

01:06:07

©1994

КИНЕМАТИЧЕСКАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ НА ПОЛИТИПНОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ С ДЕФЕКТАМИ

В.И.Пунегов, Я.И.Нестерец

Годом позднее после выдвинутой Есаки и Цу идеи создания полупроводниковой сверхрешетки путем периодического изменения композиционного состава [1] проведен неразрушающий рентгendifракционный контроль образца $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{0.5}\text{P}_{0.5}$, имеющего более чем 100 слоев толщиной 20 нм [2]. Спустя десятилетие в работе [3] предложено создать так называемые политипные сверхрешетки, период которых образован комбинацией трех и более полупроводников. В [3] ставится задача получения искусственных политипных сверхрешеток типа ABCABC, ABAC, ACBC и т.д. на основе трехкомпонентных систем из AlSb, GaSb и InAs. Такого сорта сверхрешетки не могут быть выращены на базе двухкомпонентных систем [3], однако их создание приводит к дополнительным трудностям как в сфере технологии, так и в исследовании физических свойств. Поэтому имеются предложения о конструкции сверхрешетки с периодом из двух бислоев $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$ [4]. Помимо композиционного состава, важную роль в электрических, оптических и транспортных свойствах сверхрешетки играют структурные дефекты [5]. На примере сверхрешетки, образованной чередованием двух слоев разного композиционного состава и разного структурного совершенства, показано, что наличие периодически расположенных дефектов сильно изменяет профиль кривой дифракционного отражения (КДО) [6,7].

Цель настоящей статьи — получить в рамках кинематического приближения наиболее общее решение для углового распределения когерентно и диффузно рассеянной интенсивности от политипной сверхрешетки с произвольным числом слоев в периоде и с однородно распределенными в этих слоях микродефектами. Рассмотрим симметричную Брэгг-дифракцию на сверхрешетке, состоящей из N периодов.

Период, или ячейка сверхрешетки, в свою очередь представляет собой в общем случае многослойную систему, образованную из P слоев разного элементного состава. Пусть l_p , d_p , E_p и χ_p — толщина, межплоскостное

расстояние, статический фактор Дебая–Валлера и фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости p -го слоя периода соответственно ($p = 1, 2, \dots, P$). Среднее межплоскостное расстояние политипной сверхрешетки запишется как

$$d = \sum_{p=1}^P d_p l_p / l, \text{ где } l = \sum_{p=1}^P l_p — \text{ ее период. Деформация каждого}$$

слоя периода сверхрешетки относительно d определяется соотношением $\Delta d_p = d_p - d$. Амплитудный коэффициент отражения когерентно рассеянных волн от рассматриваемой многослойной системы имеет достаточно простой вид:

$$R^c = i F_s L_s \exp \left(i(N-1) \sum_{p=1}^P A_p l_p \right). \quad (1)$$

Здесь, по аналогии с традиционной кинематической теорией рассеяния, введена величина

$$L_s = \frac{\sin \left(N \sum_{p=1}^P A_p l_p \right)}{\sin \left(\sum_{p=1}^P A_p l_p \right)}, \quad (2)$$

квадрат которой определим как интерференционную функцию Лауз политипной сверхрешетки. Угловые параметры

$$A_p = \left(\eta + 2\pi \Delta d_p / d^2 \right) / 2$$

зависят от величины несоответствия $\Delta d_p / d$. Переменная η пропорциональна угловой отстройке $\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_0$ [8]. Структурная амплитуда политипной сверхрешетки запишется как

$$F_s = \sum_{p=1}^P \sigma_p E_p \frac{\sin(A_p l_p)}{A_p} \exp \left(i \sum_{k=1}^{p-1} 2A_k l_k + i A_p l_p \right), \quad (3)$$

где $\sigma_p = \pi \chi_p C / (\lambda \cdot \sin \vartheta_0)$ — коэффициент, определяющий рассеивающую способность p -го слоя в направлении дифракции [7,8], λ — длина волны падающего рентгеновского излучения, ϑ_0 — угол Брэгга. Величина σ_p , как и Δd_p , определяется композиционным составом p -го слоя. Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности вычисляется по формуле

$$I_g^c(\Delta\vartheta) = |R^c|^2. \quad (4)$$

Из (4) с учетом (1-3) следует, что угловое распределение когерентно рассеянной на сверхрешетке интенсивности зависит от числа периодов N , числа слоев в каждом периоде P , толщин слоев l_p , композиционного состава слоев $(\sigma_p, \Delta d_p)$ и их структурного совершенства, характеризующегося статфактором E_p . Отметим, что наше решение для когерентной составляющей интенсивности (1-4) в частном случае двухкомпонентного периода ($p = 1, 2$) и отсутствия дефектов ($E_p = 1$) переходит в ранее полученный результат [9,10].

Распределенные в слоях сверхрешетки микродефекты вызывают диффузное рассеяние, угловой профиль которого определяется типом, размерами и концентрацией дефектов. В кинематическом приближении в случае $\mu_k l_k \ll 1$ решение для диффузной компоненты рассеянной интенсивности от политипной сверхрешетки можно записать в виде

$$I^d(\Delta\vartheta) = I_1^d \left(\operatorname{sh}(\mu_s l N) / \operatorname{sh}(\mu_s l) \right) \exp \left(-\mu_s l [N - 1]/2 \right), \quad (5)$$

где

$$I_1^d(\Delta\vartheta) = 2 \left(\sum_{p=1}^P \{ |\sigma_p|^2 (1 - E_p^2) \tau_p l_p \} \exp \left(- \sum_{k=1}^{p-1} \mu_k l_k \right) \right),$$

— угловое распределение некогерентно рассеянной интенсивности на периоде сверхрешетки, τ_p — корреляционная длина,

$$\mu_s = \sum_{k=1}^P \mu_k l_k / \sum_{k=1}^P l_k$$

— средний коэффициент поглощения периода сверхрешетки, μ_k — коэффициент фотопоглощения k -го слоя периода. Для $\mu_s l N \ll 1$ это решение в рамках вычислительной диагностики тонкослойных сверхрешеток может быть сведено к выражению

$$I^d(\Delta\vartheta) = N I_1^d \exp \left(-\mu_s l [N - 1]/2 \right).$$

Проведем анализ полученных решений с помощью численного эксперимента. Рассмотрим дифракцию на сверхрешетке с периодом из двух бислоев $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}$. Как отмечалось выше, такой тип структуры сверхрешетки предложен в [4]. Численные расчеты выполнены для симметричного (004) отражения σ -поляризованного CuK_{α_1} излучения.

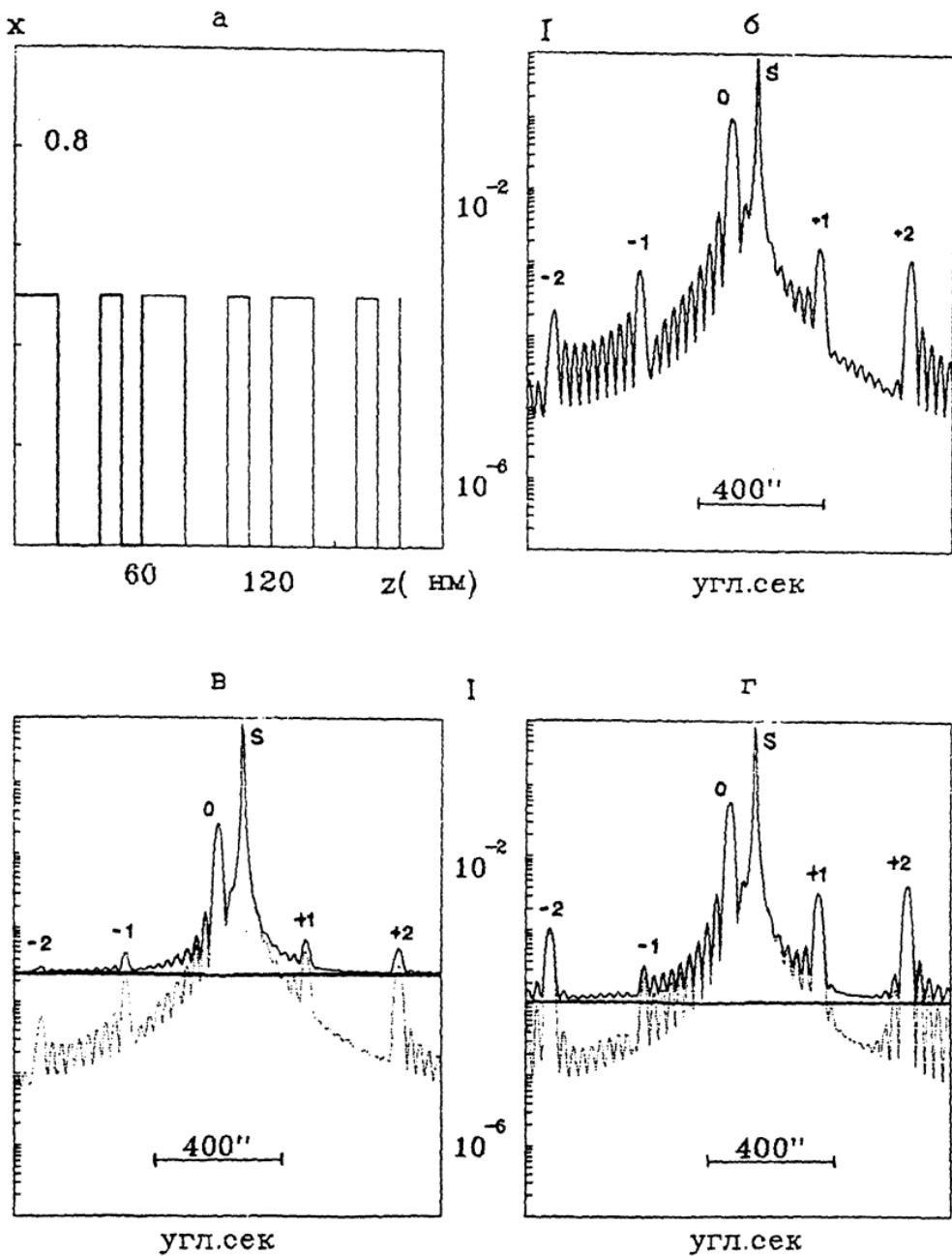
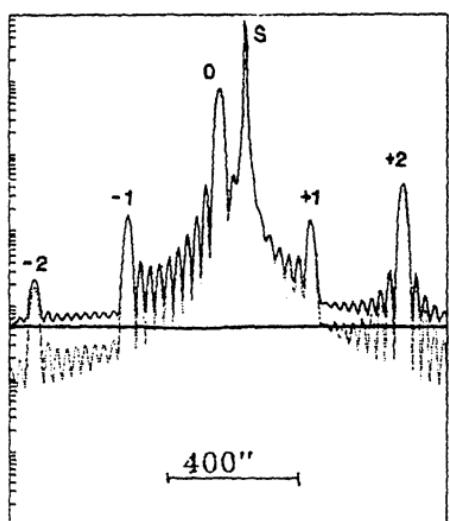


Рис. 1. Концентрационный профиль (а) и теоретические КДО (б-г) 10-периодной сверхрешетки 20 нм $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}/$ 20 нм $\text{GaAs}/$ 10 нм $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}/$ 10 нм $\text{GaAs}/\dots/(100)\text{GaAs}$. Радиус дефектов $r_0 = 1$ нм. 6 — идеальная сверхрешетка; в — $E_1 = E_2 = E_3 = E_4 = 0.5$; г — $E_1 = E_3 = 0.5$, $E_2 = E_4 = 1.0$.

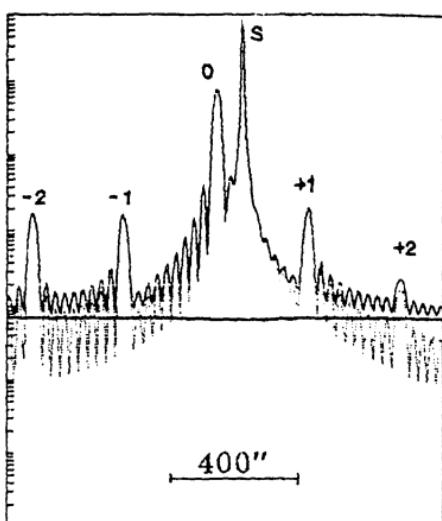
На рис. 1 показаны концентрационный профиль (период сверхрешетки выделен толстой линией) (а) и соответствующие ему теоретические кривые дифракционного отражения (КДО) (б-г) с разными комбинациями структурного совершенства слоев в периоде. На этом рисунке и на рис. 2 пунк-

а

I^{c,d}

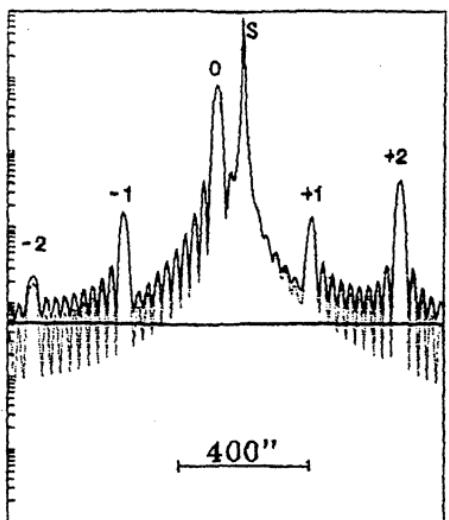
угл.сек

б



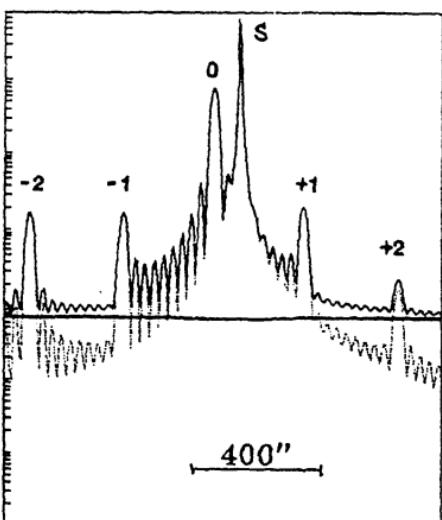
угл.сек

в

I^{c,d}

угл.сек

г



угл.сек

Рис. 2. Теоретические КДО 10-периодной сверхрешетки 15 нм $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}/15 \text{ нм GaAs}/15 \text{ нм Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}/15 \text{ нм GaAs}/\dots/(100)\text{GaAs}$. Радиус дефектов $r_0 = 1 \text{ нм}$.

a — $E_1 = 0.5, E_2 = E_3 = E_4 = 1.0$; *б* — $E_1 = E_3 = E_4 = 1.0, E_2 = 0.5$; *в* — $E_1 = E_2 = E_4 = 1.0, E_3 = 0.5$; *г* — $E_1 = E_2 = E_3 = 1.0, E_4 = 0.5$.

тирной линией изображена когерентная составляющая, толстой сплошной линией — диффузно рассеянная интенсивность и тонкой линией — полная КДО. Если все слои в периоде одинаково несовершенны ($E_1 = E_2 = \dots = E_p < 1$), ко-

герентная составляющая КДО практически не меняет своей формы, а лишь уменьшается по интенсивности (сравни 1, б, в). Изменение в структуру полной кривой отражения вносит диффузная компонента.

Иная картина наблюдается в случае разного совершенства эпитаксиальных слоев в периоде сверхрешетки (рис. 1, г). Наиболее наглядно влияние периодически расположенных дефектов на формирование КДО показано на рис. 2. В данном случае период сверхрешетки состоит из четырех слоев равной толщины. Обращает на себя внимание тот факт, что дефектность 1 или 3, а также 2 или 4 слоев периода приводят к одинаковым по интенсивности сателлитам, однако при этом профиль толщинных осцилляций различен.

Таким образом, наличие дефектов в слоях периода полигипной сверхрешетки существенно влияет на формирование профиля кривой дифракционного отражения. В случае, когда дефекты расположены в определенных слоях периода, тем самым образуя периодический профиль расположения по глубине, структура когерентной составляющей КДО в значительной степени отличается от кривой отражения сверхрешетки с однородно распределенными дефектами.

Список литературы

- [1] Esaki L., Tsu R. // IBM J. Res. Develop. 1970. V. 14. N 1. P. 61–65.
- [2] Esaki L., Chang L.L., Tsu R. // Proc. 12 Int. Conf. on Low Tem. Phys. 1970. / Acad. Press of Japan. 1971. P. 551–553.
- [3] Esaki L., Chang L.L., Mendez E.E. // Jap. J. Appl. Phys. 1981. V. 20. N 7. P. L529–L532.
- [4] Jiang H.X., Lin J.Y. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 8. P. 5851–5853.
- [5] Мильвидский М.Г. Полупроводниковые материалы в современной электронике. М., 1986. 144 с.
- [6] Пунегов В.И. // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. В. 4. С. 65–70.
- [7] Punegov V.I. // Phys. Stat. Sol. (a). 1993. V. 136. N 1. P. 9–19.
- [8] Punegov V.I., Petrakov A.P., Tikhonov N.A. // Phys. Stat. Sol. (a). 1990. V. 122. N 2. P. 449–458.
- [9] Speriosu V.S., Vreeland T., Jr. // J. Appl. Phys. 1984. V. 56. N 6. P. 1591–1600.
- [10] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М., 1989. 240 с.

Сыктывкарский государственный
университет

Поступило в Редакцию
14 апреля 1994 г.