Программа фундаментальных исследований Президиума РАН № 27
«ОСНОВЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НАНОТЕХНОЛОГИЙ И НАНОМАТЕРИАЛОВ»

- ***Раздел Программы*: 4. Диагностика наноструктур**
- ***Научное направление программы:* 4.1 Методы диагностики с использованием рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и элементарных частиц.**
- ***Проект:* ПРИМЕНЕНИЕ EXAFS И XANES СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ВЕРТИКАЛЬНО-СОПРЯЖЕННЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ.**
- ***Организация Исполнитель*: Институт неорганической химии СО РАН им. А.В. Николаева, ИНХ СО РАН**
- ***Организации РАН – соисполнители:***
  Институт физики полупроводников СО РАН, ИФП СО РАН
  Институт ядерной физики СО РАН, ИЯФ СО РАН
- ***Научный руководитель проекта:* к.ф.-м.н. Эренбург Симон Борисович**

Цель работы

- Разработка комплекса методик с использованием спектроскопии рентгеновского поглощения (EXAFS и XANES) на базе синхротронного излучения для определения параметров электронного и пространственного строения, топологии и элементного состава полупроводниковых гетероструктур с вертикально-сопряженными квантовыми точками.
- Использование разработанных методик для характеризации трехмерных полупроводниковых систем Ge/Si и GaN/AlN при изменении условий их формирования в процессе получения структур с заданными свойствами и характеристиками.

Актуальность проекта

Наличие дискретного энергетического спектра носителей заряда, присущего структурам с квантовыми точками (КТ), делает их весьма привлекательными с точки зрения создания полупроводниковых лазеров, фотодетекторов, одноэлектронных и однофотонных приборов, элементов квантового компьютера. Особый интерес для решения вышеуказанных задач представляют структуры, содержащие упорядоченные трехмерные ансамбли КТ, «молекулы» из квантовых точек (МКТ). На пути создания таких систем с заданными свойствами особенно важным представляется определение их пространственной и электронной структуры, а далее - создание систем, содержащих КТ с одинаковыми заданными размерами, формой и резкими границами раздела. Причем, упругие деформации существенно зависят от поверхностной и межфазной диффузии, которые определяются условиями приготовления. Таким образом, изменения параметров микроструктуры полупроводниковых нанокристаллов, обусловленные упругими деформациями на границах раздела и их вариацией при изменении условий приготовления гетеросистем должны оказывать решающее влияние на электронный спектр КТ, МКТ и окружающей матрицы.

Методы исследования

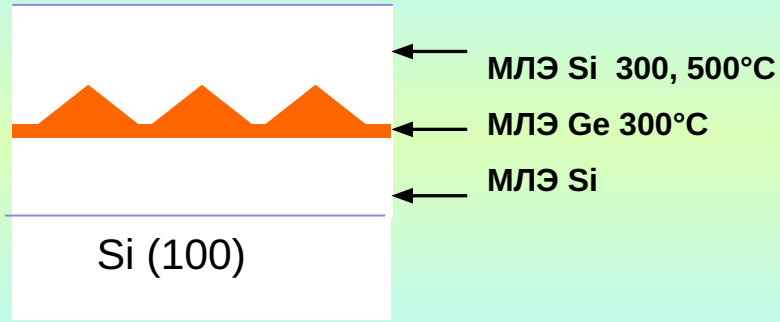
- Проект предполагает использовать методы EXAFS и XANES спектроскопии для исследования пространственной структуры, элементного состава и электронного строения упорядоченных двух- и трех- мерных гетероструктур Ge/Si, GaN/AlN, содержащих квантовые точки (КТ) и «молекулы» из квантовых точек, в зависимости от условий их приготовления. Метод EXAFS будет использован для определения параметров локальной структуры: межатомных расстояний (±0.01Å), парциальных координационных чисел (±0.1), факторов Дебая – Уоллера (±0.001Å^2).
- В рамках выполнения проекта методом молекулярно лучевой эпитаксии будут получены плотные, протяженные трехмерные структуры с вертикально сопряженными, однородными по форме и размерам наноостровками включений, упруго деформированными на границах раздела фаз.

Имеющийся научный задел

- 1. **S.B. Erenburg**, N.V. Bausk, L.N. Mazalov, A.I. Nikiforov, A.I. Yakimov. Quantum dots microstructure and energy spectrum peculiarities. Physica Scripta, 115, 2005, 439-441.
- 2. **S.B. Erenburg**, N.V. Bausk, L.N. Mazalov, A.I. Toropov, K.S. Zhuravlev, V.G. Mansurov, T.S. Shamirsaev, W. Bras, S. Nikitenko. Microscopic parameters of materials containing GaN/AlNand InAs/AlAs heterostructures. Nucl. Instr. & Meth. Phys. Res. A 543, 2005, 188-193.
- 3. **Simon Erenburg**, Nikolai Bausk, Aleksandr Nikiforov, Andrei Yakimov, Anatolii Dvurechenskii, Gennadii Kulipanov, Sergei Nikitenko. Determination of quantum dots structural parameters by XAFS spectroscopy. 27th International Conference on thePhysics of Semiconductors. Yuly 26-30, 2004, Flagstaff, Arizona, USA. Editors: J. Menendez and C.G. Van der Walle, AIP Conference Proceedings V772, Melville, New York, 2005, 585-586.
- 4. **S.B. Erenburg**, N.V. Bausk, V.E. Bausk, V.G. Mansurov, A.I. Toropov, K.S. Zhuravlev, W. Bras, S. Nikitenko. Quantum dots microstructure by XAFS spectroscopy: GaN/AlN system depending on preparation conditions. Journal of Physics: Conference Series 41 (2006) 261-266.
- 5. **С.Б. Эренбург**, Н.В. Бауск, А.В. Двуреченский, Ж.В. Смагина, А.В. Ненашев, А.И. Никифоров, В.Г. Мансуров, К.С. Журавлев, А.И. Торопов. Применение XAFS-спектроскопии для исследования микроструктуры и электронного строения квантовых точек. Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, №1, 2007, с. 31-40.

Ge квантовые точки в Si

Молекулярно лучевая эпитаксия
Условия приготовления

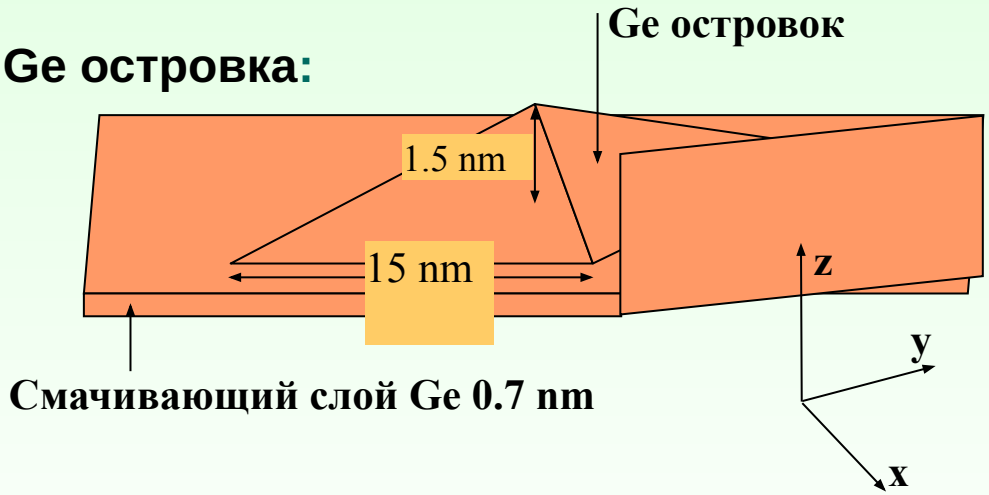


Параметры Ge нанокластеров

Размеры: 1.5 nm – высота
15 nm – основание пирамиды

- **Дисперсия по размерам: 20%**
- **Плотность нанокластеров: $3 \cdot 10^{11}$ cm^{-2}**
- **Дислокации отсутствуют**
- **Форма: пирамида с квадратным основанием**

Форма Ge островка:



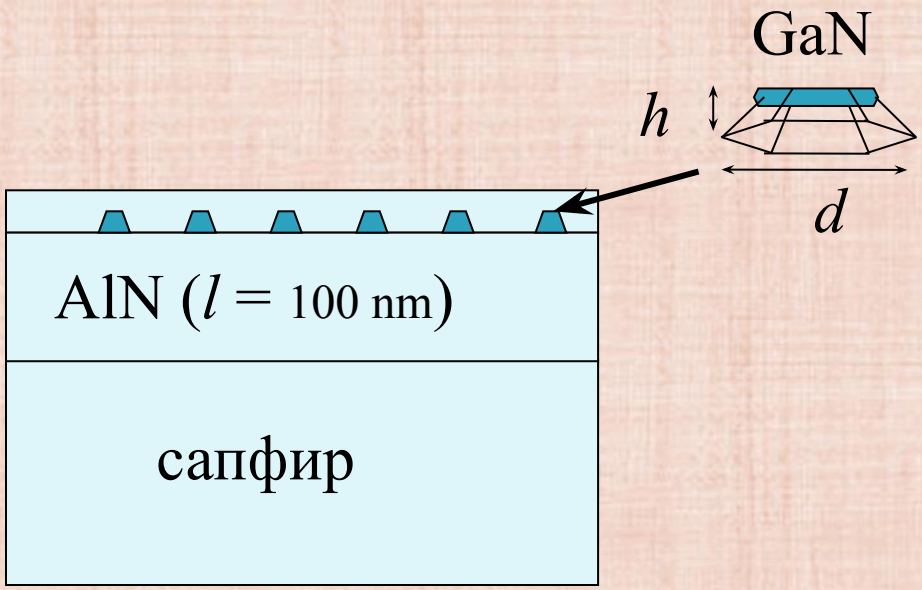
GaN квантовые точки в AlN

Методика эксперимента

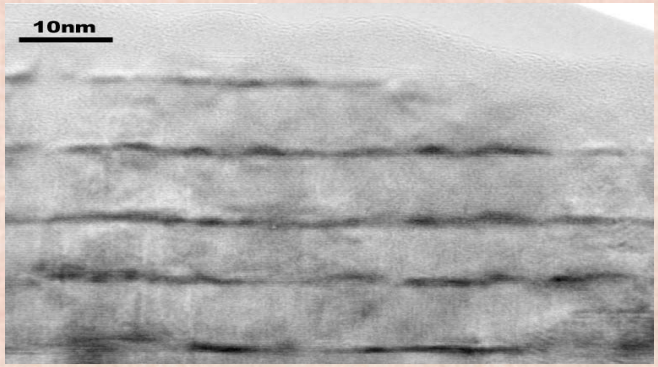
$T_{подл.}$ = 400 ÷ 600 °C - температура подложки AlN(0001) при осаждении GaN методом молекулярно лучевой эпитаксии.

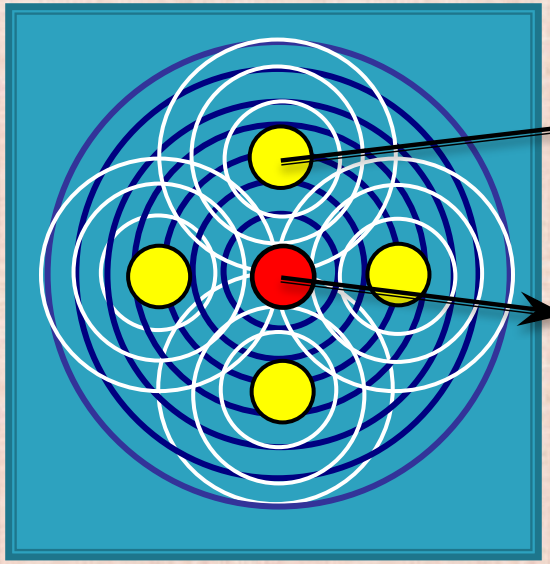
Геометрия трехмерных нанокластеров GaN

Эффективная толщина пленки GaN: 2 ÷ 5 монослоев (*ML*).
Средний размер шестигранных пирамид GaN:
основание (*d*) ~ 15 ÷ 50 Å,
высота (*h*) = 2 ÷ 4 монослоя GaN ~ 5 ÷ 15 Å .
Плотность нанокластеров не превышает 10^{11} см$^{-2}$.



TEM – фотография для многослойной структуры GaN/AlN.





Атомы окружения

Центральный поглощающий атом

Схема рассеяния фотоэлектронной волны при рентгеновском поглощении

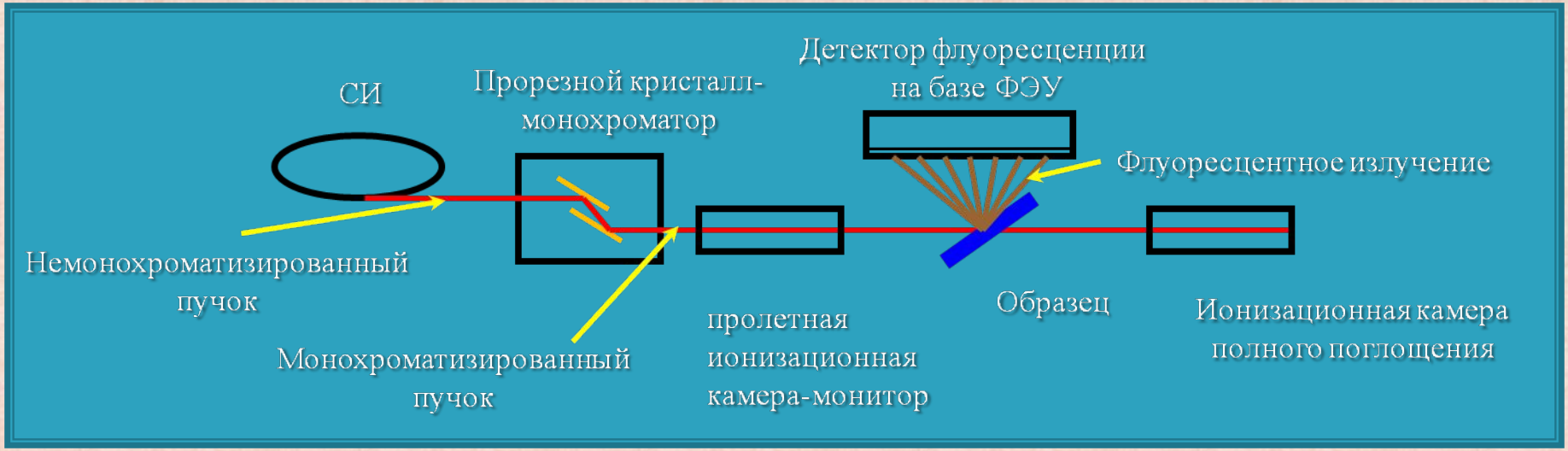
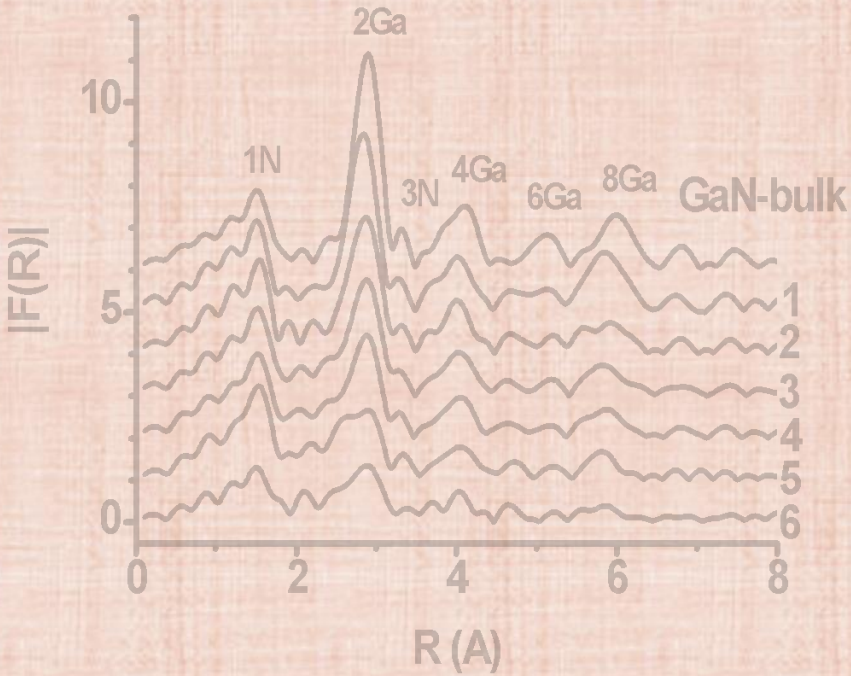
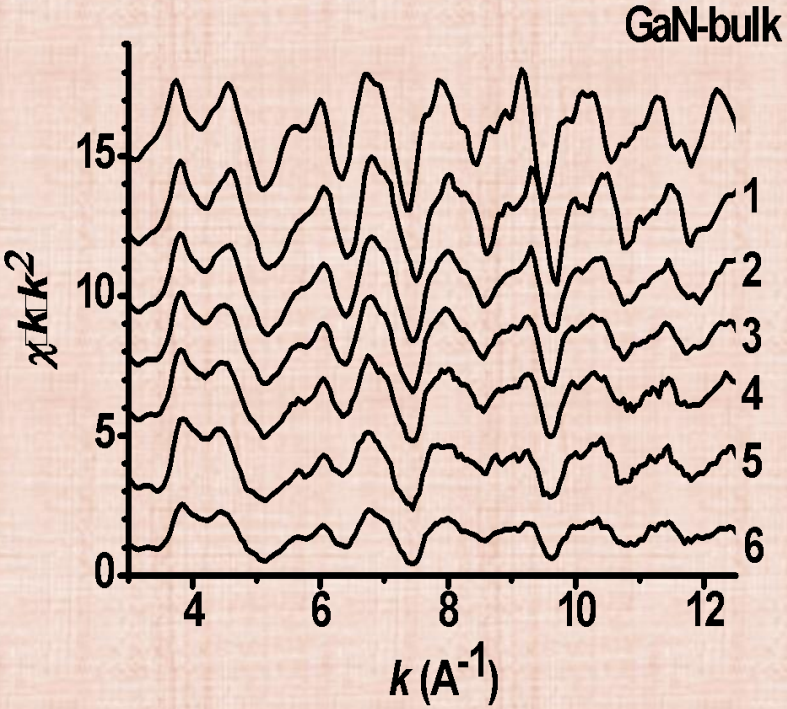


Схема эксперимента





Модули Фурье трансформант $\chi(k)k^2$ GaK EXAFS экспериментальных спектров без учета фазового сдвига для кристаллического GaN и гетероструктур GaN/AlN (Табл. 1.). Обозначения над характерными пиками соответствуют номерам координационных сфер и типам атомов окружения Ga.

Экспериментальные $\chi(k)k^2$ GaK EXAFS спектры для кристаллического GaN и гетероструктур GaN/AlN (Табл. 1).

Табл. 1. Условия приготовления и параметры микроструктуры для гетеросистем GaN/AlN: $T_{подл.}$ - температура подложки AlN при осаждении GaN; ML – эффективная толщина (число монослоев) «пленки» GaN; N_{Ga-Ga} – координационные числа, полученные в процедуре EXAFS – подгонки. Средние размеры шестигранной пирамиды GaN: основание (d) и высота (h), определенные в модели нанокластера, рассчитанной из координационных чисел N_{Ga-Ga}.

Образец	$T_{подл.}$, °C	ML	N_{Ga-Ga}	Шестигранная пирамида	
				d, Å	*h*, Å
1	600	4	10.7±0.3	0	0
2	400	5	8.7±0.3	40	10
3	400	5	7.4±0.3	25	10
4	400	3	5.9±0.3	16	8
5	500	2-3	6.2±0.3	16	8
6	400	5	4.1±0.3		

Ожидаемые результаты

- Будет установлено пространственное строение и определены изменения микроскопических параметров структуры систем Ge/Si, GaN/AlN с вертикально-сопряженными квантовыми точками при изменении условий их приготовления.
- Полученные результаты позволят установить влияние размеров квантовых точек, эффективной толщины слоев Ge и Si, GaN и AlN, количества этих слоев в «сэндвиче», температуры на разных этапах приготовления на: степень вертикального упорядочения трехмерных систем, меняющуюся топологию при переходе от двух- к трехмерным гетероструктурам, интенсивность процесса межфазной диффузии в процессе приготовления.
- Одной из основных задач проекта является установление корреляций между пространственным строением, элементным составом и электронными свойствами квантовых точек.