

**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 характеристики 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

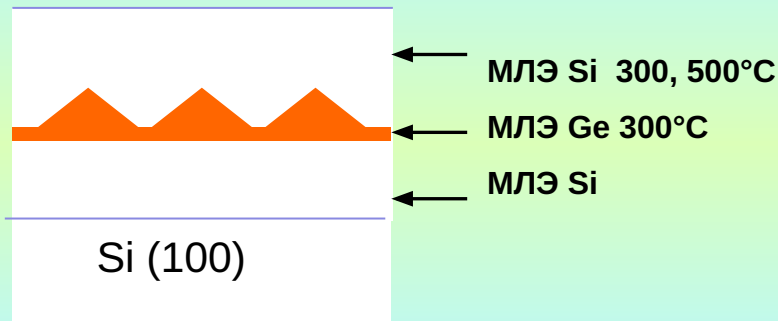
- Проект предполагает использовать методы EXAFS и XANES спектроскопии для исследования пространственной структуры, элементного состава и электронного строения упорядоченных двух- и трех- мерных гетероструктур Ge/Si, GaN/AlN, содержащих квантовые точки (КТ) и «молекулы» из квантовых точек, в зависимости от условий их приготовления. Метод EXAFS будет использован для определения параметров локальной структуры: межатомных расстояний ($\pm 0.01 \text{ \AA}$), парциальных координационных чисел (± 0.1), факторов Дебая – Уоллера ($\pm 0.001 \text{ \AA}^2$).
- В рамках выполнения проекта методом молекулярно лучевой эпитаксии будут получены плотные, протяженные трехмерные структуры с вертикально сопряженными, однородными по форме и размерам наноструктурами 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/AlN and 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 the Physics of Semiconductors. July 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

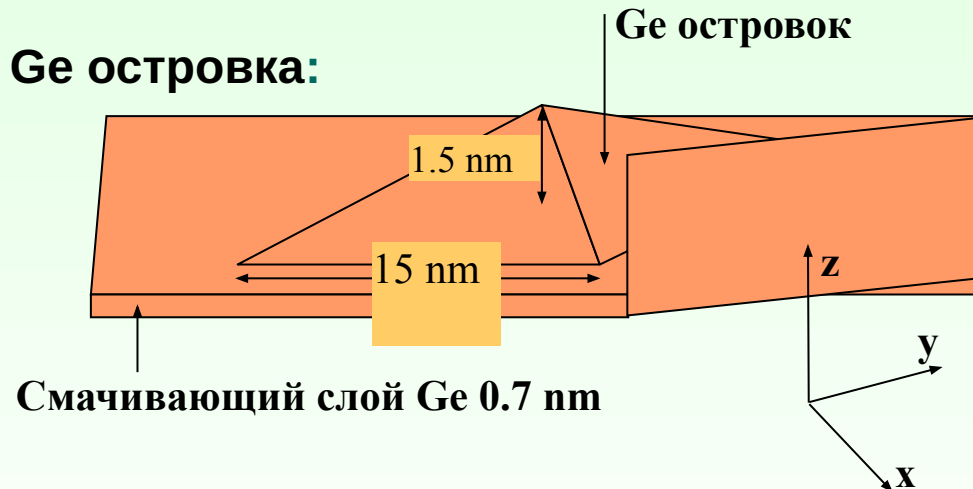
Молекулярно лучевая эпитаксия Условия приготовления



Параметры Ge нанокластеров

- Размеры: 1.5 nm – высота
15 nm – основание пирамиды
- Дисперсия по размерам: 20%
 - Плотность нанокластеров: $3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$
 - Дислокации отсутствуют
 - Форма: пирамида с квадратным основанием

Форма Ge островка:



GaN квантовые точки в AlN

Методика эксперимента

$T_{\text{подл.}} = 400 \div 600 \text{ }^\circ\text{C}$ - температура подложки AlN(0001) при осаждении GaN методом молекулярно лучевой эпитаксии.

Геометрия трехмерных нанокластеров GaN

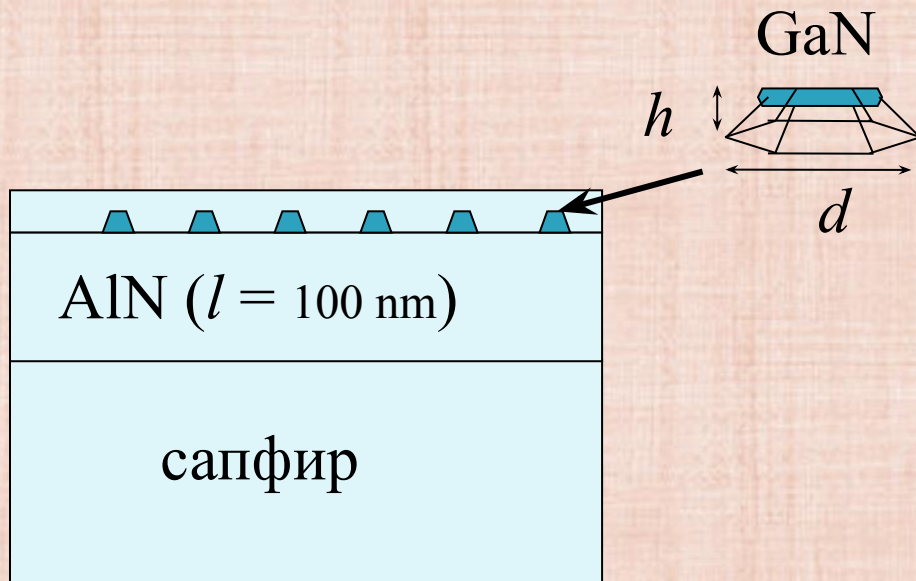
Эффективная толщина пленки GaN: $2 \div 5$ монослоев (ML).

Средний размер шестигранных пирамид GaN:

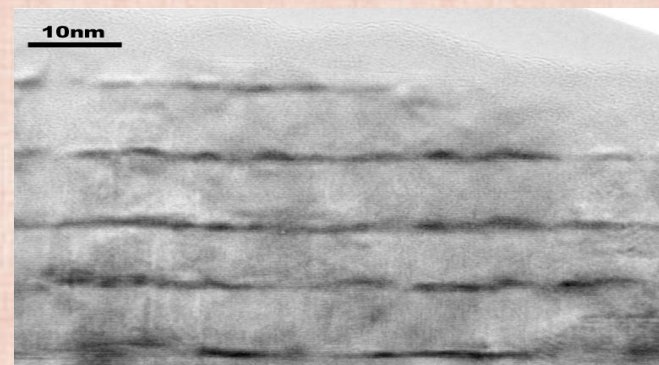
основание (d) $\sim 15 \div 50 \text{ \AA}$,

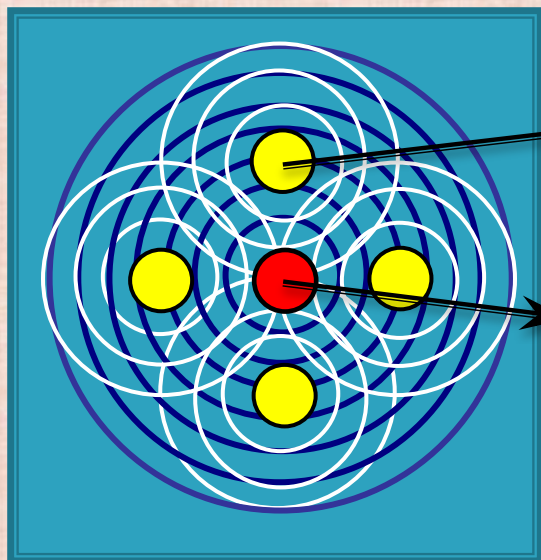
высота (h) = $2 \div 4$ монослоя GaN $\sim 5 \div 15 \text{ \AA}$.

Плотность нанокластеров не превышает 10^{11} cm^{-2} .



ТЕМ – фотография для многослойной структуры GaN/AlN.





Атомы окружения

Центральный поглощающий атом

Схема рассеяния фотоэлектронной волны при рентгеновском поглощении

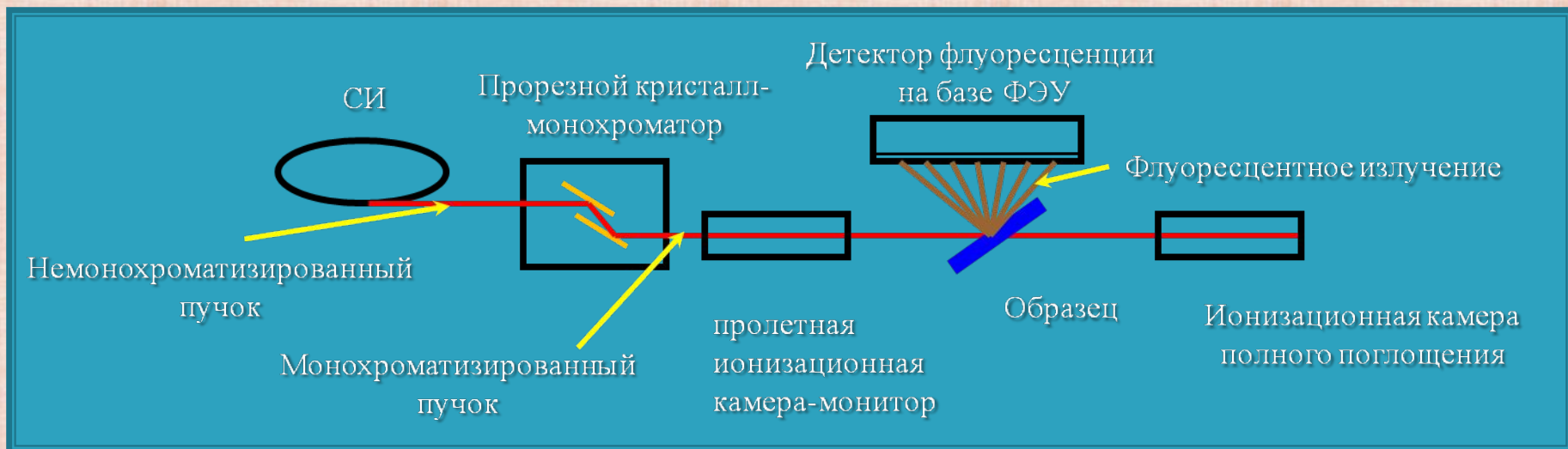
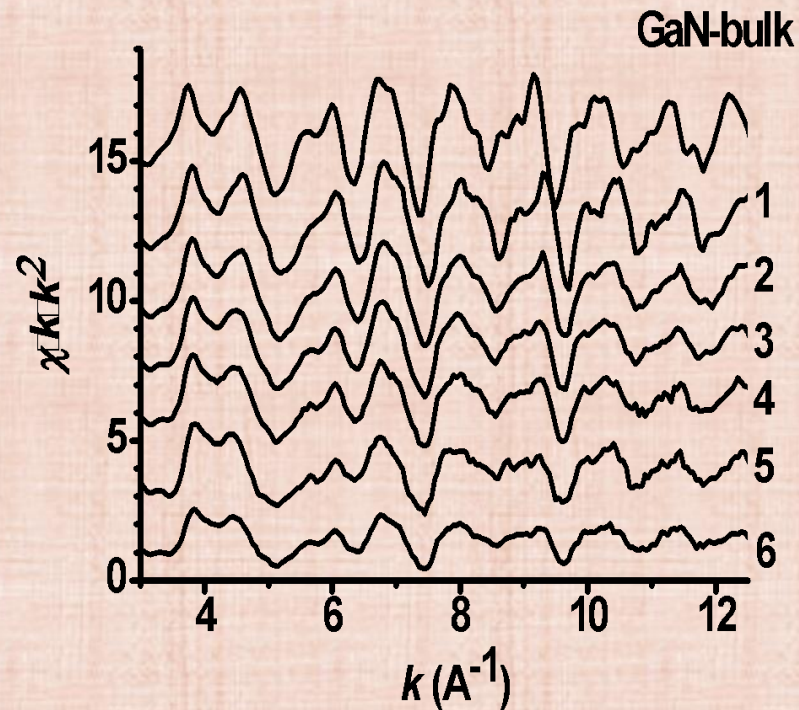
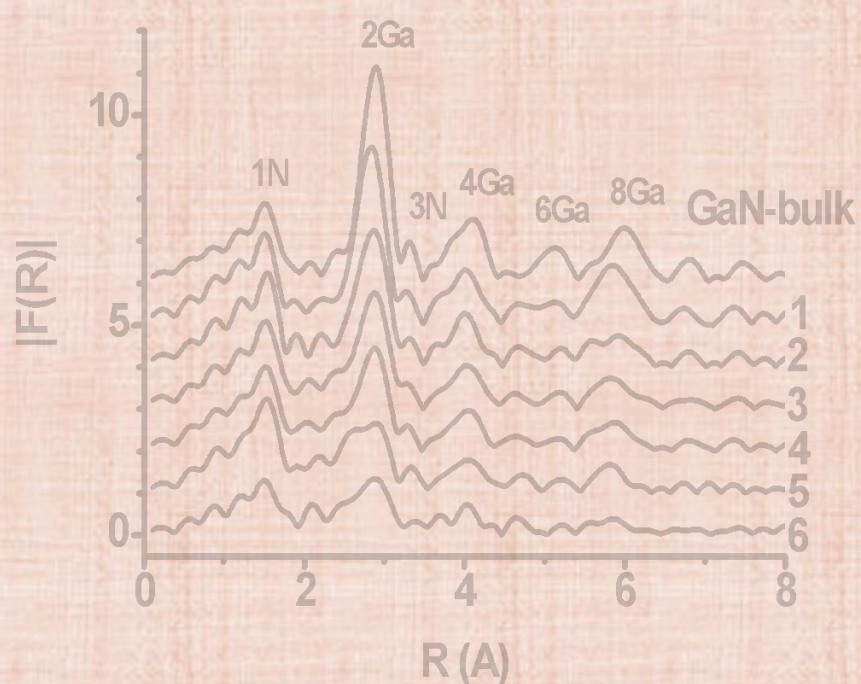


Схема эксперимента



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: $T_{\text{подл.}}$ - температура подложки AlN при осаждении GaN; ML – эффективная толщина (число монослоев) «пленки» GaN; $N_{\text{Ga-Ga}}$ – 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 $N_{\text{Ga-Ga}}$

Образец	$T_{\text{подл.}}, ^\circ\text{C}$	ML	$N_{\text{Ga-Ga}}$	Шестигранная пирамида	
				$d, \text{\AA}$	$h, \text{\AA}$
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.