

Моделирование и экспериментальное исследование AlGaAs/GaAs-структур для реализации ИК детекторов

© А.С. Дашков,^{1,2} С.А. Хахулин,¹ Н.А. Костромин,^{1,2} Д.А. Барыкин,¹ О.С. Комков,¹ Е.В. Пирогов,² М.С. Соболев,² Л.И. Горай,^{1,2,3,4} А.Д. Буравлев^{1,3,5}

¹ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“ им. В.И. Ульянова (Ленина), 197022 Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж.И. Алферова РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия

³ Институт аналитического приборостроения РАН, 198095 Санкт-Петербург, Россия

⁴ Институт космических исследований РАН, 117997 Москва, Россия

⁵ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: dashkov.alexander.om@gmail.com

Поступило в Редакцию 27 октября 2025 г.

В окончательной редакции 13 декабря 2025 г.

Принято к публикации 15 декабря 2025 г.

Проведено теоретико-экспериментальное исследование структур AlGaAs/GaAs с множественными квантовыми ямами, предназначенных для фотодетекторов среднего инфракрасного диапазона, работающих при комнатной температуре. На основе теоретических оценок были сформулированы первичные требования к составу, толщинам и степени легирования слоев исследуемых структур. Энергетическая электронная структура, экспериментально восстановленная методом фотоотражения, использована для уточнения расчетной модели, реализованной на базе метода конечных элементов. Это позволило воспроизвести зонную диаграмму и энергетические уровни с высокой точностью, а также определить параметры, необходимые для расчета спектров поглощения. На их основе были построены спектры поглощения для различных концентраций легирующих примесей, показавшие усиление пика поглощения с увеличением уровня легирования.

Ключевые слова: детекторы инфракрасного излучения, структуры AlGaAs/GaAs, квантово-размерные гетероструктуры, квантовые ямы, межподзонные переходы, фотоотражение, зонная диаграмма.

DOI: 10.61011/JTF.2026.04.62666.297-25

Введение

Современные детекторы среднего инфракрасного (ИК) диапазона ($3\text{--}8\text{ }\mu\text{m}$) играют ключевую роль в различных областях, включая спектроскопию, системы безопасности, медицинскую диагностику и космические исследования [1]. Одним из наиболее перспективных направлений разработки фотодетекторов среднего ИК диапазона является использование квантово-размерных структур AlGaAs/GaAs, что обусловлено возможностью точного управления энергетическим спектром посредством выбора толщины, состава и степени легирования слоев, а также их повышенной температурной стабильностью, радиационной стойкостью по сравнению с детекторами на основе HgCdTe [1] и совместимостью с промышленными технологиями выращивания гетероструктур [2,3].

Физические принципы работы детекторов среднего ИК диапазона основаны на межподзонных переходах, что обуславливает необходимость детального теоретического моделирования и экспериментального исследо-

вания электронной структуры и кинетических процессов при реальных рабочих условиях [3–5]. В настоящей работе реализован комплексный подход к расчету и анализу характеристик детекторов, включающий численное моделирование с использованием различных теоретических моделей и экспериментальную верификацию на выращенных образцах рассматриваемых структур.

Актуальность исследования связана с необходимостью разработки подхода для создания структур детекторов среднего ИК диапазона, обеспечивающих высокую эффективность и устойчивую работу в широком диапазоне температур. Проведенная численная оптимизация конструкции и сопоставление расчетных данных с экспериментальными результатами позволили подтвердить адекватность используемых моделей и применимость представленного комплексного метода для проектирования различных приборов на основе квантово-размерных гетероструктур. Полученные результаты могут быть положены в основу разработки ИК детекторов нового поколения с улучшенными характеристиками для ряда практических применений.

1. Методы теоретических исследований и численного моделирования

Электронная структура квантовых ям AlGaAs/GaAs рассчитывалась с использованием нескольких подходов численного моделирования: метода стрельбы в рамках приближения эффективной массы, метода конечных элементов, а также на основе решения трансцендентного уравнения. В первых двух случаях учитывались непараболичность зонной структуры и влияние внешнего электрического поля. Корректность применения указанных методов была предварительно проверена на примере расчетов квантово-каскадных структур, одиночных квантовых ям и сверхмногопериодных сверхрешеток (СР) [6–8].

Реализация вычислительных алгоритмов осуществлялась на языках Python 3.10 и C++ с использованием библиотек SciPy [9] и NumPy [10] для решения систем уравнений и задач на собственные значения. Особое внимание уделялось обеспечению высокой точности вычислений. Шаг дискретизации и параметры расчета подбирались для обеспечения численной устойчивости и минимизации ошибок аппроксимации. Для оценки устойчивости решения при использовании метода стрельбы применялись стандартные численные критерии сходимости: контроль максимальной невязки граничных условий и проверка устойчивости решения при варьировании шага дискретизации и начальных условий. В обоих случаях допустимый уровень невязки не превышал 10^{-6} . Эти критерии позволяют надежно отслеживать сходимость и исключать нефизические собственные состояния. Для решения, получаемого методом конечных элементов, устойчивость также контролировалась через максимальную величину невязки при изменении шага дискретизации; для итоговой сетки она не превышала 10^{-6} .

Данные критерии точности соответствовали требованиям, предъявляемым при расчетах квантово-каскадных структур [6–8]. В случае отсутствия сходимости при заданных условиях решение считалось не найденным, что исключало использование недостоверных данных в дальнейшем анализе.

2. Экспериментальные исследования

Для экспериментальной характеристики электронных и оптических свойств квантовых ям AlGaAs/GaAs были использованы методы спектроскопии фотоотражения (ФО) и фотолюминесценции (ФЛ). ФО представляет собой бесконтактный метод модуляционной оптической спектроскопии. В данном методе на образец направлено два излучения: из спектрометра, изменяющееся в широком диапазоне энергий, и лазерное с энергией фотонов, превышающей ширину запрещенной зоны исследуемых структур. При помощи лазера, прерываемого

на заданной частоте, осуществляется модуляция приповерхностного электрического поля. Это в конечном итоге позволяет выделять на фоне всего отраженного излучения те спектральные особенности, которые связаны с резонансным поглощением света в полупроводниках [11]. Подробное описание принципа работы метода представлено в [7]. В качестве источника лазерного излучения в работе использовался высокостабильный лазер DDS-405 с длиной волны 405 nm. Этот же лазер был использован в качестве источника возбуждения структур при измерении спектров ФЛ.

3. Экспериментальные образцы

Исследуемые структуры с множественными квантовыми ямами (МКЯ) были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках GaAs (100) *n*-типа проводимости. В качестве буферного слоя использовался слой GaAs толщиной 200 nm, легированный примесью *n*-типа до концентрации носителей $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Активная область включала 50 периодов, каждый из которых состоял из квантовой ямы GaAs толщиной 4 nm и барьера $\text{Al}_{0.284}\text{Ga}_{0.716}\text{As}$ толщиной 50 nm. Слои квантовых ям GaAs дополнительно легировались примесью *n*-типа до концентрации носителей $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Параметры слоев контролировались *in situ* с использованием дифракции быстрых электронов, а значения толщин были верифицированы *ex situ* по данным высокоразрешающей рентгеновской дифракции [12].

4. Результаты и обсуждения

4.1. Выбор и оптимизация параметров структуры МКЯ

Разработка активной области детектора ИК излучения проводилась поэтапно. В качестве целевой системы материалов была выбрана гетеропара $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, поскольку она позволяет выращивать практически ненапряженные гетеропереходы и тем самым создавать качественные многослойные гетероструктуры, необходимые для получения высокоэффективных светоизлучающих и поглощающих устройств. В качестве исходной основы был использован дизайн, описанный в литературе [4]. Дальнейшая модернизация структуры выполнена с применением методов численного моделирования, что позволило уточнить геометрию и оптимизировать параметры активной области для повышения теоретической эффективности работы конечного детектора, в данном случае коэффициента поглощения.

На этапе моделирования и оптимизации конструкции расчеты были выполнены тремя различными численными методами: модифицированным методом стрельбы [6,13], методом конечных элементов [14] и приближенным численным решением трансцендентного уравнения [15]. Практически значимые и воспроизводимые

результаты удалось получить лишь в последнем случае. Ограниченную применимость первых двух подходов можно объяснить рядом факторов. В частности, модифицированный метод стрельбы, часто используемый при расчете квантово-каскадных лазеров, детекторов [16], а также сверхрешеточных и сверхмногопериодных сверхрешеточных структур [7,8], в рассматриваемой задаче показал отсутствие сходимости. Ключевой особенностью исследуемой конструкции являлось наличие толстых барьеров (по сравнению с толщиной ямы), что, по мнению авторов, оказывало наибольшее влияние на точность вычислений в данном методе. Как отмечалось ранее [17], присутствие толстых слоев, особенно вблизи начальной точки расчета, приводит к усилению экспоненциально растущей компоненты решения, что, в свою очередь, ухудшает точность и может приводить к расходимости итоговых результатов. Это является следствием из формулы (1) для расчета волновой функции $\psi_c(z)$ при заданном значении энергии E и шаге Δz [17]:

$$\begin{aligned} \psi_c(z + \Delta z) = & \left(\left[(2(\Delta z)^2)/\hbar^2 (eV_c(z) - E) \right. \right. \\ & + 1/(m^*(z + \Delta z/2, E)) + 1/(m^*(z - \Delta z/2, E)) \left. \right] \psi_c(z) \\ & \left. - 1/(m^*(z - \Delta z/2, E)) \psi_c(z - \Delta z) \right) m^*(z + \Delta z/2, E), \end{aligned} \quad (1)$$

где Δz — шаг расчетной сетки, V_c — профиль потенциала зоны проводимости, m^* — эффективная масса электронов, e — заряд электрона, z — координата вдоль оси роста структуры.

При расчетах методом конечных элементов основная проблема, по-видимому, связана с недостаточной точностью дискретизации: исходная сетка оказалась слишком грубой, а ее уточнение приводило к росту вычислительной трудоемкости и делало расчеты практически нецелесообразными для целей первичного проектирования подобных структур. В то же время подход, основанный на приближенном решении трансцендентного уравнения, позволил получить первичную оценку параметров структуры. Его эффективность объясняется рядом причин: метод включает существенно меньше входных параметров и, по своей сути, наиболее близок к аналитическому, так как не требует построения полной энергетической диаграммы структуры детектора, ограничиваясь лишь расчетом ключевых энергетических характеристик и соотношением эффективных масс носителей [15]. Кроме того, расчеты этим методом могут выполняться на обычном ПК и требуют незначительных затрат компьютерного времени.

Первоначально структура проектировалась с учетом заданной длины волны излучения в предположении реализации переходов из связанного состояния в континуум (bound-to-continuum) [4]. Однако в процессе численного моделирования и анализа опубликованных данных [1,18] нами было установлено, что схема переходов между связанным и другим связанным или квази-связанным

(вблизи края ямы) состоянием обладает рядом существенных преимуществ. В связи с этим в дальнейших расчетах была использована именно конфигурация со связанным и квази-связанным уровнем, достоинства которой изложены в разделе обсуждения результатов численного моделирования спектра поглощения.

В результате расчета (при $T = 300$ K) удалось определить целевое значение мольной доли алюминия, составляющее 0.284, а также положение дискретного квантового уровня, обеспечивающего переход из связанного состояния в квази-связные и состояния континуума с энергией перехода 0.145 eV ($8.5 \mu\text{m}$). Для верификации полученных теоретических результатов были проведены экспериментальные исследования зонной диаграммы рассматриваемой структуры методами ФО и ФЛ.

4.2. Экспериментальный анализ энергетического спектра

На рис. 1 представлены спектры ФО (сверху) и ФЛ (снизу) МКЯ GaAs/Al_{0.284}Ga_{0.716}As с шириной 4 nm и толщиной барьеров 50 nm.

В спектре ФО наблюдаются интенсивные осцилляции в высокоэнергетической области, связанные с сигналом от барьерного слоя AlGaAs. Наблюдаемая при 1.78 eV спектральная линия соответствует ширине запрещенной зоны (E_g) барьерных слоев Al_{0.284}Ga_{0.716}As ($E_g = 1.78$ eV [19]), что находится в полном согласии с технологически заданными характеристиками. В низкоэнергетической области в диапазоне 1.5–1.6 eV наблюдается два сигнала, обозначенные на рисунке как $e1-hh1$ и $e1-lh1$. Спектральная линия при энергии 1.535 eV соответствует межзонному переходу $e1-hh1$ между первым электронным уровнем ($e1$) и первым уровнем тяжелых дырок ($hh1$). При энергии 1.562 eV наблюдается переход $e1-lh1$ между первым электронным уровнем и первым уровнем легких дырок. Полученные данные

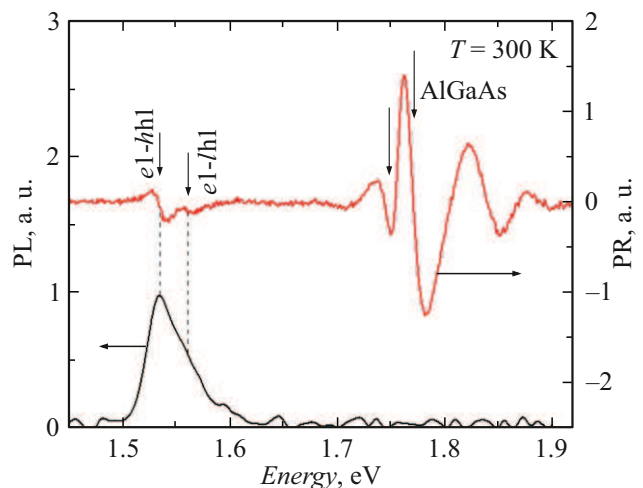


Рис. 1. Спектры ФО (сверху) и ФЛ (снизу) образца МКЯ GaAs/Al_{0.284}Ga_{0.716}As (4 nm/50 nm).

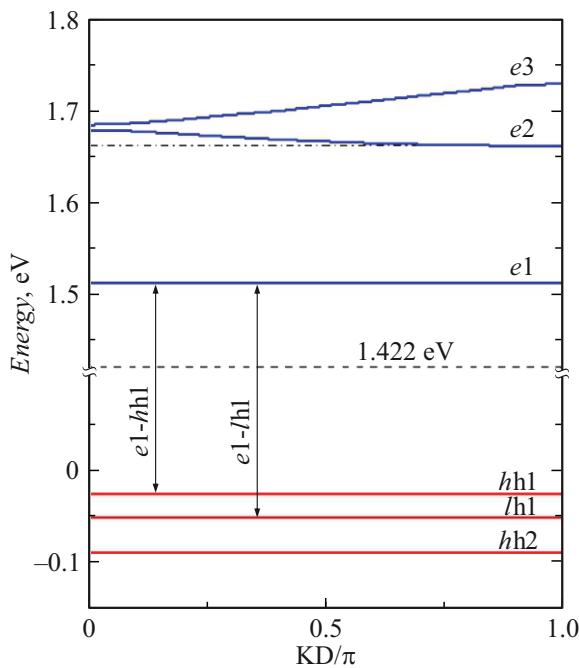


Рис. 2. Зонная структура МКЯ GaAs/AlGaAs (4 nm/50 nm).

коррелируют с измерениями спектров ФЛ, где так же наблюдаются обозначенные переходы. При энергии 1.75 eV в спектре ФО наблюдается особенность, которую можно интерпретировать как оптический переход между вторым уровнем тяжелых дырок $hh2$ и вторым электронным уровнем $e2$, расположенным выше потенциала барьера для электронов и относящимся к несвязанным состояниям [20]. Данные эксперимента находятся в полном согласии с зонной структурой рассматриваемых квантовых ям (рис. 2), рассчитанной при помощи kp -метода в рамках восьмизонной модели Кейна [7]. На основе проведенного анализа была рассчитана энергия межподзонного перехода между уровнями $e1$ и $e2$, определяющая длину волны поглощения исследуемой структуры; полученное значение составило 0.149 meV.

4.3. Результаты численного моделирования

Поскольку коэффициент поглощения является одной из ключевых характеристик при создании фотодетекторов, были выполнены дополнительные расчеты для его количественной оценки. На основе экспериментально определенной электронной структуры (разрыв зоны проводимости, положение основного электронного энергетического уровня) была уточнена модель, применяемая в методе конечных элементов, что позволило с использованием более плотной расчетной сетки (5000 точек на период) воспроизвести зонную диаграмму структуры. В уточненной модели с помощью золотого правила Ферми была рассчитана вероятность переходов между основным E_1 и возбужденным E_2 (квази-локализованным, расположенным вблизи края барьера)

состояниями, на основании которых оценен коэффициент поглощения [21,22]:

$$\alpha = \frac{e^2 k T}{2 \varepsilon_0 c n \hbar} f_{12} \ln \left[\frac{1 + \exp((E_F - E_1)/kT)}{1 + \exp((E_F - E_2)/kT)} \right] \times \frac{\Gamma/\pi}{(E_2 - E_1 - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad (2)$$

где n — средний показатель преломления структуры МКЯ, f_{12} — сила осциллятора, рассматриваемого перехода, E_F — положение уровня Ферми, ω — угловая частота падающего излучения, $\Gamma = 20$ meV — ширина на полувысоте.

Как было указано ранее, сформированная зонная структура позволяет реализовать переходы между связанным и квази-связанным состояниями вблизи края ямы, что обеспечивает ряд важных преимуществ. Прежде всего, такие схемы характеризуются более узким контуром спектра поглощения и значительно большими значениями пиковых коэффициентов, превышающими аналогичные показатели для переходов другого типа в несколько раз [18]. Это обеспечивает более высокую спектральную разрешающую способность и чувствительность детектора, что критично для устройств, работающих в узком диапазоне длин волн.

На рис. 3 представлены рассчитанные с помощью численной модели спектральные зависимости коэффициента поглощения при комнатной температуре для различных концентраций легирующих примесей. Как и ожидалось, с ростом уровня легирования наблюдается увеличение интенсивности пика поглощения, что свидетельствует о необходимости использовать высокие концентрации легирующей примеси. Положение максимума спектра ($8.31 \mu\text{m}$) с удовлетворительной точностью совпадает с заявленным значением, а величина пика хорошо согласуется с экспериментальными

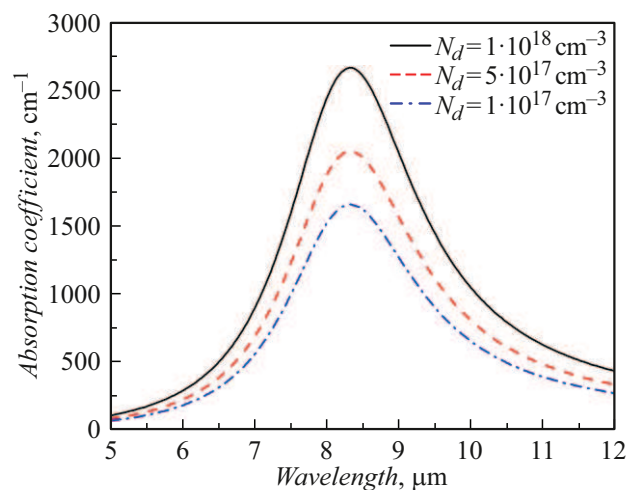


Рис. 3. Зависимость оценочного коэффициента поглощения для структуры МКЯ GaAs/AlGaAs (4 nm/50 nm) для различных степеней легирования при комнатной температуре.

данными — расхождение составляет $\sim (5-10)\%$ для аналогичных структур [1,18,21,22]. Для рассматриваемой схемы, помимо численного анализа, может быть получена и аналитическая оценка в приближении бесконечной квантовой ямы. Для рассматриваемой структуры такая оценка составляет около 6000 см^{-1} , что соответствует верхней предельной величине пикового поглощения и также свидетельствует в пользу эффективности выбранной конфигурации.

Заключение

В работе проведено численное моделирование и экспериментальное исследование структур МКЯ AlGaAs/GaAs, предназначенных для создания фотодетекторов среднего ИК диапазона. Основное внимание было сосредоточено на моделировании и экспериментальном исследовании электронного энергетического спектра, а также эффективности межподзонных переходов, формирующих спектр поглощения в исследуемых структурах.

Полученные результаты показали, что приближенная модель, основанная на решении трансцендентного уравнения, является эффективным инструментом для первичного теоретического описания и анализа исследуемых структур. Применение данного подхода позволяет задать обоснованные требования к параметрам слоев и обеспечить удовлетворительное согласование расчетных данных с экспериментальными результатами. Метод ФО подтвердил достоверность полученных расчетов и показал высокую эффективность при определении электронного энергетического спектра, что делает его перспективным средством контроля параметров подобных гетероструктур на этапах разработки и оптимизации ИК детекторов. В рамках приведенных исследований были также рассчитаны спектральные зависимости коэффициента поглощения с помощью метода конечных элементов на основе данных, уточненных в ходе предыдущих теоретических и экспериментальных шагов работы.

Проведенное исследование подтвердило, что подобранные параметры AlGaAs/GaAs-структур обеспечивают формирование требуемой электронной конфигурации, а полученные значения коэффициента поглощения удовлетворительно согласуются с данными других работ и обеспечивают потенциал для реализации ИК детекторов, работающих при комнатной температуре. В рамках дальнейших исследований планируется проведение дополнительных расчетов и экспериментов, направленных на повышение чувствительности прибора, снижение темнового тока и шумовых характеристик, что позволит обеспечить эффективную работу фотодетектора при рабочих условиях.

Финансирование работы

Исследования были поддержаны Министерством образования и науки Российской Федерации (№ 075-00003-25-04, FSEE-2025-0011).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A. Rogalski. *Infrared Phys. Technol.*, **43** (3), 187 (2002). DOI: 10.1016/S1350-4495(02)00140-8
- [2] M.A.O. Hamed. *PhD thesis in Technical Sciences* (Manchester, The University of Manchester, 2006)
- [3] A. Rogalski. *Infrared Detectors* (CRC Press, Boca Raton, 2000)
- [4] А.М. Филачев, И.И. Таубкин, М.А. Трищенко. *Твердотельная фотозлектроника: Фоторезисторы и фотоприемные устройства* (Физматкнига, М., 2012)
- [5] В.В. Копытов, Г.В. Акиншина. *Наука. Иннов. технол.*, **43**, 134 (2005).
- [6] C. Jirouschek. *IEEE J. Quant. Electron.*, **45** (9), 1059 (2009). DOI: 10.1109/JQE.2009.2020998
- [7] A.S. Dashkov, S.A. Khakhulin, D.A. Shapran, G.F. Glinskii, N.A. Kostromin, A.L. Vasiliev, S.N. Yakunin, O.S. Komkov, E.V. Pirogov, M.S. Sobolev, L.I. Goray, A.D. Bouravlev. *J. Semicond.*, **45** (2), 022901 (2024). DOI: 10.1088/1674-4926/45/2/022701
- [8] А.С. Дашков, Л.Г. Герчиков, Л.И. Горай, Н.А. Костромин, А.Д. Буравлев. *ФТП*, **57** (5), 321 (2023). DOI: 10.21883/FTP.2023.05.56197.17k
- [9] Электронный ресурс. SciPy. *Fundamental algorithms for scientific computing in Python*. Режим доступа: <https://scipy.org/> (дата обращения: 24.10.2025).
- [10] Электронный ресурс. NumPy. *The fundamental package for scientific computing with Python*. Режим доступа: <https://numpy.org/> (дата обращения: 24.10.2025).
- [11] О.С. Комков. *ФТТ*, **63** (8), 991 (2021). DOI: 10.21883/FTT.2021.08.51146.032
- [12] L.I. Goray, E.V. Pirogov, M.S. Sobolev, A.S. Dashkov, M.M. Borisov, S.N. Yakunin, A.L. Vasiliev, P.A. Yunin, A.D. Bouravlev. *Mater. Sci. Semicond. Process.*, **169** (2024), 107875 (2024). DOI: 10.1016/j.mssp.2023.107875
- [13] B. Jonsson, S.T. Eng. *IEEE J. Quant. Electron.*, **26** (11), 2025 (1990). DOI: 10.1109/3.62122
- [14] L.R. Ram-Mohan. *Finite element and boundary element applications in quantum mechanics* (Oxford University Press, Oxford, 2002)
- [15] Л.К. Мартинсон, Е. В. Смирнов. *Квантовая физика: учебное пособие для вузов* (Изд-во МИТУ им. Н.Э. Баумана, М., 2021)
- [16] C. Jirouschek, T. Kubis. *Appl. Phys. Rev.*, **1** (1), 011307 (2014). DOI: 10.1063/1.4863665
- [17] P. Harrison, A. Valavanis. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computation physics of semiconductor nanostructure* (Josh Wiley & Sons Inc., West Sussex, 2016)
- [18] B.F. Levine. *J. Appl. Phys.*, **74** (8), R1 (1993). DOI: 10.1063/1.354252
- [19] H.C. Casey Jr., M.B. Panish. *Heterostructure Lasers, Part A: Fundamental Principles* (Academic, NY., 1978), Ch. 4, 5.
- [20] R. Kudrawiec, J. Andrzejewski, J. Misiewicz, D. Gollub, A. Forchel. *Phys. Status Solidi (A)*, **202** (7), 1255 (2005). DOI: 10.1002/pssa.200460911
- [21] M. Helm. *The basic physics of intersubband transitions*. Chapter In *Semiconductors and semimetals*, **62**, 1 (Elsevier, Linz, 1999)
- [22] S.D. Gunapala, B.F. Levine, L. Pfeiffer, K. West. *J. Appl. Phys.*, **69** (9), 6517 (1991). DOI: 10.1063/1.348861