

На правах рукописи



Лазарев Сергей Владимирович

СТРУКТУРНЫЕ ДЕФЕКТЫ И КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ III-НИТРИДОВ

Специальность: 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2013

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» и в Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Германия, г. Карлсруэ.

Научные руководители: Prof. Dr., executive director of synchrotron ANKA in Karlsruhe, Germany
Tilo Baumbach

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой техники и электрофизики высоких напряжений института физики высоких технологий Томского политехнического университета

Лопатин Владимир Васильевич

Официальные оппоненты: **Брудный Валентин Натанович**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики полупроводников физического факультета Томского государственного университета.

Кульков Сергей Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией института физики прочности материалов СО РАН

Ведущая организация: **Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР).**

Защита состоится «11» сентября 2013 г. в 16 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.269.02 при ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: г. Томск, ул. Белинского, 55. (комн. 13-21а)

Автореферат разослан «___» июня 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.269.02

М.В. Коровкин



ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Исследования последних десятилетий открыли перспективы применения полупроводниковых структур и приборов на основе III-нитридов, таких как AlN, GaN, InN и их твердых растворов, в различных областях светотехники и электроники. Высокая термическая, химическая и радиационная стойкость III-нитридов позволяет использовать их для изготовления приборов, работающих при повышенных температурах и в неблагоприятных условиях. Безопасность III-нитридов ставит их в выигрышное положение по сравнению с альтернативными соединениями III-арсенидами (AlAs, GaAs, InAs), а высокая теплопроводность упрощает решение проблем охлаждения рабочей области. Кроме того, активному развитию III-нитридных технологий не помешала высокая плотность дислокаций в исходном материале, достигающая 10^9 см^{-2} (так, приборы на основе GaAs перестают функционировать, когда плотность дислокаций превышает значения $10^4 - 10^5 \text{ см}^{-2}$), хотя она снижает эффективность устройств на III-нитридах.

Прямой характер межзонных переходов позволяет использовать III-нитриды для производства лазеров, светодиодов, фотоприемников и солнечных элементов. Большая ширина запрещенной зоны, особенно в видимом спектре от 0.7 эВ (InN), 3.4 эВ (GaN) до 6.0 эВ (AlN), и образование твердых растворов InGaN, AlGaN, InAlGaN обуславливают возможность значительного расширения спектрального диапазона работы изготавливаемых устройств на основе III-нитридов. Особые свойства устройств на III-нитридах могут обеспечить нано-структуры их твердых растворов, такие как квантовые точки (КТ). Наиболее распространены InGaN квантовые точки с низкой концентрацией In, выращенные на слое GaN. Одним из наиболее приемлемых методов выращивания плёнок III-нитридов является метод газовой эпитаксии из металлоорганических соединений, являющийся на сегодняшний день единственным доступным для промышленного производства. Высокое несовершенство кристаллов связано с отсутствием доступных подложек нитрида галлия, поэтому этот материал получают гетероэпитаксией. Наиболее часто используемой подложкой для эпитаксии III-нитридов является сапфир. Гетероэпитаксия приводит к возникновению механических напряжений вследствие рассогласования постоянных решеток. Различие температурных коэффициентов расширения подложки и слоя приводит к возникновению механических напряжений при охлаждении структуры от ростовой температуры (1050°C) до комнатной. Напряжения приводят к изгибу структуры и образованию структурных дефектов, являющихся безызлучательными центрами рекомбинации пар электрон-дырка, и снижающих эффективность работы светодиодных устройств на основе III-нитридов.

Еще одной проблемой является собственная поляризация III-нитридов, связанная с асимметрией элементарной ячейки, и приводящая к спонтанному эффекту Штарка. Вызванные гетероэпитаксией поля напряжений деформируют элементарную ячейку и приводят к увеличению внутреннего поляризованного поля, которое препятствует рекомбинации зарядов и образованию фотонов.

Особенно эта проблема актуальна при гетероэпитаксии InN и его твёрдых растворов, из-за наибольшего рассогласования постоянных решеток слоя и подложки. При этом эффективность приборов, работающих в области жёлто-зелёного спектра (InGaN), резко снижается.

Таким образом, улучшение характеристик приборов на основе III-нитридов зависит от структурных дефектов, что делает актуальным их исследование.

Цель работы

Исследование структурных дефектов в слоях AlGaN на сапфире, полуполярном GaN на профилированном сапфире, и изучение средних параметров решетки квантовых точек InGaN/GaN на синхротронном излучении.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. Исследовать диффузное рассеяние структурных дефектов в трёхмерном обратном пространстве.
2. Разработать способы определения плотностей одномерных и двумерных дефектов в слоях III-нитридов.
3. Определить плотности структурных дефектов в слоях AlGaN на сапфире и в полуполярном GaN на профилированном сапфире.
4. Исследовать параметры решетки квантовых точек InGaN/GaN.

Научная новизна

1. Впервые на двумерных картах обратного пространства многослойных гетероструктур твёрдого раствора AlGaN показано расщепление рефлексов $000l$ высокого порядка индекса l на четыре подрефлекса, которым сопоставлены отдельные слои AlGaN.

2. Для расчёта плотностей линейных дефектов многослойных гетероструктур AlGaN модернизирована стохастическая модель и интерпретированы диффузные рассеяния дефектов в каждом слое.

3. Впервые в трехмерном обратном пространстве записано диффузное рассеяние дефектов упаковки полуполярного GaN на профилированном сапфире.

4. Впервые стохастическим методом по диффузному рассеянию дефектов упаковки рассчитана плотность двумерных дефектов в слоях полуполярного GaN на профилированном сапфире.

5. Впервые зарегистрированы области трехмерного обратного пространства асимметричных рефлексов квантовых точек InGaN/GaN в геометрии фиксированного угла падения и показано значительное влияние изменения угла падения на диффузное рассеяние рефлекса в обратном пространстве.

Практическая ценность работы

1. Полученный закон снижения плотности дислокаций с увеличением толщины эпитаксиального слоя AlGaIn после SiN-маски позволяет выбрать ее оптимальную толщину для производства оптических структур.
2. Метод определения плотности дефектов упаковки полуполярного GaN на профилированном сапфире позволяет определять изменения плотности в процессе роста кристаллов.
3. Разработанный метод записи обратного пространства асимметричных рефлексов, позволяет определять средние значения параметров решётки квантовых точек.

Научные положения, выносимые на защиту

1. Концентрация Al в эпитаксиальном слое AlGaIn после SiN-маски больше концентрации в слое до SiN-маски на $2\pm0.3\%$, и составляет $18\pm0.8\%$.
2. Плотность краевых дислокаций в гетероструктуре AlGaIn после SiN-маски снижается с $9.8\pm1.1\cdot10^{10}\text{ см}^{-2}$ до $6.4\pm0.9\cdot10^{10}\text{ см}^{-2}$, а уменьшение плотностей дислокаций в верхнем слое AlGaIn с увеличением его толщины описывается экспоненциальными законами с показателями $n = 0.33\pm0.02$ для винтовых и $n = 0.95\pm0.02$ для краевых дислокаций.
3. Средняя плотность дефектов упаковки полуполярного $(10\bar{1}1)$ GaN равна $6.7\pm0.2\cdot10^4\text{ см}^{-1}$ и снижается до $6.4\pm0.2\cdot10^4\text{ см}^{-1}$ при применении SiN-маски, а полуполярного $(11\bar{2}2)$ GaN равна $4.5\pm0.3\cdot10^4\text{ см}^{-1}$ и снижается до $0.6\pm0.4\cdot10^4\text{ см}^{-1}$ при применении SiN-маски.
4. Разработан способ записи трёхмерного обратного пространства асимметричных рефлексов двумерным детектором с фиксированным углом падения рентгеновского луча, позволяющий определить средние параметры решетки квантовых точек InGaIn/GaN.

Достоверность полученных результатов обеспечивается комплексным подходом к решению поставленных задач, использованием комплементарных методов и методик исследования, большим объемом экспериментальных данных и применением статистических методов для их обработки, анализом литературных данных и согласованием полученных результатов с данными других авторов.

Апробация работы Основные положения диссертационной работы докладывались на международных конференциях: ICMOVPE-XVI г. Бусан, Южная Корея (<http://www.icmovpe2012.org/sub01.php>), X-TOP 2012 г. Санкт-Петербург (приглашённый доклад), iwn 2012 г. Саппоро, Япония (<http://iwn2012.jp/>), EWMOVPE 2013 Юлих, Германия (<http://www.jara.org/index.php?id=604>), ICCGE-17 Варшава, Польша (<http://science24.com/event/iccge17/>).

Публикации

По теме диссертации опубликовано 6 печатных работ, из них 4 в соавторстве, 3 работы по результатам работ международных конференций.

Личный вклад автора состоит в постановке задач исследования, планировании и проведении экспериментов, в анализе результатов экспериментальных исследований, формулировании выводов. Все результаты получены автором лично или совместно с соавторами при его непосредственном участии.

Объем и структура работы

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка цитируемой литературы. Текст диссертации содержит 113 страниц машинописного текста, включая 73 рисунков, 5 таблиц и список литературы из 68 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемых проблем; сформулированы цели исследований и определены решаемые задачи; сформулированы основные положения, выносимые на защиту; указаны научная новизна и практическая ценность работы.

В первой главе рассматриваются проблемы роста кристаллов твёрдого раствора AlGaN высокого качества на подложках сапфира. Структуры на основе твёрдого раствора AlGaN могут иметь широкое применение в области ультрафиолетового спектра. Проблема роста кристаллов AlGaN заключается в большом несоответствии параметров решетки слоя и подложки. Недавно группе из Университета Ульма, г. Ульм, Германия, удалось найти параметры роста гетероструктур, позволяющие получить относительно высокое качество слоя AlGaN [1]. В этой главе описано детальное исследование многослойных гетероструктур AlGaN на синхротроне ANKA г. Карлсруэ, Германия.

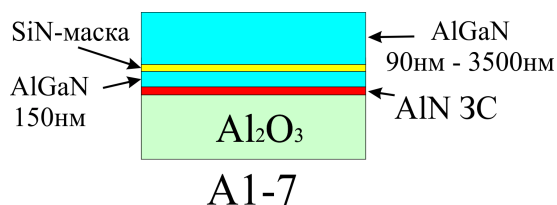


Рисунок 1. Схема многослойных гетероструктур AlGaN с толщинами верхнего слоя 90, 290, 500, 1000, 1850, 2500 и 3500 нм, соответствующих образцам А1, А2, А3, А4, А5, А6 и А7.

Для изучения влияния толщины слоя AlGaN на плотность линейных дефектов было выращено семь многослойных гетероструктур AlGaN с толщинами верхнего слоя от 90 до 3500 нм. Схема гетероструктур показана на рисунке 1. Исследование симметричных рефлексов от 0002 до 0008 выявило расщепление основного рефлекса AlGaN на подрефлексы. Последовательное изучение распределений интенсивности вдоль стержня аномального рассеяния в рефлексе 0008 для образцов с различными толщинами слоя после SiN-маски позволило соотнести каждый подрефлекс с определённым слоем многослойной гетероструктуры. На рисунке 2 показано сопоставление отдельных участков гетероструктуры с соответствующими подрефлексами.

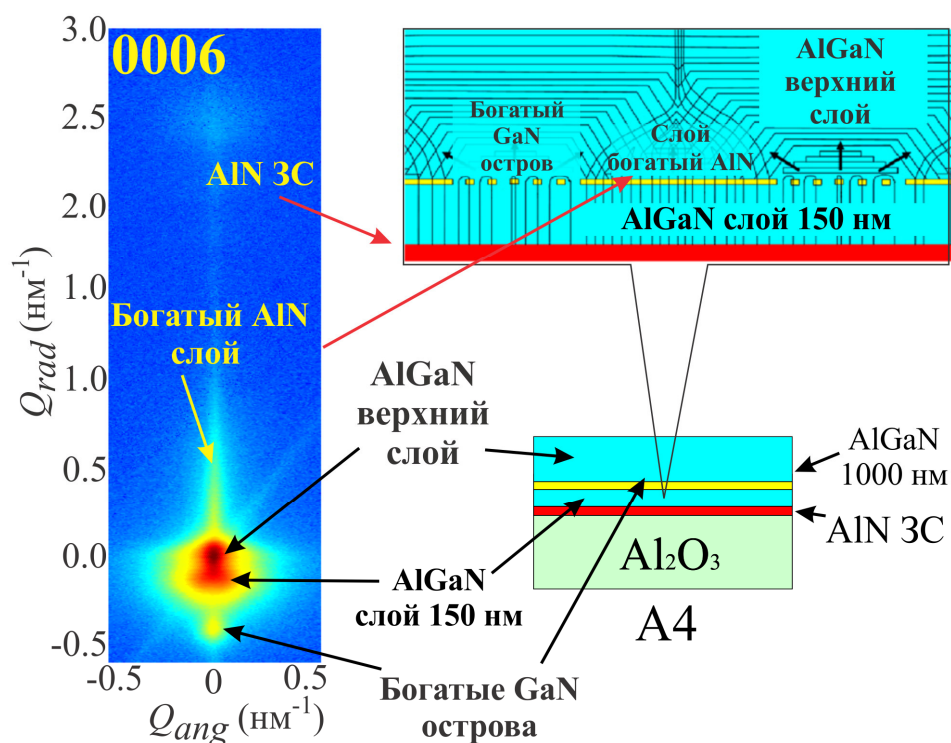


Рисунок 2. Сопоставление подрефлексов карты обратного пространства рефлекса 0006 образца A4 с соответствующими участками многослойной гетероструктуры AlGaN.

Одним из наиболее значимых фактов в исследовании многослойной гетероструктуры AlGaN было различие концентраций Al в слоях до и после SiN-маски. Различие в концентрации Al приводит к разделению рефлексов в обратном пространстве и позволяет изучить свойства каждого слоя отдельно.

Из позиций подрефлексов обратного пространства асимметричного рефлекса 30 $\bar{3}$ 8, были определены концентрации Al и значения релаксации параметров решетки слоёв до и после SiN-маски. Зависимость концентрации Al и релаксации параметров решетки от толщины верхнего слоя AlGaN приведены на рисунках 3а и 3б, соответственно. Для слоёв до и после SiN-маски, значение концентрации отличается примерно на 2%, а сами значения в среднем соответствуют 16% и 18%, соответственно. В целом, найдено уменьшение

значений концентрации с ростом верхнего слоя. Релаксация параметров решетки, в отличие от концентрации, растёт с увеличением толщины верхнего слоя AlGaN и достигает 97%.

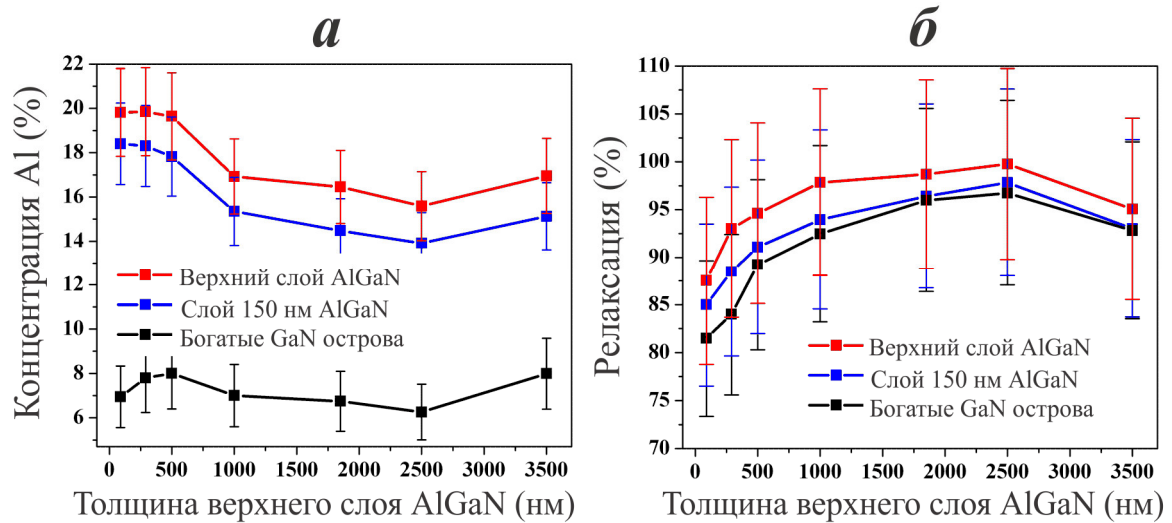


Рисунок 3. Зависимость концентрации Al, **а**, и релаксации параметров решетки слоёв AlGaN, **б**, от толщины верхнего слоя AlGaN.

На модельных образцах содержащих случайный ансамбль линейных дефектов моделировались условия дифракционного эксперимента, используя метод Монте-Карло [2], при этом были получены диффузные рассеяния дефектов в обратном пространстве. Экспериментальные карты обратного пространства симметричного рефлекса 0008 и рефлексов скользящей геометрии $10\bar{1}0$ и $11\bar{2}0$, показанные на рисунке 4, были сравнены с результатами моделирования. Входным параметром при моделировании, в случае симметричных рефлексов, была плотность винтовых дислокаций, а для рефлексов скользящей геометрии плотность краевых дислокаций.

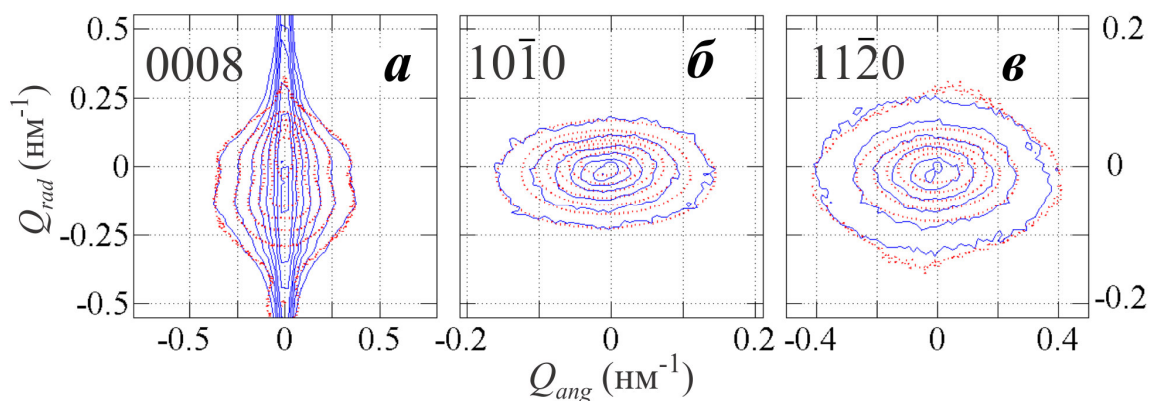


Рисунок 4. Экспериментальные (красные точки) и рассчитанные (синие линии) диффузные рассеяния линейных дефектов рефлексов 0008, **а**; $10\bar{1}0$, **б**; и $11\bar{2}0$, **в**, образца А4.

В результате моделирования были найдены плотности винтовых дислокаций (D_s) слоёв до и после SiN-маски и плотности краевых дислокаций (D_e) верхнего слоя AlGaIn для всех образцов. Зависимости плотностей винтовых и краевых дислокаций от толщины верхнего слоя приведены в двойной логарифмической шкале на рисунке 5а.

Уменьшение плотностей дислокаций в верхнем слое AlGaIn с увеличением его толщины описывается экспоненциальными законами с показателями $n = 0.33 \pm 0.02$ для винтовых и $n = 0.95 \pm 0.02$ для краевых дислокаций. Полученное в результате моделирования изменение плотности винтовых дислокаций в слое 150 нм AlGaIn, до SiN-маски, связано с влиянием диффузного рассеяния линейных дефектов слоя AlGaIn после SiN-маски, и описывается экспоненциальным законом с показателем $n = 0.18 \pm 0.03$.

Для самого тонкого образца, с толщиной верхнего слоя 90 нм, в рефлекс $11\bar{2}0$ было обнаружено разделение рефлексов слоёв AlGaIn до и после SiN-маски, что позволило рассчитать значения их плотностей краевых дислокаций. Считая плотность краевых дислокаций слоя AlGaIn до SiN-маски постоянной, была определена её эффективность, как отношение плотностей краевых дислокаций после и до SiN-маски. Зависимость эффективности маски от толщины верхнего слоя AlGaIn, показана в двойной логарифмической шкале на рисунке 5б.

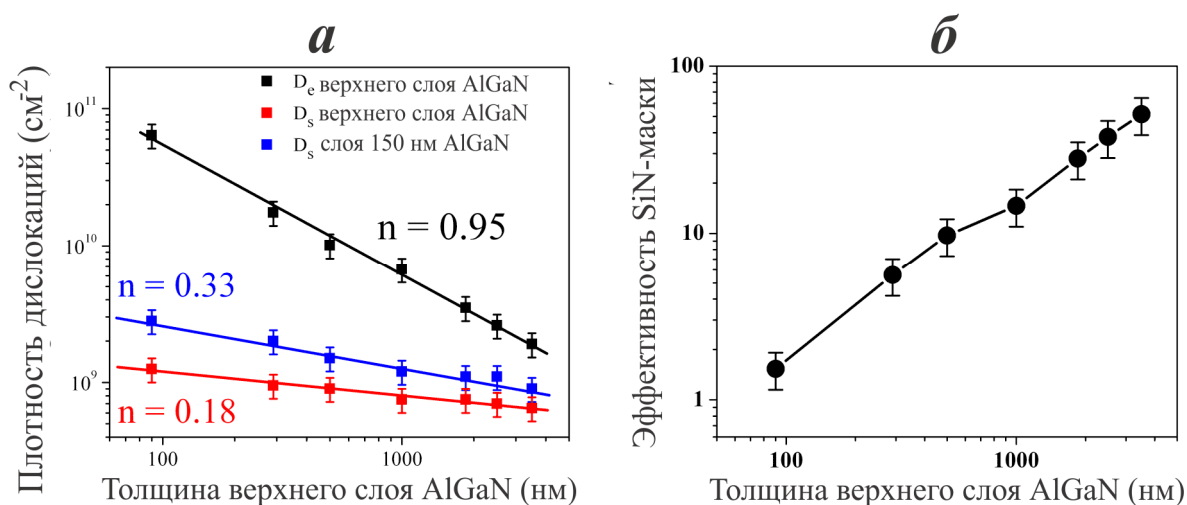


Рисунок 5. Зависимость плотностей краевых (D_e) и винтовых (D_s) дислокаций от толщины верхнего слоя AlGaIn, **а**; показатель эффективности SiN-маски в уменьшении плотности краевых дислокаций в верхнем слое AlGaIn с увеличением его толщины, **б**.

Во второй главе рассматривается проблема поляризации и спонтанного эффекта Штарка в III-нитридах. Решением проблемы является рост слоёв III-нитридов в неполярном или полуполярном кристаллографических направлениях. При этом поляризация в направлении, перпендикулярном поверхности слоя, уменьшается в случае полуполярных слоёв и равна нулю, в случае неполярного слоя. Несмотря на уменьшение поляризационного поля, увеличивается рассогласование кристаллических решеток слоя и подложки, влияние которого

приходится на направление $[0001]$ гексагональной плотной упаковки. Это приводит к образованию двумерных дефектов упаковки, которые негативно влияют на светоизлучательные свойства кристаллов. В случае полуполярных образцов III-нитридов, значения плотностей дефектов упаковки должно быть ниже, чем в случае неполярных. Таким образом, необходимо найти компромисс между уменьшением поляризационного поля, направленного вдоль нормали к поверхности образца, и увеличением числа дефектов упаковки.

Относительно недавно найден метод роста полуполярных слоёв GaN на протравленной специальным образом подложке сапфира, позволяющий значительно уменьшить плотность дефектов упаковки [3]. Травление происходит таким образом, что бы организовать рост GaN на грани (0001) под наклоном к поверхности подложки. Образовавшиеся структуры GaN смыкаются в процессе роста в однородный полуполярный слой GaN.

Для выявления влияния ориентации поверхности полуполярного GaN и осаждённой SiN-маски на плотность дефектов упаковки, были исследованы четыре образца GaN на профилированном сапфире с ориентациями поверхности $[11\bar{2}2]$ и $[10\bar{1}1]$, показанные на рисунке 6.

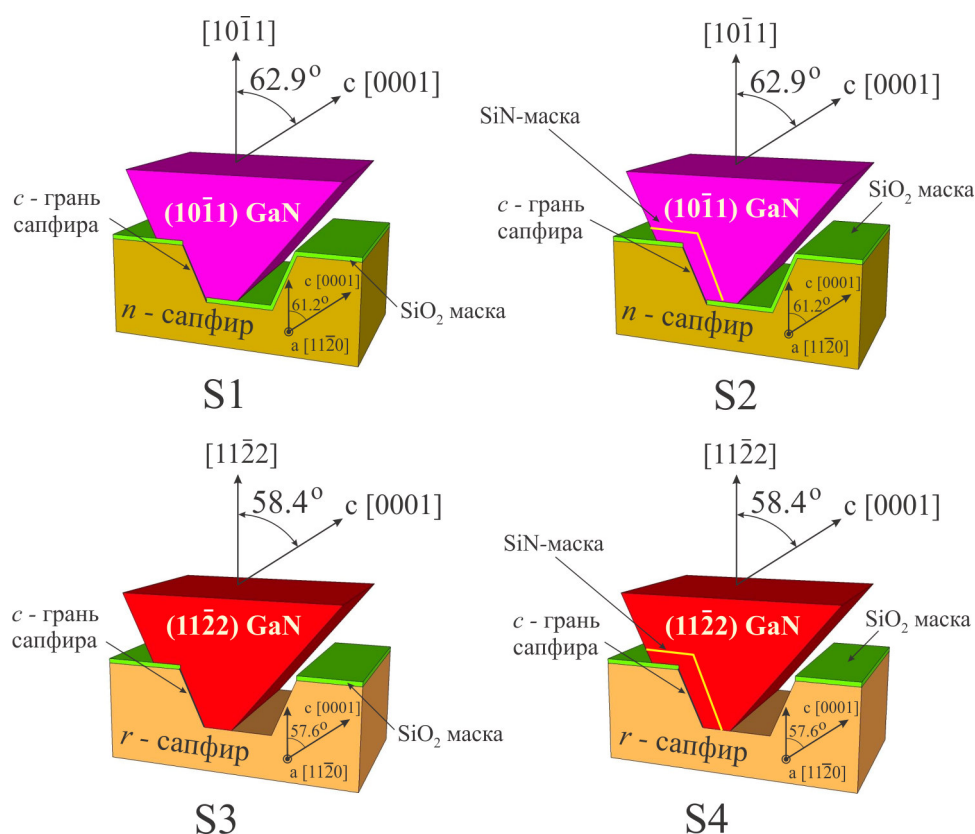


Рисунок 6. Образцы полуполярного GaN на профилированном сапфире.

Дефекты упаковки приводят к появлению диффузного рассеяния в виде «шипа» в обратном пространстве, направленного вдоль направления $[0001]$ гексагональной плотной упаковки. Не каждый рефлекс подвержен влиянию дефектов упаковки. Для полуполярных образцов направления $[11\bar{2}2]$, «шип»

дефектов упаковки не наблюдался в компланарной геометрии. Для регистрации «шипа» дефектов упаковки было необходимо записать область трёхмерного обратного пространства возле рефлекса. Трёхмерный вид диффузного рассеяния рефлекса $20\bar{2}3$ показан на рисунке 7а.

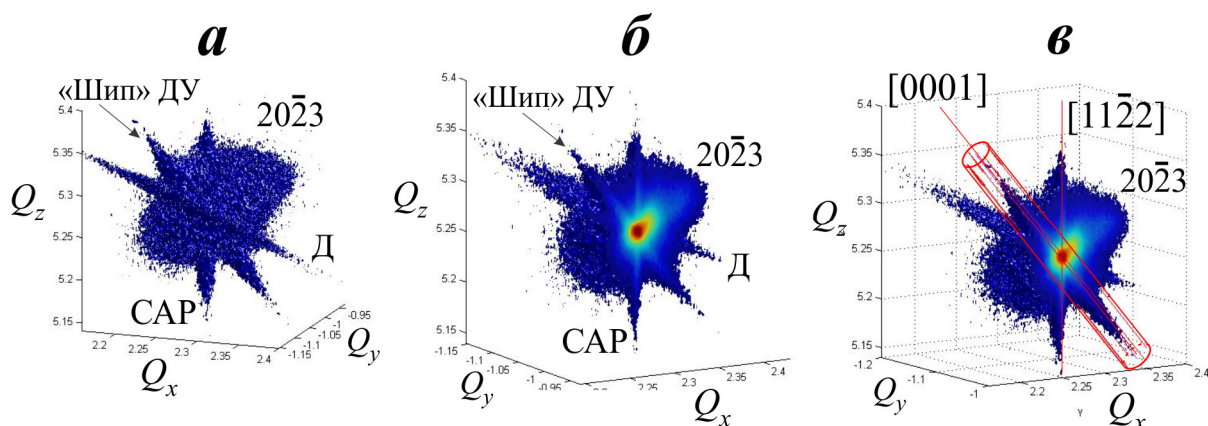


Рисунок 7. Трёхмерная карта обратного пространства рефлекса $20\bar{2}3$, образца S3, **а**; сечение диффузного облака рефлекса $20\bar{2}3$ плоскостью содержащей «шип» интенсивности дефектов упаковки (ДУ), **б**; и область интегрирования интенсивности диффузного рассеяния дефектов упаковки, **в**.

На карте можно распознать известные особенности диффузного рассеяния трёхмерного рефлекса: стержень аномального рассеяния (CAP), артефакт регистрации детектором (Д) и «шип» интенсивности дефектов упаковки в направлении $[0001]$. Рисунок 7б показывает сечение диффузного облака рефлекса плоскостью содержащей «шип» интенсивности дефектов упаковки, а рисунок 7в демонстрирует выбранную область интегрирования интенсивности диффузного рассеяния дефектов.

Из полученных трёхмерных карт обратного пространства полуполярных образцов GaN на профилированном сапфире были восстановлены распределения диффузных интенсивностей дефектов упаковки для всех образцов в рефлексе $11\bar{2}2$, не подверженном влиянию дефектов упаковки, и в рефлексе $20\bar{2}3$, подверженному влиянию дефектов упаковки. Распределения интенсивностей для рефлексов $11\bar{2}2$ и $20\bar{2}3$ показаны на рисунках 8а и 8б, соответственно. Рисунок 8в демонстрирует сравнение распределений диффузных интенсивностей дефектов упаковки в двойной логарифмической шкале.

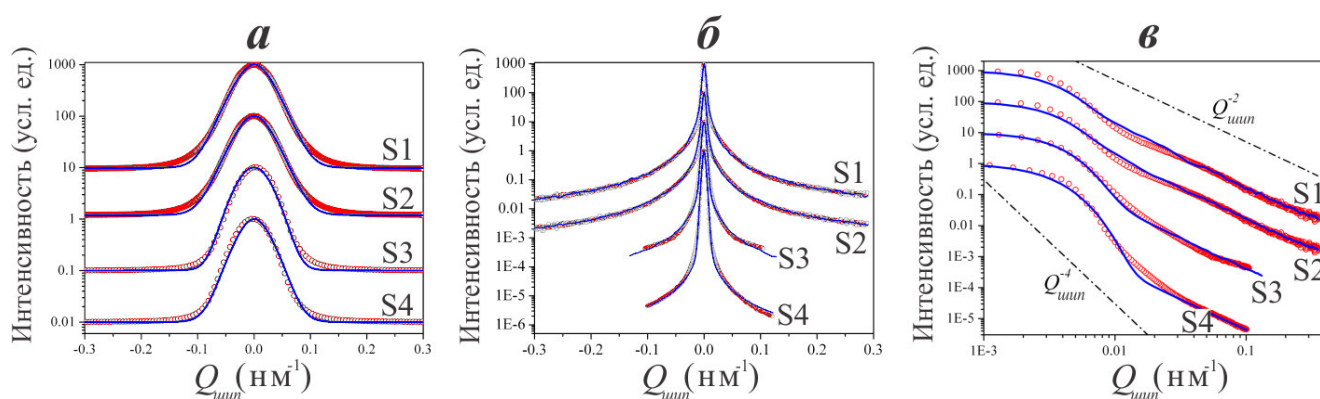


Рисунок 8. Сравнение экспериментальных (красные кругляшки) и расчетных (синие линии) данных распределения интенсивности вдоль направления $[0001]$ рефлекса $11\bar{2}2$, не подверженного влиянию дефектов упаковки, **а**; рефлекса $20\bar{2}3$, подверженного влиянию дефектов упаковки, **б**; сравнение распределений интенсивностей в двойной логарифмической шкале, **в**.

Для расчёта плотностей дефектов упаковки использовалась стохастическая модель, основанная на методе Монте-Карло [4], позволяющая рассчитать распределение интенсивности «шипа» дефектов упаковки в зависимости от их плотности. Плотности дефектов упаковки могут быть найдены путём сравнения рассчитанного распределения интенсивности с распределениями, полученными в эксперименте. Сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных так же представлены на рисунке 8.

Найденные значения плотностей дефектов упаковки приведены в таблице 1. Сравнивая значения плотностей дефектов упаковки для образцов S1 и S3, можно заключить, что плотность дефектов упаковки выше для образца S1, то есть для образца с направлением нормали $[10\bar{1}1]$. Сопоставление же образцов S1/S2 и S3/S4 демонстрирует более эффективное влияние SiN-маски в случае полуполярного $(11\bar{2}2)$ GaN на профилированном сапфире.

Таблица 1.

Плотность дефектов упаковки, полученная моделированием дифракционного эксперимента.

Образец	Средняя плотность дефектов упаковки, (10^4 см^{-1})
S1	6.7 ± 0.2
S2	6.4 ± 0.2
S3	4.5 ± 0.3
S4	0.6 ± 0.4

Полученные значения плотностей дефектов упаковки слоёв GaN на профилированном сапфире являются средними значениями на облучённом

объёме, во время эксперимента. Тем не менее, GaN на профилированном сапфире имеет определённую периодичность, а дефектов упаковки локализованы в областях, соответствующих начальным стадиям роста GaN. Соответственно, ожидается периодическое изменение плотности дефектов упаковки в направлении периодичности профилированного сапфира.

Для изучения локального распределения дефектов упаковки рентгеновский луч должен быть сфокусирован до диаметра меньшего, чем 5 $\mu\text{м}$. К сожалению, минимальный диаметр луча, достигнутый на синхротроне ANKA, на рабочей станции NANO, соответствовал 10 $\mu\text{м}$, который использовался для локального исследования дефектов упаковки. В эксперименте с микрофокусом выбиралось положение двумерного детектора, соответствующее регистрации максимальной интенсивности «шипа» дефектов упаковки рефлекса $10\bar{1}1$ образцов S1 и S2, за счёт вращения образца вокруг его нормали. Схема эксперимента показана на рисунке 9а. Вид сечения детектором диффузного облака рефлекса $10\bar{1}1$ и распределение интенсивности «шипа» дефектов упаковки, показаны на рисунке 9б.

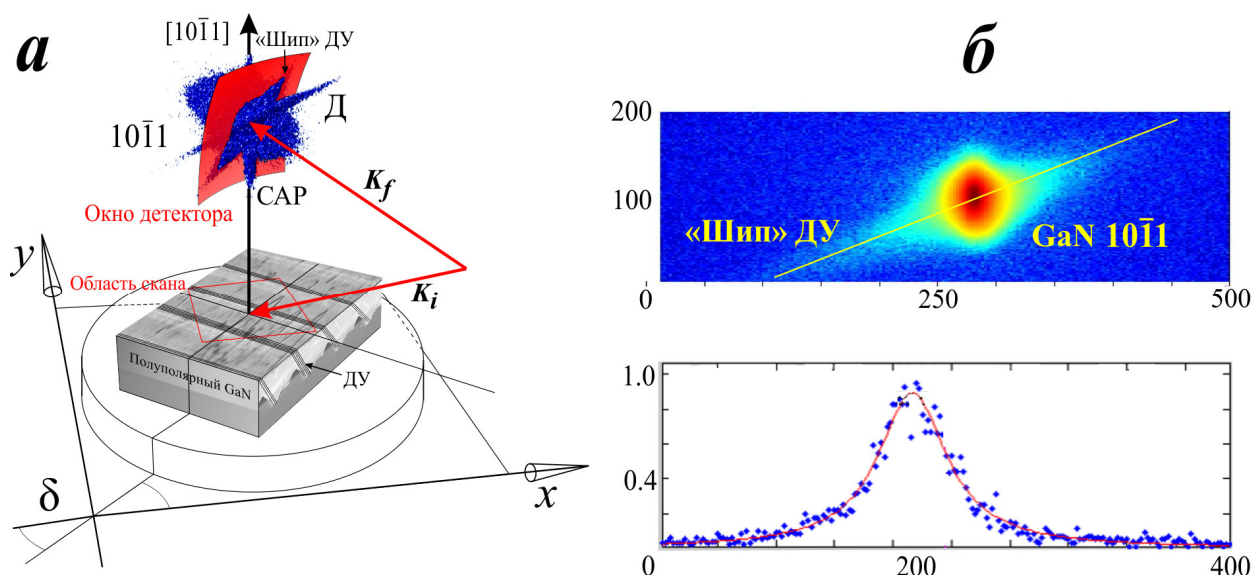


Рисунок 9. Схема эксперимента с микрофокусом и двумерным детектором, *а*; сигнал, регистрируемый детектором в рефлексе $10\bar{1}1$, и распределение интенсивности дефектов упаковки (ДУ), *б*.

Находясь в фиксированном положении в обратном пространстве, были произведены сканы поверхностей образцов S1 и S2, с шагом 10 $\mu\text{м}$, и было обнаружено периодическое изменение интенсивности диффузного рассеяния дефектов упаковки. Рассчитывая значения плотностей дефектов упаковки для каждой позиции в скане, были построены карты плотностей дефектов упаковки для образцов S1 и S2, приведенные на рисунках 10а и 10б, соответственно. Сравнение карт образцов, позволяет ещё раз подтвердить снижение плотностей дефектов упаковки за счёт применения SiN-маски. Скан центральной части образца S1 с шагом 5 $\mu\text{м}$ показан на рисунке 10в. Несмотря на относительно

большой размер рентгеновского луча, на карте наблюдается периодичность плотности дефектов упаковки в направлении, соответствующем периодичности профилированного сапфира.

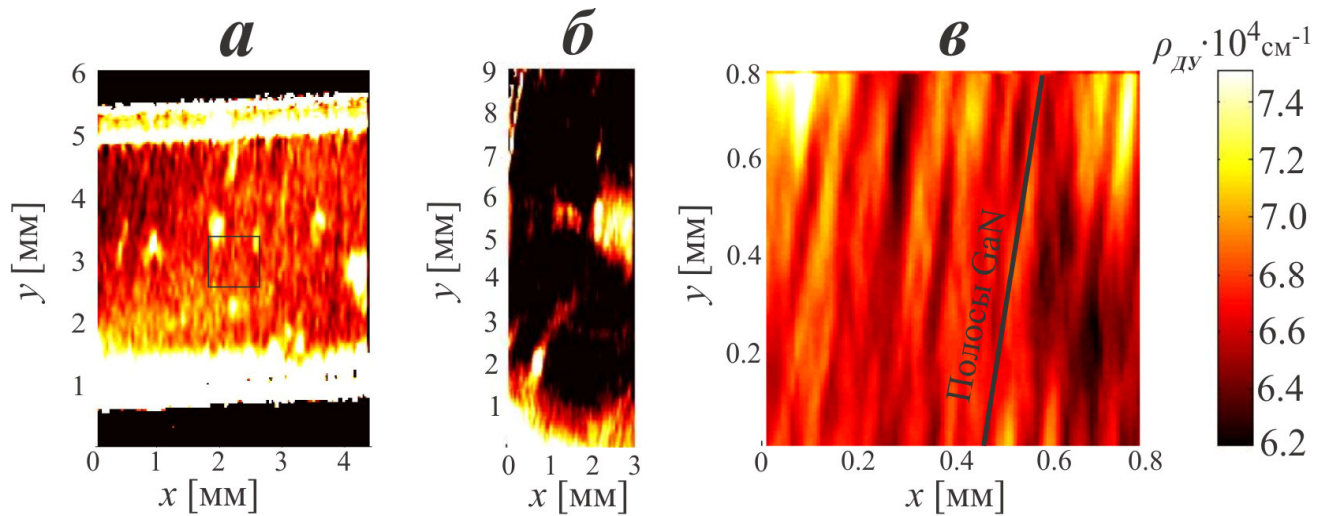


Рисунок 10. Сравнение карт плотностей дефектов упаковки ($\rho_{ДУ}$) образца S1, без SiN-маски, **а**; и образца S2, с маской, **б**; увеличенный участок скана образца S1, **в**.

В третьей главе проводится исследование InGaN квантовых точек, выращенных на слое GaN. При концентрации In порядка 10%, квантовые точки характеризуются средними размерами 10 нм в диаметре и 2 нм в высоту, при этом во время роста так же формируются InGaN острова с концентрацией In порядка 90% и средними размерами 30 нм в диаметре и 20 нм в высоту. Малый размер квантовых точек определяет низкую интенсивность рассеянного ими рентгеновского излучения. Изучение компланарных рефлексов обратного пространства выявляет сигнал от сравнительно больших InGaN островов, но не позволяет выделить сигнал квантовых точек. В подобной ситуации обычно используют дифракцию в геометрии скользящего падения рентгеновских лучей. Из-за низкой концентрации In рефлекс квантовых точек находится очень близко к рефлексу подложки, и лишь вносит асимметрию в облако диффузного рассеяния рефлекса $10\bar{1}0$, показанного на рисунке 11а, в направлении убывания координат обратного пространства. Указанная асимметрия является косвенным подтверждением наличия квантовых точек. Прямое же подтверждение наличия квантовых точек, значения средней концентрации In и релаксации параметров решетки квантовых точек могут быть получены только из асимметричного рефлекса, измеренного при сохранении режима скользящего отражения рентгеновского луча.

Трёхмерная карта обратного пространства асимметричного рефлекса $10\bar{1}3$ показана на рисунке 11б. Как и следовало ожидать, при угле падения много большем критического угла, доминирует рефлекс подложки GaN.

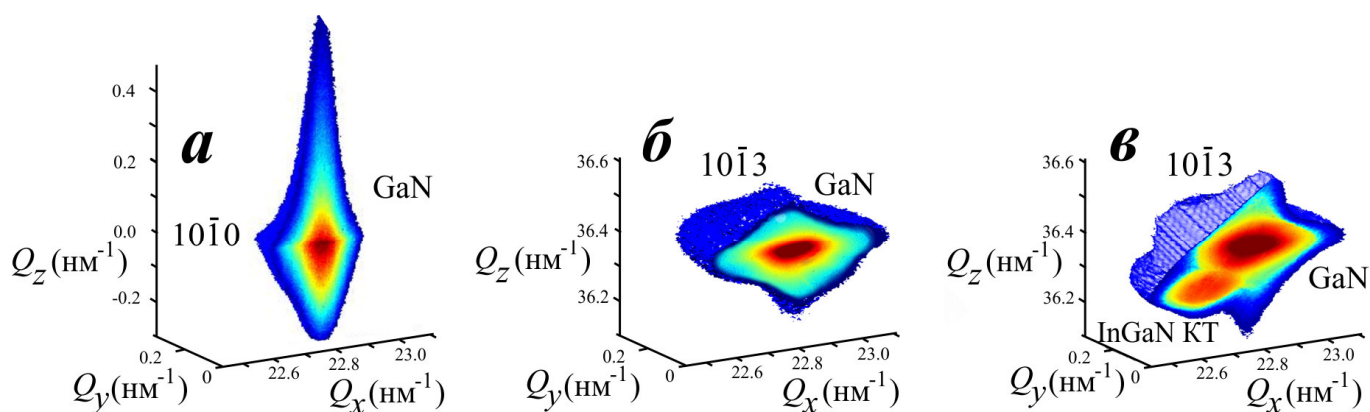


Рисунок 11. Трёхмерное диффузное рассеяние в обратном пространстве рефлекса GaN $10\bar{1}0$, **а**; асимметричного рефлекса $10\bar{1}3$, измеренного при угле падения 10° , **б**; и рефлекса $10\bar{1}3$, измеренного в геометрии фиксированного угла падения близкого к 0.3° , **в**.

Для повышения чувствительности рефлекса к квантовым точкам была предложена геометрия фиксированного угла падения, с углом падения близким к углу полного внешнего отражения рентгеновского излучения. В геометрии фиксированного угла асимметричный рефлекс с углом Брэгга, при данной энергии, меньше, чем угол наклона дифракционных плоскостей к поверхности образца, записывается двумерным детектором, при вращении образца вокруг его нормали. При этом угол падения остаётся постоянным и может быть выбран произвольно. В этом случае, информационная глубина регистрации рентгеновского излучения может варьироваться от единиц нанометров до абсорбционной глубины поглощения.

При энергии 8 кэВ критический угол для GaN составляет примерно 0.3° . Рефлекс $10\bar{1}3$, измеренный в геометрии фиксированного угла падения близкого к 0.3° , показан на рисунке 11в. Сравнение рисунков 11б и 11в показывает значительную разницу в распределении интенсивности рефлекса. При малом угле падения в геометрии фиксированного угла проявляется сигнал InGaN квантовых точек за счёт уменьшения глубины проникновения в условиях полного внешнего отражения и увеличения числа облучённых квантовых точек. Из позиции выделенного рефлекса InGaN квантовых точек были определены средняя концентрация In и релаксация параметров решетки квантовых точек, которые составили $6 \pm 1\%$ и $90 \pm 7\%$, соответственно.

Нужно отметить, что предложенный метод имеет существенные преимущества по отношению к существующим методам и таким образом, расширяет возможности рентгеновской диагностики монокристаллических материалов. Применительно к рассматриваемой задаче, геометрия фиксированного угла позволяет получить информацию о концентрации In и релаксации параметров решетки InGaN/GaN квантовых точек.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Forghani K., Klein M., Lipski F., Schwaiger S., Hertkorn J., Leute R.A.R., Scholz F., Feneberg M., Neuschl B., Thonke K., Klein O., Kaiser U., Gutt R. & Passow T. High quality AlGa_N epilayers grown on sapphire using SiN_x interlayers / K. Forghani // *J. Cryst. Growth*. — 2011. — № 315. — pp. 216-219.
2. Barchuk M., Holý V., Miljevic B., Krause B., Baumbach T., Hertkorn J. and Scholz F. X-ray diffuse scattering from threading dislocations in epitaxial GaN layers / M. Barchuk // *J. Appl. Phys.* — 2010. — № 108. — pp. 043521-043528.
3. Scholz F. Semipolar GaN grown on foreign substrates: a review / F. Scholz // *Semicond. Sci. Technol.* — 2012. — № 27. — pp. 024002.
4. Barchuk M., Holy V., Kriegner D., Stangl J., Schwaiger S. and Scholz F. Diffuse x-ray scattering from stacking faults in a-plane GaN epitaxial layers / M. Barchuk // *Phys. Rev. B*. — 2011. — № 84. — pp. 094113.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Обнаружено расщепление рефлекса 0008 обратного пространства многослойных гетероструктур твёрдого раствора AlGa_N на четыре подрефлекса, соответствующих различным слоям гетероструктуры. Запись трехмерных карт обратного пространства полуполярного GaN на профилированном сапфире позволила записать «шип» дефектов упаковки и получить распределения интенсивностей вдоль «шипа».
2. Рассчитано диффузное рассеяние линейных дефектов в слоях гетероструктуры AlGa_N до и после SiN-маски, используя модернизированную модель, основанную на методе Монте-Карло. Смоделировано распределение интенсивности вдоль «шипа» дефектов упаковки в полуполярном GaN на профилированном сапфире, используя модель Монте-Карло.
3. Для гетероструктур твёрдого раствора AlGa_N с толщинами верхнего слоя от 90 до 3500 нм найдены значения краевых и винтовых дислокаций для слоёв до и после SiN-маски. Найдены значения плотностей дефектов упаковки для полуполярного GaN на профилированном сапфире с направлениями поверхности $[11\bar{2}2]$ и $[10\bar{1}1]$, в случае наличия и отсутствия SiN-маски.
4. Разработана некомпланарная асимметричная геометрия фиксированного угла падения рентгеновского излучения, позволяющая, при угле падения близком к углу полного внешнего отражения, получить информацию о средней концентрации In и релаксации параметров решетки InGa_N квантовых точек.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Lazarev S., Bauer S., Forghani K., Barchuk M., Scholz F., and Baumbach T. High resolution synchrotron x-ray studies of phase separation phenomena and the scaling law for the threading dislocation densities reduction in high quality AlGa_N heterostructure / S. Lazarev // *Journal of Crystal Growth*. — 2013. — № 370. — pp. 51–56.

2. Lazarev S., Barchuk M., Bauer S., Forghani K., Holy V., Scholz F., and Baumbach T. Study of threading dislocation density reduction in AlGa_N epilayers by Monte Carlo simulation of high-resolution reciprocal-space maps of a two-layer system / S. Lazarev // *Journal of Applied Crystallography*. — 2013. — № 46, part 1. — pp. 120-127.
3. Helfrich M., Schroth P., Grigoriev D., Lazarev S., Felici R., Slobodskyy T., Baumbach T., Schaadt D. M. Growth and characterization of site-selective quantum dots / M. Helfrich // *Physica Status Solidi (a)*. — 2012. — № 209, issue 12. — pp. 2387–2401.
4. Schroth P., Slobodskyy T., Grigoriev D., Minkevich A., Riotte M., Lazarev S., Fohtunge E., Hud D.Z., Schaadt D.M., Baumbach T. Investigation of buried quantum dots using grazing incidence X-ray diffraction / P. Schroth // *Materials Science and Engineering B*. — 2012. — № 177, issue 10. — pp. 721–724.
5. Scholz F., Forghani K., Klein M., Klein O., Kaiser U., Neuschl B., Tischer I., Feneberg M., Thonke K., Lazarev S., Bauer S., Baumbach T., “Studies on defect reduction in AlGa_N hetero-structures by integrating an in-situ SiN interlayer / F. Scholz // *Japanese Journal of Applied Physics*. — 2013. — № 52. — pp. 08JJ07 (4 pages).
6. Barchuk M., Holý V., Lazarev S. and Bauer S. Defect determination in epitaxial a-plane Ga_N layers / M. Barchuk // *Acta Cryst.* — 2011. — № A67, C407. — pp. MS28.P07.