

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЙ С ТВЁРДЫМ ТЕЛОМ

PACS numbers: 61.10.Dp, 61.10.Kw, 61.72.Dd, 68.37.Uv, 68.49.Uv, 68.65.Cd

Поведение спутниковых дифракционных максимумов короткопериодных сверхрешеток GaAs–AlAs с различной степенью кристаллического совершенства слоев

В. П. Кладько, Л. И. Даценко, В. Ф. Мачулин, В. Б. Молодкин*

*Институт физики полупроводников НАН Украины,
просп. Науки, 45,
03028 Киев-28, Украина*

**Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

Работа посвящена изучению поведения интенсивностей спутников в короткопериодных сверхрешетках (СР) GaAs–AlAs/GaAs (001) в зависимости от величины статического фактора (наличия дефектов) и уровня деформации слоев СР, а также параметра корреляции Като как для структурных, так и квазизапрещенных рефлексов. Показаны высокая чувствительность интенсивности спутников СР к дефектам структуры в субслоях, а также некоторые особенности применения квазизапрещенных рефлексов в этих структурах.

Роботу присвячено вивченню поведінки інтенсивностей спутників у короткоперіодних надгратах (НГ) GaAs–AlAs/GaAs (001) залежно від величини статичного фактора (наявності дефектів) і рівня деформації шарів НГ, а також параметра кореляції Като як для структурних, так і квазізаборонених рефлексів. Виявлено високу чутливість інтенсивності спутників НГ до дефектів структури в субшарах, а також показано деякі особливості застосування квазізаборонених рефлексів у цих структурах.

Behaviour of X-ray satellite intensities in the GaAs–AlAs/GaAs (001) short-period superlattices (SL) is studied experimentally and theoretically depending on the value of Debye–Waller static factor, value of the Kato correlation parameter as well as on deformation level in the SL studied for a ‘structural’ and quasi-forbidden reflections. Semikinematical approximation of X-ray scattering theory is used for calculation of intensities of diffraction curves obtained experimentally by means of the Philips three-crystal diffractometer. High sensitivity of intensity ratios for ‘positive’ and ‘negative’ satellites to structural defects in sublattices is shown. Some peculiarities of quasi-forbidden reflection

utilization are discussed.

Ключевые слова: спутники, параметр корреляции Като, структурные и квазизапрещенные рефлексы.

(Получено 5 февраля 2003 г.)

1. ВЕДЕНИЕ

Большой интерес исследователей вызывают композиционные сверхрешетки (СР) с периодически чередующимися слоями полупроводников, отличающихся постоянными решетками, благодаря их уникальным оптическим, транспортным и акустическим свойствам [1]. Однако, несмотря на значительный прогресс в технологии их получения, не всегда удается избежать различных структурных дефектов. Поскольку дефекты существенно влияют на физические свойства СР, получение информации о типе и размерах дефектов, а также их распределении по глубине является важной задачей. Эта задача весьма успешно реализуется с помощью высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии [2–4]. Как показано в работах [5–7], присутствие дефектов в СР вызывает некогерентное (диффузное) рассеяние и меняет профиль кривой дифракционного отражения (КДО) для когерентно рассеянных волн. Задача поведения спектров КДО в длиннопериодных СР в зависимости от степени дефектности слоев была решена в [6].

Цель настоящей работы — выяснение особенностей поведения КДО в короткопериодных СР GaAs–AlAs, содержащих различные концентрации точечных дефектов, а также влияния этих дефектов на поведение спутанных пиков с помощью полукинематического приближения теории рассеяния рентгеновских лучей (РЛ).

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАСЧЕТОВ ХАРАКТЕРА РАССЕЯНИЯ СР В ПОЛУКИНЕМАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Для СР, состоящей из двух слоев с различным межплоскостным расстоянием, рассеивающей способностью σ и величиной фактора аморфизации выражение для амплитудного коэффициента рассеяния (АКР) R с учетом статистического усреднения можно записать в виде [7]

$$R = \langle R \rangle = i \sum_{n=1}^N \left\{ \int_{(n-1)T}^{(n-1)T+4} \sigma_1^n E_1^n \exp \left[i(\eta z - \mathbf{g} \cdot \langle \mathbf{u}_1^n(z) \rangle) \right] dz + \right.$$

$$+ \int_{(n-1)T+t_1}^{nT} \sigma_2^n E_2^n \exp \left[i(\eta z - \mathbf{g} \cdot \langle \mathbf{u}_2^n(z) \rangle) \right] dz \Bigg\}, \quad (1)$$

где $E_{1,2}^n$ — статические факторы Дебая–Валлера для слоев 1 и 2; $\mathbf{u}_{1,2}^n(z)$ — векторы атомных смещений в слоях СР; $t_{1,2}$ — толщины слоев; $T = t_1 + t_2$; $\eta = (2\pi / \lambda \sin \vartheta)(\chi_0 + \sin 2\vartheta \Delta\vartheta)$ — угловая переменная, характеризующая положение кристалла относительно направления падающей волны; $\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_0$; \mathbf{g} — вектор дифракции; $\sigma_h = \pi \chi_h C / (\lambda \sin \vartheta)$ — параметр рассеяния; C — фактор поляризации; χ_h — коэффициент поляризуемости; N — число периодов СР.

Выражения для векторов атомных смещений представляются через межплоскостные расстояния $d_{1,2}$ составляющих слоев СР. Среднее межплоскостное расстояние периода СР находится как $d = (d_1 t_1 + d_2 t_2) / T$. Величины рассогласования межплоскостных расстояний слоев относительно среднего определяются как $\Delta d_{1,2} / d$, где $\Delta d_{1,2} = d_{1,2} - d$.

Для случая симметричной дифракции, учитывая однородное распределение дефектов в периодически повторяющихся слоях, запишем выражение для АКР когерентно рассеянных волн СР

$$R^C = iF^C \exp(i\Psi) \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}, \quad (2)$$

где $y = A_1 t_1 + A_2 t_2$; $A_{1,2} = (\eta + 2\pi \Delta d_{1,2} / d^2) / 2$; $\Psi = (N-1)y + A_1 t_1$.

Структурная амплитуда СР имеет вид

$$F^C = \sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + \exp(iy) \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2}. \quad (3)$$

Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности можно охарактеризовать с помощью интерференционной функции Лауэ

$$I^C(\Delta\vartheta) = |F^C|^2 \exp(-2 \operatorname{Im} \Psi) \left| \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)} \right|^2. \quad (4)$$

В кинематическом приближении угловое распределение диффузно рассеянных волн для слоев с изменяющимся по глубине параметром решетки исследовано в работах [8, 9]. Для проведения численного анализа и сопоставления его с экспериментом удобно использовать модель дефектов кулоновского типа. Тогда выражение для статического фактора Дебая–Валлера, согласно [10], можно представить как

$$E_{1,2} = \exp(-4\pi r_{1,2}^3 c_{1,2} / 3), \quad (5)$$

где $r_{1,2}$ и $c_{1,2}$ — соответственно радиусы и концентрации дефектов в слоях периода решетки. Выражение для диффузно рассеянных волн на одном периоде запишется следующим образом:

$$I_1^d = 2 \left\{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \int_0^{t_1} \tau_1(\eta, z) dz + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \int_0^{t_2} \tau_2(\eta, z) dz \right\}, \quad (6)$$

где $\tau_{1,2}$ — длины параметров корреляции Като, описывающих степень близкого порядка, для соответствующих слоев периода СР. Параметры $\tau_{1,2}$ для слоев короткопериодной СР не зависят ни от z , ни от периода СР. Угловую зависимость корреляционной длины с учетом (5) запишем в явном виде:

$$\tau_i(\eta) = (6r_i / X_i^4) [(X_i^2 / 2) + 1 - \cos(X_i) - X_i \sin(X_i)], \quad (7)$$

где $X_i = 2r_i \eta_0 A_i$. Тогда (6) запишем в виде

$$I_1^d = 2 \left\{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \tau_1 t_1 + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \tau_2 t_2 \right\}. \quad (8)$$

Введем средний коэффициент поглощения на одном периоде СР $\mu = (\mu_1 t_1 + \mu_2 t_2) / T$. Угловое распределение диффузного фона в окрестности брэгговского рефлекса можно характеризовать с помощью следующего выражения:

$$I^d(\Delta\theta) = \sum_{n=1}^N I_1^d \exp(-\mu T(N-1)/2). \quad (9)$$

Если интенсивности диффузно рассеянных волн одинаковы для всех периодов СР, то (9) имеет вид

$$I^d(\Delta\theta) = N I_1^d \exp(-\mu T(N-1)/2). \quad (10)$$

3. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Измерения КДО для симметричных рефлексов 400, 200 проводилось в Институте физики ПАН (Варшава) на трехкристальном спектрометре фирмы «PHILIPS». Образец сканировался вблизи точного положения Брэгга в диапазоне около 3° в так называемом $\omega/2\theta$ -режиме. Измерения проводились в дискретном угловом режиме с шагом $2''$. При данных параметрах накопления числа импульсов соотношение сигнал-шум достигало величины 10^{-6} . Для анализа экспериментальных данных проводилось сопоставление экспериментальных и расчетных КДО путем фитирования с использованием так называемой методики χ^2 , которая, как известно, позволяет находить средние значения параметров и их ошибки.

Нормирование экспериментальных спектров проводилось по максимуму отражательной способности СР. Для анализа особенностей поведения спутных пиков СР использовались формулы (1)–(10). В расчетах КДО учитывалась как когерентная, так и диффузная составляющие отражательной способности.

Технология получения СР состояла в том, что сначала на подложке GaAs (001) выращивался буферный слой GaAs толщиной 20 нм. После этого рост прекращался на протяжении 60 с, а потом наращивалось 50 периодов СР (AlAs толщиной 1,13 нм и GaAs — 2,26 нм). Вся эта структура покрывалась слоем AlAs (30 нм) и 30 слоями GaAs по 6 нм.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Интерференционная функция Лауэ СР, присутствующая в выражении (4), принимает максимальное значение при $y = \pi m$, где $m = 0, \pm 1, \dots$. Тогда для m -го углового положения кристалла η получаем $\eta_m = 2\pi m/T$. Это выражение описывает угловые положения спутника нулевого порядка при $\eta_m = 0$ и спутников высших порядков. Отсюда выражение для интенсивности спутников принимает вид

$$I_m = N^2 |F_m^S|^2,$$

а структурный фактор описывается выражением

$$|F_m^S|^2 = (\sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + (-1)^m \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2})^2. \quad (11)$$

Для короткопериодных СР структурный фактор нулевого максимума можно представить в виде

$$|F_m^0|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2.$$

В случае же, когда один из слоев в периоде СР имеет сильно выраженную аморфизированную структуру ($E_i = 0$), интенсивность основного спутника будет определяться лишь более совершенным кристаллическим слоем. Из анализа выражения (11) следует еще один интересный вывод. Он касается использования квазизапрещенных рефлексов (КЗР). Для таких отражений вследствие малости рассеивающей способности одного из слоев, состоящих из атомов с близкими порядковыми номерами, интенсивность спутников будет определяться лишь рассеивающей способностью другого слоя с более отличающимися атомными номерами составляющих его компонентов [11]. Отсюда вытекает, что использова-

ние КЗР позволяет сепарировать влияние одного из слоев на величину интенсивности рассеяния. При изучении СР GaAs-AlAs/GaAs (001) с помощью рефлексов 200 или 600 такими слоями, которые оказывают малое влияние на общую картину рассеяния, являются субслои GaAs.

Численные расчеты картины рассеяния $\text{CuK}\alpha$ -излучения выполнялись для симметричных рефлексов 400 и 200.

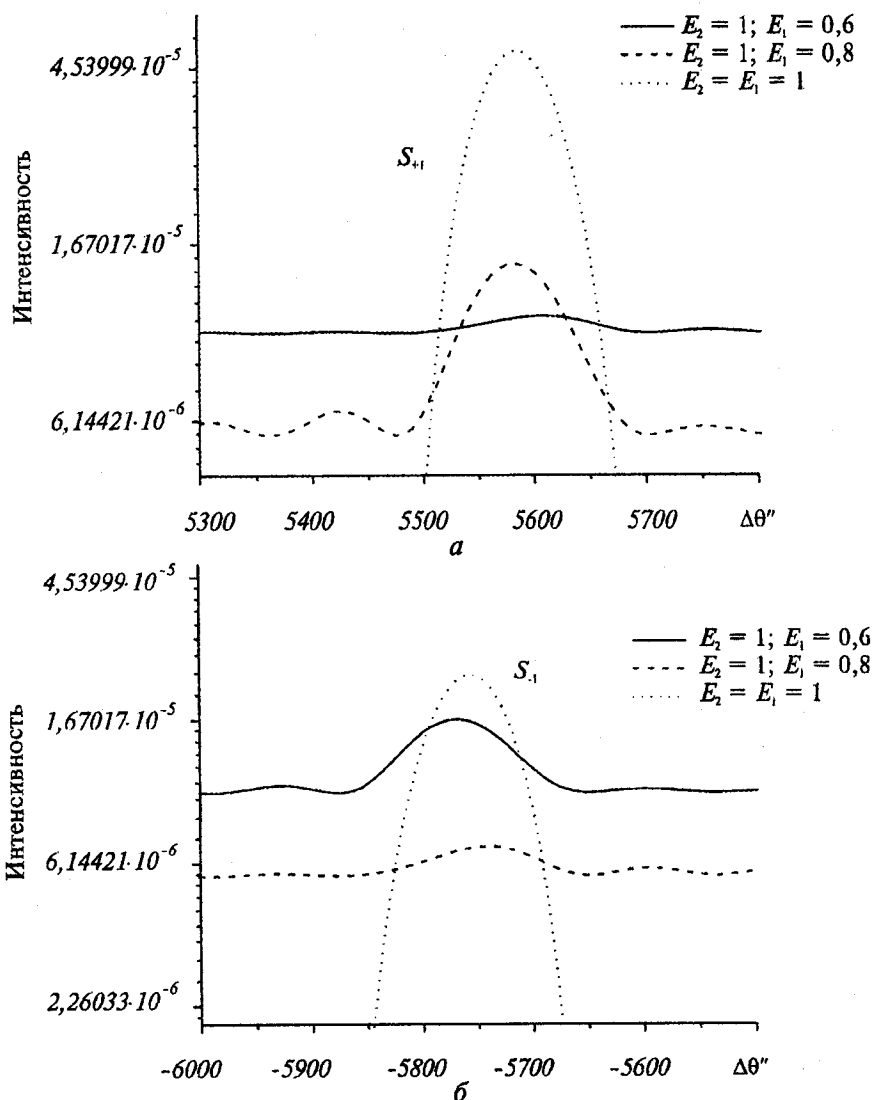


Рис. 1. Фрагменты кривых дифракционного отражения в области положительных (а) и отрицательных (б) спутников в зависимости от величины статического фактора верхнего E_1 и нижнего E_2 субслоев.

нялись для симметричных рефлексов 400 и 200.

На рис. 1 приведены расчетные спектры КДО (фрагменты в области спутников первого порядка) для рефлекса 400 от решетки с толщинами слоев $t_1 = 2,24$ нм и $t_2 = 1,1$ нм при различных значениях статического фактора $E = \exp(-L)$.

Как следует из анализа этого рисунка, поведение интенсивности спутников в зависимости от степени структурного совершенства верхнего или нижнего слоя СР соответствует результатам, полученным в работе [6], в которой отмечается тот факт, что несовершенство верхнего слоя СР уменьшает интенсивность положительных спутников, а нарушения же структуры нижнего слоя приводят к погасанию отрицательных спутников. Здесь следует отметить, что в отличие от [6] при наших расчетах КДО учитывалась как когерентная, так и диффузная составляющие отражения. Сравнивая поведение спутников на расчетных и экспериментальных КДО (рис. 2), можно сделать вывод, что в исследуемых СР более совершенным является нижний слой AlAs. При этом соотношение интенсивностей экспериментальных спутников первого порядка $I_+/I = 0,56$ при величине статического фактора 0,68 для слоя GaAs удовлетворительно коррелирует с данными результатов подгонки КДО. Зависимость указанного отношения I_+/I от величины статического фактора одного из слоев L_i при фиксирован-

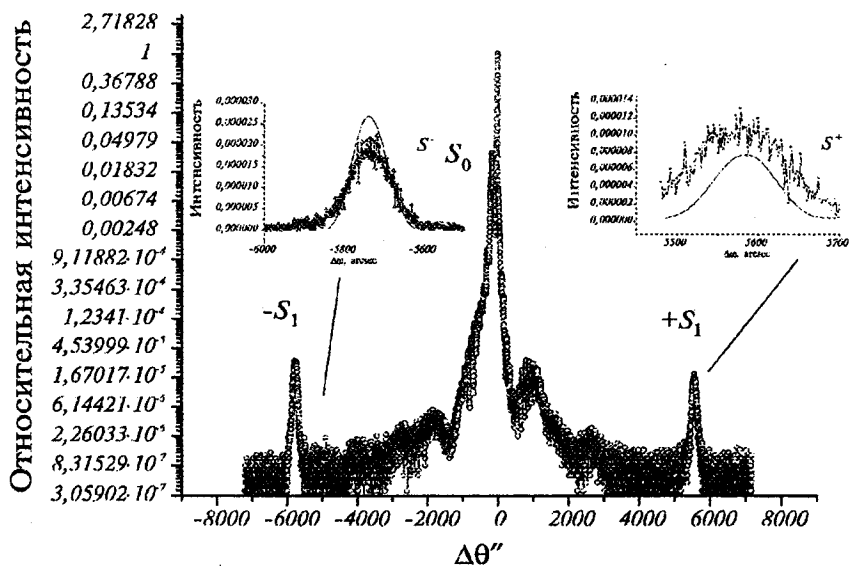


Рис. 2. Экспериментальная кривая дифракционного отражения для рефлекса 400 в области спутников первого порядка. На вставках приведены фрагменты КДО в области спутников первого порядка: сплошные кривые — расчет; точки — эксперимент.

ном уровне искажений структуры другого слоя $L_j = \text{const}$ в отличие от [6, 7] носит отчетливо выраженный нелинейный характер (рис. 3) как при одинаковой толщине слоев ($t_1 = t_2$), так и в случае, когда толщина одного из слоев больше другого ($t_1 = 2t$).

Причем, как следует из рисунка, изменение совершенства нижнего слоя (AlAs) влияет практически монотонно на соотношение интенсивностей спутников. Несовершенство же верхнего слоя (GaAs) изменяет отношение интенсивностей положительных и отрицательных спутников немонотонным образом. Особенно чувствителен этот параметр к размеру дефектов. В последнем случае наблюдаются как максимум, так и минимум на кривых зависимости отношения интенсивностей спутников от величины статического фактора. Для рефлекса 400 такая картина поведения интенсивности спутников качественно не зависит от соотношения толщин слоев СР.

Для квазизапрещенного отражения 200 наблюдается монотонный спад интенсивности спутников с ростом статического фактора для несовершенного верхнего слоя и рост — при увеличении степени несовершенства нижнего слоя. Однако эффект изменения отношения интенсивностей спутников для КЗР значительно

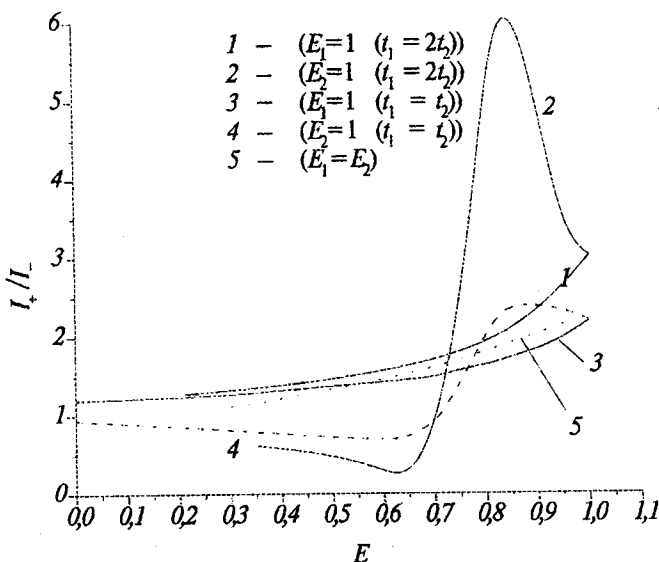


Рис. 3. Зависимость отношения интенсивностей спутников первого порядка для отражения 400 от величины статического фактора одного из субслоев при фиксированном уровне структурного совершенства другого слоя. Для кривых 1 и 3 совершенным является первый (верхний) слой $E_1 = 1$ при $t_1 = 2t_2$ (1) и $t_1 = t_2$ (3). В кривых (2) и (4) совершенную структуру имеет нижний слой $E_2 = 1$ при $t_1 = 2t_2$ (2) и $t_1 = t_2$ (4).

меньше, чем для структурного отражения 400, что согласуется с нашими результатами, полученными раньше [11]. Следует отметить, что уровень механических напряжений в слоях СР значительно меньше влияет на соотношение интенсивностей спутников, чем величина статического фактора Дебая-Валлера.

Весьма интересным моментом, на наш взгляд, является поведение такого параметра, как длина корреляции Като в зависимости

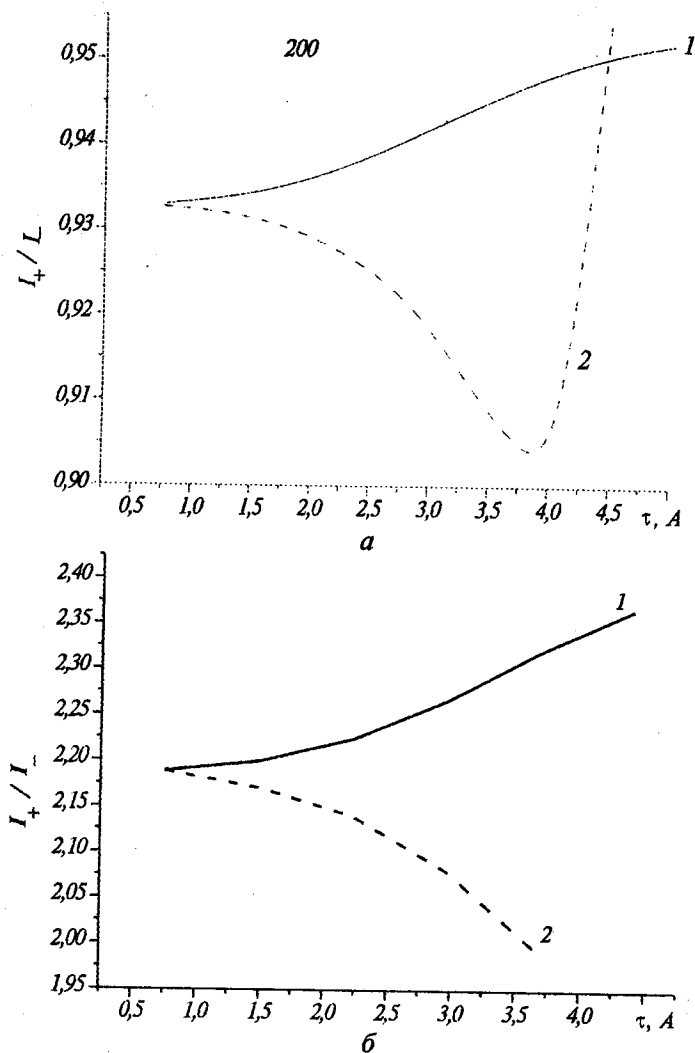


Рис. 4. Характер изменения зависимости отношения интенсивностей спутников первого порядка для отражений 200 (а) и 400 (б) от значений корреляционного параметра Като. Номера кривых соответствуют верхнему слою GaAs (1) и нижнему AlAs (2).

от дефектности того или иного субслоя. Как показывают расчеты по (7), (8), параметр $\tau_{1,2}$ весьма чувствителен к дефектам кулоновского типа как для структурных, так и КЗР рефлексов.

Зависимости отношения интенсивностей спутников от величины параметра корреляции для двух субслоев СР приведены на рис. 4.

Легко видеть, что увеличение параметра τ , описывающего степень корреляции случайных фазовых соотношений для верхнего слоя СР при использовании структурных отражений, приводит к росту и уменьшению отношения интенсивностей спутников соответственно для верхнего и нижнего слоев (рис. 4, б). В случае же использования КЗР чувствительность к параметру корреляции сохраняется в значительной степени лишь для слоя AlAs. Зависимость отношения интенсивностей спутников от τ для нижнего слоя имеет ярко выраженный минимум (рис. 4, а). Исследования зависимостей интенсивности спутников от $\tau_{1,2}$ может быть интересными и в плане возможной чувствительности этой величины к уровню нестехиометричности слоев, поскольку она в какой-то мере характеризует ближний порядок в решетке [12].

5. ВЫВОДЫ

Проведенные в работе эксперименты и численные расчеты КДО с применением полукинематического приближения теории рассеяния РЛ дали возможность сделать вывод о том, что в короткопериодных СР изменение соотношения интенсивностей спутников, расположенных слева и справа от главного (нулевого) спутника, зависит как от степени структурного совершенства (фактора Дебая-Валлера, параметра ближнего порядка Като), так и от уровня упругой деформации отдельных слоев.

Показано, что для верхнего слоя, которым является GaAs, это отношение интенсивностей имеет немонотонный характер. Указанный факт может быть вызван, вероятнее всего, неравнозначными фазовыми изменениями в структурном множителе каждого из реальных слоев. Для сравнительно высокого уровня искажений структуры ($E \sim 0,8$) соотношение I_+/I может в несколько раз превышать значение, характерное для совершенного слоя. Вариации характеристики I_+/I в случае КЗР имеют значительно меньшую амплитуду по сравнению со структурными отражениями. Это обстоятельство качественно согласуется с малой чувствительностью КЗР к искажениям структуры, обнаруженной нами ранее.

Выполненные расчеты показывают возможность проведения качественных оценок степени структурного совершенства выращенных слоев СР даже по внешнему виду КДО (соотношению между интенсивностями спутников).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. М. Херман *Полупроводниковые сверхрешетки* (Москва: Мир: 1989).
2. V. Holy, J. Kubena, and K. Ploog, *Phys. Status Solidi B*, **162**, No. 3: 347 (1990).
3. I. Tapfer and K. Ploog, *Phys. Rev. B*, **33**: 5565 (1986).
4. V. Holy, U. Pietch, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Berlin: Springer: 1998).
5. H. -J. Herzog, *Solid State Phenomena*, **32–33**: 523 (1993).
6. В. И. Пунегов, *Письма в ЖТФ*, **18**, № 4: 66 (1992).
7. В. И. Пунегов, *ФТТ*, **37**, № 4: 1134 (1995).
8. R. N. Kyutt, P. V. Petrashen, and L. M. Sorokin, *Phys. Status Solidi A*, **60**, No. 11: 381 (1980).
9. В. И. Пунегов, *Кристаллография*, **35**, № 3: 576 (1990).
10. В. А. Бушуев, *ФТТ*, **31**, № 11: 70 (1989).
11. Л. И. Даденко, В. П. Кладько, В. Ф. Мачулин, В. Б. Молодкин, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии* (Киев: Академперіодика: 2002).
12. В. И. Пунегов, К. М. Павлов, *Кристаллография*, **38**, № 5: 34 (1993).