

УДК 621.382.2/3

PACS: 42.25.Fx, 81.05.Hd,  
61.05.C-, 78.30.Fs

## Численный анализ спектров рентгеновского дифракционного отражения от сверхрешеток на основе гетеропары AlGaAs/GaAs в зависимости от структурных параметров

Д. В. Ильинов, А. Д. Шабрин, А. Е. Гончаров, Д. А. Пашкеев

*Изучены свойства спектров рентгеновского дифракционного отражения многослойных периодических гетероструктур AlGaAs/GaAs в зависимости от толщины и состава материала слоев и количества периодов. Показано, что количество и интенсивность дополнительных дифракционных максимумов на кривых качания возрастает с увеличением толщины слоев и количества периодов. Состав слоев не влияет на количество максимумов, а изменяет их угловое положение и полуширину. Проводилось сравнение численных расчетов с экспериментальными спектрами, измеренными для гетероструктуры, выращенной методом молекулярно-пучковой эпитаксии и состоящей из 50 периодов, в которых барьер  $Al_xGa_{1-x}As$  имел состав  $x \approx 26,7\%$  и толщину  $d \approx 51,6$  нм, а квантовая яма GaAs – толщину  $d \approx 4,6$  нм. Установлено хорошее соответствие рассчитанных параметров с технологическими данными и результатами измерения на просвечивающем электронном микроскопе.*

**Ключевые слова:** рентгеновская дифрактометрия, сверхрешётки, многослойная структура, матрица переноса, кривые качания, твердый раствор AlGaAs.

**Ссылка:** Ильинов Д. В., Шабрин А. Д., Гончаров А. Е., Пашкеев Д. А. // Прикладная физика. 2019. № 1. С. 51.  
**Reference:** D. V. Ilinov, A. D. Shabrin, A. E. Goncharov, and D. A. Pashkeev, Prikl. Fiz., No. 1, 51 (2019).

### Введение

Современные достижения в эпитаксиальных методах выращивания полупроводниковых материалов позволили получать новые фоточувствительные устройства (ФПУ) [1]. В частности, в последнее время особый интерес представляют структуры с множественными квантовыми ямами и сверхрешетки, варьируя параметры которых, удается изготавливать ФПУ для широкого диапазона длин волн в инфракрасной области спектра [2].

Наиболее технологичными, с точки зрения выращивания, являются твердые растворы на ос-

нове полупроводниковых бинарных соединений  $A_3B_5$ . Например, гетеропара AlGaAs/GaAs [3] используется для получения ФПУ с квантовыми ямами, это так называемые QWIP-детекторы (Quantum Well Infrared Photodetector). Гетеропара InAs/GaSb, а также различные комбинации твердых растворов данных соединений позволяют разрабатывать детекторы на сверхрешетках второго рода [4, 5].

Теретические расчеты показывают, что характеристики данных приборов могут превзойти параметры аналогичных устройств на основе твердого раствора кадмий-ртуть-теллур (КРТ), например, по величине темновых токов и более высокой рабочей температуре [6].

Для достижения высоких рабочих характеристик приборов с квантовыми ямами требуется прецизионный контроль всех технологических параметров гетероструктуры: состава и толщины слоев и резкости гетероинтерфейсов. Его можно осуществлять с помощью метода высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии [7]. Однако рентгеновские спектры отражения от многослойных периодических структур, в отличие от одиночных эпитаксиальных слоев, имеют сложный вид, определяемый наличием дополнительных

Ильинов Денис Владимирович<sup>1</sup>, аспирант, инженер НИЦ.  
Шабрин Алексей Дмитриевич<sup>1</sup>, инженер 2 кат. НИЦ.  
Гончаров Андрей Евгеньевич<sup>1</sup>, инженер 2 кат. НИЦ.  
Пашкеев Дмитрий Александрович<sup>1,2</sup>, гл. спец., доцент, к.ф.-м.н.  
<sup>1</sup> АО «НПО «Орион».  
Россия, 111538, Москва, ул. Косинская, 9.  
Тел. 8(499) 374-81-30. E-mail: orion@orion-ir.ru  
<sup>2</sup> МИРЭА – Российский технологический университет (РТУ МИРЭА).  
Россия, 119454, Москва, просп. Вернадского, 78.

Статья поступила в редакцию 24 января 2019 г.

© Ильинов Д. В., Шабрин А. Д., Гончаров А. Е., Пашкеев Д. А., 2019

максимумов отражения (сателлитов), возникающих вследствие дополнительной периодичности самой структуры, помимо периодичности кристаллической решетки. Поэтому их анализ требует применения численных методов расчета.

Настоящая работа посвящена проблеме характеристики и изучению свойств фоточувствительных многослойных гетероэпитаксиальных квантовых структур [8–10] на основе гетеропары AlGaAs/GaAs методами рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения. При измерении спектров рентгеновского дифракционного отражения основную информацию о степени кристаллического совершенства и параметрах эпитаксиальных слоев обычно удается получать из анализа кривых качания. Поэтому основное внимание при проведении численного анализа было уделено именно данным кривым. Для их расчета использовались методы характеристических матриц и матриц переноса в приближении динамической теории дифракции. Анализ свойств кривых качания периодических гетероструктур проводился в зависимости от материала и толщины слоев, а также количества периодов. Для верификации полученных результатов были рассчитаны кривые для структур, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Показано их хорошее согласие с экспериментальными результатами.

### Моделирование и анализ кривых качания периодических структур с квантовыми ямами

Численное моделирование кривых качания проводилось с помощью метода характеристических матриц и матриц переноса для двухволновой дифракции в многослойных периодических системах в рамках динамического подхода теории дифракции. В методе характеристической матрицы задается вектор-функция  $\Psi(z)$ , элементами которой являются компоненты волнового поля, значения которых обуславливаются на границах слоя. Элементы  $\psi_j(z)$  выбираются в зависимости от типа поставленной задачи. Значения этой вектор-функции  $\Psi(z)$  на противоположных границах слоя связаны друг с другом матрицей  $M$ , элементы которой определяют величины коэффициентов отражения и пропускания волны слоем либо слоистой средой, то есть характеризуют её рассеивающие свойства. Поэтому матрицу  $M$  называют характеристической матрицей (ХМ) слоя (слоистой среды).

Пусть  $d$  – толщина многослойной системы,  $N$  – количество слоёв в ней, а  $M$  – её ХМ. Тогда:

$$\Psi(0) = M\Psi(d). \quad (1)$$

Метод ХМ имеет преимущество при расчетах многослойной структуры, поскольку её характеристическая матрица представляется в виде:

$$M = M_1 M_2 \dots M_N, \quad (2)$$

где  $M_j, j = 1, \dots, N$  – ХМ каждого слоя, зависящая только от его структуры. Следовательно, при изменении структуры какого-либо слоя достаточно учесть лишь это изменение и не пересчитывать полностью произведение всех ХМ каждого слоя, так как другие части произведения останутся прежними.

В теории дифференциальных уравнений матрица  $W$ , выражающая значение неизвестной вектор-функции  $\Psi(d)$  через начальные данные  $\Psi(0)$ , называется фундаментальной:

$$\Psi(d) = W\Psi(0). \quad (3)$$

В теории дифракции матрица  $W$  названа матрицей переноса. Значения её элементов определяются свойствами слоя рассматриваемой среды. Матрица, обратная  $W$ , является характеристической:

$$M = W^{-1}. \quad (4)$$

В случае рассеяния на одиночной поверхности раздела  $j$  можно выразить рассеянные волны  $R_0$  и  $T_j$  через падающие волны  $T_0$  и  $R_j$ :

$$\begin{pmatrix} T_j \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_j^{tt} & W_j^{tr} \\ W_j^{rt} & W_j^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ R_j \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Элементы матрицы переноса  $W_j$  в уравнении выше отвечают за множественный процесс рассеяния; они являются суперпозицией характеристических матриц слоёв  $S$  и  $F$ , соответствующих изменению амплитуды и фазы электромагнитного излучения на каждой гетерогранице и выражающиеся в следующем виде:

$$S_{\mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ \gamma_0 & 0 & -\gamma_0 & 0 \\ 0 & \gamma_h & 0 & -\gamma_h \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$(F_n)_{ij} = \delta_{ij} \exp(iu_n^j k t_n),$$

где  $u_n = k_{nz}/k$ ,  $n$  – единичный вектор нормали к системе в направлении  $z$ ,  $\gamma_0 = \sin \omega_i$ ,  $\gamma_h = \sin \omega_d$ ,  $\omega_i$  и  $\omega_d$  – углы падения и дифракции соответственно относительно поверхности образца.

Решения задачи рассеяния для многослойных структур, содержащих  $N$  поверхностей разде-

ла, можно записать в виде суперпозиции  $W_N$  матриц рассеяния для каждой границы:

$$W_N = W_1 W_2 \dots W_{j=N}. \quad (7)$$

Итоговое пропускание  $T_N$  и отражение  $R_N$  для всей структуры для определенных углов падения и дифракционного отражения рассчитываются из соотношения:

$$\begin{pmatrix} T_N \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_N^{tt} & W_N^{tr} \\ W_N^{rt} & W_N^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ R_N \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Варьируя углы падения, можно рассчитать кривые дифракционного отражения. В сверхрешётках они имеют особенности и отличаются от дифракционных спектров единичных слоёв и объёмных кристаллов. Так, на дифракционной картине возникают основной и нулевой брэгговские пики, а также появляются последовательности пиков-сателлитов.

Угловое положение основного пика соответствует брэгговскому углу материала подложки, а угловое положение нулевого пика – среднему значению состава твёрдого раствора. Нулевой пик возникает вследствие сложения брэгговских отражений от материалов, входящих в период сверхрешётки. Пики-сателлиты соответствуют сверхрешётке из-за интерференции между слоями структуры. Возникновение вторичных пиков-сателлитов связано с периодической структурой сверхрешётки, модулирующей узлы обратной решётки кристалла. Период пиков-сателлитов определяется толщиной периода сверхрешётки.

Анализируя количество, интенсивность, период, угловую ширину и угловое положение сателлитов на дифракционной картине, можно получить разные сведения об исследуемом материале [7, 11]. Форма интерфейсов и их резкость определяют количество сателлитов на кривой качания. Для решения обратной задачи следует рассматривать дифракционную картину как преобразование Фурье от структуры. Число элементов квантово-размерной структуры и наличие дисперсии периода сверхрешётки влияют на угловую ширину пиков-сателлитов.

Изменяя какой-либо параметр материала и фиксируя другие, можно проанализировать изменение кривой качания, что позволяет в дальнейшем решать обратную задачу дифракции. Численным методом матрицы переноса была рассчитана кривая дифракционного отражения от сверхрешётки, содержащей  $N = 50$  периодов гетеропары  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  со следующими характеристиками: толщина квантового барьера составляла  $d_b = 25$  нм, толщина квантовой ямы –  $d_w = 5$  нм, доля алюминия в твердом растворе  $Al_xGa_{1-x}As$  равна  $x = 26\%$ . Выбор соответствующих характеристик структуры обусловлен возможностью её работы в качестве активной зоны фоточувствительного элемента QWIP-детектора в дальнем ИК-диапазоне. В качестве варьируемых параметров для проведения анализа изменения кривых качания являлись толщины квантовой ямы и барьера  $d_w$  и  $d_b$ , а также доля алюминия  $x$  в тройном твёрдом растворе арсенида алюминия-галлия.

Из набора кривых качания на рис. 1 можно заметить влияние количества периодов сверхрешётки  $N$  на вид дифракционного спектра.

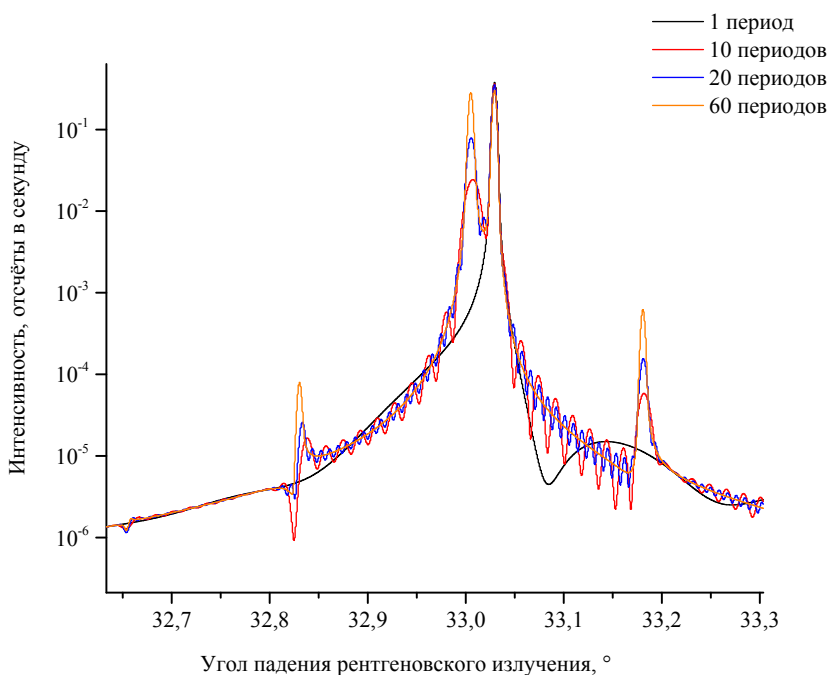


Рис. 1. Дифракционные спектры, вычисленные методом матрицы переноса при различном количестве периодов  $N$  в сверхрешётке на основе гетеропары  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ . Значения  $d_b = 25$  нм и  $d_w = 5$  нм,  $x = 26\%$  были фиксированными.

На рис. 1 изображены кривые качания от сверхрешётки, содержащих 1, 10, 20 и 60 гетеропар AlGaAs/GaAs. Видно, что с увеличением  $N$  происходит усложнение вида зависимостей дифрагированной интенсивности от угла падения рентгеновского излучения. На кривых качания возникают периодические осцилляции возле нулевого и основного пиков – толщинные осцилляции. Они возникают вследствие интерференции лучей при их многократных отражениях на границах слоёв по аналогии с оптической интерференцией. По разделению толщинных осцилляций можно определять толщину эпитаксиальной плёнки на подложке или слоёв, составляющих сверхрешётку. При увеличении числа пар слоёв частота возникающих интерференционных осцилляций растёт, а их амплитуда заметно падает. На изображении видно, что для  $N = 60$  осцилляции уже практически незаметны. Однако выделить слабые толщинные колебания на экспериментально измеренных спектрах иногда не представляется возможным из-за шумов и погрешностей измерительного оборудования. Но, несмотря на ослабление интерференционных осцилляций, с ростом  $N$  увеличивается интенсивность пиков-сателлитов, которые становятся экспериментально разрешимы даже при больших значениях фоновых шумов в детекторе и дают возможность рассчитать среднюю величину периода сверхрешётки  $\Lambda$ .

Непосредственно из кривых качания сверхрешётки может быть рассчитано среднее значение её периода  $\Lambda$ , используя значения положений сателлитов. Используя уравнение Вульфа–Брэгга:

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (9)$$

где  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения;  $d$  – межплоскостное расстояние;  $\theta$  – брэгговский угол отражения;  $n$  – порядок отражения. Аналогично можно записать условия для дифракционных максимумов (нулевого пика и пиков-сателлитов) сверхрешетки:

$$N_i\lambda = 2\Lambda \sin \theta_i, \quad N_j\lambda = 2\Lambda \sin \theta_j, \quad (10)$$

где  $N_i$  и  $N_j$  – порядки отражения;  $\theta_i$  и  $\theta_j$  – угловое положение сателлитов  $i$  и  $j$ . Отсюда можно получить выражение для расчёта толщины периода сверхрешётки:

$$\Lambda = \frac{\lambda(N_i - N_j)}{2(\sin \theta_i - \sin \theta_j)}. \quad (11)$$

Толщину периода можно вычислить, взяв угловые положения и порядки любых сателлитов. Однако, для увеличения точности расчёта следует

брать положения разных сателлитов, а затем усреднять результат. Также период  $\Lambda$  сверхрешетки через угловые расстояния между сателлитами  $\delta\theta$  можно оценить по формуле:

$$\Lambda = \frac{|\gamma_h|\lambda}{\sin(2\theta_B)\delta\theta}. \quad (12)$$

Несоответствие кристаллических параметров сверхрешетки и подложки в плоскости, перпендикулярной направлению роста структуры, обозначается как  $(\Delta d/d)_{zz}$  и определяется из соотношения:

$$(\Delta d/d)_{zz} = \frac{\langle d \rangle - d_0}{d_0} = \frac{-\Delta\theta}{\left[ \operatorname{tg}(\theta_B) \frac{2|\gamma_h|}{\gamma_0 + |\gamma_h|} \right]}, \quad (13)$$

где  $\gamma_0$  и  $\gamma_h$  – направляющие косинусы падающего и дифрагированного пучков;  $d_0$  – расстояние между кристаллографическими плоскостями подложки.

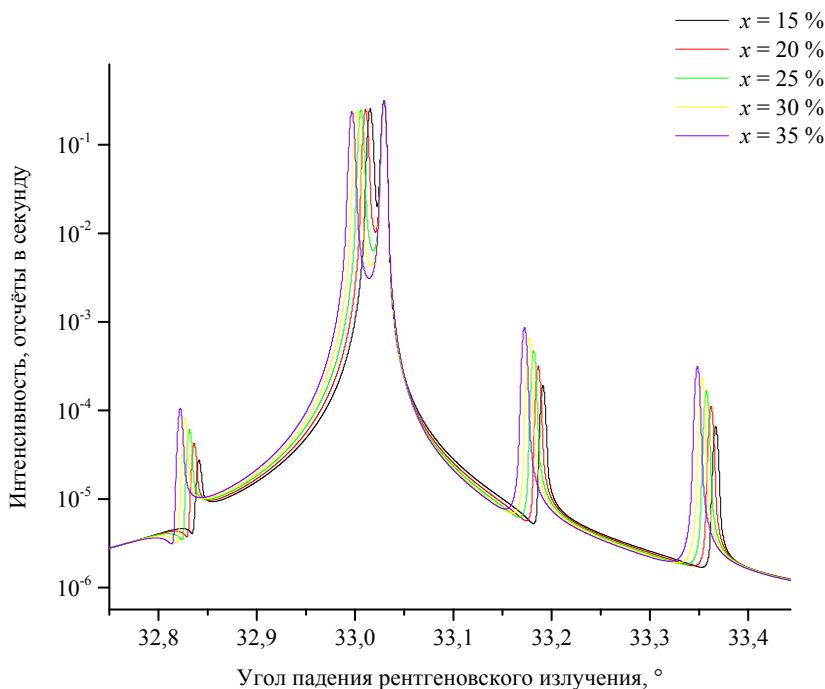
Анализ расчётных кривых качания в зависимости от доли алюминия  $x$  в пределах от 15 % до 35 % с фиксированными величинами толщины барьера и ямы –  $d_b = 25$  нм и  $d_w = 5$  нм показал, что изменяется положение нулевого пика (рис. 2).

Его значение при таких  $x$  меняется от  $33,0154^\circ$  до  $32,9968^\circ$  вследствие того, что постоянная кристаллической решетки  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  увеличивается. Зависимость углового положения нулевого пика от доли алюминия близка к аппроксимации линейной функцией. Можно заметить, что доля алюминия в твёрдом растворе не влияет на количество пиков-сателлитов на кривых качания, однако есть небольшое изменение в их угловой ширине (FWHM) и угловом положении также в связи с увеличением параметра решётки. С увеличением  $x$  сателлиты справа располагаются ближе к пику подложки на  $0,015^\circ$ – $0,020^\circ$  в зависимости от порядка сателлита, а слева они начинают смещаться дальше от нулевого пика на ту же величину – порядка  $0,02^\circ$ .

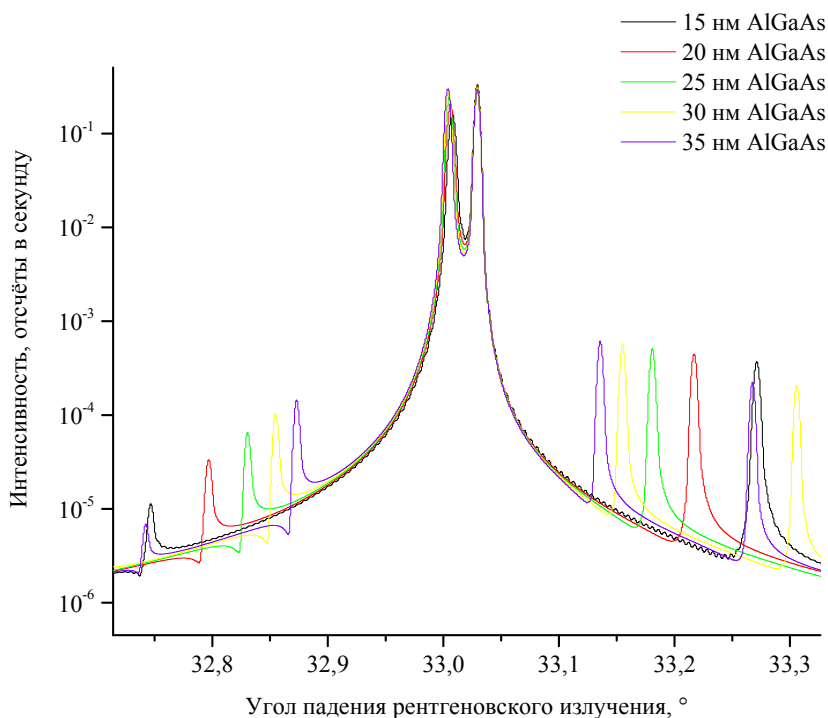
Вариация толщин квантовых ям  $d_w$  и барьеров  $d_b$  в выбранном материале также приводит к изменениям кривой качания. При варьировании толщины барьера  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  от 15 нм до 35 нм с шагом 5 нм при постоянном значении толщины ямы GaAs  $d_w = 5$  нм наблюдается смещение углового положения нулевого пика кривой качания от  $33,0083^\circ$  до  $33,0040^\circ$  (рис. 3). Пики-сателлиты также меняют своё положение при повышении толщины барьера в сверхрешётке и располагаются ближе к нулевому (отрицательные порядки) и основному (положительные порядки) пикам. Угловое положение сателлита 1-го порядка  $\theta_1$  измени-

лось на  $0,1355^\circ$ , а 1-го порядка  $\theta_{-1}$  – на  $0,1264^\circ$ . Интенсивность  $I_0$  нулевого пика зависит от толщин элементов многослойной квантовой структуры, поскольку является суммой отражений от каждого материала в её периоде. Следовательно, чем толще период сверхрешётки, тем более интенсивен нулевой пик на кривой качания. Прирост интенсивности при повышении толщины барьера  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  с  $d_b = 15$  нм до  $d_b = 35$  нм составил 0,13 отсчетов в секунду (для сравнения интенсивность пика при  $d_b = 35$  нм приблизительно 0,30 отсчетов

в секунду). При изменении толщины квантовой ямы GaAs меняется относительная интенсивность нулевого и основного пиков. Увеличение толщины периода сверхрешётки за счёт увеличения  $d_w$ , также как и в случае увеличения  $d_b$  приводит к смещению пиков-спутников в тех же направлениях с ростом их интенсивности (рис. 4). Это происходит в обоих случаях из-за увеличения общей толщины периода сверхрешётки и изменения соотношения толщин  $d_w/d_b$ .



**Рис. 2.** Дифракционные спектры, вычисленные методом матрицы переноса от сверхрешётки с 50 периодами  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  при доле алюминия в твёрдом растворе  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  от 15 % до 35 %. Значения  $d_b = 25$  нм и  $d_w = 5$  нм были фиксированными.



**Рис. 3.** Дифракционные спектры, вычисленные методом матрицы переноса от сверхрешётки с 50 периодами  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  при толщинах AlGaAs от 15 нм до 35 нм. Значения  $x = 26\%$  для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  и  $d_w = 5$  нм были фиксированными.

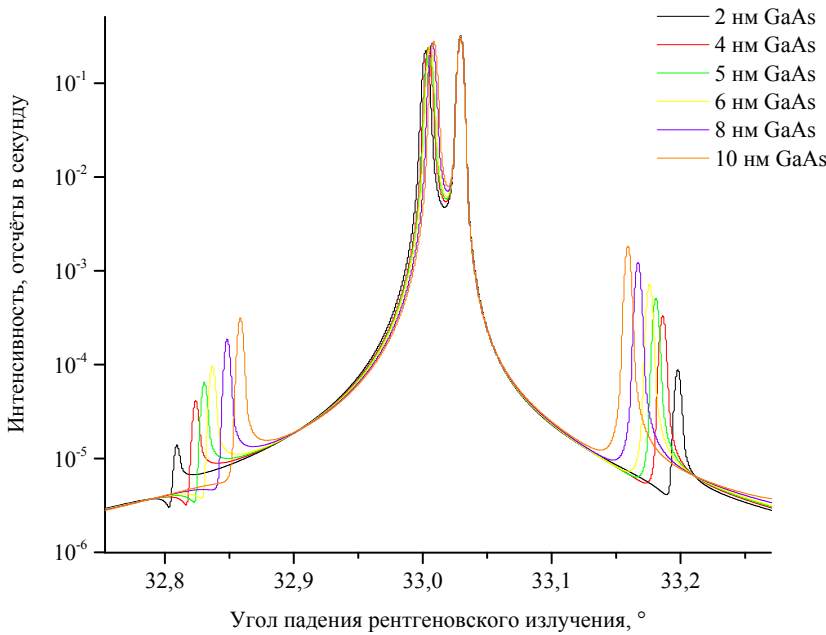


Рис. 4. Дифракционные спектры, вычисленные методом матрицы переноса от сверхрешётки с 50 периодами  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  при толщинах GaAs от 2 нм до 10 нм. Значения  $x = 26\%$  для  $Al_xGa_{1-x}As$  и  $d_b = 25$  нм были фиксированными.

### Экспериментальные результаты и обсуждение

Для сопоставления и проверки проанализированных теоретических данных, полученных методом матрицы переноса, была исследована выращенная методом молекулярно-пучковой эпитаксии полупроводниковая QWIP-структура с 50-периодной композиционной сверхрешёткой I типа на основе гетеропары  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  на подложке GaAs (001). В процессе роста для данной гетероструктуры закладывались следующие параметры: толщина квантовых ям (GaAs) –  $d_w = 4,8$  нм, барьеров ( $Al_xGa_{1-x}As$ ) –  $d_b = 50$  нм, доля алюминия в твёрдом растворе  $x = 26\%$ .

Эта наноструктура представляет собой периодическую систему потенциальных ям и барьеров для носителей заряда – электронов и дырок. Такие параметры обеспечивают наличие двух энергетических уровней в квантовой яме. Зазор между ними составил 152 мэВ, что соответствует длине волны  $\lambda = 8,1$  мкм при  $T = 77$  К. Структура была легирована кремнием таким образом, чтобы нижний уровень размерного квантования был заполнен электронами в равновесии при рабочей температуре фотоприёмника ( $T \approx 70$  К). При поглощении квантов регистрируемого излучения электроны переходят с основного квантоворазмерного уровня на первый возбужденный и далее за счет тепловых возбуждений переходят в область зоны проводимости и тем самым дают вклад в фототок.

На рис. 5 показана кривая качания симметричного (004) отражения данного образца. Измерения проводились на высокоразрешающем рентгеновском дифрактометре Bruker Discover D8 с геометрией Брэгга–Брентано в схеме двухосевой

дифракции. В качестве источника рентгеновских лучей использовалась трубка с медным анодом (длина волны излучения  $\lambda = 0,15405$  нм), а в качестве детектора – сцинтилляционный счётчик (0D-детектор). Для ограничения угловой и спектральной расходимости падающего пучка рентгеновских лучей в схеме использовались апертуры, зеркало Гёбеля и четырёхкристалльный германиевый коллиматор-монокроматор конструкции Монда-Харта-Бартельса с отражением 220 для получения пучка с высокой монохроматичностью.

На кривой отчётливо наблюдаются пик от подложки GaAs, нулевой пик среднего состава SL0, который расположен в области меньших углов, что соответствует слою с большим параметром решётки, а также толщинные осцилляции (в области сателлитов отрицательных порядков они уже не видны из-за шумов детектора) и пики сателлиты 1-го порядка SL+1 и -1-го порядка SL-1, что даёт возможность сделать вывод о наличии периодичности QWIP-структуры.

Приведенная методика расчета многослойных структур позволяет решать обратную задачу дифракции по поиску характеристик и определения структуры материала по кривым качания и последующего анализа его свойств. Её также можно использовать для контроля технологических параметров. Варьируя характеристики материала – толщины и состав слоёв, количество периодов сверхрешётки, можно добиться наилучшего сходства экспериментального и численного спектров, уточняя расчётные значения параметров.

Для измеренной QWIP-структуры были получены следующие средние значения: толщина ямы равняется  $d_w = 4,6$  нм, барьера –  $d_b = 51,6$  нм, доля алюминия составляет  $x = 26,5\%$ . Кривая ка-



чения, смоделированная методом матрицы переноса в рамках динамической теории дифракции, имеет хорошее совпадение с экспериментальной кривой при этих же параметрах. Полученные зна-

чения согласуются с технологическими данными МПЭ и измерениями на просвечивающем электронном микроскопе. Фотография скола данной структуры показана на рис. 5.

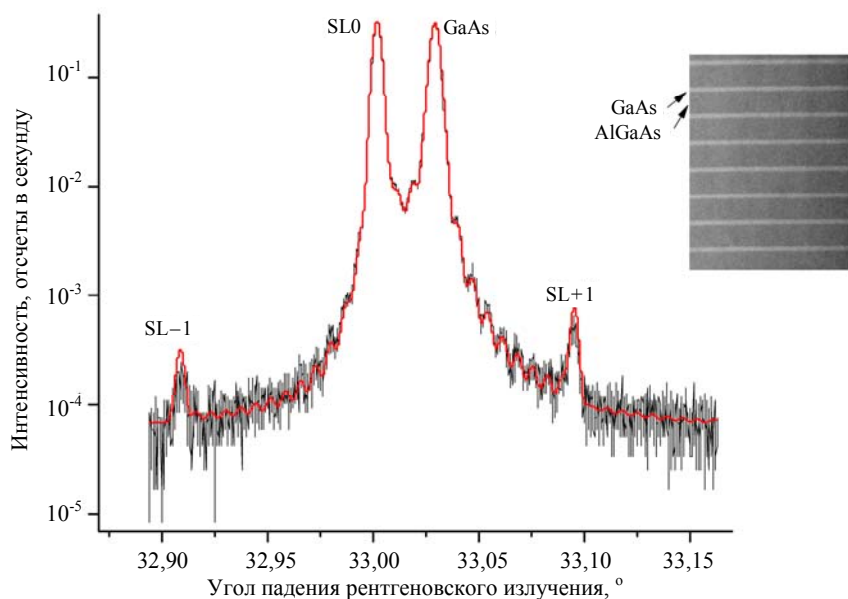


Рис. 5. Кривые дифракционного отражения (004) для QWIP-структуры с 50-периодной сверхрешёткой на основе гетеропары  $Al_{0,267}Ga_{0,733}As/GaAs$ . Чёрная – экспериментальная кривая качания, красная – рассчитанная методом матрицы переноса. На вставке показана фотография скола фрагмента структуры, сделанная на просвечивающем электронном микроскопе.

### Заключение

В работе на основе метода матрицы переноса построена численная модель для расчета дифракционных спектров многослойных полупроводниковых эпитаксиальных структур с применением динамической теории дифракции. Модель позволяет рассчитывать симметричные и асимметричные кривые качания различных типов сканирования с высокой точностью. Из сравнения расчетной кривой качания с экспериментальной для QWIP-структуры на основе гетеропары  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  можно сделать вывод о корректности численной модели.

Из проведённого анализа результатов моделирования дифракционных спектров сверхрешёток на основе гетеропары  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  (интенсивность и угловые положения пиков, количество пиков-сателлитов и толщинных осцилляций) при различных технологических параметрах показано, что:

- толщины квантовых ям и барьеров определяют относительную интенсивность нулевого и основного пиков; положение пиков-сателлитов отрицательного и положительного порядков смещается к нулевому и основному пикам соответственно с ростом толщины периода сверхрешётки;
- доля алюминия в твёрдом растворе  $Al_xGa_{1-x}As$  не влияет на количество пиков-сателлитов на кривой качания, меняя лишь их угловое положение и полуширину вследствие изменения постоянной кристаллической решётки в

структуре;

- количество толщинных осцилляций растёт с увеличением количества периодов сверхрешётки, а их амплитуда падает.

Для сверхрешётки на основе гетеропары  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  рассчитаны дифракционные спектры в зависимости от разного количества периодов в структуре (1, 10, 20 и 60), доли алюминия в твердом растворе (от 15 % до 35 %), различных толщин квантовых ям (от 2 нм до 10 нм) и барьеров (от 15 до 35 нм). Из экспериментального спектра выращенной МПЭ QWIP-структуры со сверхрешёткой, содержащей 50 гетеропар  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , получены значения параметров: доля алюминия  $x = 26,5 \%$ , средняя толщина периода – 57,1 нм. После моделирования расчетного спектра и варьирования параметров они были уточнены: доля алюминия  $x = 26,7 \%$ , средняя толщина барьеров и квантовых ям – 51,6 нм и 4,6 нм соответственно.

В качестве взаимодополняющего и верификационного метода к методу рентгеновской дифрактометрии может служить просвечивающая электронная микроскопия. Результаты рентгеновской дифрактометрии подтверждаются сравнением с технологическими данными и результатами измерения образца на просвечивающем электронном микроскопе.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Бурлаков И. Д., Пономаренко В. П., Филачев А. М., Дегтярев Е. В. // Прикладная физика. 2007. № 2. С. 43.

2. Rogalski A. // Progress in Quantum Electronics. 2003. Vol. 27. No. 2. P. 59.
3. Бурлаков И. Д., Болтарь К. О., Власов П. В., Лопухин А. А., Торопов А. И., Журавлев К. С., Фадеев В. В. // Прикладная физика. 2016. № 3. С. 58.
4. Rogalski A., Martyniuk P., Kopytko M. // Applied Physics Reviews. 2017. Vol. 4. P. 031304.
5. Benyahia D., Kubiszyn L., Michalczewski K., Bogulski J., Koblowski A., Martyniuk P., Piotrowski J., Rogalski A. // Nanoscale Research Letters. 2018. Vol. 13. P. 196.
6. Rogalski A., Kopytko M., Martyniuk P. // Proceedings of SPIE. 2017. Vol. 13. P. 10177.
7. Шабрин А. Д., Гончаров А. Е., Пашкеев Д. А., Ляликов А. В., Егоров А. В. // Прикладная физика. 2017. № 3. С. 101.
8. Нестерец Я. И., Пунегов В. И., Павлов К. М. // Журнал технической физики. 1999. Т. 69. № 2. С. 44.
9. Reyner C. J., Kiefer A. M., Ariyawansa G., Duran J. M., Scheihing J. E. // Crystals. 2016. Vol. 6. P. 150.
10. Старкова М. В., Лихущина Е. В., Свешников С. В., Кацнельсон А. А. // Вестник МГУ. Физика и Астрономия. 1999. № 6. С. 38.
11. Маслова О. А., Захарченко И. Н., Бунина О. А., Юзюк Ю. И., Ortega N., Kumar A., Katiyar R. S. // Физика твердого тела. 2012. Т. 54. № 8. С. 1526.
12. Kladko V. P., Datsenko L. I., Korchovyi A. A., Machulin V. F., Lytvyn P. M., Shalimov A. V., Kuchuk A. V., Kogutyuk P. P. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. 2003. Vol. 6. No. 3. P. 392.

PACS: 42.25.Fx, 81.05.Hd, 61.05.C-, 78.30.Fs

## Numerical analysis of the X-ray diffraction spectra of AlGaAs/GaAs superlattices in relation to structural parameters

D. V. Ilinov<sup>1</sup>, A. D. Shabrin<sup>1</sup>, A. E. Goncharov<sup>1</sup>, and D. A. Pashkeev<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Orion R&P Association, JSC  
9 Kosinskaya st., Moscow, 111538, Russia

<sup>2</sup>MIREA – Russian Technological University (RTU MIREA)  
78 Vernadsky av., Moscow, 119454, Russia

Received January 24, 2019

*Properties of X-ray diffraction spectra of multilayer periodical heterostructures AlGaAs/GaAs have been studied in dependence of layers' thickness and composition and the number of periods. It is shown that the number and intensity of additional diffraction maxima (satellites) on rocking curves increases together with increasing layers' thickness and the number of periods. The composition of layers doesn't affect the number of maxima but leads to changing their angular positions and the full width at half maximum values. Numerical calculations have been compared to experimental spectra observed on the heterostructure grown by means of molecular beam epitaxy consisting of 50 periods of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As with the composition  $x \approx 26.7\%$  and the thickness  $d \approx 51.6$  nm and GaAs with the thickness  $d \approx 4.6$  nm. Good conformity between the calculated values and the technological parameters and experimental studies by means of transmission electron microscopy has been established.*

**Keywords:** X-ray diffractometry, superlattices, multilayer structure, transfer matrices, rocking curves, solid solution AlGaAs.

### REFERENCES

1. I. D. Burlakov, V. P. Ponomarenko, A. M. Filachev, and E. V. Degtyarev, Prikl. Fiz., No. 2, 43 (2007).
2. A. Rogalski, Progress in Quantum Electronics **27** (2), 59 (2003).
3. I. D. Burlakov, K. O. Boltar, P. V. Vlasov, A. A. Lopukhin, A. I. Toropov, K. S. Juravlev, and V. V. Fadeev, Prikl. Fiz., No. 3, 58 (2016).
4. A. Rogalski, P. Martyniuk, and M. Kopytko, Applied Physics Reviews **4**, 031304 (2017).
5. D. Benyahia, L. Kubiszyn, K. Michalczewski, J. Bogulski, A. Koblowski, P. Martyniuk, J. Piotrowski, and A. Rogalski, Nanoscale Research Letters, **13**, 196 (2018).
6. A. Rogalski, M. Kopytko, and P. Martyniuk, Proceedings of SPIE **13**, 10177 (2017).
7. A. D. Shabrin, A. E. Goncharov, D. A. Pashkeev, A. V. Lyalikov, and A. V. Egorov, Journal of Communications Technology and Electronics **63** (3), 309 (2018).
8. Ya. I. Nesterec, V. I. Punegov, and K. M. Pavlov, Tech. Phys. **69** (2), 44 (1999).
9. C. J. Reyner, A. M. Kiefer, G. Ariyawansa, J. M. Duran, and J. E. Scheihing, Crystals **6**, 150 (2016).
10. M. V. Starkova, E. V. Lihushina, S. V. Sveshnikova, and A. A. Kacnelson, Vestnik MGU, Fizika i Astronomiya, No. 6, 38 (1999).
11. O. A. Maslova, I. N. Zaharchenko, O. A. Bunina, U. I. Uzuk, N. Ortega, A. Kumar, and R. S. Katiyar, Phys. Solid State **54** (8), 1526 (2012).
12. V. P. Kladko, L. I. Datsenko, A. A. Korchovyi, V. F. Machulin, P. M. Lytvyn, A. V. Shalimov, A. V. Kuchuk, and P. P. Kogutyuk, Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics **6** (3), 392 (2003).