія і алюмінія-структури і прибори. – Санкт-Петербург, Росія.-26-29 травня 2011, П'ятий міжнародний науковий семінар «Сучасні методи аналізу дифракційних даних (топографія, дифрактометрія, електронна мікроскопія) і актуальні проблеми рентгеновської оптики» - Великий Новгород, Росія - 12 – 16 вересня 2011, V-Українська конференція по фізиці напівпровідників (УНКФП-5), м.Ужгород, 9-15 жовтня 2011 р., Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарівські читання-2011». - Київ, Україна. -12-14 квітня 2011 р.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 15 наукових праць, з яких 6 статей та 9 тез доповідей на конференціях. Список публікацій наведено в кінці дисертації.

Структура дисертації Дисертаційна робота складається із вступу, літературного огляду з теми дослідження (розділ 1), трьох оригінальних розділів, які присвячені основним результатам роботи та методиці дослідження, висновків та списку цитованої літератури з 130 найменувань. Дисертація викладена на 130 сторінках тексту, і містить 46 рисунків та 7 таблиць.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, її зв'язок з науковими програмами і темами, сформульовані мета та основні завдання роботи, її наукова новизна, практичне значення отриманих результатів, наведено дані про особистий внесок дисертанта, а також відомості про апробацію роботи та публікації.

У **першому розділі** дана загальна характеристика об'єктів дослідження, детально описані основні механізми релаксації в напівпровідникових сполуках, а також проведений опис причин виникнення, типів дефектів та методів визначення густини дислокацій. Вказано на області застосування багатошарових нітридних структур A_3N . Приведені особливості технології росту та оптимізації процесів росту нітридних сполук. Приведений також опис основних типів дислокацій, причин їх виник-

нення та методів визначення їх густини, а також детально описані основні механізми релаксації деформацій в напівпровідникових гетероструктурах на основі A_3N . Приведені особливості оптимізації технологічних процесів росту нітридних сполук. Окремий підрозділ присвячено загальноприйнятим методам розрахунку параметрів ґратки та деформаційних характеристик об'ємних кристалів та багатошарових структур. Проаналізовані результати інших досліджень деформаційно-релаксаційних процесів в БШС на основі A_3N .

На основі критичного аналізу приведених даних окреслені рамки завдань дисертації, сформульовані переваги вибору даних методів дослідження БШС на основі A_3N .

У другому розділі приведено основні експериментальні методики дослідження багатошарових наноструктур.

Розглянуто методи дифракції X-променів від нанорозмірних структур на основі кінематичної та динамічної теорій. Окреслені можливості різних експериментальних схем дифракції X-променів. Коротко викладена теорія дво- та трикристальної X-променевої дифрактометрії. Показана конструкція схем дифракції як в прямому, так і в оберненому просторі. Відмічені основні переваги трикристальної схеми дифракції перед двокристальною. Детально описана методика картографування оберненого простору та аналізу особливостей отриманих дифракційних картин, методика підбору рефлексів в оберненому просторі для розділення внеску шарів, які знаходяться на різній глибині структури.

Досить значна увага приділена методиці розрахунку деформаційного стану багатошарових структур на основі аналізу їх кривизни.

Розділ 3 присвячений дослідженню структурної досконалості, причин виникнення деформацій та процесів їх релаксації в багатошарових структурах A_3N , вирощених різними методами.

В першій частині досліджувалась еволюція дефектного та деформаційно-релаксаційного стану HEMT-структур $Al_xGa_{1-x}N/GaN$, вирощених методом металгідридної епітаксії (MOCVD) на підкладках *c*-сапфіру різної товщини: 450 мкм – тонка підкладка та 3000 мкм – товста підкладка. Варіація товщини підкладки при гетероепітаксійному рості використовувалась для зниження густини дефектів в шарах структур. При цьому вивчався вплив товщини підкладки на наступні структурні параметри систем $Al_xGa_{1-x}N/GaN$: розмір областей когерентного розсіяння в площині L_{\parallel} та вздовж росту L_{\perp} , густина гвинтових N_S та крайових N_E дислокацій, деформація в площині росту ε_{\parallel} та в напрямку росту ε_{\perp} . Також були експериментально проміряні та розраховані для ідеальної (бездислокаційної структури) радіуси кривизни систем R_{exp} та R_{theor} , відповідно. Всі ці величини приведені в Табл. 1.

Як видно з таблиці, товщина підкладки суттєво впливає на деформацію та густину дислокації в шарах $Al_xGa_{1-x}N$ і GaN , а також на радіус кривизни систем. Більш того, величини експериментальних та розрахованих теоретично радіусів кривизни систем сильно відрізнялись.

Таблиця 1. Структурні характеристики систем $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Товщина підкладки (мкм)	Шари структури	ε_{\parallel}	ε_{\perp}	$L_{\parallel} / L_{\perp}$ (нм)	N_E / N_S ($\times 10^{-8} \text{ см}^{-2}$)	$R_{\text{exp}} / R_{\text{theor}}$ (м)
450	GaN	$2.34 \cdot 10^{-3}$	$9.04 \cdot 10^{-4}$	31.7/58.8	13.8/0.98	9.91/0.08
	AlGaN	$1.52 \cdot 10^{-3}$	$6.9 \cdot 10^{-4}$	21.7/29.9	2.54/2.9	
3000	GaN	$6.75 \cdot 10^{-4}$	$3.04 \cdot 10^{-4}$	64.5/50.0	6.2/1.09	69.3/3.50
	AlGaN	$6.27 \cdot 10^{-4}$	$3.79 \cdot 10^{-4}$	20/38.3	2.8/1.74	

Пояснити цю різницю відмінністю лише густини дислокацій виявилось неможливим. Адже, при релаксації системи до рівня експериментальних радіусів кривизни, необхідна кількість дислокацій (сума гвинтових та крайових) мала б становити близько $3.8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для структури на тонкій підкладці і $3.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ для структури на товстій підкладці, що значно перевершує експериментальні дані, отримані з аналізу напівширин КДВ. Для встановлення основних причин, що приводять до таких розбіжностей, проводився розрахунок розподілу пружних деформацій у системі по товщині в залежності від закону розподілу дислокацій та розорієнтації елементарних комірок кристалічної ґратки плівки відносно підкладки.

Розподіл деформацій в залежності від густини і закону розподілу дислокацій в структурах наведених на Рис. 1.

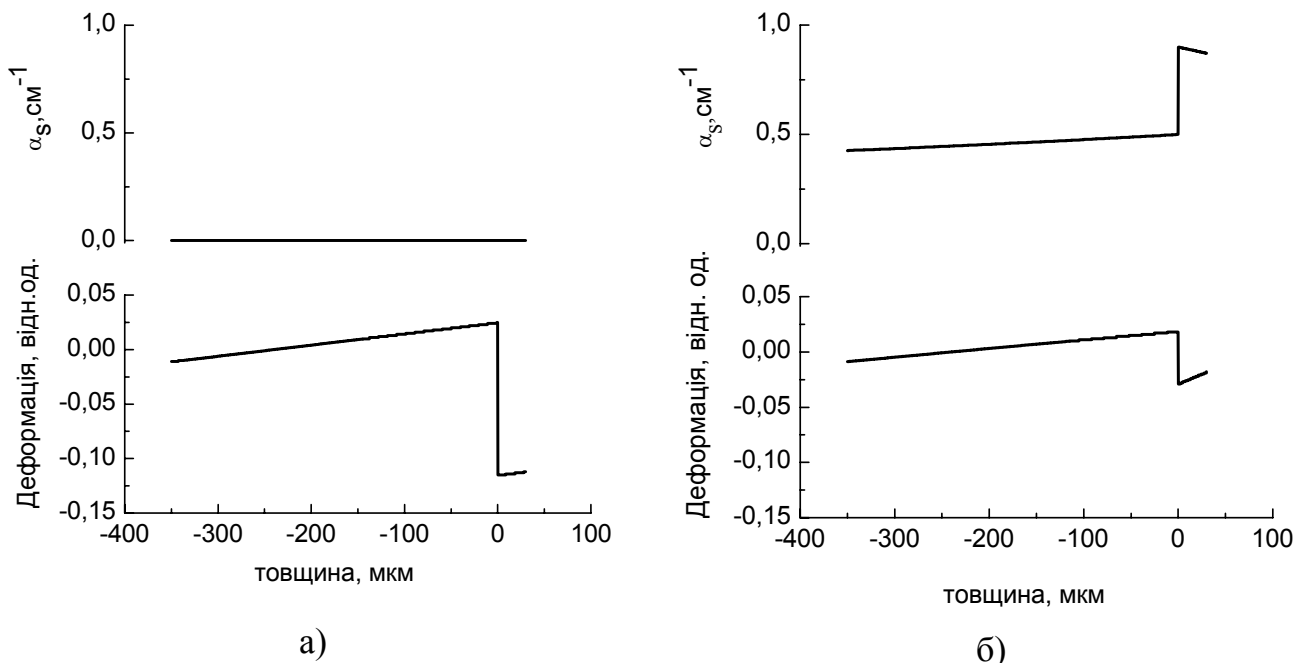


Рис. 1. Залежність деформацій в площині росту по товщині від закону розподілу дислокацій: а) без дислокацій; б) лінійний закон розподілу дислокацій.

З наведених даних слідує, що стрибок деформації на границі розділу на порядок менший для структур які містять дислокації, в порівнянні з бездислокаційними.

Як показано на Рис. 2,а невідповідність параметрів решітки в площині інтерфейсу для GaN і Al₂O₃ становить $(\Delta a/a) = (a_{\text{GaN}} - a_{\text{Al}_2\text{O}_3})/a_{\text{Al}_2\text{O}_3} = -0.33$, де $a_{\text{GaN}} = 0.31876$ нм, $a_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 0.4758$ нм. Така невідповідність параметрів решіток, при когерентному рості, повинна приводити до макровигину системи підкладка-епішар (увігнутість із боку плівки).

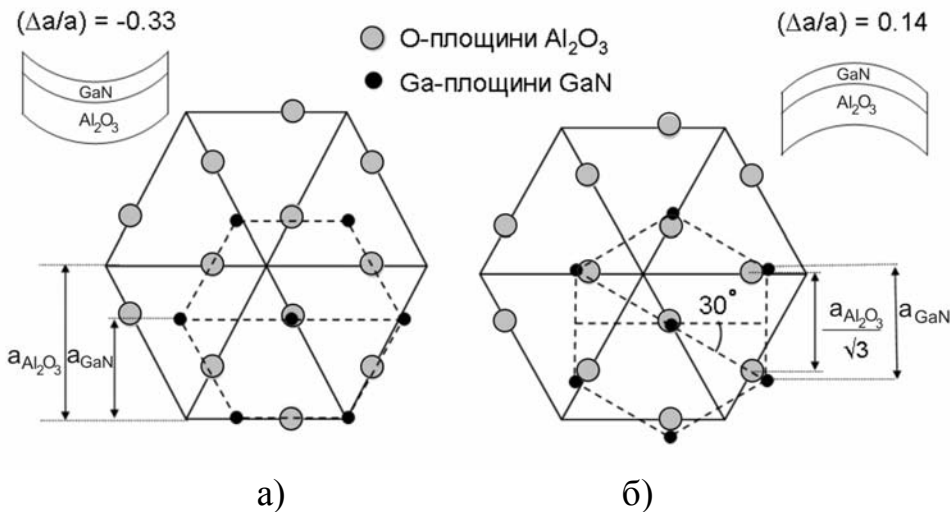


Рис. 2. Схематичне зображення розташування атомів в площині (0001) GaN відносно площини (0001) сапфіру: без розвороту (а) та з розворотом на 30° (б) одиничних комірок GaN відносно с-осі сапфіру.

(протилежного знака) латеральній невідповідності. Значення такої невідповідності $(\Delta a/a)_l = (a_{\text{GaN}} - a_{\text{Al}_2\text{O}_3})/a_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 0.14$ ($a_{\text{GaN}} = 0.31876$ нм, $a_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 0.2749$ нм) можна одержати при обертанні комірки GaN на кут 30° навколо осі [0001] стосовно комірки сапфіру. Експериментально це проявляється в тому, що асиметричні відбиття типу 11-2l фіксуються для шару і підкладки при різних азимутальних установах зразка (Рис. 3).

Однак, у наших експериментах було отримано, що насправді вигин системи відбувається таким чином, що поверхня плівки виявляється опуклою. Тому, ми припускаємо, що оскільки структура плівки стовпчаста, то відзначений вище ефект може бути обумовлений тим, що блоки GaN вибудовуються в площині зрощення при іншій

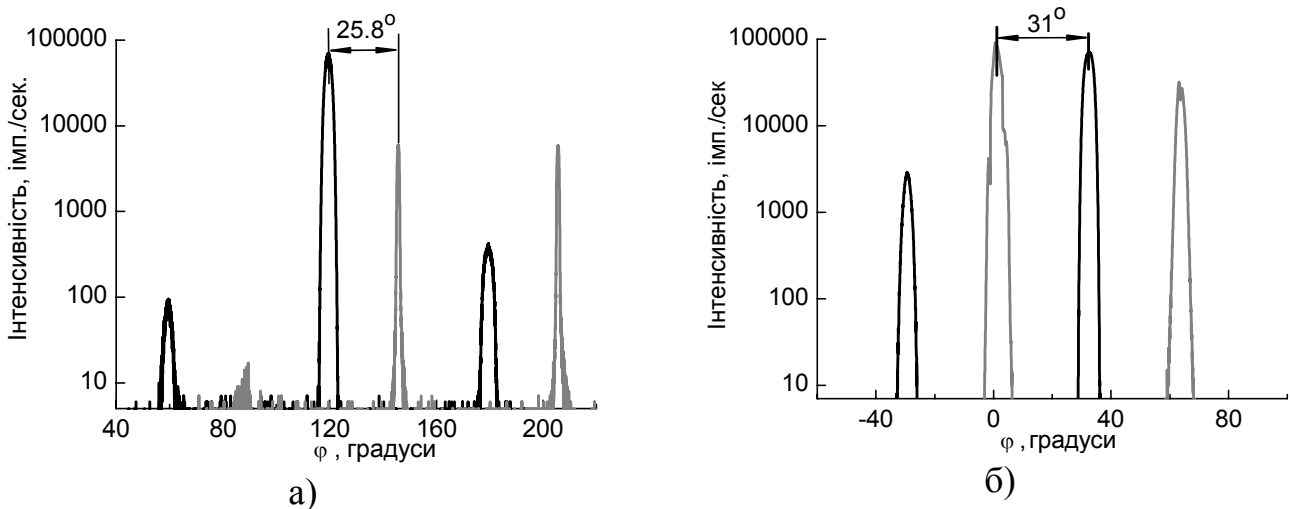


Рис. 3. Азимутальні ϕ -скани НЕМТ-структур Al_xGa_{1-x}N/GaN, вирощених на тонкій (а) і товстій (б) підкладках сапфіру.

При цьому встановлено, що латеральна розорієнтація комірок GaN і сапфіру становить близько 25.8° для структури на тонкій і 31° для структури на товстій під-

кладках. Причиною цих розворотів може бути наявність більшої густини дислокацій із гвинтовими сегментами (вектор Бюргерса паралельний площині інтерфейсу).

З врахуванням отриманих результатів були зроблені розрахунки залежності радіуса кривизни НЕМТ-структур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ від товщини сапфірової підкладки

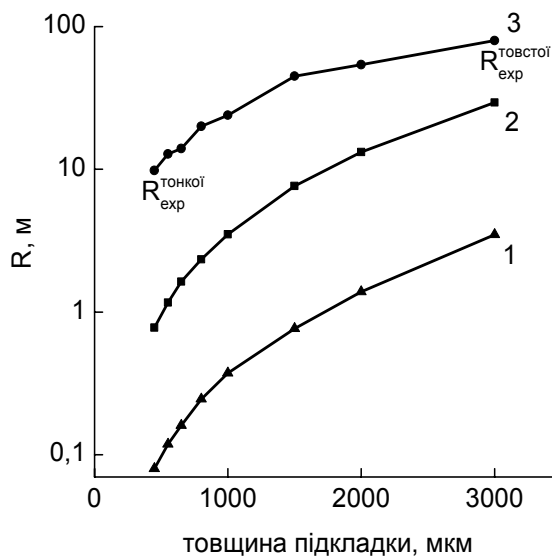


Рис. 4. Залежність радіусів кривизни НЕМТ-структур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ від товщини сапфірової підкладки: 1) ідеальна структура; 2) однорідний розподіл дислокацій; 3) для структури з лінійним законом розподілу густини дислокацій і експериментальними значеннями кута розвороту одиничних комірок.

тики 30-ти періодних НГ структур AlN/GaN . Всі шари GaN в надгратках були леговані $\text{Si} \sim 10^{-19} \text{ см}^{-3}$, так само легованими були буферний та покриваючий GaN шари. Результати комплексних рентгенодифракційних та оптичних досліджень даних серій зразків приведені в Табл.2.

Для пояснення розбіжностей в структурних характеристиках НГ AlN/GaN на різних темплейтах проводилась зйомка мап оберненого простору (МОП) навколо вузлів асиметричних рефлексів. Приводяться мапи оберненого простору для зразків NB165 та NB151, далі S1 та S2, відповідно.

Проблемою отримання інформації з мап оберненого простору є проблема розділення внесків кожного шару в сумарний розподіл інтенсивності від необхідного вузла оберненої ґратки. Саме на даних зразках була розроблена методика підбору рефлексу в оберненому просторі, який давав би точну інформацію про буферний шар, без внеску в розсіяння від покриваючого шару GaN (кеп-шару). В оберненому просторі вибирався рефлекс від шару, який був найближчим до рефлексу від підкладки. Необхідною умовою цього вибору була ковзна геометрія падіння первинного променя (під малим кутом $\sim 0.6^\circ$) для розділення внеску від кап-шару. Для даних структур це був рефлекс 12-33. Мапи 12-33 представлені на рис.5. На рисунку зображені вузли оберненого простору від покриваючого шару (кеп шар), буферного та темплейтних шарів, а також вузли від надграток, для S1 (Рис. 5а) та S2 (Рис. 5б).

(Рис. 4). Як видно з рисунка розрахункова крива (3) досить добре співпадає з експериментальними величинами радіуса кривизни системи. Саме цей процес (розвороти елементарних комірок на різні кути), на нашу думку, є додатковим каналом релаксації напруг невідповідності в таких структурах.

Наступна частина присвячена дослідженню причин виникнення деформацій та процесів їх релаксації в НГ AlN/GaN , вирощених методом променевої епітаксії активованою плазмою (РАМВЕ) на структурно різних підкладках - GaN на сапфірі (GaN -темплейт) та AlN на сапфірі (AlN -темплейт). Вивчався вплив залишкових деформацій в буферному шарі GaN на структурні характеристики

Таблиця 2. Структурні параметри НГ AlN/GaN отримані з рентгенівських та оптичних даних

Зразки	$t_{\text{GaN}}^{\text{exp}} / t_{\text{GaN}}^{\text{tehn}}$ (нм)	$t_{\text{AlN}}^{\text{exp}} / t_{\text{AlN}}^{\text{tehn}}$ (нм)	N_{cracks} ($\times 10^{-2} \text{см}^{-1}$)	N_{total} ($\times 10^8 \text{см}^{-2}$)
<i>GaN-темплейт</i>				
NB 165	1.70±0.07/1.98	2.30±0.06/1.98	4.0	1.27
NB 166	1.23±0.07/1.59	2.18±0.07/1.98	15	1.87
NB 157	1.90±0.06/1.98	2.16±0.06/1.98	8.0	1.40
NB 158	1.85±0.07/2.06	2.08±0.06/1.98	16	1.42
<i>AlN-темплейт</i>				
NB 148	1.60±0.04/2.06	2.48±0.07/2.05	0.2	53.7
NB 151	1.50±0.04/1.98	2.50±0.05/1.98	0.4	14.1
NB 152	0.94±0.05/1.49	2.45±0.04/1.98	1.0	12.4

З аналізу МОП можна зробити висновок, що буферний шар GaN є майже повністю релаксований (розрахункове положення піку для повністю релаксованого GaN співпадає з положенням отриманим з експерименту) при рості на GaN-темплейті (рівень релаксації ~ 80%), в порівнянні з ростом на AlN-темплейті (рівень релаксації ~ 70%).

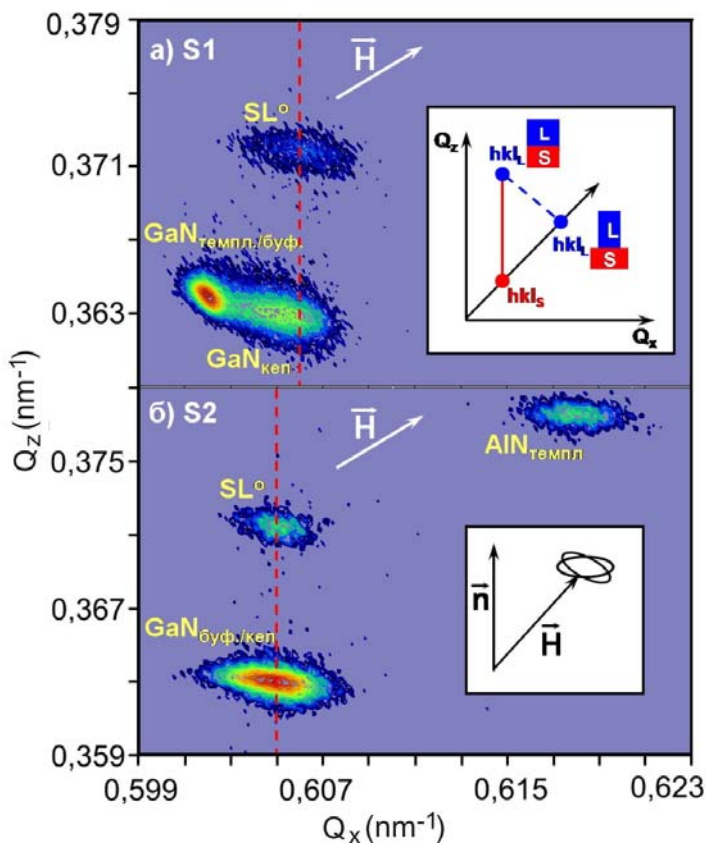


Рис. 5 (12-33) МОП для НГ GaN/AlN на GaN-темплейті (а) та на AlN-темплейті (б). \vec{H} – вектор дифракції. \vec{n} – нормаль до поверхні.

Вузли від НГ (SL°), яка росте на AlN-темплейті та буферного шару GaN (Рис. 5б), знаходяться на нормалі до поверхні, тобто між ними немає релаксації і гетероструктура є когерентною (псевдоморфний ріст). Як видно з розташування вузлів оберненого простору від НГ та буферного шару при рості на GaN-темплейті (Рис. 5б) ріст є непсевдоморфним. Не дивлячись на це, обидві НГ мають близькі рівні деформації.

Детальніше було розглянуто розподіл деформацій на інтерфейсах між шарами для обох темплейтів у випадку гетероепітаксійного росту і порівняно його з експериментальними результатами отриманими з мап оберненого простору.

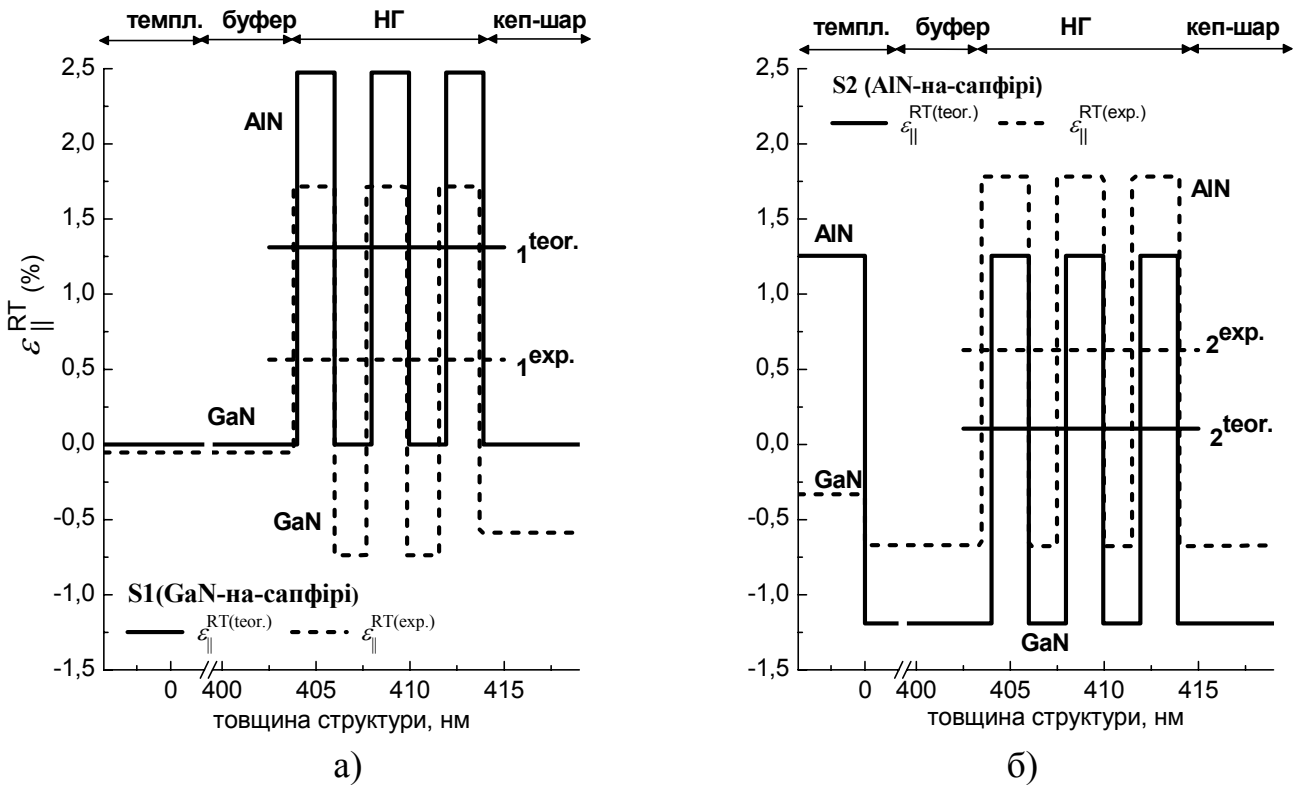


Рис. 6 Залежності середніх деформацій в площині росту по товщині структури: а) GaN-темплейт, б) AlN-темплейт. Суцільна крива – теорія, штрихова крива-експеримент.

На рис.6а,б показаний розрахунковий та експериментальний розподіл деформацій в площині по товщині структури, для зразків S1 та S2, відповідно. Теоретичний розрахунок деформацій в площині $\varepsilon_{||}^{RT(\text{теор.})}$ при кімнатній температурі при водиться в припущенні псевдоморфного росту НГ та кеп шару на буферному шарі GaN. Експериментальний розподіл деформацій $\varepsilon_{||}^{RT(\text{exp.})}$ при кімнатній температурі був розрахований з використанням параметрів ґратки отриманих з мап оберненого простору.

Порівнюючи розраховані усереднені рівні деформації в НГ на обох темплейтах, видно, що для зразка S1 (лінія $1^{\text{теор}}$) в 12 раз є вищою ніж для зразка S2 (лінія $2^{\text{теор}}$). В зразку S1, при рості товстого темплейтного шару GaN (5 мкм), велика невідповідність параметрів ґраток між GaN та сапфіром ($\sim 14\%$), компенсується. Отже, темплейтний шар GaN та буферний шар GaN можна прийняти повністю релаксованими. Тому при псевдоморфному рості структури S1, стрибок деформації між буферним шаром та НГ буде перерозподілятися лише на AlN шари НГ. У випадку зразка S2, через перерозподіл деформації між темплейтним шаром AlN та буферним шаром GaN, які мають практично однакову товщину, буферний шар GaN, буде знаходитись в стані стиску. При подальшому псевдоморфному рості НГ стрибок деформації між буферним шаром GaN та НГ буде перерозподілятися між обома як AlN так і GaN шарами НГ.

Усереднений рівень деформації в НГ, отриманий з мап оберненого простору є таким же як $\varepsilon_{||}^{RT(\text{exp.})} \sim 5-6 \times 10^{-3}$ (лінії 1^{exp} і 2^{exp}). У випадку S1, як було показано раніше, повністю релаксований буферний шар GaN викликає сильні деформації розтягу

шарів AlN в НГ. Рівень цих деформації в AlN шарах НГ такий високий, що псевдоморфний ріст структур є практично не можливим. Отже НГ росте «ізолюваною» від буферного шару (непсевдоморфний ріст) і релаксаційні процеси полягають в перерозподілі деформацій між когерентними шарами НГ. Отже, кеп шар GaN, який є менш деформованим, ніж GaN шари НГ і більш деформованим, ніж буферний шар GaN, росте «ізолюваним» від НГ і буферного шару. У випадку зразка S2, тонкий темплейтний шар AlN (340 нм) на сапфірі є майже повністю релаксованим (рівень релаксації $\sim 97\%$). Буферного шару GaN вирощений на цьому темплейті буде в стані стиску, і рівень деформації тут перевищує теоретично розрахований в 2 рази. Тому, на відміну до зразка S1, в зразку S2 буферний шар GaN викликає менші напруги розтягу в AlN шарах НГ, в цьому випадку спостерігається псевдоморфний ріст НГ на буферному шарі GaN і кеп шару GaN на НГ.

Отже в зразку S1 значення деформації були достатніми для утворення тріщин, а в другому випадку через недостатність напруг утворювались тільки дислокації. Хоча структури при рості на GaN-темплейтах містять більшу густину тріщин, проте області матеріалу між тріщинами менш дислокаційні.

В літературі вказано, що істотну роль в деформаційному стані гетеросистем відіграють термічні напруги, викликані різницею термічних коефіцієнтів розширення шарів, які виникають під час охолодження структури від температури росту до кімнатної. В нашому випадку величина деформацій, викликаних термоградієнтами є на декілька порядків нижчою за величину деформацій, викликаних невідповідністю параметрів ґраток шарів, тому їх внесок тут незначний.

Також з мап оберненого простору та «симуляції» високороздільних дифракційних $\omega/2\theta$ -сканів, навколо симетричних 002 відбиттів (тут не показаних), були отримані параметри ґратки шарів. З допомогою цих параметрів отримувались товщини шарів НГ (t_{GaN}^{exp} і t_{AlN}^{exp}). Як видно з Таблиці 2, отримані товщини відрізнялись від номінальних (технологічно заданих t_{GaN}^{tehn} і t_{AlN}^{tehn}). Ця різниця може бути пояснена термічно-активованим і деформаційно-залежним взаємообміном між атомами Al та атомами Ga з GaN шарів НГ.

Четвертий розділ присвячений дослідженню впливу буферної НГ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ на особливості релаксації деформацій в активній НГ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ при зміні в останній кількості квантових ям. Структури отримані методом газофазної епітаксії із метал-органічних сполук (MOCVD) на сапфірових підкладках орієнтації (0001), на котрих спочатку вирощувався товстий буферний шар $n-GaN$ (товщиною $\sim 3.5\mu m$).

На першому етапі досліджувався вплив нарощеної на буферному шарі GaN 5-періодної буферної НГ1 $In_yGa_{1-y}N(2.5\text{ нм})/GaN(9\text{ нм})$ з низькою концентрацією індію ($\sim 5\%$) на величину деформацій невідповідності і густину проростаючих дислокацій в шарах активної НГ2 $In_xGa_{1-x}N/GaN(2.5\text{ нм})/GaN(4\text{ нм})$ с концентрацією індію ($\sim 12\%$). З асиметричних МОП навколо вузла 11-24 від GaN (не приведених тут) були розраховані параметри ґратки (c та a) активної та буферної НГ, та отримані значення деформацій в напрямку росту і вміст індію в обох надґратках, які добре корелюють з даними отриманими методом фотолюмінесценції (Табл.3).

Таблиця 3. Параметри шарів активної та буферної НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Шари структури	t^{exp} , нм	c , нм	a , нм	ε_{\perp}	x з ВРХД	x з ФЛ
$\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ -НГ1	3.6	0.52987	0.32309	0.01410	0.18 ± 0.3	0.18 ± 0.1
GaN-НГ1	8.9	0.51744	0.31871	-0.0056	—	—
$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -НГ2	3.5	0.53007	0.32313	0.01560	0.07 ± 0.3	0.08 ± 0.1
GaN-НГ2	3.8	0.51713	0.31887	-0.0064	—	—

Як видно з Таблиці 3 шари буферної НГ GaN знаходяться в стані розтягу ($\varepsilon_{\perp} > 0$), а шари твердого розчину $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ - в стані стиснення ($\varepsilon_{\perp} < 0$). В абсолютних значеннях деформації розтягу шарів GaN менші, ніж деформації стиснення шарів $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$. Активна НГ знаходиться в напруженому стані відносно буферної. А всі напруги, які виникають між буферною НГ в цілому та буферним шаром знімаються на нижній гетерограниці.

На дифракційних спектрах для симетричного рефлексу 0002 від НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ (Рис. 7) чітко спостерігаються сателіти до четвертого порядку, що свідчить про хорошу періодичність вирощених структур та про відсутність компонентного змішування на границі розділу. Отже використання буферних НГ в якості областей зниження деформацій і густини дефектів є хорошим засобом для отримання активних НГ хорошої якості.

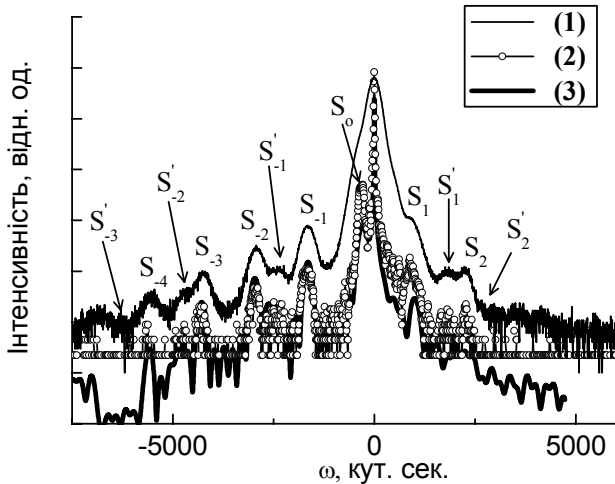


Рис. 7. Експериментальні ω - 2θ -скани, отримані в двокристалній схемі (1), трикристалній схемі (2) та промодельовані (3) дифракційні спектри для симетричного рефлексу 0002 від НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. S_n -сателіти активної НГ, S'_n - сателіти буферної НГ.

нм для буферної НГ та відповідно 3 та 6 нм – для активної НГ.

Інформація про деформаційний стан систем і рівень їх релаксації була отримана з МОП навколо вузла рефлексу 11-24 від GaN.

Дані про склад квантових ям x^{exp} , товщини шарів НГ t^{exp} а також про періоди НГ, отримані різними методами (рентгенівськими та вторинної іонної мас-спектроскопії (ВІМС)) приведені в Табл.4 Отримані дані порівнювались з заданими технологічно значеннями x^{tehn} та t^{tehn} . Розрахунок густини дислокацій показав, що при такому рості вона складає $\sim 10^7 \text{ см}^{-2}$ (Табл.4).

На наступному етапі, вивчалась еволюція релаксації деформацій при зміні архітектури активної НГ, тобто число $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ квантових ям змінювалось від 1 до 5. Дані структури відрізнялись від попередніх тільки товщинами шарів буферної та активної НГ, товщина квантових бар'єрів GaN становила 4 нм, а квантових ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ – 5

нм для буферної НГ та відповідно 3 та 6 нм – для активної НГ.

Таблиця 4. Технологічні та отримані з рентгенівських і ВІМС вимірювань параметри активної НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

Зразки	Шари активної НГ	t^{tehn} / t^{exp} , нм	x^{tehn} / x^{exp} , %	T_{BPXD} , нм	$T_{ВІМС}$, нм	N_{total} , $\times 10^7 \text{ см}^{-2}$	R_{exp} , м
1227(1 КЯ)	GaN	–	12/9	–	–	8.37	6.8
	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	3/3.0					
1226(3 КЯ)	GaN	6/7.7	12/14	11.5	13.5	6.00	6.6
	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	3/3.8					
1208(5 КЯ)	GaN	6/7.9	12/12	11.8	14	7.37	7.9
	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	3/3.9					

Як і в попередньому розділі було показано, що товщини шарів в НГ структурах InGaN/GaN також відрізнялись від номінально заданої. В даному випадку зростала товщина як бар'єрних шарів GaN, так і товщина ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Причому цей ефект сильніше проявлявся з ростом числа квантових ям і не пов'язаний з деформацією буферного шару GaN.

Аналіз даних показав, що буферний шар GaN є стиснутим і має однаковий ступінь релаксації для всіх структур, про що свідчать приблизно рівні радіуси кривизни систем. Це підтверджує той факт, що товсті шари A_3N , вирощені на сапфірі, практично повністю релаксують під час росту в основному за рахунок дислокацій, а напруги, що спостерігаються при кімнатній температурі, носять в основному термічний характер. Для розуміння динаміки релаксаційних процесів деформацій в активній НГ проводився аналіз структурних параметрів систем.

Залежності цих параметрів від числа КЯ зображені графічно на Рис. 8. Розрахунок середньої відносної деформації по періоді НГ в площині росту зображений на Рис. 8а де показано, що шари GaN знаходяться в стані розтягу ($\epsilon_{\text{GaN}} > 0$), а шари твердого розчину – в стані стиску ($\epsilon_{\text{InGaN}} < 0$), причому це спостерігається для всіх досліджуваних структур.

По величині деформації розтягу шарів GaN менші, ніж деформації стиску шарів $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, що обумовлено, в основному, товщиною шарів. При цьому деформація в бар'єрних шарах GaN залишається практично незмінною, в той же час як для шарів $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ спостерігається монотонне збільшення деформації з ростом числа квантових ям в активній НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. В той же час, з ростом числа ям усереднене значення деформації в напрямку росту в одному періоді активної НГ сильно зменшується (Рис. 8б).

Середня деформація в періоді НГ сильно залежить від співвідношення товщин ям/бар'єр, а також параметрів ґраток даних шарів (складу ями). Спостерігалось, що при зміні кількості періодів активної НГ товщини шарів GaN і $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ мають різну степінь відхилення від заданих при рості (Рис.8в), також відрізнявся склад $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ КЯ (Рис. 8г).

Що стосується природи ефекту збільшення концентрації індію з ростом числа періодів в НГ (Рис.8г), то, як відмічалось раніше [3], ефективність входження індію в шари $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ залежить від величини пружних деформацій.

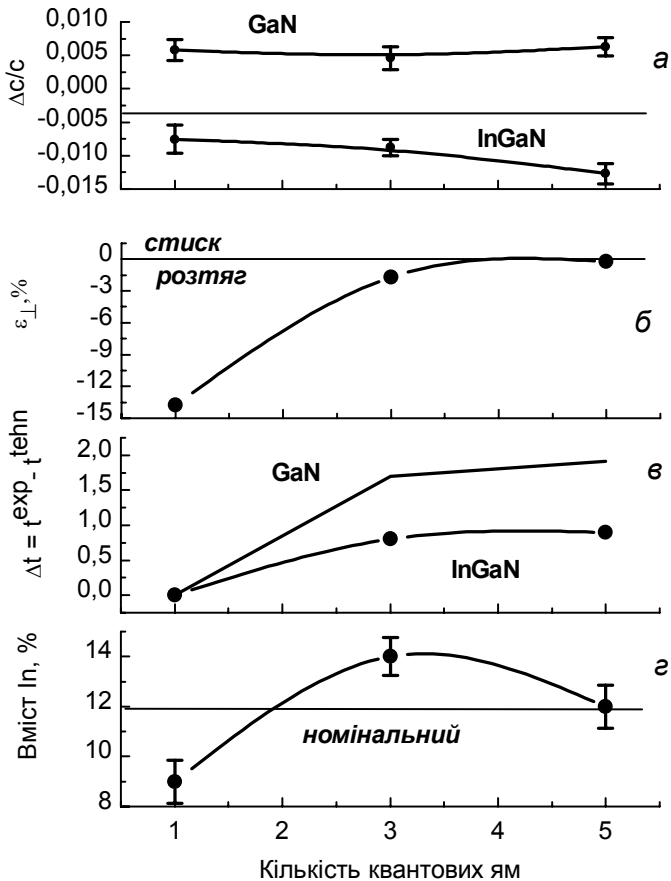


Рис. 8. Залежності зміни параметрів НГ з ростом числа квантових ям в активній НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

Це доказує, що самовільна зміна товщин шарів НГ і, відповідно складу КЯ, є додатковими каналами релаксації деформацій в НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Більш того ці процеси взаємопов'язані між собою. Це легко зрозуміти з аналізу залежності критичної товщини шару ($h_{cr.}$) для НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ від складу КЯ (x).

З Рис. 9 видно, що досліджувані НГ знаходяться в докритичній області, де виключена релаксація деформацій невідповідності тільки через дислокації. Дійсно, товщини шарів в нашому випадку менші $h_{cr.}$, і релаксація деформацій в них завдяки пружній взаємодії між дислокаціями невідповідності є неможливою. Відповідно тут працюють інші канали релаксації, такі як, наприклад, самовільна зміна товщин шарів (складу).

Було показано [3, 4], що спостерігається суттєве подавлення входження індію в ґратку під дією деформаційного поля. Відповідно, збільшення концентрації індію в КЯ при збільшенні числа періодів можна пояснити релаксацією напруг в системі. Внаслідок релаксації напруг збільшується швидкість росту $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ КЯ і вмісту In в шарах, через зменшення часу десорбції атомів In з поверхні, та їх захватом нарощуваним шаром.

Різниця в зміні параметра Δt (швидкості росту шарів), як і концентрації атомів In від числа КЯ, обумовлені впливом деформаційних полів на процеси сегрегації атомів Ga(In) в нарощуваних шарах.

Як видно з таблиці і Рис.8, зміна деформації в шарах НГ не супроводжується значними змінами густини дислокацій N_{total} , а також радіуса кривизни структур R_{exp} . Тобто, при однаковому вигині структур, та однакової густини дислокації, НГ релаксовані по-різному.

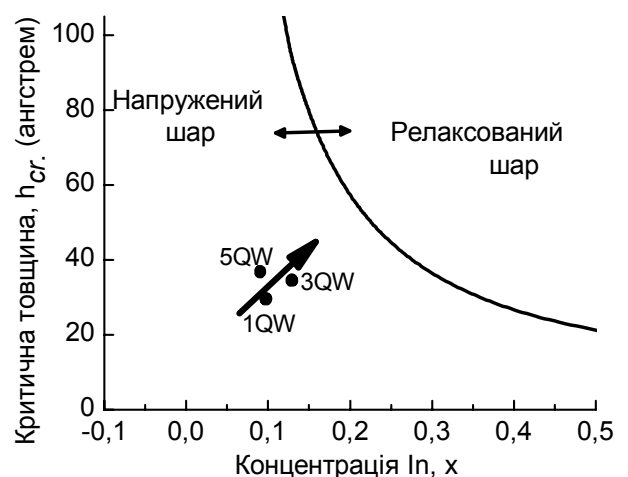


Рис. 9. Розрахована крива залежності критичної товщини шару ($h_{cr.}$) від складу (x) для НГ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі обґрунтовано та апробовано комплекс методів високо-роздільної рентгенівської дифрактометрії для кількісної характеристики реальної структури та деформаційного стану A^3N гетеросистем та надграткових структур. З аналізу отриманих результатів слідують **такі висновки**:

1. При структурних дослідженнях НЕМТ-структур на основі $Al_{0.30}Ga_{0.70}N/GaN$ показано, що основною причиною розширення дифракційних рефлексів є розорієнтація (нахили (tilts) і повороти (twists)) та малі розміри областей когерентного розсіяння. Розширення вздовж поверхні (перпендикулярно вектору дифракції) свідчить про те, що дислокаційний ансамбль складається як з крайових, так і гвинтових компонент дислокацій, з вектором Бюргерса, відповідно, перпендикулярним і паралельним гетерограниці.
2. Вперше для системи $GaN/Al_2O_3(0001)$ встановлено новий механізм релаксації пружних деформацій, який полягає в різних кутових розворотах гексагональних комірок нітриду галію навколо c -осі сапфіру. Показано, що величина цих розворотів залежить від товщини підкладки.
3. Наявність дислокацій у гетероструктурах A_3N призводить до істотного перерозподілу як мікродеформацій (всередині блоків), так і макродеформацій (макрівигину) при зміні товщини підкладки сапфіру. Повне узгодження між експериментальною та теоретичною кривизною систем можливе лише за умови врахування як розворотів одиничних комірок шарів відносно підкладки так і густини та закону розподілу дислокацій в них.
4. При дослідженні короткоперіодних НГ AlN/GaN встановлено, що структури на частково релаксованих AlN/Al_2O_3 -темплейтах ростуть без тріщин, а надлишкові деформації релаксують шляхом формування дислокацій невідповідності. При рості структур на GaN/Al_2O_3 -темплейті через наявність більш сильних початкових деформацій шари НГ починають розтріскуватись. При цьому, матеріал в областях між тріщинами містить меншу густину дислокацій.
5. Для надграткових структур AlN/GaN , встановлений ефект “потоншення” чи “потовщення” шарів НГ та його залежність від початкового деформаційного стану буферного шару GaN (тобто залишкових напруг).
6. В структурах з активною та буферною НГ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ показано, що пружні деформації практично повністю релаксують на гетерограниці між товстим буферним шаром GaN і буферною НГ. Встановлено, що шари GaN в активній НГ знаходяться в стані розтягу, а шари $In_xGa_{1-x}N$ – в стані стиску. В абсолютних значеннях, деформації розтягу шарів GaN менші, ніж деформації стиску шарів $In_xGa_{1-x}N$. Показано, що шари активної НГ є менш дислокаційними в порівнянні з шарами буферної НГ з більш хаотичним розподілом дислокацій.
7. Встановлено, що процеси релаксації деформацій в короткоперіодних НГ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ починаються вже в структурах з однією квантовою ямою. Показано, що степінь релаксації деформацій зростає із збільшенням числа квантових ям в НГ, а ріст рівня релаксації приводить до збільшення концентрації індію в КЯ. Ці процеси супроводжуються змінами товщин, як ям, так і бар'єрів.

Список цитованої літератури

1. Morkoc H Handbook of Nitride Semiconductors and Devices: GaN-based optical and electronic devices [Text]/ Morkoc H. - Berlin: Wiley-VCH, 2008.- 902 p.
2. Hyuang Koun Cho Generation of misfit dislocations in high indium content InGaN layer grown on GaN [Text] / Hyuang Koun Cho, Gye Mo Yang // Journal of crystal growth. – 2002. - 243. – P.124-128.
3. Влияние релаксации напряжений на формирование активной области гетероструктур InGaN/(Al)GaN для светодиодов зеленого диапазона [Текст]/ А.В. Сахаров, В.В. Лундин, Е.Е. Заварин, М.А. Сеницын [и др.]// Физика и техника полупроводников. – 2009. – 43. – С.841-846.
4. M.C. Johnson, E.D. Bourret-Courchesne, J. Wu, Z. Liliental-Weber, D.N. Zakharov, R.J. Jorgenson, T.B. Ng, D.E. McCready, J.R. Williams, J. Appl. Phys., **96**, 1381 (2004).

Список опублікованих праць за темою дисертації

1. Mechanism of strain relaxation by twisted nanocolumns revealed in AlGaIn/GaN heterostructures [Text]/ V.P. Kladko, A.V. Kuchuk, N.V.Safryuk, V.F. Machulin, A.E. Belyaev, H.Hardtdegen, S.A. Vitusievich // Applied Physics Letters. - V.95, Issue 3. - 2009. –p.031907-1 – 031907-3.
2. Вплив дислокаційної структури на деформаційні процеси в AlGaIn/GaN/(0001)Al₂O₃ [Текст]/ Кладько В.П., Кучук А.В., Сафрюк Н.В., Беляєв О.Є., Мачулін В.Ф.// Український Фізичний Журнал.- Т.54, №10.- 2009. - с.1014-1020.
3. X-ray diffraction study of deformation state in InGaIn/GaN multilayered structures [Text]/ Kladko V.P., Kuchuk A.V., Safryuk N.V., Machulin V.F., Belyaev A.E., Konakova R.V., Yavich B.S.// Semiconductor Physics, Quantum Electronics, Optoelectronics.-V.13, No1.- 2010.- p.1-7.
4. Рентгеновская дифрактометрия и сканирующая микро-рамановская спектроскопия неоднородностей структуры и деформаций по глубине многослойной гетероструктуры InGaIn/GaN [Текст]/ В.В.Стрельчук., В.П.Кладько, К.А.Авраменко, А.Ф.Коломыс, Н.В. Сафрюк Р.В.Конакова, Б.С.Явич, М.Я.Валах, В.Ф.Мачулин, А.Е.Беляев// Физика и техника полупроводников.- Т.44. вып.9. – 2010.-с.1236-1247.
5. Эволюция деформационного состояния и компонентного состава при изменении количества квантовых ям в InGaIn/GaN многослойных структурах [Текст]/ В.П.Кладько, А.В. Кучук, Н.В.Сафрюк, В.Ф.Мачулин, А.Е.Беляев, Р.В. Конакова, Б.С. Явич, Б.Я. Бер, Д.Ю.Казанцев// Физика и техника полупроводников.- Т.45. вып.6. – 2011.-с.770-777;
6. Influence of template type and buffer strain on structural properties of GaIn multi-layer quantum wells grown by PAMBE. X-Ray study [Text]/ V.P. Kladko, A.V.Kuchuk, N.V. Safriuk, V.F. Machulin, P.M. Lytvyn, V.G. Raicheva, A.E. Belyaev, Yu.I. Mazur, E.A. DeCuir Jr, M.E. Ware, G.J. Salamo// Journal of Physics D: Applied Physics,- V.44., N2-2011.- P.025403 (8);
7. The influence of dislocation structure on deformation processes of GaIn\GaN heterostructures based on sapphire/ В.П. Кладько, Н.В.Сафрюк, А.В. Кучук, О.Є.

- Беляев, В.Ф. Мачулін// Фізика і технологія тонких плівок та наносистем XII міжнародна конференція МКФТТПН-XII. Тези доповідей –Івано-Франківськ, Україна.-18-23 травня, 2009.-Т.2, с.366-367.
8. Вплив дислокацій на деформаційні процеси в гетероструктурах GaAlN/GaN на сапфірі/ Сафрюк Н.В., Кучук А.В., Гудименко О.Й., Беляев О.Є., Кладько В.П.// IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН-4. Тези доповідей.-Запоріжжя, Україна-15-19 вересня 2009.-Т.2, с.138-139.
 9. Рентгеноструктурные исследования деформационного состояния многослойных структур InGaN/GaN/ Б.С. Явич, В.П. Кладько, А.В. Кучук, Н.В. Сафрюк, Р.В. Конакова, В.Ф. Мачулин, А.Е. Беляев// 7-я Всероссийская конференция: Нитриды галлия, индия и алюминия-структуры и приборы. Тезисы докладов. – Санкт-Петербург, Россия.-1-3 февраля 2010. –с.61-62.
 10. Канали релаксації деформацій в нітридних структурах/ В.П.Кладько, Н.В. Сафрюк, А.В. Кучук, В.Ф.Мачулин, А.Е.Беляев// Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «ЛАШКАРЬОВСЬКІ ЧИТАННЯ-2010». Збірник тез.-Київ, Україна. -5-6 жовтня, 2010.-с.70.
 11. О флуктуации толщины слоев в сверхрешетках на основе III-нитридов как канале релаксации механических напряжений Кучук А.В., Кладько В.П., Сафрюк Н.В., Беляев А.Е, Литвин П.М., Мазур Ю.И, Явич Б.С.// 8-я Всероссийская конференция: Нитриды галлия, индия и алюминия-структуры и приборы. Тезисы докладов. –Санкт-Петербург, Россия.-26-29 мая 2011. –с.222-223.
 12. Рентгеновские исследования сверхрешеток InGaN/GaN с разным количеством квантовых ям/ Кладько В.П., Сафрюк Н.В., Кучук А.В., Беляев А.Е., Мачулин В.Ф., Конакова Р.В., Явич Б.С., Бер Д.Я., Казанцев Д.Ю.// 8-я Всероссийская конференция: Нитриды галлия, индия и алюминия-структуры и приборы. Тезисы докладов. –Санкт-Петербург, Россия.-26-29 мая 2011. – с.231-232;
 13. Комплексные исследования короткопериодных сверхрешеток AlN/GaN/ В.П.Кладько, Н.В. Сафрюк, А.В.Кучук, А.И.Гудыменко, А.Е.Беляев, В.Ф. Мачулин, П.М.Литвин, Yu I Mazur// Пятый международный научный семинар «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия) и актуальные проблемы рентгеновской оптики» - Великий Новгород. - 12 – 16. 09. 2011 г.
 14. Рентгеноструктурні дослідження багаточарових III-нітридних структур. Сафрюк Н.В., Кладько В.П., Кучук А.В., Литвин П.М., Мачулін В.Ф., Беляев О.Є. V Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН-5. Тези доповідей.-Ужгород, Україна-9-15 жовтня 2011 -, с.434;
 15. Еволюція структурних параметрів InGaN/GaN надграток при зміні кількості квантових ям/ В.П.Кладько, Н.В. Сафрюк, А.В. Кучук, В.Ф.Мачулин, А.Е.Беляев// Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «ЛАШКАРЬОВСЬКІ ЧИТАННЯ-2011». Збірник тез.-Київ, Україна. -12-14 квітня, 2011.-с.104-105.

Сафрюк Н.В. Рентгеноструктурна характеристика багат шарових систем Al(In)GaN на полярних площинах сапфіру. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, 2011.

У дисертаційній роботі обґрунтовано та апробовано комплекс методів високо-роздільної рентгенівської дифрактометрії для кількісної характеристики реальної структури та деформаційного стану III-нітридних гетеросистем та багат шарових структур.

Для багат шарових систем $Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al_2O_3(0001)$ встановлено новий механізм релаксації пружних деформацій, який полягає в різних розворотах елементарних комірок наноблоків нітриду галію навколо с-осі сапфіру. Встановлено взаємозв'язок деформацій з густиною дислокацій в шарах і підкладці при зміні товщини останньої. Показано, що збільшення товщини підкладки сапфіру приводить до збільшення пружних деформацій та зменшення густини дислокацій у шарах структури $Al_xGa_{1-x}N/GaN$.

Встановлено вплив типу темплейта і остаточних напружень в буферному шарі на структурні властивості НГ GaN/AlN. Показано, що більш ефективно потоншення GaN квантових ям (КЯ) і відповідне потовщення AlN бар'єрів спостерігається в НГ, вирощених на напруженому темплейті AlN в порівнянні з НГ, вирощеними на товстому релаксованому GaN темплейті.

Встановлено, що НГ, вирощені на AlN темплейті релаксують в основному за рахунок формування дислокацій невідповідності, в той час як НГ, вирощені на GaN темплейті релаксують за рахунок утворення тріщин. Ці ефекти пояснюються впливом остаточних деформацій в системі буфер/темплейт.

Показано, що пружні деформації практично повністю релаксують на гетерограніці між товстим буферним шаром GaN і $In_xGa_{1-x}N/GaN$ буферною надграткою (НГ). Встановлено, що шари GaN в НГ знаходяться в стані розтягу, а шари твердого розчину – в стані стиску. Встановлено зв'язок між рівнем деформації (релаксації) системи $In_xGa_{1-x}N/GaN$, вирощеної методом газофазної епітаксії з металорганічних сполук, складом індію в квантових ямах, співвідношенням між товщинами яма-бар'єр і кількістю квантових ям активної НГ. Показано, що часткова релаксація системи починається вже в структурах з однією квантовою ямою.

Ключові слова: дифракція X-променів, квантово-розмірні шари, деформація, градієнт складу, надгратки.

Сафрюк Н.В. Рентгеноструктурная характеристика многослойных систем Al(In)GaN на полярных плоскостях сапфира . – Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, 2011.

В диссертационной работе обоснован и апробирован комплекс методов высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии для количественной характеристики реальной структуры и деформационного состояния III-нитридных гетеросистем и многослойных структур (МСС).

Для МСС AlN/GaN/Al₂O₃(0001) установлен новый механизм релаксации упругих деформаций, заключающийся в разных разворотах элементарных ячеек наноблоков нитрида галлия вокруг с-оси сапфира. Установлена взаимосвязь деформаций с плотностью дислокаций в слоях и подложке при изменении толщины последней. Показано, что увеличение толщины подложки сапфира приводит к увеличению упругих деформаций и уменьшению плотности дислокаций в слоях структуры AlGaIn/GaN.

Установлено влияние типа темплейта и остаточных напряжений в буферном слое на структурные свойства СР GaN/AlN. Показано, что более эффективное утоньшение GaN квантовых ям (КЯ) и соответствующее утолщение AlN барьеров наблюдается в сверхрешетках (СР), выращенных на напряженном темплейте AlN в сравнении со СР, выращенными на толстом релаксированном GaN темплейте.

Установлено, что СР, выращенные на AlN темплейте релаксируют в основном за счет формирования дислокаций несоответствия, в то время как СР, выращенные на GaN темплейте релаксируют за счет образования трещин. Эти эффекты объясняются влиянием остаточных деформаций в системе буфер/темплейт.

Методами рентгеновской дифракции в работе определено деформационное состояние активной СР и ее отдельных слоев, степень релаксации, а также период, толщины слоев и состав твердого раствора In_xGa_{1-x}N. Показано, что упругие деформации практически полностью релаксируют на гетерогранице между толстым буферным слоем GaN и In_xGa_{1-x}N/GaN буферной СР. Установлено, что слои GaN в СР находятся в состоянии растяжения, а слои твердого раствора – в состоянии сжатия.

Установлено, что даже при малых концентрациях индия в КЯ происходит частичная релаксация многослойных структур, оказывающая влияние на перераспределение индия в слоях. Показано, что процессы релаксации напряжений в многослойных структурах начинаются уже в СР с одной квантовой ямой. Степень релаксации возрастает с увеличением периодов в СР. Рост уровня релаксации приводит к увеличению концентрации индия в КЯ. Возрастание концентрации In в КЯ сопровождается изменениями толщин, как ям, так и барьеров.

Рассмотрены основные каналы релаксации таких структур – дислокации в слоях, вариации состава и толщин слоев в процессе роста структур. Установлено, что структурные свойства СР в значительной степени определяются процессами неупругой релаксации напряжений, которые, в свою очередь, зависят от режимов роста, в частности от температуры роста КЯ и их толщин.

Ключевые слова: дифракция X–лучей, квантово-размерные слои, деформация, градиент состава, сверхрешетки.

ABSTRACT

Safriuk N.V. X-Ray characterization of multilayered systems Al(In)GaN on polar planes of sapphire. – Manuscript.

Dissertation for the Ph.D. degree by speciality 01.04.07 – solid state physics. V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2011.

The complex of methods of X-ray high resolution diffractometry for quantify characterization of real structure and deformation state of III-nitride systems and multilayered structures is proposed and applied in present work.

The new mechanism of strain deformations relaxation for multilayer structures Al-GaN/GaN/Al₂O₃(0001), that connected with different angles of twisted of GaN unit cells with respect to c-axis of sapphire was established. It was found the interaction of deformations in the layers with density of dislocations and law of their distribution for structures grown on substrate with different thicknesses. It was shown the increase of substrate thickness leads to increasing of strain deformation and decreasing of dislocation density into layers of structure AlGaIn/GaN.

The influence of template type and residual strain in buffer layer on structure quality of superlattices (SL) AlN/GaN was established. The effect of thinning of quantum wells (QW) GaN and respectively thickening of barriers AlN was shown to be much strong for structures grown on strained AlN-template than on fully relaxed GaN-template.

It was found that for SL grown on AlN-templates the relaxation of strains occurs through formation of dislocations, while for structures on GaN-template they relaxed through cracking process. We explain these effects by influence of residual strains in system template/buffer.

After studying of multiple quantum wells (MQW) systems In_xGa_{1-x}N/GaN it was shown that strain relaxation of deformations occurs on the interface between thick buffer layer and buffer superlattice In_xGa_{1-x}N/GaN. It was established that quantum barriers GaN of active SL are under tension, but QW In_xGa_{1-x}N are under compression. For MQW systems In_xGa_{1-x}N/GaN grown by MOCVD was found the correlation between deformation state, thickness ratio of wells/barriers, indium content within QW and quantity of QW. It was shown the relaxation process starts for structures with one QW.

Keywords: X–ray diffraction, quantum layers, deformation, gradient of composition, superlattices.