Методы оптической характеризации толстых (десятки мкм) градиентных слоев AlGaAs

© В.Д. Родин[1,2], А.С. Власов[1,¶], А.А. Караваева[1], И.П. Сошников[1,3,4], О.А. Хвостикова[1], В.П. Хвостиков[1]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский государственный технический университет „ЛЭТИ“,
197022 Санкт-Петербург, Россия
[3] Академический университет им. Ж.И. Алфёрова Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
[4] Институт аналитического приборостроения Российской академии наук,
198095 Санкт-Петербург, Россия

¶ E-mail: vlasov@scell.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 5 мая 2026 г.
В окончательной редакции 25 августа 2026 г.
Принята к публикации 2 сентября 2026 г.

Для экспресс-анализа толстых градиентных слоев $Al_xGa_{1-x}As$ преобразователей лазерного излучения с торцевым вводом излучения рассмотрены оптические методы характеризации на основе спектроскопии рамановского рассеяния и фотолюминесценции. Для определения состава твердого раствора по спектру фотолюминесценции легированных твердых растворов рассмотрены три физические модели. Полученные значения верифицированы измерениями с использованием растрового электронного микроскопа, снабженного приставкой для энергодисперсионной спектроскопии.

Ключевые слова: AlGaAs, профилирование градиентных слоев, рамановское рассеяние света, фотолюминесценция.

DOI: 10.61011/FTP.2026.09.64166.9731

1. Введение

В настоящее время активно ведутся разработки преобразователей мощного лазерного излучения, в которых ввод излучения осуществляется через торцевую поверхность, что позволяет увеличить предельную плотность мощности преобразуемого излучения и одновременно увеличить напряжение за счет последовательного соединения нескольких фотопреобразователей [1–5]. В отличие от многопереходных структур лазерных фотопреобразователей с фронтальным вводом излучения [6,7], использование торцевого ввода делает такие приборы более универсальными, обеспечивая преобразование лазерного излучения в широком спектральном диапазоне. Особенностью разрабатываемых торцевых фотоэлектрических преобразователей на основе $Al_xGa_{1-x}As$ [5] является существенная толщина (десятки мкм) переменного состава твердого раствора от $x_{Al} = 0.6$ у подложки до $x_{Al} =\sim 0.1$ вблизи фотоактивной области. Это существенно затрудняет использование традиционных методов анализа физических характеристик полученного слоя, таких как вторичная ионная масс спектроскопия (ВИМС). При этом в процессе разработки технологии роста полупроводниковых структур необходимым условием является наличие возможности экспресс-анализа полученных слоев.

Для решения задачи характеризации толстых градиентных слоев были использованы оптические методы с высоким пространственным разрешением: рамановское рассеяние света и фотолюминесценция (ФЛ). Использовался одномодовый CW лазер 532 нм, мощность излучения 5 мВт (рамановские спектры) и 0.05–25 мВт (фотолюминесценция). Спектры регистрировались на CCD матрицу 2048 пикс., с решетками 2400″/мм (рамановское рассеяние, 0.267 $см^{-1}$/пикс.) и 150″/мм (фотолюминесценция, ~ 1 нм/пикс.), монохроматор с фокальным расстоянием 500 мм. Сканирование пучком лазерного излучения осуществлялось по поперечному сколу структуры в направлении роста слоя. Пространственное разрешение объектива 80x составляет не хуже 1.5 мкм, что превышает необходимую точность.

Спектры рамановского рассеяния измерялись в геометрии обратного рассеяния. Согласно правилам отбора с поверхности скола, имеющей ориентацию (110), в рассеянии участвуют только поперечные оптические колебания. Это сильно затрудняет процесс характеризации ввиду того, что дисперсия поперечных колебаний существенно ниже, чем продольных, и составляет всего $\sim 15\,см^{-1}$ для колебаний типа Ga–As и $< 7\,см^{-1}$ для колебаний типа Al–As во всем диапазоне составов $Al_xGa_{1-x}As$, при том что аналогичные диапазоны для продольных колебаний составляют $\sim 40\,см^{-1}$.

Сложность точного определения состава твердого раствора по спектрам ФЛ заключается в переменном уровне легирования слоев, который из-за эффектов Бурштейна–Мосса, уширения полосы ФЛ и сужения ширины запрещенной зоны при высоком уровне легирования может оказывать влияние на положение мак-

симума ФЛ. Рассмотренные модели имеют зависимость от температуры, концентрации свободных носителей и состава твердого раствора. Спектры ФЛ измерялись при комнатной температуре, что позволяло регистрировать излучение, в том числе в непрямозонной области составов, при соответствующем увеличении плотности мощности лазерного излучения.

2. Моделирование

При расчете использовались и сопоставлялись с экспериментальными данными три модели спектра фотолюминесценции. Первая модель спектра ФЛ рассматривает прямые межзонные переходы с учетом непараболичности зон на основе модели, представленной в работе [8]. Она хорошо описывает случаи доминирования Г-долины при $x_{\mathrm{Al}} < 0.396$. Вторая модель учитывает влияние X-долины. Третья — основывается на второй, но учитывает влияние флуктуаций состава твердого раствора.

A. Модель спектра ФЛ для прямых межзонных переходов в Г-долине

Данная модель рассматривает прямые межзонные переходы с учетом непараболичности зоны проводимости и хвостов плотности состояний, обусловленных флуктуациями потенциала легирующей примеси [8,9].

Спектр фотолюминесценции задается выражением, учитывающим плотность состояний электронов и дырок $\rho_{e/h}(E_{e/h})$, функциями распределения $f_{e/h}(E_{e/h})$.

Для прямых межзонных переходов соблюдается условие $k_e = k_h = k$. Тогда с учетом параболического закона дисперсии, при переходе к интегрированию в k-пространстве выражение для интенсивности спектра принимает вид

$$I_L(\hbar\omega) \propto \int_0^\infty k^2 f_e\big(E_C(k)\big) f_h\big(E_V(k)\big)\delta\left(\hbar\omega - E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\right)dk, \tag{1}$$

где $\delta(E_e - E_h - \hbar\omega)$ — δ-функция Дирака, обеспечивающая соблюдение закона сохранения энергии.

Хвосты плотности состояний учтены в рамках выражения

$$\rho_h(E_h) = \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}}\,\exp\left(-\frac{(E_h - E_A)^2}{2\gamma^2}\right), \tag{2}$$

где E_A — энергия акцепторного уровня [20], γ — параметр уширения, описывающий флуктуации потенциала, пропорциональный квадратному корню концентрации дырок.

B. Модель спектра ФЛ с учетом влияния X-долины на оптические переходы

Модель A не учитывает влияние X-долины на спектр ФЛ. Известно, что при критическом значении состава $x_C > 0.42$ минимум ширины запрещенной зоны переходит в X-точку зоны Бриллюэна. Переход от состояний, с преимущественным влиянием Г-долины, к состояниям, с преимущественным влиянием X-долины, учитывается при помощи Г–X-кроссовера (Г–X crossover) [10,11]. Этот подход учитывает, что в некоторой промежуточной области состава, в которой влияние X-долины и Г-долины сравнимы и не могут быть отброшены как малые величины, возникает зона мультиплицирования состояний шириной $2\Delta x$ (для AlGaAs $\Delta x = 0.03$), связанная с эффектом антипересечения. Тогда для энергетического зазора в Г- и X-точках зоны Бриллюэна вводится функция смешивания [11]:

$$w(x) = \begin{cases} 0 & x \le x_C - \Delta x \\ 0.5[1 - \cos(\pi \times t)] & x_C - \Delta x < x < x_C + \Delta x \\ 1 & x \ge x_C + \Delta x \end{cases}, \tag{3}$$

где t — член, зависимый от состава, задаваемый выражением $t = \frac{x - x_C + \Delta x}{2\Delta x}$; $t \in [0;\, 1]$.

Известно, что в области Г–X-кроссовера ширина запрещенной зоны имеет S-образную зависимость от состава [12]. В рамках данной модели эта зависимость была аппроксимирована гладкой интерполяцией косинусом $[1 - \cos(\pi \times t)]/2$. При учете Г–X-кроссовера выражение для ширины запрещенной зоны приобретает вид

$$E_g^{\mathrm{X-\Gamma}}(x, T) = w(x)E_g^{\mathrm{X}}(x, T) + \big(1 - w(x)\big)E_g^{\Gamma}(x, T) + \Delta E_g^{BGN}. \tag{4}$$

Сужение запрещенной зоны ΔE_g^{BGN} учтено формулой Кейси–Штерна [13]. Для описания уширения спектральной линии использовалось выражение из работ [14,15]:

$$\sigma_{\mathrm{total}}(p, T) = \sqrt{\sigma_T^2 + \sigma_{\mathrm{dop}}^2}, \tag{5}$$

где σ_T — тепловое уширение спектральной линии [16], σ_{dop} — уширение от легирования $\sigma_{\mathrm{dop}}(p) = 2.335 \times \gamma_0 \times \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\alpha}$, γ_0, α — константы, представленные в работе [14] и определяющие, соответственно, величину и форму зависимости от концентрации уширения от легирования, p_0 — нормировочная концентрация $(1 \cdot 10^{18})$.

Интенсивность фотолюминесценции определялась соотношением

$$I_G(E) = I_0 \exp\left(-\frac{(E - E_{\max})^2}{2\sigma_{\mathrm{total}}^2}\right), \tag{6}$$

где $E_{\max} = E_g(x, p, T) + E_A(x, T)$.

C. Модель спектра ФЛ с учетом влияния флуктуаций состава

Модель B не учитывает вклад флуктуаций состава [14,15] в уширение полосы ФЛ. Для корректного

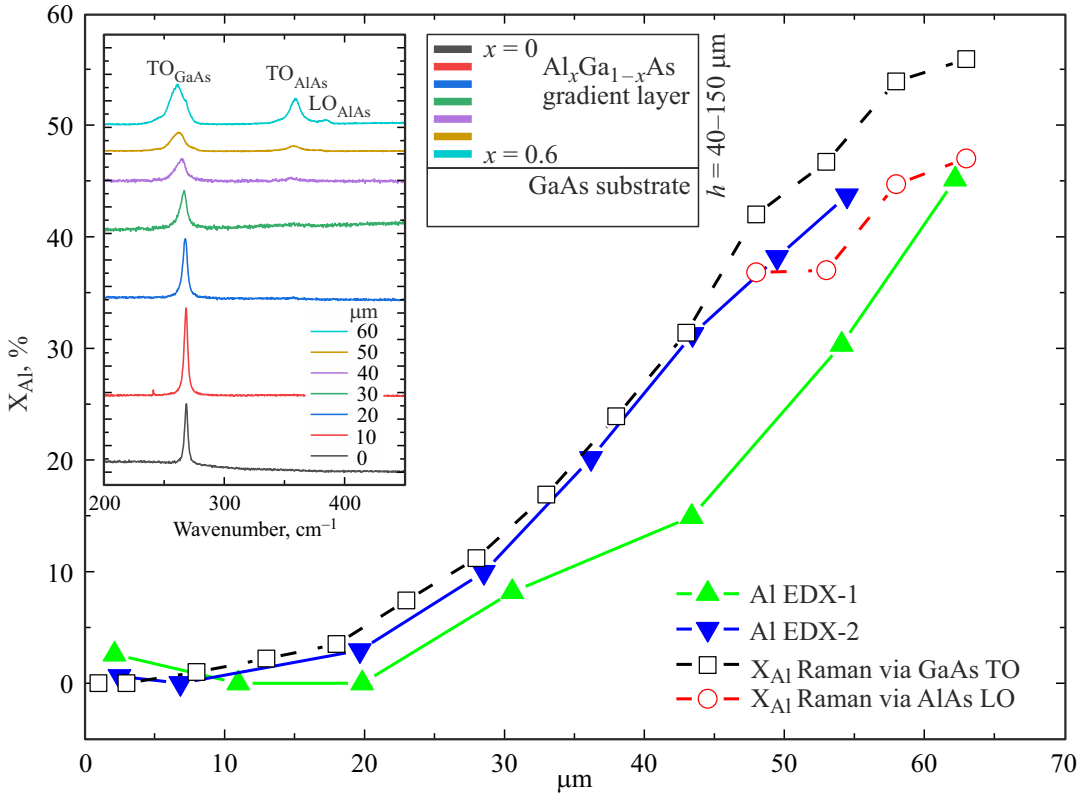

Рис. 1. Профили состава, полученные из анализа спектров рамановского рассеяния по сдвигу положения TO_{GaAs} (квадраты) и LO_{AlAs} (кружки). Треугольники — данные EDX измерений. На вставке — примеры спектров рамановского рассеяния и схематическое изображение исследуемых слоев. Приблизительное положение исследуемых слоев показано полоской соответствующего цвета.

учета необходимо модифицировать (5):

$$\sigma_{\text{total}} = \sqrt{\sigma_T^2 + \sigma_{\text{alloy}}^2 + \sigma_{\text{dop}}^2}, \qquad (7)$$

где σ_{alloy} — сплавное уширение спектра, определяемое по формуле Шуберта [14].

Первичная верификация результатов расчета проведена путем сравнения расчетной спектральной линии ФЛ с данными из литературных источников [11,14,17,18]. Результаты сравнения профилей состава, полученных различными моделями, с независимыми методами оценки представлены далее.

3. Эксперимент

На рис. 1 представлены профили состава экспериментальной структуры, полученные по спектрам рамановского рассеяния и EDX измерениями, проведенными с помощью растрового электронного микроскопа Supra25 C.Zeiss, оборудованном приставками микроанализа и дифракции обратно рассеянных электронов Ultim и Symmetry Oxford Instruments Inc. Анализ результатов исследований рентгеновских спектров проводился с помощью программы AZTec. На вставке показаны примеры спектров рамановского рассеяния с торцевой поверхности и схематическое изображение структуры. Градиентный слой $Al_xGa_{1-x}As$ выращивался методом жидкофазной эпитаксии при скорости охлаждения системы 1 °C/мин. Кристаллизация осуществлялась из галлиевого расплава с добавлением в жидкую фазу 10 ат.% висмута и 15 ат.% олова. Температура начала кристаллизации составляла 900 °C. Градиентные слои выращивались в графитовой кассете поршневого типа на подложках арсенида галлия ориентации (100). За счет изменения коэффициента сегрегации алюминия при постепенном охлаждении системы формировался естественный градиент состава твердого раствора: от $x = 0.6$ на границе с подложкой и до $x = 0.1$ к концу роста (рис. 1).

Необходимо отметить, что метод энергодисперсионной спектроскопии (EDX), хотя и является прямым измерением, дает большой разброс значений при различных измерениях, демонстрируя тем самым низкую точность. На рис. 1 приведены два экспериментальных профиля, полученных при разных измерениях. Отличия в значениях достигают 100 % относительно меньшего значения. Соответственно, на практике приходится проводить большое количество измерений и использовать статистическую обработку для получения наиболее вероятного профиля состава (профиль 2). Опре-

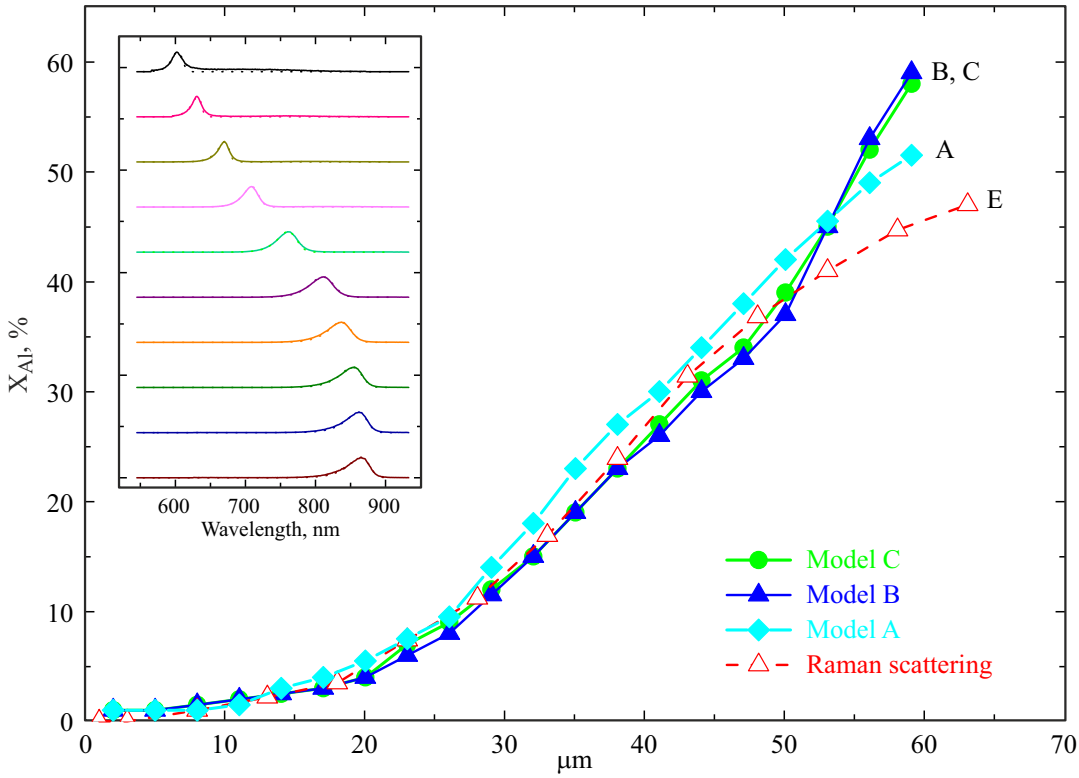

Рис. 2. Профили состава, полученные на основе моделирования спектров ФЛ (линии A–C). Линия E — данные рамановских измерений. На вставке — примеры экспериментальных и расчетных спектров ФЛ.

деление состава методом рамановского рассеяния по сдвигу положения поперечного колебания типа GaAs показывает хорошую сходимость с данными EDX при концентрации Al $< 35\,\%$ [19,20]. При дальнейшем увеличении значений x_{Al} наблюдается значительное уширение полосы, вызванное, вероятно, вкладом локализованных колебаний, имеющих меньшую частоту, что приводит к завышению значений состава твердого раствора. При значениях x_{Al} 40 % и более в спектре можно наблюдать появление запрещенного продольного колебания типа AlAs. Значения x_{Al}, определенные по сдвигу частоты продольных колебаний типа AlAs, совпадают с данными EDX измерений. Таким образом, можно заключить, что с помощью рамановского рассеяния света, используя комбинированный подход к определению состава твердого раствора, можно регистрировать профили распределения состава Al в толстых градиентных слоях.

На рис. 2 показаны профили распределения состава, полученные путем моделирования по данным измерения спектров ФЛ. Спектры излучения непрямозонных составов были получены при увеличении плотности накачки лазерного излучения, за счет чего происходит сдвиг положения квазиуровней Ферми вглубь зоны и обеспечивается заселение Г-долины. Для сравнения на графике представлен профиль состава, полученный методом рамановского рассеяния. На вставке приведены экспериментальные (сплошная линия) и соответствующие расчетные (пунктирная линия) спектры ФЛ, соответствующие различным точкам образца.

Сопоставление данных моделирования и экспериментальных измерений методом рамановского рассеяния показало, что в области прямозонных составов ($x_{\mathrm{Al}} < 0.42$) наилучшее совпадение демонстрирует модель C. Учет эффекта флуктуаций состава не дает значимых улучшений точности определения состава. Модель A показывает систематическое завышение значений x_{Al}. В области непрямозонных составов наименьшую погрешность демонстрирует модель A.

4. Заключение

Рассмотрены оптические методы характеризации толстых градиентных легированных слоев AlGaAs. Наилучшую сходимость из оптических методов показала спектроскопия рамановского рассеяния при использовании смешанного подхода к определению состава: по сдвигу поперечных колебаний типа GaAs ($x_{\mathrm{Al}} < 0.35$) и продольных колебаний типа AlAs при $x_{\mathrm{Al}} > 0.35$. Рассмотрены три модели для расчета спектров фотолюминесценции. Все модели продемонстрировали умеренную сходимость в области прямых переходов $x_{\mathrm{Al}} < 0.42$ и систематическое завышение состава при $x_{\mathrm{Al}} > 0.42$.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] E.F. Fernández, N. Seoane, F. Almonacid, A.J. García-Loureiro. IEEE Electron Dev. Lett., **40** (1), 44 (2019).
[2] T. Nayfeh, B. Fast, D. Raible, D. Dinca, N. Tollis, A. Jalic. Int. Conf. on Space Opt. Systems and Applications (ICSOS) (Santa Monica, California, 2011). NASA/TM — 2012-217256
[3] M. Perales, M. Yang, Ch. Wu, Ch. Hsu, W. Chao, K. Chen, T. Zahuranec. Proc. SPIE, **10086**, 100860G (2017).
[4] M. Perales, M. Yang, Ch. Wu, Ch. Hsu, W. Chao, K. Chen, T. Zahuranec. Proc. SPIE, **9733**, 97330U (2016).
[5] V.P. Khvostikov, A.N. Panchak, O.A. Khvostikova, P.V. Pokrovskiy, A.V. Malevskaya. IEEE Electron Dev. Lett., **45**, 1417 (2024). https://doi.org/10.1109/LED.2024.3416760
[6] S. Fafard. J. Laser Opt. Photonics, **5**, 33 (2018). DOI: 10.4172/2469-410X-C7-040
[7] M.C.A. York, F. Proulx, O. Gilard, L. Bechou, R. Aràs, V. Aimez, D.P. Masson, S. Fafard. IEEE Trans. Nucl. Sci., **66** (6), 938 (2019).
[8] A. Bignazzi, A. Bosacchi, R. Magnanini. J. Appl. Phys., **81**, 7540 (1997).
[9] D.M. Eagles. J. Phys. Chem. Solids, **21** (1–2), 87 (1961). DOI: 10.1016/0022-3697(61)90229-6
[10] S. Adachi. J. Appl. Phys., **58**, R1 (1985). DOI: 10.1063/1.336070
[11] L. Pavesi, M. Guzzi. J. Appl. Phys., **75** (10), 4779 (1994). DOI: 10.1063/1.355769
[12] H. Lee, M. Klein, L.P. Fu, G.D. Gilliland, H.P. Hjalmarson, D.E. Aspnes, K.C. Hsieh, J. Kim, J.G. Yu, M.G. Craford. Phys. Rev. B, **51** (7), 4186 (1995). DOI: 10.1103/PhysRevB.51.4186
[13] H.C. Casey, F. Stern. J. Appl. Phys., **47**, 631 (1976).
[14] E.F. Schubert, E.O. Göbel, Y. Horikoshi, K. Ploog, H.J. Queisser. Phys. Rev. B, **30**, 813 (1984). DOI: 10.1103/PhysRevB.30.813
[15] M. Grundmann, C.P. Dietrich. J. Appl. Phys., **106** (12), 123521 (2009). DOI: 10.1063/1.3267875
[16] E.F. Schubert. *Light-Emitting Diodes*. 2nd ed. (Cambridge, Cambridge University Press, 2006).
[17] N.C. Miller, S. Zemon, G.P. Werber, W. Powazinik. J. Appl. Phys., **57** (2), 512 (1985). DOI: 10.1063/1.334786
[18] K. Saito, H. Ohnishi, T. Saito, K. Kurishima. IEEE Electron Dev. Lett., **10** (12), 540 (1989). DOI: 10.1109/55.43102
[19] B. Jusserand, J. Sapriel. Phys. Rev. B, **24** (12), 7194 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.24.7194
[20] R. Heilman, G. Oelgart. Semicond. Sci. Technol., **5** (10), 1040 (1990). DOI: 10.1088/0268-1242/5/10/006

Редактор Г.А. Оганесян

Optical characterization of thick (tens of microns) graded AlGaAs layers

V.D. Rodin[1,2], *A.S. Vlasov*[1], *A.A. Karavaeva*[1], *I.P. Soshnikov*[1,3,4], *O.A. Khvostikova*[1], *V.P. Khvostikov*[1]

[1] Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia
[2] St. Petersburg Electrotechnical University „LETI“,
197022 St. Petersburg, Russia
[3] Alferov University,
194021 St. Petersburg, Russia
[4] Institute of Analytical Instrumentation
Russian Academy of Sciences,
198095 St. Petersburg, Russia

Abstract Optical characterization methods based on Raman scattering and photoluminescence spectroscopy are considered for analysis of thick $Al_xGa_{1-x}As$ graded layers of edge-illuminated laser beam photovoltaic converters. Three physical models are considered to determine the solid solution composition from the photoluminescence spectrum of doped alloys. The obtained values are verified by scanning electron microscope equipped with an energy-dispersive spectroscopy unit.