

УДК 548.732

©1995

ПОГАШЕНИЕ САТЕЛЛИТНЫХ МАКСИМУМОВ СВЕРХРЕШЕТКИ С ПЕРИОДИЧЕСКИ РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ МИКРОДЕФЕКТАМИ

В.И. Пунегов

Сыктывкарский государственный университет
(Поступила в Редакцию 18 апреля 1994 г.
В окончательной редакции 11 октября 1994 г.)

Построена кинематическая теория рассеяния рентгеновских лучей на двухкомпонентной полупроводниковой сверхрешетке с хаотически распределенными в слоях микродефектами. Получены аналитические решения для углового распределения когерентно и диффузно рассеянных волн. Для сверхрешетки, период которой состоит из слоев с разной степенью аморфизованности, образуя тем самым периодическое распределение дефектов по глубине, обнаружен и исследован эффект погашения сателлитных максимумов. Показано, что для заданных толщин слоев сверхпериода этот эффект обусловлен структурным совершенством и композиционным составом сверхрешетки. Дается сравнительный анализ вычисления кривых дифракционного отражения в рамках кинематической и динамической теории дифракции рентгеновских лучей на неидеальной дискретно-слоистой сверхрешетке.

Современные достижения технологии позволяют легко изменять одномерный дополнительный потенциал полупроводниковой сверхрешетки. Это приводит к изменениям энергетического спектра (зонной структуры) полупроводника. Поэтому искусственно создаваемые сверхрешетки имеют уникальные оптические, транспортные и акустические свойства [1]. Большой интерес вызывают так называемые композиционные сверхрешетки, представляющие собой эпитаксиально выращенные периодически чередующиеся слои полупроводников с отличающимися постоянными решетки. Так, например, методом молекулярно-лучевой эпитаксии получают атомно-гладкие поверхности и очень резкие границы раздела между гетерослоями [1]. Однако, несмотря на значительный прогресс в технологии синтеза искусственных сверхрешеток, не всегда удается избежать различных структурных дефектов. Поскольку дефекты сильно влияют на физические свойства сверхрешеток, получение информации о типе, концентрации, размерах дефектов, а также о их распределении по глубине полупроводниковой системы является весьма важной теоретической и прикладной задачей. Неразрушающие исследования структуры полупроводниковых сверхрешеток успешно реализуются с помощью рентгенодифракционных методов [2]. Присутствие дефектов в сверхрешет-

ке порождает некогерентное (диффузное) рассеяние и изменяет профиль кривой дифракционного отражения (КДО) когерентно рассеянных волн [3].

Проводя численное моделирование КДО от неидеальной сверхрешетки в рамках динамической теории дифракции с использованием аналитического решения [4] и рекуррентной процедуры [3], был зафиксирован эффект изменения интенсивности сателлитных максимумов при наличии дефектов в слоях с одинаковым композиционным составом. Из-за сложности полученного аналитического решения не удалось дать простое и ясное объяснение данному явлению на основе динамической теории дифракции.

Настоящая статья посвящена развитию кинематической теории дифракции на неидеальной дискретно-слоистой сверхрешетке. Используемый при этом формализм существенно упрощает задачу и, по-видимому, позволит дать ответ в ясной и доступной форме на вопросы, связанные с особенностями формирования рентгенодифракционных спектров от сверхрешеток с дефектными слоями, а также выявить причины отмеченного выше поведения сателлитных максимумов сверхрешетки с периодически распределенными по глубине микродефектами.

1. Когерентное рассеяние

Рассмотрим дифракцию рентгеновских лучей на кристаллическом слое в рамках кинематического приближения. Для простоты оставим свой выбор на следующей физической модели: отражающие атомные плоскости кристалла параллельны входной поверхности (симметричный случай Брэгга); заданный композиционный состав кристаллического слоя соответствует определенному межплоскостному расстоянию системы отражающих плоскостей (для кристалла с напряженными слоями пренебрегаем горизонтальными составляющими деформации решетки); монохроматическое рентгеновское излучение с длиной волны λ падает под углом ϑ к входной поверхности. В кинематическом приближении мы не учитываем изменений интенсивности проходящего рентгеновского пучка, и уравнение для амплитуды дифракционной волны E_g может быть записано в виде [5]

$$-\frac{dE_g}{dz} = i\sigma_g e^{i(\eta z - \mathbf{g}z)}, \quad (1)$$

где \mathbf{u} — вектор атомных смещений; \mathbf{g} — вектор обратной решетки, умноженный на 2π ; коэффициент $\sigma_g = \pi\chi_g C / (\lambda \sin \vartheta_0)$. Здесь χ_g — фурье-компонента рентгеновской поляризуемости, C — поляризационный фактор ($C = 1$ для σ - и $\cos 2\vartheta_0$ для π -поляризации), ϑ_0 — угол Брэгга. Строго говоря, коэффициент σ_g в общем случае может зависеть от координаты z , направленной в глубь кристалла. Это имеет место, например, при неоднородном распределении компонентов твердого раствора по толщине слоя. Далее мы будем предполагать, что композиционный состав в пределах отдельного слоя однороден, и, следовательно, σ_g будет постоянной величиной в пределах этого слоя. В

показателе экспоненты (1)

$$\eta = (2\pi/\lambda \sin \vartheta_0)(\chi_0 + \sin 2\vartheta_0 \Delta\vartheta)$$

— угловая переменная [3], определяемая угловой отстройкой $\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_0$.

Применительно к кристаллическому слою толщиной l запишем формальное решение уравнения (1)

$$E_g(z) = i \int_z^l \sigma_g \exp[i(\eta z' - \mathbf{g}\mathbf{u})] dz' + E_g l, \quad (2)$$

где $E_g(l)$ — амплитуда волны на нижней границе ($z = b$). Полученное выражение (2), определяющее значение амплитуды рентгеновской волны на глубине z от входной поверхности кристалла, используем для исследования дифракции на полупроводниковой сверхрешетке.

Пусть период (или ячейка) дискретно-слоистой сверхрешетки состоит из двух слоев различного композиционного состава. Каждый такой слой, например с номером n , характеризуется своим межплоскостным расстоянием $d_{1,2}$ (индекс 1 относится к верхнему слою ячейки сверхрешетки), своей рассеивающей способностью $\sigma_{1,2}^n$ и своими структурными нарушениями. Под термином «структурные нарушения» в дальнейшем будем понимать наличие в слоях многослойной системы статистически распределенных микродефектов определенного вида, размера и концентрации. Обозначим через l_1 и l_2 толщины слоев, образующие период сверхрешетки $l = l_1 + l_2$. Воспользуемся тем обстоятельством, что амплитуду волны в произвольном слое сверхрешетки в любой ее точке с координатой z можно записать в виде решения (2). Полагая далее, что в (2) слагаемое $E_g(l) = R$ — амплитудный коэффициент отражения (АКО) от всех нижних слоев, для АКО сверхрешетки, состоящей из N периодов, получаем

$$R = i \sum_{n=1}^N \left\{ \int_{(n-1)l}^{(n-1)l+l_1} \sigma_1^n \exp[i(\eta z' - \mathbf{g}\mathbf{u}_1^n(z'))] dz' + \int_{(n-1)l+l_1}^{nl} \sigma_2^n \exp[i(\eta z' - \mathbf{g}\mathbf{u}_2^n(z'))] dz' \right\}, \quad (3)$$

где $\mathbf{u}_{1,2}^n(z)$ — векторы атомных смещений в верхнем и нижнем слое периода n сверхрешетки соответственно. Эти векторы представим в виде суммы усредненной $\langle \mathbf{u}_{1,2}^n(z) \rangle$ и флуктуационной $\sigma \mathbf{u}_{1,2}^n(z)$ компонент. Величина вектора смещения усредненной компоненты обусловлена композиционным составом, в то время как флуктуационная часть есть результат атомных смещений, вызванных статистически распределенными

ми микродефектами. Статистическое усреднение соотношения (3) приводит к следующему решению для АКО когерентно рассеянных волн:

$$R^0 = \langle R \rangle = i \sum_{n=1}^N \left\{ \int_{(n-1)l}^{(n-1)l+l_1} \sigma_1^n E_1^n \exp \left[i(\eta z' - \mathbf{g} \langle \mathbf{u}_1^n(z') \rangle) \right] dz' + \int_{(n-1)l+l_1}^{nl} \sigma_2^n E_2^n \exp \left[i(\eta z' - \mathbf{g} \langle \mathbf{u}_2^n(z') \rangle) \right] dz' \right\}, \quad (4)$$

где $E_1^0(z) = \langle e^{i\mathbf{g}\sigma\mathbf{u}_1^n} \rangle = e^{-w_1^n}$, $E_2^n(z) = \langle e^{i\mathbf{g}\sigma\mathbf{u}_2^n} \rangle = e^{-w_2^n}$ — статические факторы Лебая–Валлера верхнего и нижнего слоя периода сверхрешетки соответственно. Соотношение (4) описывает угловое распределение амплитуды отраженной когерентной рентгеновской волны от многослойной системы с послойно изменяющимися по глубине структурными параметрами.

В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением однородного распределения дефектов в субслоях сверхрешетки. В этом случае статические факторы $E_{1,2}^n$ не зависят от координат и их можно вынести из под знака интеграла. Таким образом, решение для когерентно рассеянной на сверхрешетке интенсивности примет вид

$$I^0(\Delta\vartheta) = \left| \sum_{n=1}^N \left\{ \sigma_1^n E_1^n \int_{(n-1)l}^{(n-1)l+l_1} \exp \left[i(\eta z' - \mathbf{g} \langle \mathbf{u}_1^n(z') \rangle) \right] dz' + \sigma_2^n E_2^n \int_{(n-1)l+l_1}^{nl} \exp \left[i(\eta z' - \mathbf{g} \langle \mathbf{u}_2^n(z') \rangle) \right] dz' \right\} \right|^2. \quad (5)$$

В рассматриваемом случае симметричной брэгговской дифракции на одномерно деформированной структуре справедливо $\mathbf{g}(\mathbf{u}) = -\mathbf{g}(u(z))$. Если композиционный состав и распределение дефектов в соответствующих слоях сверхрешетки периодически повторяются по толщине без изменений, т.е. не зависят от номера периода, то в соотношении (5) параметры $\sigma_{1,2}^n = \sigma_{1,2}$ и $E_{1,2}^n = E_{1,2}$ можно вынести за знак суммы. Следующим шагом преобразования (5) является вычисление интегралов. Для этого необходимо найти аналитические выражения векторов атомных смещений $\langle \mathbf{u}_{1,2}^n(z) \rangle$. Пусть d_1 и d_2 — межплоскостные расстояния отражающих атомных плоскостей соответствующих слоев (образующих период) сверхрешетки. Тогда $d = (d_1 l_1 + d_2 l_2) / l$ — среднее межплоскостное расстояние сверхпериода. Величины $\Delta d_1 / d$, $\Delta d_2 / d$ определяют рассогласование межплоскостных расстояний относительно d , где $\Delta d_1 = d_1 - d$ и $\Delta d_2 = d_2 - d$. Используя выражение для вычисления величины атомных смещений

$$u(z) = \frac{1}{d} \int_0^z \Delta d(z') dz',$$

где $\Delta d(z)$ — зависящая от координаты z деформация кристаллической решетки, находим

$$\langle u_1^n(z) \rangle = -(n-1)(\Delta d_1/d)l + (\Delta d_1/d)z,$$

$$\langle u_2^n(z) \rangle = -(n-1)(\Delta d_2/d)l + ([\Delta d_1 - \Delta d_2]/d)l + (\Delta d_2/d)z. \quad (6)$$

При получении соотношений (6) мы воспользовались равенством

$$\Delta d_1 l_1 = -\Delta d_2 l_2.$$

Подставляя (6) в решение (4) и учитывая однородность распределения микродефектов в слоях, получаем простое выражение для АКО когерентно рассеянных волн

$$R^c = iF_s e^{i\psi} \cdot \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}, \quad (7)$$

где $y = A_1 l_1 + A_2 l_2$, $A_{1,2} = (\eta + 2\pi \Delta d_{1,2}/d^2)/2$. Структурная амплитуда сверхрешетки имеет вид

$$F_s = \sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 l_1)}{A_1} + e^{iy} \sigma^2 E_2 \frac{\sin(A_2 l_2)}{A_2}. \quad (8)$$

Показатель экспоненты в (7) зависит от числа периодов сверхрешетки N , рассогласований межплоскостных расстояний $\Delta d_{1,2}/d$ и угловой переменной η

$$\psi = (N-1)y + A_1 l_1.$$

Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности запишем как

$$I^c(\Delta\vartheta) = |F_s|^2 e^{-2\text{Im}\psi} \left| \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)} \right|^2. \quad (9)$$

По своему виду решение (9) совпадает с выражением для углового распределения рассеянной интенсивности от тонкой монокристаллической пленки [6]. Роль структурной амплитуды пленки играет F_s . В рассматриваемой задаче N соответствует числу отражающих атомных плоскостей в пленке, а переменная y — параметру, определяющему отклонение отражающих плоскостей от точного условия Брэгга.

2. Диффузное рассеяние

В кинематическом приближении решение для углового распределения диффузно рассеянных волн от кристаллических структур с изменяющимся по глубине межплоскостным расстоянием найдено в [5,7]. Для анализа диффузного рассеяния от дискретно-слоистой сверхрешетки необходимо задать модель дефектов в каждом из слоев сверхпериода. В рамках теоретического рассмотрения можно принять наиболее простую модель в виде сферических аморфных кластеров, однородно распределенных в слоях сверхрешетки. Для проведения численных расчетов при непосредственном сопоставлении с экспериментальными

результатами следует использовать модель дефектов, наиболее подходящую для данного конкретного случая (например, модель дефектов кулоновского типа [8]). Пусть r_1, r_2 и c_1^d, c_2^d — радиусы и концентрации дефектов в соответствующих слоях периода сверхрешетки. Для принятой модели статические факторы Дебая-Валлера $E_{1,2}$ имеют простой вид [9]

$$E_{1,2} = \exp(-4\pi r_{1,2}^3 c_{1,2}^d / 3).$$

Если $\mu_i l_i \ll 1$ (это реализуется практически всегда), где $\mu_i (i = 1, 2)$ — коэффициенты поглощения рентгеновских лучей для соответствующих слоев периода сверхрешетки, выражение для интенсивности диффузно рассеянных волн на одном периоде запишется следующим образом:

$$I_1^d = 2 \left\{ |\sigma_1|^2 (1 - E_1^2) \int_0^{l_1} \tau_1(\eta, z) dz + e^{-\mu_1 l_1} |\sigma_2|^2 (1 - E_2^2) \int_0^{l_2} \tau_2(\eta, z) dz \right\}, \quad (10)$$

где $\tau_{1,2}$ — корреляционные длины соответствующих слоев периода сверхрешетки. Появление $\exp(-\mu_1 l_1)$ во втором слагаемом (10) обусловлено тем обстоятельством, что диффузно рассеянные кванты, рожденные в нижнем слое периода, испытывают фотопоглощение при прохождении верхнего слоя. Используя выражение для длины корреляции одномерно деформированного кристалла [5,7] и учитывая особенности рассматриваемой модели, имеем

$$\tau_{1,2}^{(n)} = \text{Re} \int_0^\infty g_{1,2}(\xi) \exp(i[\eta\xi - \mathbf{g}(\langle \mathbf{u}_{1,2}^n(\xi+z) \rangle - \langle \mathbf{u}_{1,2}^0(z) \rangle)]) d\xi, \quad (11)$$

где

$$g_{1,2}(\xi) = 1 - \frac{\xi}{4r_{1,2}\gamma_0} \left(3 - \frac{(\xi)^2}{4r_{1,2}^2\gamma_0^2} \right)$$

— корреляционные функции для сферических аморфных кластеров [9]. Здесь $\gamma_0 = \sin(\vartheta_0)$. Подставляя явные выражения полей атомных смещений в (11), получаем

$$\tau_{1,2}^{(n)} = \tau_{1,2} = \text{Re} \left\{ \int_0^\infty g_{1,2}(\xi) \exp(i2A_{1,2}\xi) d\xi \right\}. \quad (12)$$

Как и следовало ожидать, корреляционные длины чередующихся слоев со строго выдержанными по координате z структурными параметрами не зависят ни от z , ни от номера периода сверхрешетки. С учетом принятой модели они могут отличаться по величине (если $r_1 \neq r_2$), однако угловая зависимость сохраняется [9,10]

$$\tau_i(\eta) = (6r_i/X_i^4) \left[(X_i^2/2) + 1 - \cos(X_i) - X_i \cdot \sin(X_i) \right]. \quad (13)$$

Здесь $X_i = \tau_i \gamma_0 2A_i$, $i = 1, 2$. В результате выражение для углового распределения диффузно рассеянной интенсивности на одном периоде сверхрешетки примет простой вид

$$I_1^d = 2 \{ |\sigma_1|^2 (1 - E_1^2) \tau_1 l_1 + e^{-\mu_1 l_1} |\sigma_2|^2 (1 - E_2^2) \tau_2 l_2 \}. \quad (14)$$

Далее будем придерживаться следующих рассуждений: диффузно рассеянные волны, рожденные в пределах самого нижнего периода сверхрешетки, проходят через расположенные выше сверхрешеточные ячейки и испытывают фотопоглощение. Введем средний коэффициент поглощения на одном периоде сверхрешетки $\mu = (\mu_1 l_1 + \mu_2 l_2)/l$. Если число таких периодов N , диффузный фон в окрестности брэгговских рефлексов будет описываться формулой

$$I^d(\Delta\vartheta) = \sum_{n=1}^N I_1^d \exp(-\mu l[n - 1]/2).$$

В приближении, в котором интенсивности диффузно рассеянных волн одинаковы от всех ячеек сверхрешетки, независимо от их расположения в многослойной структуре, имеем

$$I^d(\Delta\vartheta) = I_1^d (\text{sh}(\mu l N) / \text{sh}(\mu l)) \exp(-\mu l[N - 1]/2).$$

Если выполняется условие $\mu l N \ll 1$, то, разложив гиперболические синусы в ряд $\text{sh}(z) = z + (z^3/3!) + \dots$ и ограничившись первым членом разложения, получаем

$$I^d(\Delta\vartheta) = N I_1^d \exp(-\mu l[N - 1]/2). \quad (15)$$

Таким образом, в кинематическом приближении угловое распределение диффузно рассеянной интенсивности определяется толщинами слоев сверхрешетки, их рассеивающими способностями, факторами Дебая-Валлера (степенью аморфизованности слоев), длинами корреляции (типом и размерами дефектов), а также числом периодов сверхрешетки N .

3. Обсуждение результатов

Для модели идеальной непоглощающей сверхрешетки ($E_{1,2} = 1$) явление рентгеновской дифракции детально проанализировано в [2]. В настоящей работе основное внимание уделяется исследованию углового распределения рассеянной интенсивности в зависимости от структурного совершенства слоев сверхрешетки. Рассмотрим сначала решение для углового распределения когерентно рассеянной интенсивности (9). Принимая во внимание тот факт, что искусственно создаваемые полупроводниковые сверхрешетки имеют сравнительно небольшие толщины ($\simeq 0.1 - 1.0 \mu\text{m}$, что много меньше длины поглощения $(\mu_1 + \mu_2)^{-1}$), в (9) сохраним только вещественные части комплексных угловых параметров $A_{1,2}$ ($A_{1,2} \sim \eta \sim \chi_0^r + i\chi_0^{im}$, χ_0^r — вещественная и

χ_0^{im} — мнимая части фурье-компоненты поляризуемости в направлении прохождения рентгеновского пучка) и коэффициентов $\sigma_{1,2}$. Поэтому

$$I^c(\Delta\vartheta) = |F_s|^2 \frac{\sin^2(Ny)}{\sin^2(y)}, \quad (16)$$

где

$$|F_s|^2 = \sigma_1^2 E_1^2 \frac{\sin^2(A_1 l_1)}{A_1^2} + \sigma_2^2 E_2^2 \frac{\sin^2(A_2 l_2)}{A_2^2} + 2\sigma_1 E_1 \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_1 l_1)}{A_1} \frac{\sin(A_2 l_2)}{A_2} \cos(y).$$

Интерференционная функция Лауэ сверхрешетки $L_s = \frac{\sin^2(Ny)}{\sin^2(y)}$, присутствующая в решении (16), принимает максимальное значение $L_s = N^2$ при $y = \pi m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Отсюда для угловой переменной η получаем $\eta_m = 2\pi m/l$. Условие $\eta_m = \eta_0 = 0$ соответствует угловому положению основного максимума сверхрешетки, $\eta_{\pm 1} = 2\pi/l$ — положениям первых, $\eta_{\pm 2} = (2\pi/l)2$ — вторых и т.д. спутников. Величина когерентно рассеянной интенсивности определяется не только значением интерференционной функции, но и значением структурной амплитуды сверхрешетки F_s , которая, строго говоря, также является функцией углового параметра. В зависимости от рассеивающей способности (композиционного состава), степени аморфизации, рассогласования параметров решетки, входящих в многослойную структуру элементов, а также толщин слоев эта амплитуда может принимать различные значения. Отметим, что $\sigma_{1,2}$ и $\Delta d_{1,2}$ однозначно определяются композиционным составом сверхрешетки. Выполнение условия $\eta = \eta_m$ позволяет записать простое выражение для интенсивностей спутниковых максимумов

$$I_m = |F_s^m N^2|,$$

где структурный фактор имеет вид

$$|F_s^m|^2 = \left(\sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1^m l_1)}{A_1^m} + (-1)^m \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2^m l_2)}{A_2^m} \right)^2. \quad (17)$$

Угловые параметры $A_{1,2}^m = \pi(m/l + \alpha_{1,2})$ связаны между собой соотношением $A_2^m l_2 = \pi m - A_1^m l_1$, $\alpha_{1,2} = \Delta d_{1,2}/d^2$. Если $m = 0$, что соответствует угловому положению основного пика сверхрешетки, и выполняется условие $\alpha_{1,2} l_{1,2} \ll 1$, для основного максимума можно записать $|F_s^0|^2 \approx (\sigma_1 E_1 l_1 + \sigma_2 E_2 l_2)^2$. Из этого соотношения непосредственно следует закон убывания интенсивности основного пика сверхрешетки в зависимости от структурного совершенства слоев ее периода. Например, если сверхрешетка образована чередованием совершенных ($E_1 = 1$) и аморфных ($E_2 \approx 0$) слоев, интенсивность основного пика будет определяться лишь рассеивающей способностью кристаллического слоя в данном дифракционном направлении и его толщиной ($|F_s^0|^2 \approx \sigma_1^2 l_1^2$). Величины $f_i = \sigma_i E_i l_i$, где $i = 1, 2$, имеет

смысл трактовать как максимальные значения амплитуд рассеяния слоев сверхрешетки по аналогии с атомными амплитудами в рентгеновском структурном анализе. Согласно (17), можно подобрать параметры субслоев (толщину, композиционный состав и статический фактор Дебая-Валлера), при которых $|F_s^m|^2 \approx 0$. Иными словами, для определенных спутных максимумов формируются условия, при которых из-за интерференции отраженных рентгеновских волн имеет место ослабление дифракционного пучка. Значит, в дифракционных направлениях, соответствующих положениям этих спутников, рассеянные в слоях сверхрешетки рентгеновские волны гасят друг друга. В других же направлениях, наоборот, возможно интерференционное сложение амплитуд, в результате чего следует возрастание интенсивности спутных максимумов. Это явление и было обнаружено в численных расчетах [3,4] при варьировании статических факторов соответствующих слоев сверхрешетки.

4. Результаты численных расчетов КДО

Численные расчеты кривых дифракционного отражения выполнены для сверхрешеток типа $Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As \dots / (001)GaAs$, где x и y определяют концентрацию алюминия в субслоях многослойной периодической структуры. Дифракционные спектры соответствуют симметричному (004)-отражению σ -поляризованного CuK_{α_1} -излучения.

На рис. 1 показаны графики величин когерентно рассеянных интенсивностей в угловых областях расположения спутников в зависимости от величины статических факторов $E_{1,2}$ соответствующих слоев ячейки десяти периодной $GaAs/Al_{0.9}Ga_{0.1}As/\dots$ сверхрешетки. Из этого рисунка ясно следует, что при определенных значениях статических факторов имеет место «резонансное» уменьшение интенсивности спутных максимумов. Причем эффект погашения интенсивностей спутников зависит и от соотношения толщин слоев периода сверхрешетки. Для многослойной периодической структуры с $l_1 = l_2 = 30$ нм минимальное значение интенсивности спутного пика (-1) имеет место при $E_2 = 0.4$, а для сверхрешетки с $l_1 = 50$ и $l_2 = 10$ нм — при $E_2 = 0.05$. Последнее указывает на то, что в рамках рассматриваемой модели сверхрешетки с достаточно большим отношением l_1/l_2 погашение (-1)-спутника наблюдается при наличии сильно аморфизованного нижнего слоя $AlGaAs$.

С другой стороны, для этих двух сверхрешеток дефектность верхнего слоя не дает таких сильных различий в статических факторах, при которых исчезают спутные максимумы (в нашем случае $+1$) и $+2$) в правой части дифракционного спектра. На рис. 2 показаны КДО сверхрешетки с периодическим распределением микродефектов по ее толщине. Буквой s обозначен дифракционный максимум (004) от совершенной подложки $GaAs$. Интересно отметить, что при несовершенных верхних слоях периода сверхрешетки наблюдается погашение интенсивности спутных максимумов слева от основного пика сверхрешетки (в области меньших углов). Наличие дефектов в нижних слоях периода приводит к исчезновению определенного спутника в области больших углов КДО (рис. 2). Интенсивность диффузного фона полностью определяется толщинами слоев периода сверхрешетки,

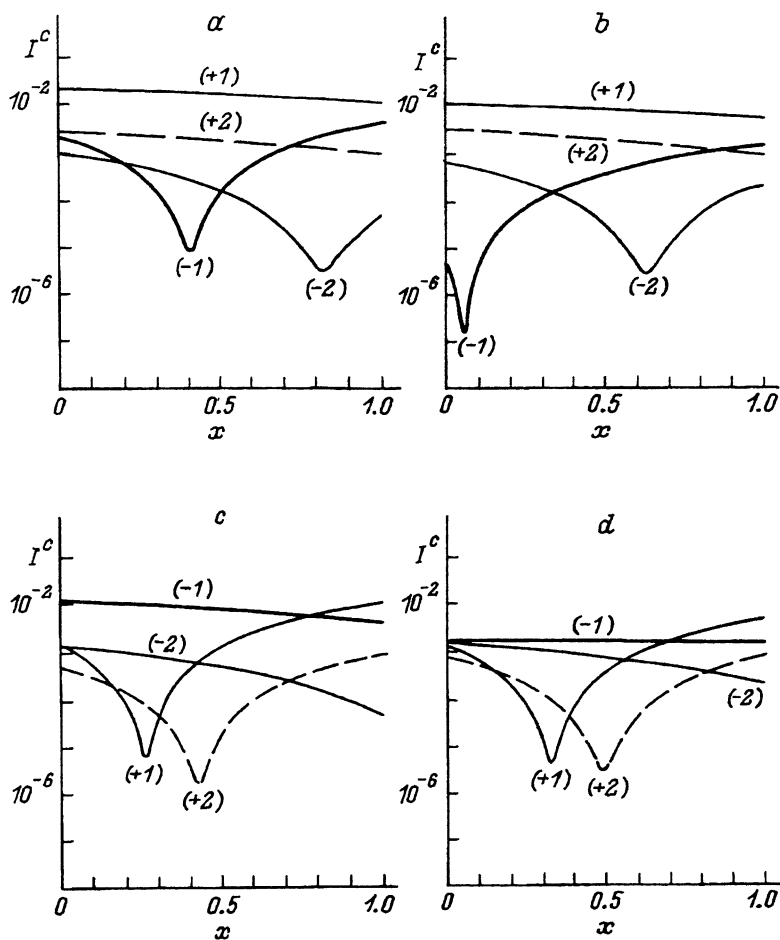


Рис. 1. Интенсивности спутных максимумов в зависимости от структурного совершенства нижних AlGaAs (a,b) и верхних GaAs (c,d) слоев периода сверхрешетки GaAs/Al_{0.9}Ga_{0.1}As/... (001)GaAs.

Число периодов $N = 10$, радиус дефектов 1 нм. Толщины слоев периода: a, c — $l_1 = l_2 = 30$ нм, b, d — $l_1 = 50$, $l_2 = 10$ нм. Статические факторы: a, b — $E_1 = 1$; c, d — $E_2 = 1$.

их рассеивающими способностями (композиционным составом), общей степенью несовершенства периода, включая тип, размеры и концентрацию дефектов, а также числом этих периодов в конструкции сверхрешетки. Так, в нашем случае интенсивность диффузного фона для равнотолщинной многослойной системы тем сильнее, чем меньше статический фактор Дебая-Валлера (ср. рис. 2, a и b) и чем больше рассеивающая способность дефектного слоя (рис. 2, a и d).

Строго говоря, наличие дефектов в слое уменьшает рассеивающую способность этого слоя в условиях дифракции. Рассеивающая способность может быть уменьшена и изменением композиционного состава. Действительно, в силу более слабой рассеивающей способности Al по сравнению с Ga увеличение концентрации алюминия x приводит к такому же эффекту, что и увеличение концентрации де-

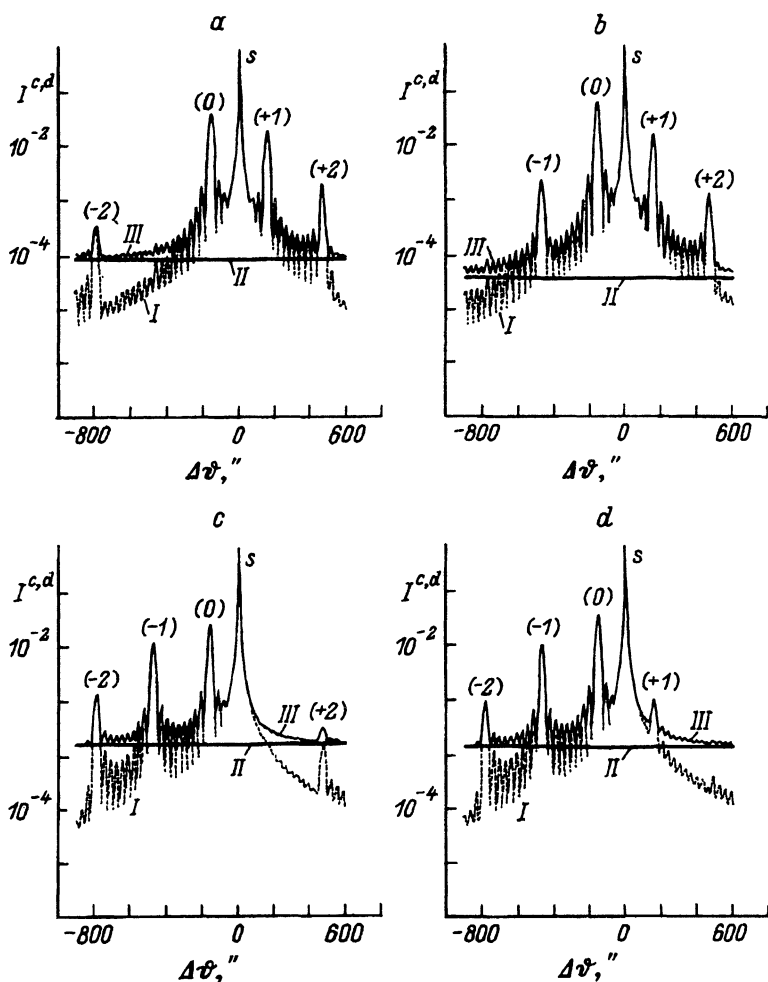


Рис. 2. Эффект погашения спутных максимумов сверхрешетки 30 нм GaAs/30 нм Al_{0.9}Ga_{0.1}As/.../(001)GaAs для статических факторов.

E_1 и E_2 : a — 1 и 0.4, b — 1 и 0.8, c — 0.25 и 1, d — 0.4 и 1. Здесь и на рис. 4,5 пунктирная линия — когерентная составляющая, толстая сплошная линия II — диффузная составляющая, тонкая сплошная линия III — полная КДО.

фактов. Существенное отличие этих двух процессов состоит в том, что дефекты являются причиной появления углового распределения диффузно рассеянной интенсивности. Рис. 3 иллюстрирует значения когерентно рассеянной интенсивности спутников в зависимости от концентрационного состава нижнего слоя периода сверхрешетки при различном структурном совершенстве всей ячейки. Если слои совершенны или одинаково несовершенны (рис. 3, a, b), поведение кривых интенсивностей спутников по виду совпадает, однако при наличии дефектов спутничные максимумы имеют пропорционально меньшую интенсивность. В данном случае имеется один единственный минимум для (-2)-спутника при концентрации $x = 0.5$. Поведение этих кривых изменяется в случае периодического распределения микродефек-

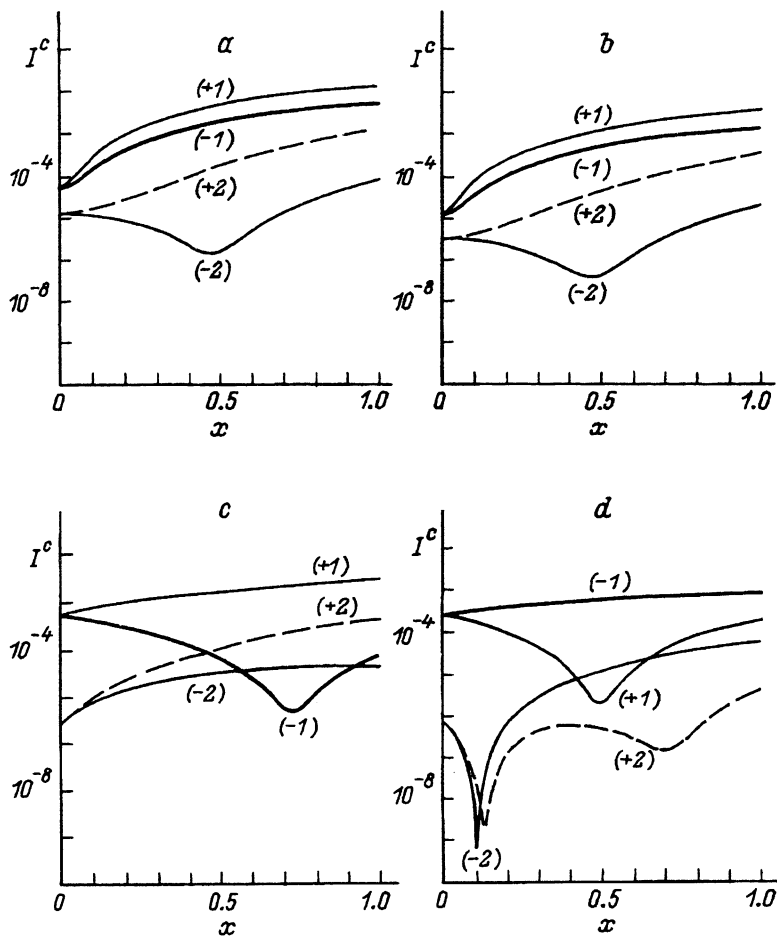


Рис. 3. Интенсивности спутных максимумов сверхрешетки 30 нм GaAs/30 нм $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\dots/(001)\text{GaAs}$ в зависимости от концентрации алюминия x .
 $a - E_1 = E_2 = 1$, $b - E_1 = E_2 = 0.5$, $c - E_1 = 1$; $E_2 = 0.5$, $d - E_1 = 0.5$, $E_2 = 1$.

тов (рис. 3, c, d). Так, например, при чередовании совершенного слоя GaAs и дефектного AlGaAs ($E_2 = 0.5$) минимум интенсивности имеет уже кривая для (-1)-спутника. Если же дефектным оказывается сильно рассеивающий слой GaAs, картина распределения спутных максимумов в зависимости от концентрации x становится достаточно сложной (рис. 3, d). При этом кривая интенсивности (+2)-спутника как функция этого параметра имеет два минимума. На рис. 4 изображены КДО от сверхрешеток GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\dots/(001)\text{GaAs}$ с чередующимися совершенными и несовершенными (статический фактор равен 0.5) слоями.

При определенных значениях концентрации Al на профиле КДО наблюдается полное (рис. 4, a, b) или частичное (рис. 4, c, d) погашение спутных пиков. В нашем случае на профиле КДО не формируются первые спутники в области меньших углов для совершенных слоев GaAs и соответственно в области больших углов для совершенных

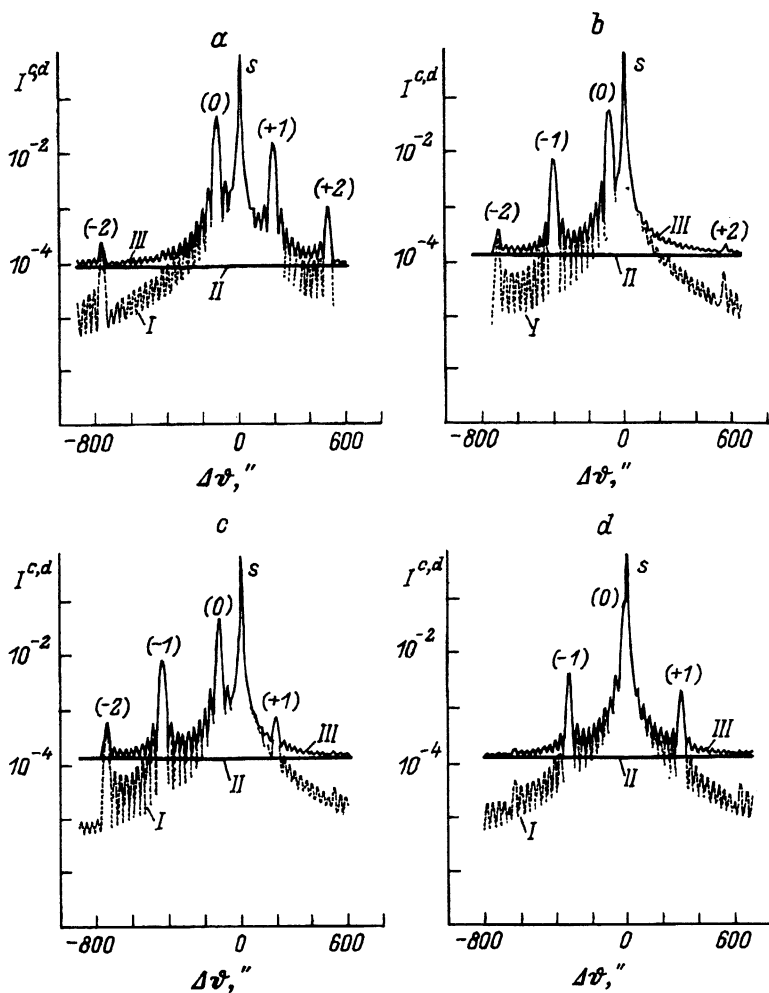


Рис. 4. Эффект погашения спутных максимумов сверхрешетки 30 nm GaAs/30 nm Al_xGa_{1-x}As/.../(001)GaAs для фиксированных значений концентрации алюминия x .

a — $E_1 = 1$, $E_2 = 0.5$, $x = 0.73$; b — $E_1 = 0.5$, $E_2 = 1$, $x = 0.50$, c — $E_1 = 0.5$, $E_2 = 1$, $x = 0.70$; d — $E_1 = 0.5$, $E_2 = 1$, $x = 0.10$.

слоев AlGaAs. Причем, согласно рис. 3, для малых концентраций x возможно погашение сразу двух спутных максимумов. Это явление иллюстрируется на рис. 4, d .

В заключение проведем сравнительный анализ расчетов КДО от дискретно-слоистых сверхрешеток по формулам кинематической и динамической теории [4]. Для тонкослойных десятипериодных структур численные расчеты в рамках кинематического приближения (рис. 5, a) и динамической теории дифракции [3,11] (рис. 5, b) практически совпадают. Однако увеличение толщин слоев сверхрешетки в пять раз приводит к существенному отличию дифракционных спектров (рис. 5, c, d). Это отличие прежде всего проявляется в интенсивностях когерентно рассеянных волн. В кинематическом приближении не учитывается

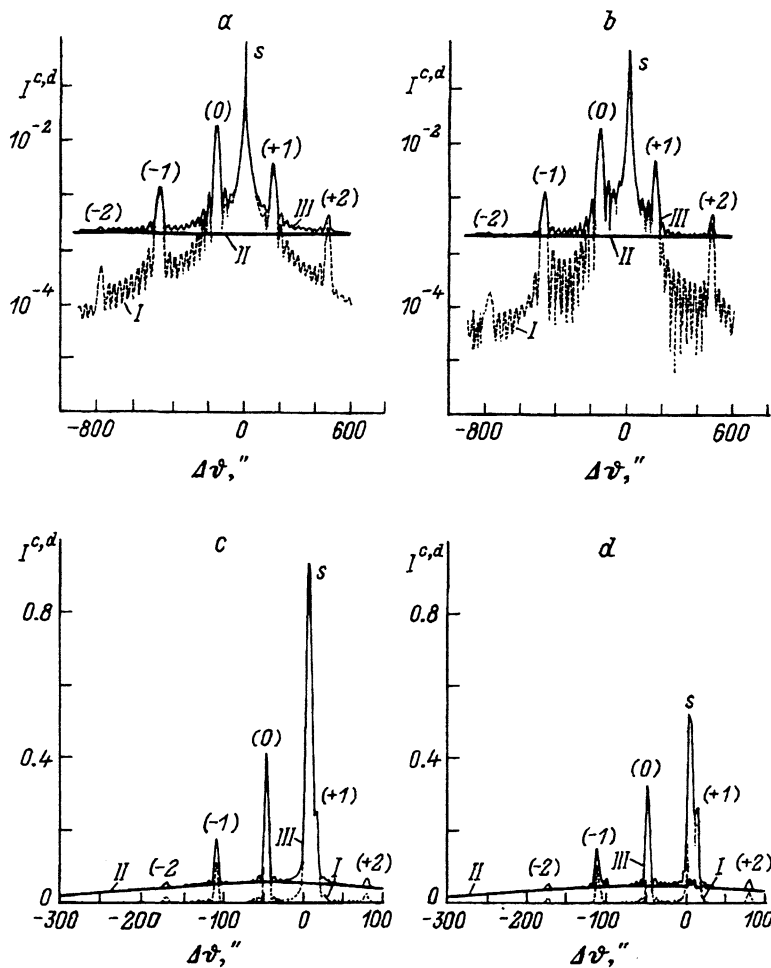


Рис. 5. Теоретические КДО от десяти периодной сверхрешетки GaAs/Al_x-Ga_{1-x}-As/.../(001)GaAs с тонкими ($l_1 = l_2 = 30$ нм радиус дефектов 1 нм, $x = 0.9$) (a,b) и толстыми ($l_1 = l_2 = 150$ нм радиус дефектов 50 нм, $x = 0.3$) (c,d) слоями.

Статические факторы $E_1 = E_2 = 0.5$. a,c — расчет по формулам кинематической теории дифракции, b,d — расчет по формулам динамической теории дифракции [4].

явление первичной экстинкции (следовательно, не выполняется закон сохранения энергии) и имеет место пропорциональный рост интенсивностей по мере увеличения толщины многослойной структуры. Экстинкционные эффекты, в отличие от динамического рассеяния, не проявляются и на угловом распределении диффузного фона (рис. 5,c,d). В условиях динамической дифракции последний имеет более сложную структуру, меньшую интенсивность, хотя в целом слабо отличается от кинетического профиля диффузно рассеянных волн.

Таким образом, периодическое распределение микродефектов по толщине сверхрешетки существенно влияет на вид КДО. Это влияние проявляется не столько в традиционных признаках, сопровождающих

дифракцию в объектах со статистически распределенными микродефектами (уменьшение когерентно рассеянной интенсивности и наличие диффузного фона) [12,13], сколько в формировании самого профиля КДО с учетом амплитудно- фазовых изменений рентгеновских волн, отраженных от чередующихся слоев сверхрешетки.

В настоящей работе основное внимание уделено кинематической рентгеновской дифракции на сверхрешетке, которая представляет собой многослойную систему с периодически повторяющимися по глубине неидеальными кристаллическими слоями. Практический интерес представляют задачи по рентгеновской дифракции на сверхрешетке с произвольным законом распределения дефектов по глубине. Численное решение данной проблемы может быть реализовано в рамках изложенной выше теории с использованием соотношения (3). Для более общей динамической дифракции эта задача сводится к рекуррентной процедуре [14].

Автор благодарит Международный научный фонд за частичную финансовую поддержку данной работы (грант N U600).

Список литературы

- [1] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М. (1989), 240 с.
- [2] Speriosu V.S., Vreeland T.Jr. J. Appl. Phys. **56**, 6, 1591 (1984).
- [3] Punegov V.I. Phys. Stat. Sol. (a) **136**, 1, (1993).
- [4] Пунегов В.И. Письма в ЖТФ **18**, 4, 65 (1992).
- [5] Пунегов В.И. Кристаллография **35**, 3, 576 (1990).
- [6] Джемс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М. (1950), 572 с.
- [7] Punegov V.I., Petrakov A.P., Tikhonov N.A. Phys. Stat. Sol. (a) **122**, 2, 449 (1990).
- [8] Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев (1983), 408 с.
- [9] Бушуев В.А. ФТТ **31**, 11, 70 (1989).
- [10] Пунегов В.И., Павлов К.М. Кристаллография **38**, 5, 34 (1993).
- [11] Пунегов В.И. ФТТ **33**, 1, 234 (1991).
- [12] Пунегов В.И. ФТТ **32**, 8, 2476 (1990).
- [13] Пунегов В.И. ЖТФ **60**, 10, 82 (1990).
- [14] Пунегов В.И. Письма в ЖТФ **20**, 2, 25 (1994).