

01; 06; 07

© 1992

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ НА ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ С МИКРОДЕФЕКТАМИ

В.И. П у н е г о в

Метод молекулярно-лучевой эпитаксии позволяет получать атомно-гладкие поверхности и очень резкие границы раздела между тонкими полупроводниковыми слоями в процессе создания композиционных сверхрешеток. Однако не всегда удается избежать возникновения различных структурных искажений, в частности, наличия микродефектов в субслоях.

В настоящее время расчеты кривых дифракционного отражения от полупроводниковых сверхрешеток практически всегда проводятся в рамках так называемого когерентного приближения. Наличие микродефектов в сверхрешетке приводит к диффузному рассеянию рентгеновских лучей, влияние которого на формирование двухкристалльных кривых отражения не исследовано. Аналитические выражения для амплитудных коэффициентов отражения и прохождения получены лишь для идеальной произвольной сверхрешетки [1].

Цель данной работы – исследовать дифракцию на произвольной сверхрешетке со статистически распределенными микродефектами в субслоях.

Рассмотрим брэгговскую дифракцию на сверхрешетке, состоящей из N -чередующихся бислоев различного композиционного состава или ячеек сверхрешетки. Пусть известны амплитудные коэффициенты отражения r_c, \bar{r}_c и прохождения t_c, \bar{t}_c каждой ячейки с учетом статистики распределенных микродефектов [2]. Используя процедуру рекуррентных вычислений при условии, что амплитуда падающей волны $E_0 = 1$, получаем выражения для амплитуд проходящей E_0^n и дифракционной E_g^n волн в любой, например, n -й ячейке произвольной сверхрешетки

$$E_0^n = \left(\frac{t_c}{\bar{t}_c} \right)^{\frac{n}{2}} \frac{\sin\{(N-n)\varphi_c + V_c\}}{\sin\{N\varphi_c + V\}}, \quad (1)$$

$$E_g^n = \left(\frac{t_c}{\bar{t}_c} \right)^{\frac{n}{2}} \sqrt{\frac{r_c}{\bar{r}_c}} \frac{\sin\{(N-n)\varphi_c\}}{\sin\{N\varphi_c + V_c\}}, \quad (2)$$

где нумерация ячеек ведется от поверхности входа сверху вниз;

$$\varphi_c = \arccos \left\{ \frac{1 + t_c \bar{t}_c - r_c \bar{r}_c}{2\sqrt{t_c \bar{t}_c}} \right\}; \quad V_c = \arccos \left\{ \frac{1 + r_c \bar{r}_c - t_c \bar{t}_c}{2\sqrt{r_c \bar{r}_c}} \right\}.$$

Здесь \bar{t}_c — амплитудный коэффициент прохождения в направлении дифракции, который в обозначениях работы [2] для эпитаксиального слоя толщиной l имеет вид:

$$\bar{t}_c = (\varepsilon/Q) \exp \left\{ -i \left(\frac{\pi \chi_0}{\lambda \gamma_0} + i\rho + \varepsilon_2 \right) l \right\}.$$

При $n=0$ из решения (2) следует амплитудный коэффициент отражения когерентно рассеянных волн от дефектной сверхрешетки

$$R_N = \sqrt{\frac{\bar{t}_c}{\bar{r}_c}} \frac{\sin(N\varphi_c)}{\sin(N\varphi_c + V_c)}. \quad (3)$$

Из (1) при $n=N$ получаем амплитудный коэффициент прохождения

$$T_N = \left(\frac{t_c}{\bar{t}_c} \right)^{\frac{N}{2}} \frac{\sin(V_c)}{\sin(N\varphi_c + V_c)}. \quad (4)$$

Результаты (3), (4) согласуются с решениями работы [1] при отсутствии микродефектов в субслоях. Поскольку в [1] используется другой теоретический подход, решения типа (1) и (2) в этой работе не получены.

Угловое распределение интенсивности когерентно рассеянных на сверхрешетке рентгеновских волн находится из (3); $I^c(\Delta V) = |R_N|^2$. Интенсивность диффузно рассеянного излучения от любой, например, n -й ячейки I_n^d может быть вычислена по методу, предложенному в [2]. Угловой профиль некогерентно рассеянного излучения от всей сверхрешетки находится последовательным суммированием интенсивностей диффузных квантов, рожденных в каждом слое с учетом их прохождения вышележащих ячеек

$$I^d(\Delta V) = I_N^d + |\bar{t}_c|^2 I_{N-1}^d + \dots + |\bar{t}_c|^{2(N-1)} I_1^d. \quad (5)$$

Так как в общем случае I_n^d определяется интенсивностью проходящей когерентной волны $I_0 = |E_0^n|^2$, где E_0^n задается формулой (1), то $I_N^d \neq I_{N-1}^d \neq \dots \neq I_1^d$.

В кинематическом приближении решение не учитывает послонное

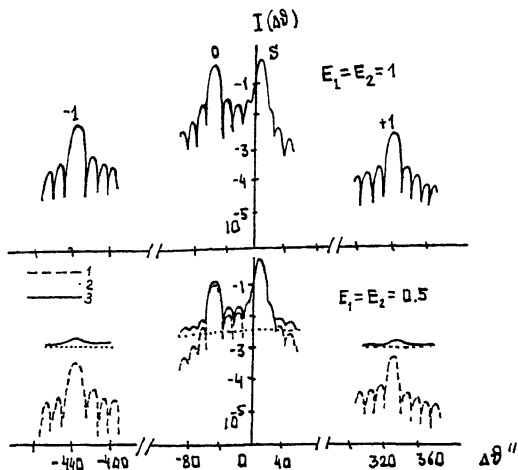


Рис. 1. Кривые дифракционного отражения от полупроводниковой сверхрешетки $GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As$ /.../ (100) $GaAs$ в зависимости от величины статфакторов субслоев $AlGaAs$ (E_1) и $GaAs$ (E_2). S - дифракционный максимум подложки $GaAs$; 0 - основной максимум сверхрешетки; ± 1 - первые сателлиты. 1 - когерентная; 2 - диффузная; 3 - полная интенсивность.

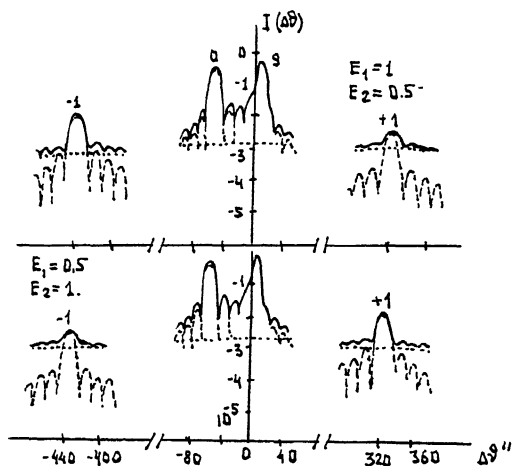


Рис. 2. Кривые дифракционного отражения от сверхрешетки с различной степенью совершенства субслоев (обозначения см. на рис. 1)

изменение мощности проходящей волны и, следовательно, на каждой ячейке сверхрешетки рассеиваются некогерентные волны одной и той же интенсивности. В результате решение (5) может быть записано в виде

$$I^d(\Delta\nu) = I_1^d \left\{ \frac{1 - |\bar{t}_c|^{2N}}{1 - |\bar{t}_c|^2} \right\}.$$

В качестве иллюстрации приведем численные результаты для модельной сверхрешетки $GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As / \dots / (100) GaAs$. Подложка из $GaAs$ полубесконечная и идеальная. Дефекты в субслоях сверхрешетки рассматриваются в виде сферических аморфных кластеров с радиусами r_1 и r_2 . Стратифакторы, определяющие степень совершенства субслоев, зависят от концентрации дефектов C_1 и C_2 , а также от их радиусов: $E_{1,2} = \exp\{-4\pi r_{1,2}^3 C_{1,2}/3\}$.

Обычно толщины l_i субслоев полупроводниковых сверхрешеток не превышают 30 нм. Полученные решения описывают наиболее общую динамическую дифракцию на эпитаксиальных структурах произвольной толщины, поэтому для наглядности примем $l_1 = 30$ нм, $l_2 = 20$ нм. Радиусы дефектов в численных расчетах $r_1 = r_2 = 5$ нм, число ячеек сверхрешетки $N = 30$. Выбрано (400) отражение SiK_{α_1} излучения.

На рис. 1 показано влияние концентрации дефектов (величин статфакторов субслоев $E_{1,2}$) на формирование кривых дифракционного отражения в области основного пика сверхрешетки и первых сателлитов. Как и следовало ожидать, с увеличением концентрации дефектов наблюдается уменьшение интенсивности когерентно рассеянных волн в угловой области основного максимума и в области расположения сателлитов. Не трудно видеть (рис. 2), что чередование слоев различного совершенства существенно влияет на вид полной кривой дифракционного отражения. Наблюдается интересный интерференционный эффект, связанный с ростом интенсивности сателлитов при увеличении концентрации дефектов в одном из субслоев ячеек сверхрешетки. С другой стороны, как это и ожидалось, интенсивность основного максимума падает. Наблюдаемый эффект интересен и тем, что дефектность нижнего слоя ячейки приводит к значительному увеличению интенсивности правого сателлита и, наоборот, дефектность верхнего слоя приводит к увеличению интенсивности левого сателлита. По-видимому, природа наблюдаемого эффекта связана с явлением отражения мягкого рентгеновского излучения от многослойных зеркал [3].

Отметим еще одну важную деталь – в данной работе мы учитывали лишь корреляцию между дефектами в отдельно взятом субслое. При учете корреляции между дефектами всей сверхрешетки возможно формирование диффузного фона в угловых областях отдельно взятых сателлитов [4, 5].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- 1] V a r d a n y a n D.M., M a n o u k y a n H.M.
P e t r o s y a n H.M. // Acta Cryst. A. 1985.
V. 41. P. 212-217, 218-222.
- 2] П у н е г о в В.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 1. С. 234-242.
- 3] М и ш е т т А. Оптика мягкого рентгеновского излучения.
М.: Мир, 1989. 352 с.
- 4] П у н е г о в В.И. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 8. С. 2476-
2479.
- 5] П у н е г о в В.И. // ЖТФ. 1990. Т. 60. № 10. С. 82-87.

П о с т у п и л о в Р е д а к ц и ю
16 я н в а р я 1992 г.