

© 2001р. Р.Л. Політанський, В.П. Кладько*, М.І. Клюй*

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

*Інститут фізики напівпровідників НАН України, Чернівці

ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМЕТРІВ СТРУКТУРНОЇ ДОСКОНАЛОСТІ НАДТОНКИХ ЕПІТАКСІЙНИХ ШАРІВ SiGe_x МЕТОДОМ ВИСОКОРОЗДІЛЬНОЇ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ

Проведено експериментальне дослідження тонких епітаксійних шарів (~ 700 Å) твердих розчинів кремній-германій на кремнії методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії. На основі моделювання кривих дифракційного відбивання отримані основні параметри структурної досконалості даних структур.

Experimental investigation of submicron epi-layers (~ 700 Å) of Si-based silicon-germanium solid solutions by means of supersolving x-ray diffractometry have been carrying out. The main parameters of structural perfection of these structures have been obtained on the basis of simulation of diffraction reflectivity curves.

У зв'язку з розвитком технологій тонко-плівкових структур таких як надгратки, гетероструктури з квантово-розмірними активними областями, необхідні структурні дослідження тонких епітаксійних шарів напівпровідників. Серед численних методів визначення кристалічної структури найперспективніші – методи двокристалльної рентгенівської спектрометрії, оскільки їм властива висока чутливість до спотворень кристалічної ґратки. Тому вони стали основою нових експериментальних методик та теоретичних підходів опису рентгенівської дифракції в складних багатошарових структурах.

У [1-3] показано, що інтерференційні осциляції інтенсивності на кривих гойдання надзвичайно чутливі до зміни товщини, структури тонких (декілька нанометрів) шарів, сформованих як на поверхні, так і на певній глибині кристалу, а також до релаксаційних процесів, що відбуваються на границях розділу між ними. Врахування двох механізмів дифракційного розсіяння – когерентного та дифузного дозволяє отримувати більш повні профілі деформацій, з аналізу яких визначаються розміри та розподіл дефектів за глибиною кристалу.

Метою роботи було експериментальне дослідження методами рентгенівської дифрактометрії тонких епітаксійних шарів (~ 700 Å) твердих розчинів кремній-германій, сформованих на кремнії

плазмохімічним осадженням, і визначення основних параметрів структурної досконалості таких структур.

Для дослідження тонких шарів (~ 1000 Å) кремнію, легованих Ge ($\sim 0,2$), використано високороздільну двокристалну схему дифракції рентгенівського випромінювання (подвійний кремнієвий монохроматор), для різко асиметричного випадку $\beta \ll 1$, де $\beta = \gamma_0 / \gamma_n$, $\gamma_{0,n} = \cos \theta_{0,n}$, $\theta_{0,n}$ – кути між нормаллю до поверхні кристала і напрямками заломленої і дифрагрованої хвиль відповідно. Джерелом рентгенівського випромінювання була трубка з мідним анодом ($\text{CuK}\alpha$ -випромінювання). Вимірювання проводились скануванням навколо осі $[\vec{k}_0 \times \vec{h}]$ з кроком ~ 1 кут.с. Статистична похибка вимірювань інтенсивності складала близько 3%.

Для дослідження зразків з вхідною поверхнею (100) вибрана асиметрична дифракція (311). Така схема дифракції забезпечує значне зменшення кутової розбіжності дифрагovanого пучка, оскільки кут входу рентгенівських променів в кристал складав $\sim 3^\circ$.

Досліджувана тонкоплівкова система представлялась як система однорідних квазішарів. Кожний квазішар характеризується своїми структурними параметрами – товщиною, періодом кристалічної ґратки, статичним фактором Дебая-

Валлера L_j , що визначає ступінь аморфізації шару. Всередині кожного шару його структурні параметри вважались незмінними.

Для аналізу формування кривих дифракційного відбивання (КДВ) використано рівняння статистичної динамічної теорії дифракції. Розрахунок кривих відбивання в залежності від змін параметрів квазішарів проводиться за рекурентними співвідношеннями [4], які пов'язують амплітуду відбивання від n шарів R_h^n з амплітудами відбивання R_h^1 і проходження R_0^1 від верхнього шару і відповідними амплітудами наступних $(n-1)$ шарів:

$$R_h^n = (R_h^1 + R_h^{n-1}(R_0^1 R_0^1 - R_h^1 R_h^1)) \times (1 - R_h^{n-1} R_h^1)^{-1} \quad (1)$$

Чисельне моделювання КДВ проведено з урахуванням обох механізмів розсіяння рентгенівського випромінювання: когерентного і дифузного.

Для знаходження параметрів шарів використовувався відомий метод мінімізації функціоналу, так званий χ^2 -метод [5].

На рис.1 наведені розрахункові криві гойдання для рефлексу (311) від плівок Si_{0,83}Ge_{0,17} різних товщин – 110 та 70 нм (ідеальної структури), а також плівки Si товщиною 110 нм. Зміна періоду осциляцій інтенсивності на кривих гойдання підтверджує високу чутливість методу двокристалльної дифрактометрії як до зміни товщини плівки, так і до її складу.

Для одного й того ж профілю деформації профіль КДВ від сильно розупорядкованого шару майже повністю визначається дифузною компонентою розсіяння, а у випадку бездефектної структури – когерентною (рис.2).

Звідси випливає, що межі кутової області, які визначаються дифузним фоном, задаються як величиною градієнта деформації ґратки, так і розмірами мікрodefektів. При цьому інтенсивність дифузного фону спадає зі зменшенням розмірів defektів, а сам фон стає більш протяжним в кутовому інтервалі. Збільшення товщини плівки без зміни $\Delta d/d$ приводить до зміни кутового розподілу когерентної і дифузної складових.

На рис.3 наведені криві відбивання для кристала Si з шаром Si_{0,83}Ge_{0,17} товщиною 700Å. Параметри, отримані в результаті теоретичної підгонки спектрів вказаним вище методом, такі: про-

міжний шар кремнію (частково аморфізований, статфактор Дебая-Валлера 0,5-0,6) має товщину 4 нм, шар твердого розчину Si_xGe_{1-x} ($x=0,18$) – товщину 70 нм ($\Delta d/d=0,00438$). Величина статичного фактора для цього шару має середнє значення 0,7. Стандартне середнє відхилення теоретичної кривої від експериментальної складає 0,00725.

Якщо ступінь аморфізації плівки зростає з глибиною кристала, то верхній менш defektний шар плівки має більшу відбивну здатність і, відповідно, дифрагована на плівці когерентна інтенсивність зосереджена в основному зліва від піка підкладки (далеко від нього). Дифузний фон зміщений ближче до основного піка.

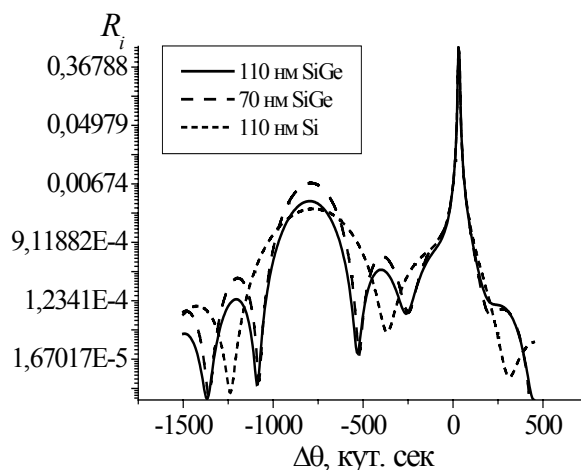


Рис.1. Розрахункові криві дифракційного відбивання в сильно асиметричній геометрії (рефлекс (311)) для структур SiGe/Si та Si/Si для різних товщин.

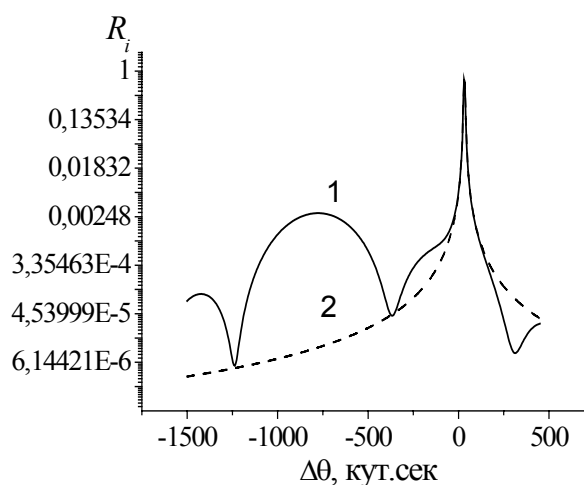


Рис.2. Розрахункові криві дифракційного відбивання (311) для плівок Si/Si товщиною 110 нм: кристалічна безdefektна (1), сильно розупорядкована структура (2).

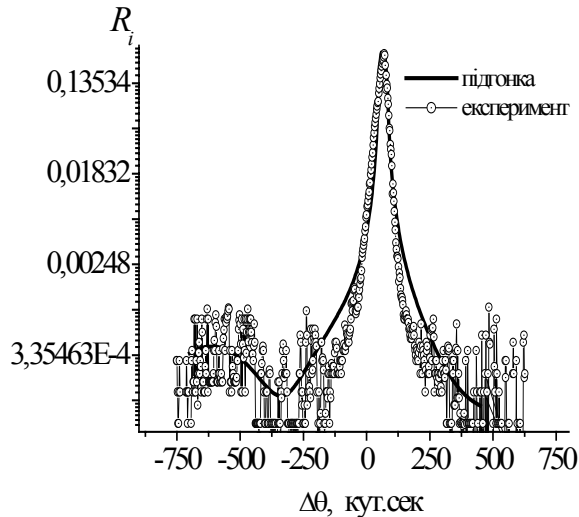


Рис.3. Криві дифракційного відбивання для плівки $\text{Si}_{0,83}\text{Ge}_{0,17}/\text{Si}$ (рефлекс (311), $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання). Точки – експеримент, суцільна крива – результати підгонки.

Отже, використання високороздільної двокристалльної дифрактометрії в асиметричній геометрії дозволяє досліджувати гетероструктури з товщиною порядку десятків нанометрів. Шляхом аналізу і моделювання кривих дифракційного відбивання визначено характеристики епітаксійних шарів – товщину, ступінь аморфізації та релаксаційні процеси, що відбуваються на границях розділу між шарами гетероструктур.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Пунегов В.И. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на кристаллах с непрерывно изменяющимся по глубине параметром решетки // Кристаллография. - 1990. - **35**, №3. - С.576-583.
2. Пунегов В.И., Павлов К.М., Подоров С.Г., Фалеєв Н.Н. Определение структурных параметров градиентного эпитаксиального слоя методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии // ФТТ. - 1996. - **38**, №1. - С.264-271.
3. Punegov V.I., Petrakov A.P., Tikhonov N.A. X-Ray Diffraction on Laser Disturbed Near-Surface Crystal Layers // Phys. Stat. Sol.(A). - 1990. - **122**, No.2. - P.449-458.
4. Afanas'ev A.M., Melikyan O.G. A modified dynamical theory (MDT) of X-ray diffraction in extremely asymmetric schemes // Phys. Stat. Sol.(A). - 1990. - **122**, No.2. - P.459-468.
5. Кладько В.П. Влияние точечных дефектов и их ассоциаций на рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами полупроводников: Дис... доктора физ.-мат.наук. - Киев. - 2000. - 335 с.