

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ ім. В.Є. ЛАШКАРЬОВА**

**ЛЮБЧЕНКО Олексій Ігорович**



УДК 538.975; 539.12.04; 539.26

**ВИСОКОРОЗДІЛЬНА Х-ПРОМЕНЕВА ДИФРАКТОМЕТРІЯ  
ПОВЕРХНЕВИХ ШАРІВ МОНОКРИСТАЛІВ ТА БАГАТОШАРОВИХ  
СТРУКТУР ПРИ ІОННОМУ ОПРОМІНЕННІ**

(01.04.07 – фізика твердого тіла)

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

**КИЇВ – 2019**

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова Національної академії наук України.

**Науковий керівник** член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор,  
**КЛАДЬКО Василь Петрович,**  
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України (м. Київ), заступник директора Інституту, завідувач відділу рентгеноструктурного і елементного аналізу матеріалів і систем

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник  
**БОРЧА Мар'яна Драгошівна,**  
завідувач кафедри фізики твердого тіла Чернівецького Національного Університету ім. Юрія Федьковича (м. Чернівці)

доктор фізико-математичних наук, професор  
**ЛЕНЬ Євген Георгійович,**  
завідувач відділу електронної структури та електронних властивостей Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, (м. Київ)

Захист відбудеться "18" вересня 2019 р. о 14<sup>15</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.199.01 при Інституті фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України за адресою: 03028, м. Київ, пр. Науки, 41.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України (м. Київ, пр. Науки, 45), та на сайтах Інституту: <http://isp.kiev.ua/> і відділу рентгеноструктурного і елементного аналізу матеріалів і систем: <http://www.x-ray.net.ua/prints.php>.

Автореферат розісланий "8" серпня 2019 року.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 26.199.01  
доктор фізико-математичних наук



О.Б. Охріменко

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Обґрунтування вибору теми дослідження.** Метод іонної імплантації широко використовується для створення приладів нано- та мікроелектроніки. Він дозволяє вводити домішки з певним профілем залягання, не потребує таких високотемпературних операцій, як дифузія, і є ключовим технологічним процесом при створенні багатьох приладів. Тому детальне дослідження змін структури матеріалу після цього процесу важливе для вибору оптимальних параметрів імплантації та отримання заданих характеристик приладів. Також імплантація іонів інертних газів – один із методів впливу на деформаційний стан багатошарових систем та приповерхневих областей кристалів.

За допомогою легування напівпровідників методом іонної імплантації створюються *p-n* переходи для застосування в приладах на основі InSb та GaN. Детектори інфрачервоного (ІЧ) діапазону на основі фотодіодів InSb широко використовуються в якості тепловізорів для систем орієнтування та спостереження, для контролю промислових процесів. Діоди на основі GaN використовуються як світловипромінювальні прилади ультрафіолетового діапазону. Дослідження та контроль розподілу домішок при створенні *p-n* переходів важливі для контролю та покращення характеристик цих приладів.

Напівпровідникові багатошарові структури на основі GaN, AlN та сплавів AlGaN широко використовуються в якості яскравих високоефективних світлодіодів, що покривають весь видимий діапазон спектру, лазерних діодів, приладів силової та надвисокочастотної електроніки. Перспективність застосування цих матеріалів обумовлена унікальними фізико-хімічними властивостями – такими як термічна, хімічна та радіаційна стійкість. Але серйозною проблемою для отримання високоякісних багатошарових структур (БШС), таких як надгратки (НГ), є відсутність належної підкладки для їх вирощування, що спричиняє існування значної кількості структурних дефектів. Крім того, у зв'язку із зменшенням геометричних розмірів структур, на властивості приладів сильно впливають неоднорідності товщини шарів. Діагностика таких мікро- та макропорушень структури в БШС важлива для оптимізації технологічних процесів вирощування – а отже, для покращення відтворюваності характеристик приладів.

Широкий діапазон значень ширин заборонених зон AlGaN-сплавів (від 3,4 еВ до 6,2 еВ) і наявність сильних полів п'єзополяризації є привабливими властивостями для розробки різних оптоелектронних пристроїв. Зокрема, індуковане поляризацією легування в III-нітридах ефективно підвищує провідність *p*-типу шарів AlGaN, які використовуються для виготовлення світлодіодів та *p-n* переходів. Керування полями п'єзополяризації за допомогою іонного опромінення дає можливість робити точну настройку параметрів приладів та створювати структури з новими функціональними можливостями. Оскільки при іонній імплантації виникають радіаційні порушення, то вивчення процесів пошкодження при імплантації в III-нітридних сплавах з композиційними

градієнтами та БШС важливе для подальшого розуміння механізмів пошкоджень в цих матеріалах та впливу імплантації на оптоелектричні параметри приладів.

Розвиток надійних і швидких методів діагностики структури для визначення деформаційного та дефектного станів іонно-імплантованих структур важливі для розвитку фундаментальної нанофізики та нанотехнології. Основним методом швидкої та неруйнівної діагностики структур є X-променева дифрактометрія. Тому вдосконалення методів оцінки параметрів структури та оцінка розподілів деформацій і дефектів в монокристалах та БШС – важливий напрямок фізики напівпровідників та нанотехнології.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами.** Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України і виконана у відповідності до тем:

- Державна цільова науково-технічна програма „Розроблення і створення сенсорних наукоємних продуктів на 2008-2017 роки” проект „Розроблення і створення високороздільних рентгенівських методів і обладнання для сертифікації нанорозмірних матеріалів” (№ державної реєстрації 0108U003196) – (виконавець).
- Цільова комплексна програма фундаментальних досліджень НАН України „Нанофізика, наноматеріали та нанотехнології” (№ державної реєстрації 0103U006315) – (виконавець).
- Цільова програма ВФА НАН України „Фізичні механізми впливу деформацій і процесів релаксації на формування і характеристики напівпровідникових наноструктур із складною кристалічною ґраткою” (№ державної реєстрації 0111U002512) – (виконавець).
- Цільова науково-технічна програма НАН України „Дослідження і розробки з проблем підвищення обороноздатності і безпеки держави” проект “Розробка технології виготовлення дводіапазонних багатоелементних фотоприймальних інфрачервоних пристроїв спеціального призначення на основі антимонодиду індію” (№ державної реєстрації 0117U001509) – (виконавець).
- Грант НАН України “Структурні дослідження іонно-модифікованих AlGa<sub>x</sub>N-GaN гетероепітаксійних систем для приладів нано- і оптоелектроніки” (№ державної реєстрації 0117U006195) – (виконавець).

**Мета та завдання дослідження.** Метою дисертаційної роботи є встановлення фізичних механізмів еволюції деформаційного та дефектного станів в градієнтних шарах Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N, надґраткових структурах AlN/GaN та монокристалах InSb та GaN під дією іонної імплантації; розробка методик аналізу дифракційних спектрів з врахуванням впливу шорсткості гетерограниць, неоднорідності товщини шарів по глибині та дислокаційних порушень структури.

Для досягнення поставленої мети було визначено такі *завдання*:

1. Розробити методику відтворення профілів деформації в приповерхневих шарах монокристалів при різних умовах імплантації.

2. Дослідити вплив шорсткості поверхні і гетерограниць та неоднорідності товщини шарів надграткової структури по глибині на форму дифракційних спектрів, виміряних в геометрії Бреґгівської дифракції.

3. Дослідити одночасний вплив дислокацій і неоднорідності товщини шарів AlN і GaN по глибині в НГ AlN/GaN на високороздільні рентгенодифракційні спектри. Встановити причини симетричного і асиметричного розширення сателітних піків на дифракційних спектрах від НГ.

4. Дослідити деформаційний стан короткоперіодних AlN/GaN надграток, його зміну після імплантації іонами аргону та встановити можливість керування деформаційно-релаксаційним станом НГ з метою формування нових фізичних властивостей НГ.

5. Встановити вплив імплантації іонів  $Ar^+$  у композиційно-градієнтні сплави  $Al_xGa_{1-x}N$  з різним вмістом Al на зміни їх структурного та деформаційного стану (деформаційно-поляризаційна інженерія).

6. Встановити зміни гідростатичних компонент деформації, поведінку щільності точкових дефектів та конфігурацію системи дислокацій в кристалах та багатошарових структурах під впливом іонної імплантації та постімплантаційних термообробок.

**Об'єкт дослідження** – надгратки AlN/GaN із структурними порушеннями, іонно-імплантовані НГ AlN/GaN, композиційно-градієнтні шари  $Al_xGa_{1-x}N$  і монокристали GaN та InSb.

**Предмет дослідження** – еволюція дифракційних спектрів (асиметричне та симетричне розширення піків, їх кутові зсуви) для неідеальних надграткових структур AlN/GaN, викликана шорсткістю поверхні та інтерфейсів, варіаціями товщини шарів та періоду, деформаціями ґратки, зміною співвідношення товщини шарів періоду, а також наявністю дислокацій; особливості дифракції X-променів в цих структурах та монокристалах InSb і GaN після іонної імплантації.

**Методи дослідження:** методи високороздільної X-променевої дифрактометрії (ВРХД), вторинна іонна мас-спектрометрія (ВІМС), раманівська спектроскопія, фотолюмінесценція (ФЛ) та теоретичне моделювання.

#### **Наукова новизна одержаних результатів.**

1. На основі кінематичної та динамічної теорій дифракції X-променів розроблено модель для аналізу впливу іонної імплантації на розподіл мікро- та макродеформацій в кристалах та багатошарових структурах (БШС). Теоретично і експериментально визначено товщину деформованого шару і максимальне значення деформації в іонно-модифікованих шарах InSb.

2. Вперше побудована модель дифракції з врахуванням реальної дефектної структури кристалів для ефективного розрахунку глибинних профілів деформації та неоднорідності товщини шарів в когерентних та частково релаксованих надгратках (НГ) AlN/GaN.

3. Вперше розроблено підхід до моделювання дифракційних спектрів з використанням статистичної динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів для імплантованих композиційно-градієнтних структур  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

4. На основі даних, отриманих з X-променевої дифрактометрії, розроблена модель, яка пояснює зміну деформаційного стану і, відповідно, швидкостей травлення імплантованих іонами аргону шарів  $\text{AlN}/\text{GaN}$  в НГ.

5. Вперше встановлено, що низькодозова ( $D < 4 \cdot 10^{14}$  ат./ $\text{cm}^2$ ) іонна імплантація в шари  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  призводить головним чином до збільшення концентрації точкових дефектів, в той час як на конфігурацію дислокацій вона практично не впливає. Показано, що постімплантаційний відпал призводить до значного зниження концентрації мікродефектів.

6. Встановлено, що структурна якість градієнтних шарів  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  сильно залежить від концентрації Al і погіршується з її збільшенням. При цьому виявлено, що структурні зміни в системі точкових дефектів, викликані імплантацією у півки  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  з більшими густинами дислокацій, менш виражені.

#### **Практичне значення одержаних результатів.**

- Показано можливість змінювати деформаційний і дефектний стан БШС за допомогою іонної імплантації, що дозволить оптимізувати технологію виготовлення структур з наперед заданими властивостями і сприятиме створенню новітніх приладів на основі III-нітридів з необхідними параметрами.
- Розроблено методику визначення профілів розподілу деформації та компонентного складу в градієнтних  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  структурах по глибині, яка дозволяє калібрувати швидкість росту та компонентний склад даних структур та досліджувати зміни деформаційного та дефектного стану в них після іонної імплантації.
- Продемонстровано можливість керованого регулювання величини поляризації за рахунок зміни деформаційного стану систем, що відкриває шлях для поляризаційної інженерії в електронних приладах на основі III-нітридів.

**Особистий внесок здобувача** полягає в одержанні експериментальних результатів за допомогою X-променевої дифрактометрії. Також, автору дисертації належать математичні розрахунки в роботах [1-6], виконані з використанням особисто написаних комп'ютерних програм. Здобувач брав активну участь у постановці завдань, інтерпретації результатів [1, 3-6] та представленні результатів на конференціях [7-12]. Тексти статей написані спільно з іншими авторами.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати дисертаційної роботи доповідалися на українських та міжнародних конференціях:

VII українська наукова конференція з фізики напівпровідників "УНКФН-7", 26-30 вересня 2016, Дніпро, Україна.

Summer school International research and practice conference: Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2017), 19-26 August, 2017, Migove-Chernivtsi region, Ukraine.

IV міжнародна науково-практична конференція “Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка” НМІТФ-2018, 17-19 травня 2018 Кременчук, Україна.

6th International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2018)”, 27-30 September 2018, Kiev, Ukraine.

The 14th Biennial Conference on High-Resolution X-Ray Diffraction and Imaging XTOP 2018, 3-7 September 2018, Bari, Italy.

SIMS Europe 2018, 16-18 September 2018, Münster, Germany.

VIII Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 2-4 жовтня 2018, Ужгород, Україна.

I міжнародна науково-практична конференція “Елементи, прилади та системи електронної техніки” (ЕПСЕТ-18), 14-16 листопада 2018, Запоріжжя, Україна.

**Публікації.** У дисертації узагальнено наукові результати 12 наукових праць, у тому числі 6 статей в міжнародних [4-5] та вітчизняних [1-3, 6] провідних фахових журналах і 6 тез доповідей на наукових конференціях [7-12].

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертаційна робота складається із вступу, літературного огляду з теми дослідження, п'яти оригінальних розділів, які присвячені основним результатам роботи та методикам дослідження і розрахунків, висновків та списку цитованої літератури з 280 найменувань. Дисертація викладена на 181 сторінці тексту, з яких 148 сторінок основного тексту, і містить 49 рисунків.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, її зв'язок з науковими програмами і темами, сформульовані мета та основні завдання роботи, її наукова новизна, практичне значення отриманих результатів, наведено дані про особистий внесок здобувача, а також відомості про апробацію роботи та публікації.

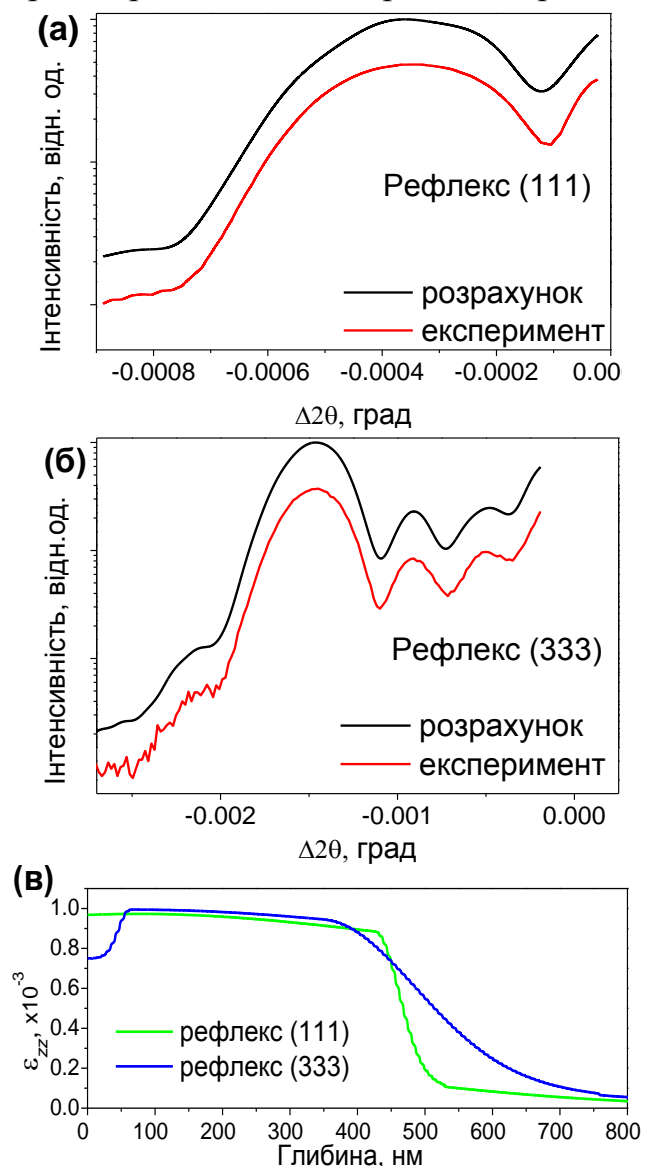
У **першому розділі** дана загальна характеристика об'єктів дослідження та описані методи дослідження. Також наведено основні роботи, присвячені даній тематиці. Вказано на області застосування напівпровідникових іонно-імплантованих монокристалів та іонно-модифікованих багат шарових структур AlN і GaN та композиційно-градієнтних шарів  $Al_xGa_{1-x}N$ .

На основі аналізу результатів окреслено рамки завдань дисертації та сформульовано переваги вибору методів дослідження вказаних структур.

В **другому розділі** розглянуто загальні принципи високороздільної X-променевої дифрактометрії та приведено основні формули кінематичної та динамічної теорій дифракції, які використовувалися для моделювання ВРХД спектрів. Також обговорено процедуру підгонки спектрів, розглянуто деякі алгоритми мінімізації та їх особливості при застосуванні для підгонки ВРХД спектрів. Розглянуто модифікований критерій мінімізації, за допомогою якого можна обирати частину спектру по інтенсивності сигналу для кращої підгонки нормалізованих спектрів.

В третьому розділі проведено дослідження іонно-імплантованих монокристалів InSb і GaN за допомогою методів ВРХД. Велика увага приділена методиці відтворення профілів деформації в імплантованих кристалах, яка полягає у моделюванні і підгонці спектрів. Досліджувалися монокристали InSb після двостадійної імплантації іонами  $\text{Be}^+$  при таких параметрах імплантації: перша –  $E = 66$  кеВ, доза  $D = 1,56 \cdot 10^{14}$  ат./см<sup>2</sup>, друга –  $E = 80$  кеВ,  $D = 3,125 \cdot 10^{14}$  ат./см<sup>2</sup> та імплантовані іонами  $\text{Ar}^+$  та  $\text{Mg}^+$  монокристали GaN при різних режимах імплантації. Аналіз карт оберненого простору асиметричних рефлексів показав, що імплантовані шари когерентні до підкладки за параметром ґратки  $a$ . Іонна імплантація призводить до розширення елементарної комірки і появи деформацій, що проявляється у збільшенні параметра ґратки  $c$ .

На рис. 1 показано спектри від імплантованого монокристалу InSb та профілі деформації, отримані моделюванням спектрів. Симуляція спектрів була проведена використовуючи напівкінематичну теорію дифракції, імплантована область при цьому ділилась на шари, в межах яких деформація вважалася постійною. Профіль деформації в імплантованій області задавався у вигляді суми двох асиметричних гаусіанів. Відтворені профілі деформації, що отримані моделюванням  $2\theta$ - $\omega$  сканів симетричних рефлексів (111) і (333), показані на рис. 1в. Величина деформації в імплантованому шарі складає  $\varepsilon_{zz} \approx 0,1\%$ . Фітування  $2\theta$ - $\omega$  сканів від рефлексу (333) спрощується через наявність характерних особливостей спектрів у вигляді чітко видимих осциляцій. Ситуація з підгонкою спектру від рефлекса (111) набагато складніша: по-перше рефлекси нижчих порядків менш чутливі до деформацій, по-друге, вони не мають добре виражених характерних особливостей. Слід зазначити, що результати підгонки (знаходження параметрів профілю деформації, при яких співпадіння розрахованого і експериментального спектрів найкраще) неоднозначні і для отримання найкращого результату використовувалася додаткова згортка спектру (згладжування). Використовуючи аналогічну процедуру, було досліджено іонно-



**Рис. 1** Експериментальні та змодельовані  $2\theta$ - $\omega$  скани від рефлексів (111) (а), (333) (б) та отримані профілі деформації (в).

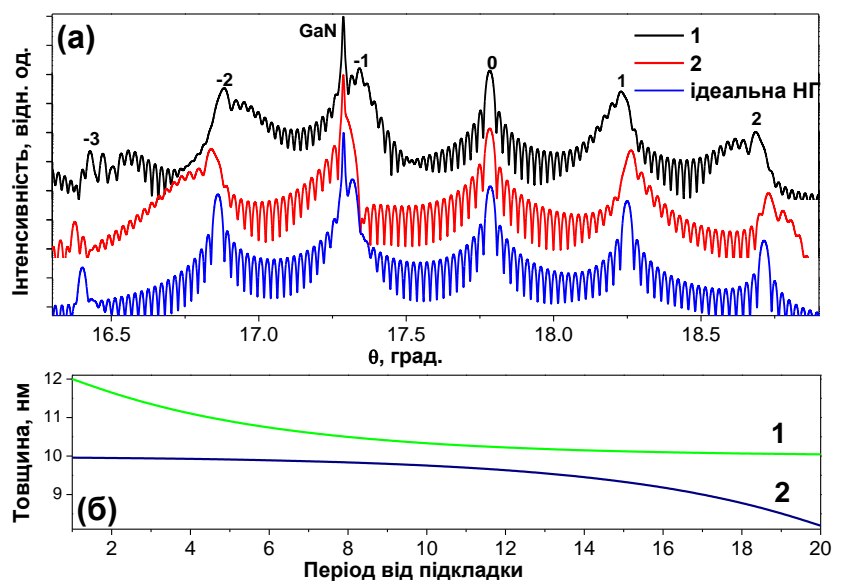
яких співпадіння розрахованого і експериментального спектрів найкраще) неоднозначні і для отримання найкращого результату використовувалася додаткова згортка спектру (згладжування). Використовуючи аналогічну процедуру, було досліджено іонно-



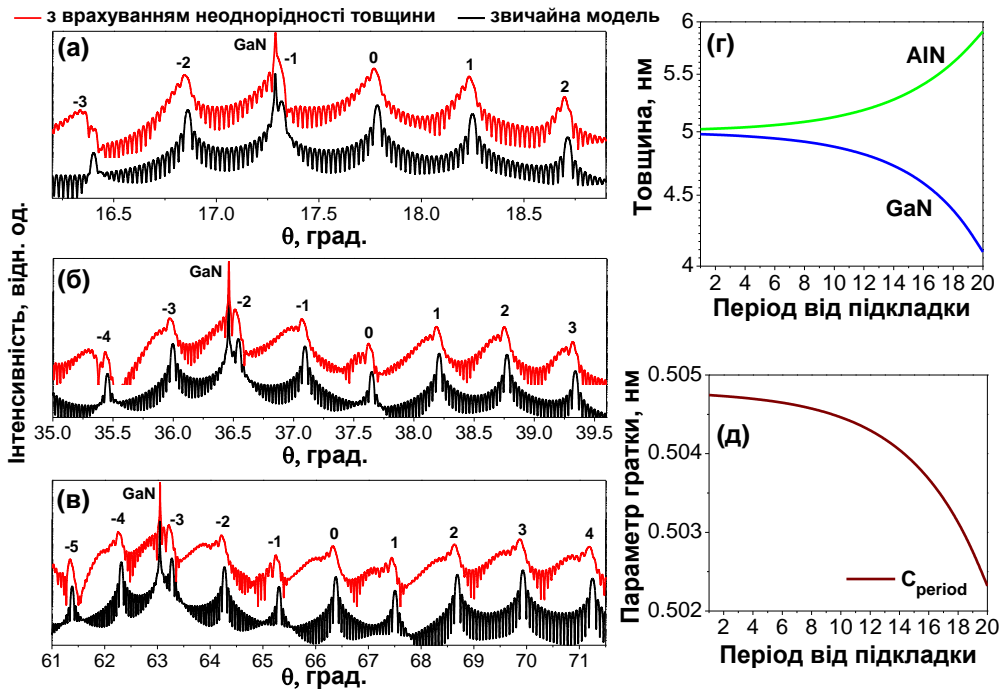
імплантовані монокристали GaN та визначено профілі деформації в них. В результаті імплантації іонами  $\text{Ag}^+$  з енергією 108 кеВ та дозою  $2 \cdot 10^{13}$  ат./см<sup>2</sup>, зміни деформаційного стану малі і практично невидимі на спектрах, при збільшенні дози до  $1 \cdot 10^{14}$  ат./см<sup>2</sup> деформації збільшуються до значення  $\varepsilon_{zz} \approx 0,42\%$ . При імплантації іонами  $\text{Mg}^+$  з енергією 95 кеВ та дозою  $2,5 \cdot 10^{14}$  ат./см<sup>2</sup>, величина деформації становить  $\varepsilon_{zz} \approx 0,53\%$ .

В четвертому розділі представлено результати дослідження впливу порушень структурної досконалості надграток AlN/GaN, вирощених на темплейтних підкладках GaN (0001), на ВРХД спектри. Сучасні дослідження в більшості випадків використовують оцінку товщини шарів та деформаційно-релаксаційного стану НГ, розглядаючи тільки кутові положення піків. Більшість комерційних програм для розрахунку спектрів від НГ використовує модель ідеальної надгратки. Але типові товщини шарів в наноструктурах складають кілька моношарів і будь-які відхилення товщини суттєво впливають на оптоелектричні параметри приладів. Тому виникає необхідність діагностики таких структур з врахуванням їх неідеальності, в тому числі одночасно з врахуванням порушень мікроструктури, таких як дислокації, типові густини яких для AlN/GaN структур становлять  $10^8 \dots 10^{10}$  см<sup>-2</sup>.

Було розглянуто різні варіанти зміни товщини шарів в НГ по глибині (від поверхні до підкладки): зміну товщини періоду по глибині структури, зміну товщини шарів AlN і GaN при умові сталої товщини періоду та зміну товщини одного із шарів НГ по глибині. Відхилення товщини шарів НГ по глибині  $\Delta t$  від номінального значення  $t$  задавалося у вигляді функції  $\Delta t = k_1 \exp(k_2 z)$ , де  $k_1$  і  $k_2$  – коефіцієнти,  $z$  – координата по глибині структури. На рис. 2 показано ВРХД  $2\theta$ - $\omega$  скани від НГ при наявності зміни товщини періоду надгратки по глибині. Моделювання здійснювалося для 20-періодної НГ AlN/GaN з номінальними товщинами шарів по 5 нм, вирощеної на підкладці GaN. З рис. 2а бачимо, що при наявності неоднорідності товщини періоду, виникає асиметрія сателітних піків різного ступеня, також присутній сателіт, форма якого не змінюється. На рис. 2б показано зміну товщини періодів НГ, яка задавалася залежністю у вигляді експоненти. При моделюванні вважалося, що зміна товщини періоду обумовлена одночасними змінами товщини шарів, що входять до складу періоду, причому величина зміни однакова як за знаком, так і за



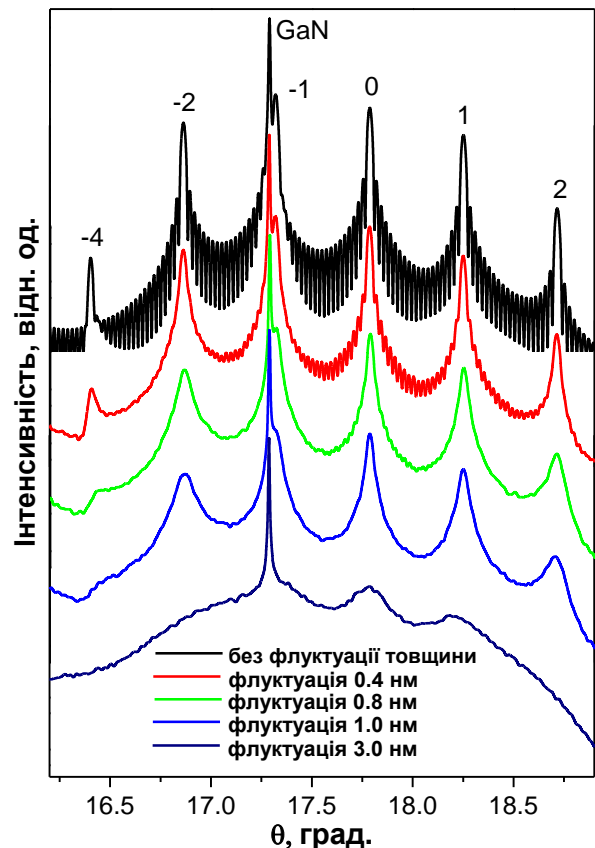
**Рис. 2**  $2\theta$ - $\omega$  скани рефлексу (0002) для різних випадків варіації товщини періоду (1 і 2) і без зміни (а); глибинні профілі варіації товщини періоду (б).



**Рис. 3**  $2\theta$ - $\omega$  скани для рефлексів (0002) (а), (0004) (б), (0006) (в), які відповідають глибинним профілям зміни товщини шарів AlN і GaN (г) та зміни параметра ґратки періоду (д).

амплітудою. Якщо розглядати інший випадок, коли товщина періоду не змінюється, а змінюються товщини шарів AlN і GaN, що входять до періоду, причому величина зміни однакова за значенням і протилежна за знаком (рис. 3г), то у цьому випадку виникає асиметрія всіх сателітних піків (рис. 3а-3в).

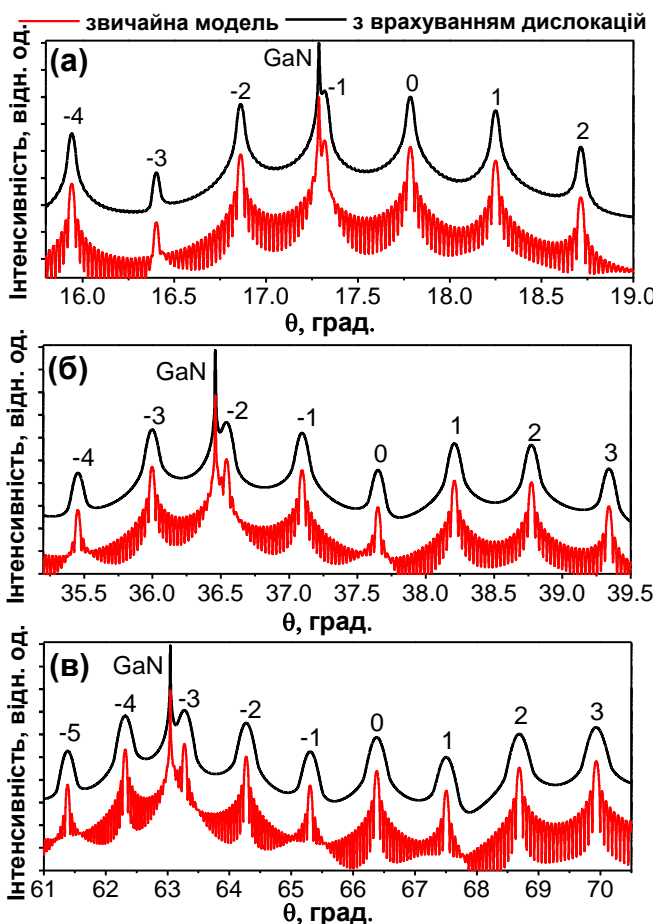
На рис. 3 показано спектри рефлексів (0002), (0004) та (0006), розраховані для випадку зміни товщини шарів, яка показана на рис. 3г. На рис. 3д показано зміну параметра ґратки періоду  $C_{period}$ , який залежить від товщини шарів у періоді та параметрів ґратки цих шарів. Отже, зміна параметра ґратки при незмінному значенні товщини періоду – причина виникнення асиметрії всіх сателітних піків. Асиметрія сателітів суттєво збільшується на спектрах вищих порядків. Асиметрія більш далеких відносно піка незмінної форми сателітів більша і зростає з віддаленням по кутовому положенню відносно незмінного сателіта (рис. 2). Асиметрія є більшою для сателітів з нижчою інтенсивністю. Слід відмітити, що спектри мають не дуже велику чутливість до положення по глибині області більшої зміни товщини періоду: біля поверхні чи біля підкладки. Основні відмінності найбільш видимі для



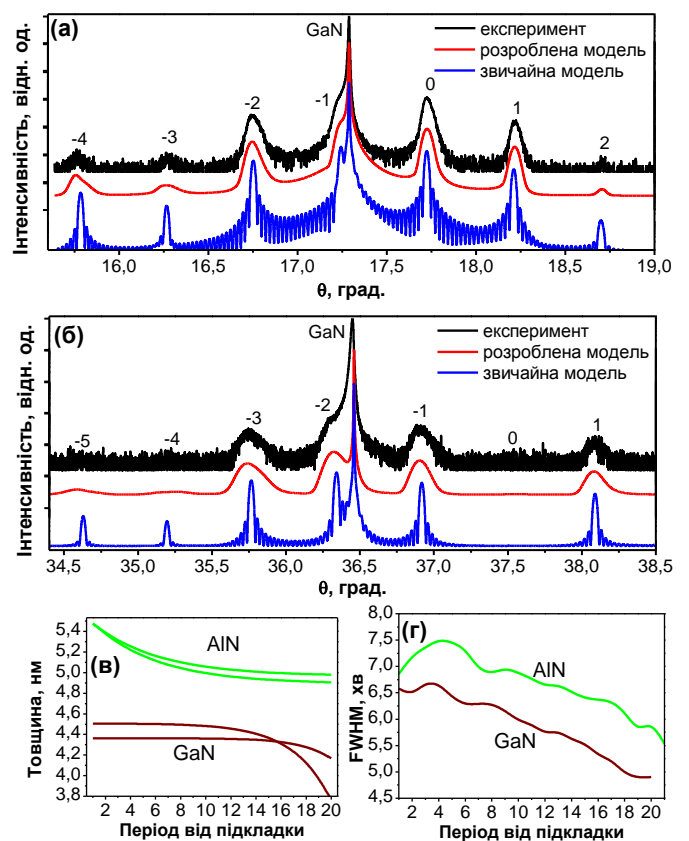
**Рис. 4** Вплив різних значень амплітуди зміни випадкової величини флуктуації товщин на  $2\theta$ - $\omega$  скани рефлексу (0002).

тонкої сателітної структури (дрібних осциляцій на спектрах). Поведінка асиметрії залишається такою ж, як було розглянуто раніше, включаючи незначний кутовий зсув сателітів з асиметрією. При зміні товщини лише одного із шарів НГ AlN чи GaN виникає асиметрія сателітів, схожа на ту, що спостерігається на рис. 2а, але порядок сателіта незмінної форми тепер не нульовий і, наприклад, при зміні товщини шарів AlN асиметрія не виникає в сателіта першого порядку на  $2\theta$ - $\omega$  скані рефлексу (0002).

Також було розглянуто вплив випадкової флуктуації товщини шарів НГ (шорсткості) на  $2\theta$ - $\omega$  скани (рис. 4). Шорсткість призводить до згладжування тонких осциляцій на спектрах та до розширення сателітів із одночасним зменшенням інтенсивності піків. Розширення піків сателітів нерівномірне, найменше змінюється форма сателіта нульового порядку та близьких до нього сателітів. Вплив шорсткості на згладжування спектрів сильніше виражений на спектрах рефлексів вищих порядків. Для дослідження впливу дислокацій на спектри була розроблена модель дифракції з використанням мозаїчної моделі кристалу.



**Рис. 5** Вплив дислокацій на спектри від симетричних рефлексів (0002) (а), (0004) (б), (0006) (в). Чорним позначено  $2\theta$ - $\omega$  скани з врахуванням дислокацій, червоним –  $2\theta$ - $\omega$  скани від ідеальної НГ. Дислокації невідповідності, густина  $5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ .

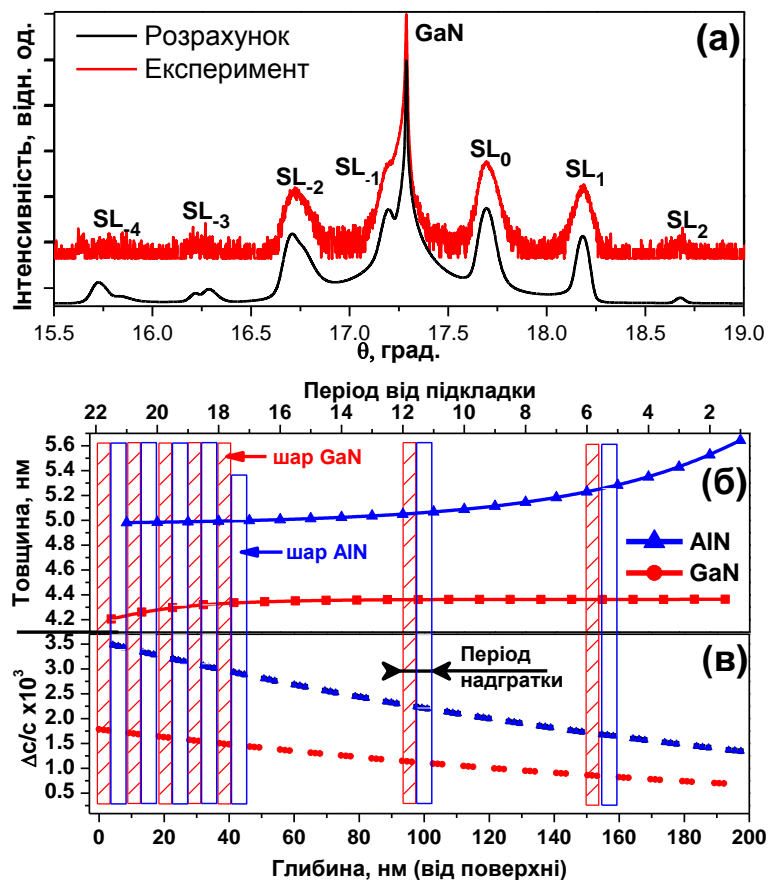


**Рис. 6** Експериментальні, фітовані з врахуванням дислокацій і варіації товщини, та розраховані з використанням звичайної моделі дифракції спектри НГ від рефлексів (0002) (а) і (0004) (б) та закони зміни товщин шарів AlN і GaN в залежності від № періоду НГ отримані з моделювання спектрів (в) та ВІМС (г).

Дислокації в кристалі призводять до існування полів мікродеформацій та розширення піків на ВРХД спектрах. На рис. 5 показано розраховані спектри від різних рефлексів з врахуванням впливу дислокацій і без нього. Дислокації призводять до симетричного розширення піків сателітів, яке проявляється значно сильніше на спектрах від рефлексів вищих порядків. На відміну від впливу шорсткості на  $2\theta-\omega$  скани, розширення всіх сателітів від НГ з дислокаціями однакове. Для перевірки коректності роботи розробленої моделі, було використано метод Вільямсона-Холла для аналізу розширення піків сателітів на спектрах від різних рефлексів. В результаті, розроблена модель може використовуватися для моделювання спектрів від БШС з дислокаціями при густинах дислокацій більших ніж  $1 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ . На рис. 6 показано результати моделювання експериментальних спектрів від НГ з врахуванням дислокаційного розширення піків та неоднорідності товщини шарів по глибині структури. Тут також для порівняння показано спектри, отримані з використанням звичайної моделі дифракції від ідеальної НГ. Отримані з рефлексів (0002) та (0004) значення густин дислокацій складали  $2,8 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$  та  $2,3 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ , відповідно. Глибинні профілі товщини шарів НГ, отримані з симуляції, показано на рис. 6в, отримані з використанням ВІМС – на рис. 6г. Отже, одночасне врахування таких порушень структури НГ як варіація товщини та дислокації дозволяє пояснити асиметрію та розширення сателітів на експериментальних спектрах.

У п'ятому розділі представлено результати дослідження імплантованої іонами  $\text{Ag}^+$  НГ  $\text{AlN}/\text{GaN}$ . Імплантація іонами інертних газів дозволяє змінювати деформаційний стан в БШС. Оскільки матеріали  $\text{AlN}$  і  $\text{GaN}$  п'єзоелектрики, то деформаційний стан систем на їх основі суттєво впливає на електрооптичні властивості приладів. Структури були проімплантовані іонами  $\text{Ag}^+$  з енергією 100 кеВ та дозою  $1 \cdot 10^{14} \text{ ат./см}^2$  при густині струму  $0,1 \text{ мА/см}^2$ .

Зразки досліджувалися за допомогою методів ВРХД, ВІМС, раманівської та ФЛ спектроскопій. Для визначення змін деформаційного стану було проведено моделювання



**Рис. 7** Порівняння експериментальних та симульованих (0002)  $2\theta-\omega$  сканів від імплантованого зразка (а), профілі зміни товщини індивідуальних шарів НГ та зміни параметра ґратки  $c$  після імплантації показані на (б) та (в), відповідно.

$2\theta$ - $\omega$  сканів від імпантованого зразка, що показано на рис. 7а. Оскільки досліджувався іонно-імпантований зразок 21-періодної НГ, розглянутий вище, то при моделюванні використовувалися профілі зміни товщини шарів та значення густини дислокацій, отримані в попередньому розділі.

Визначені профілі деформації в шарах НГ AlN і GaN після імпантації показані на рис. 7в. Імпантація призводить до нерівномірної зміни значень деформації на всій товщині НГ. На рис. 8 показано спектри від НГ до і після імпантації. Середня зміна деформації по всій НГ, визначена за зсувом кутового положення сателіта  $SL_0$  склала  $\Delta c/c = 0,28\%$ . Значення періоду НГ, визначені з (0002)  $2\theta$ - $\omega$  сканів до та після імпантації складають  $9,1 \pm 0,1$  нм та  $9,5 \pm 0,4$  нм, а з КОП асиметричного рефлексу (11 $\bar{2}$ 4) –  $9,5 \pm 0,4$  нм і  $9,3 \pm 0,6$  нм для вихідного та імпантованого зразків, відповідно. Низька точність отриманих значень товщини періоду обумовлена асиметричним розширенням піків сателітів разом зі значним фоном на рентгенівських спектрах. Отже, період НГ в межах похибки практично не змінився в процесі імпантації.

В порівнянні з вихідним спектром ФЛ AlN/GaN НГ, після імпантації в спектрах ФЛ спостерігається високоенергетичний зсув смуги  $D^0X$  від GaN шарів з 3,41 еВ до 3,45 еВ, що свідчить про збільшення в них напружень стиску (рис. 9). Щоб оцінити величину напружень, які призводять до такого зсуву вищезгаданої ФЛ смуги, можна скористатися тим фактом, що значення енергії вільного екситону для GaN при кімнатній температурі становить 3,409 еВ. Деформацію, яка призводить до такого зсуву ( $\Delta E = 0,03$  еВ) смуги ФЛ, можна оцінити використавши формулу:  $\Delta E = C \cdot \varepsilon_{zz}$ , де  $\varepsilon_{zz} = \Delta c/c$  – напруження вздовж осі  $c$ ,  $C$  – параметр, який характеризує ефективну енергію деформації. Врахувавши, що ефективна енергія деформації дорівнює  $C = 12$  еВ, було визначено величину

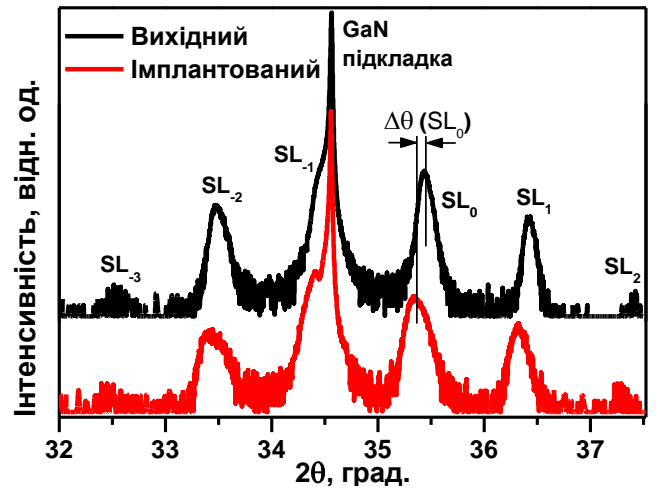


Рис. 8 Високороздільні  $2\theta$ - $\omega$  скани рефлексу (0002) від вихідного зразка та після імпантації. Позначення  $SL_n$  відповідає сателітам НГ.

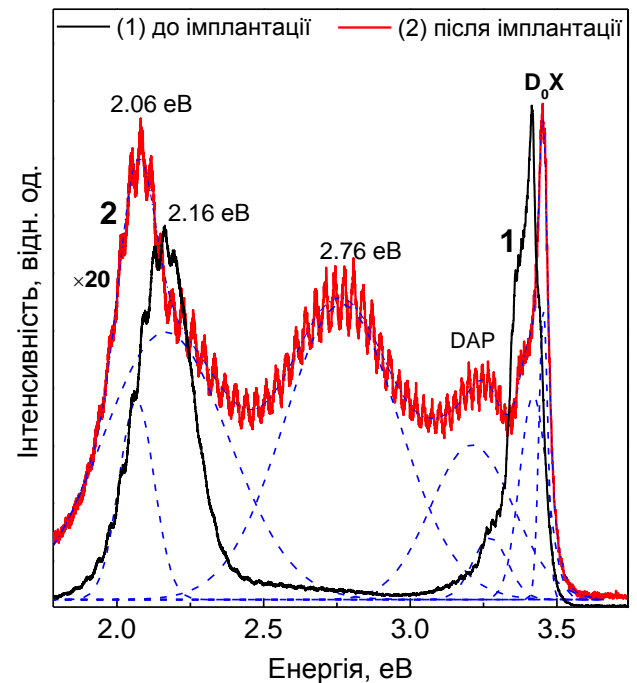


Рис. 9 Спектри фотолумінесценції вихідного (1) та імпантованого (2) зразків при збудженні випромінюванням з енергією 3,82 еВ при 300К.

деформації  $\varepsilon_{zz} = 0,25\%$ , яка з високою точністю збігається зі значенням, що було отримано для  $\varepsilon_{zz}$  з даних ВРХД (0,28%).

Дослідження ВІМС показують зміну швидкості розпорошення шарів НГ після імплантації, причому якщо для вихідного зразка характерне збільшення часу травлення для шарів, що знаходяться біля інтерфейсу НГ/підкладка GaN, то для імплантованого зразка ця тенденція змінюється, і для шарів, які знаходяться біля інтерфейсу, характерні менші часи травлення, ніж для шарів біля поверхні. Така зміна не може бути пов'язаною зі зміною товщини шарів, оскільки доза імплантації аргону не є високою і жодних ефектів перемішування та розмиття границь поділу шарів не спостерігається. Отже, найбільш ймовірний процес, що пояснює ці результати – це зміна швидкості розпорошення, обумовлена впливом деформаційних полів.

Після імплантації в досліджувану структуру іонів  $\text{Ar}^+$  раманівський спектр також дещо змінився. Зокрема, в спектрі проявляються інтенсивні смуги з частотами  $152\text{ см}^{-1}$ ,  $309\text{ см}^{-1}$  і  $678\text{ см}^{-1}$  та виникає низькочастотне плече в найбільш інтенсивної смуги GaN шару  $E_2$  (high). Поява вищеназваних трьох смуг в спектрі зумовлена порушенням трансляційної симетрії в GaN шарах за рахунок виникнення дефектів в процесі імплантації, які призводять до послаблення правил відбору по хвильовому вектору коливних мод, заборонених в раманівських спектрах малодфектних кристалів. Що стосується появи низькочастотного плеча у смуги  $E_2$  (high), то воно може бути зумовлене як розширенням смуг  $A_1(\text{TO})$ ,  $E_1(\text{TO})$  та  $E_2$  (high) від буферного шару GaN та від близько прилягаючих до нього шарів НГ, так і незначним зміщенням в низькочастотний бік вищеназваних смуг по відношенню до відповідних смуг від шарів GaN НГ, а також впливом обох механізмів.

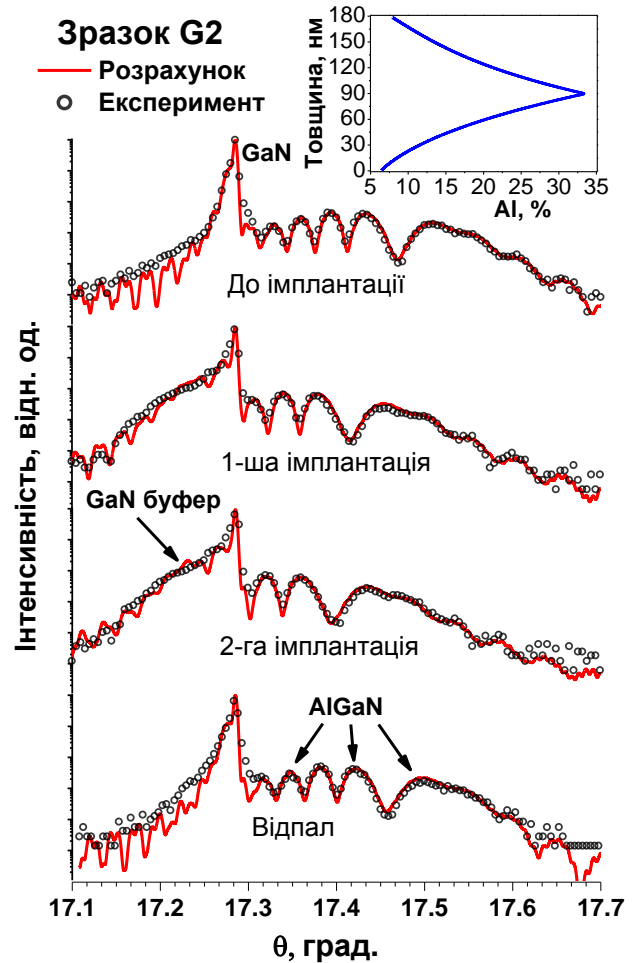
Аналіз раманівських спектрів з кратерів, які були сформовані в процесі ВІМС досліджень, дозволяє стверджувати, що буферний шар GaN є більш розупорядкованим в порівнянні з шарами GaN в НГ. Це може бути результатом того, що імплантація іонів  $\text{Ar}^+$  призводить до формування дислокацій невідповідності та інших типів дефектів на інтерфейсі між НГ і буферним шаром, де наявні максимальні напруження. Необхідно зазначити, що розупорядкування не зумовлене ефектом перемішування під час формування кратера, оскільки на спектрах, що зняті в кратерах неімплантованих структур, ефекти розупорядкування не спостерігаються. Ці результати підтверджують той факт, що розпорошення атомів в процесі мас-спектрометрії не призводить до ефектів перемішування елементів та до розмиття границь поділу шарів.

Таким чином, після проведення комбінованого дослідження вихідних та імплантованих структур було зроблено висновок, що іонна імплантація сильно впливає на зміну розподілу вбудованої деформації, що в свою чергу призводить до зміни структурних і оптичних характеристик приладів. Показано можливість керування деформаційним станом в надграткових гетероструктурах AlN/GaN.

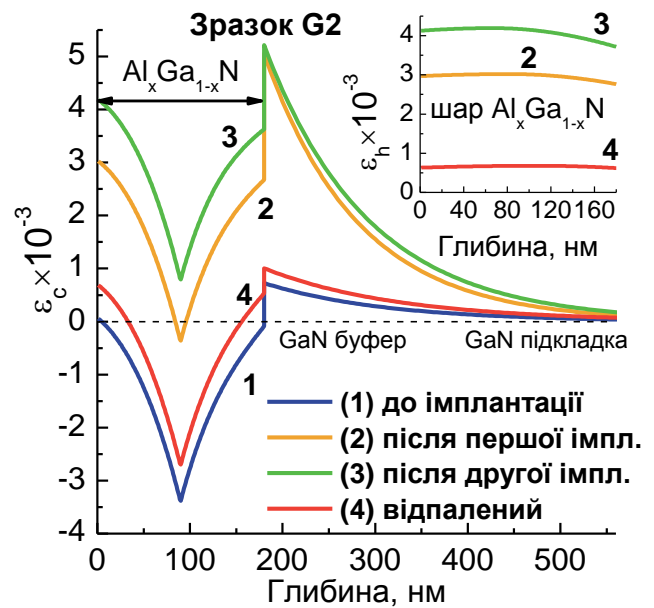
**В шостому розділі** представлено результати комплексних структурних досліджень гетероепітаксійних градієнтних  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  структур після імплантації

іонами аргону. Композиційно-градієнтні шари  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $\sim 180$  нм) були вирощені за допомогою плазмокерованої молекулярно-променевої епітаксії на комерційних підкладках, що склалися з  $\sim 5$   $\mu\text{m}$  шару GaN (0001) на  $\text{AlN}/\text{Al}_2\text{O}_3$  та буферного шару GaN товщиною 400 нм. Молярна частка AlN в шарах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  змінювалася від  $\sim 7\%$  до  $\sim 22\%$  (зразок G1) та від  $\sim 7\%$  до  $\sim 32\%$  (зразок G2). Зразки були двічі послідовно імпантовані іонами  $\text{Ar}^+$ . Кожна імпантacja проводилася при енергії 100 кеВ та дозі  $1 \cdot 10^{14}$  ат./ $\text{cm}^2$ . Високотемпературний відпал проводився при температурі  $750^\circ\text{C}$  протягом 15 хв в атмосфері азоту.

Для визначення зміни деформаційного стану після імпантации, були виміряні карти оберненого простору асиметричних рефлексів та симетричні  $2\theta$ - $\omega$  скани рефлексу (0002). На рис. 10 показано експериментальні та розраховані  $2\theta$ - $\omega$  скани для зразків після різних етапів дослідження. Моделювання здійснювалося з використанням статистичної теорії динамічної дифракції з врахуванням зміни деформаційного та дефектного станів після імпантаций та відпалу. На рис. 11 показано отримані профілі деформації в півці  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  та буферному шарі GaN для вихідного, імпантованих та відпалених зразків. Шар  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  у вихідних зразках знаходиться у стані стиску ( $\epsilon_c$ ) вздовж осі  $c$ , зумовленого розтягом по осі  $a$  ( $\epsilon_a$ ) через існування біаксіальних деформацій та псевдоморфним ростом структури. Спостережуваний стрибок  $\epsilon_c$  на інтерфейсі  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  виникає



**Рис. 10** Експериментальні та розраховані (0002)  $2\theta$ - $\omega$  скани від зразка G2. Вставка показує профілі концентрації Al в  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  шарі.



**Рис. 11** Профілі деформації в зразку G2 після імпантаций та відпалу. На вставці показана гідростатична деформація в шарах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  після процесів імпантаций та відпалу.

через те, що концентрація Al в шарі  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  на границі становить приблизно 7%, що призводить до  $-0,17\%$  невідповідності ґратки на інтерфейсі  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ . Результати моделювання показують, що незважаючи на вибір енергії імплантації, при якій максимум концентрації  $\text{Ag}^+$  має бути біля середини композиційного градієнта ( $\sim 90$  нм), змінився деформаційний стан всього шару, на відміну від іонної імплантації в монокристал, де профіль деформації має вигляд асиметричного гаусіана з чітко вираженим максимумом деформації, який розміщений біля максимуму концентрації імпантованих атомів. Деформація стиснення  $\varepsilon_c$  в іонно-імпантованому шарі  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  співіснує з гідростатичним розтягом ( $\varepsilon_h$ ), який виникає при іонній імплантації.

Деформація  $\varepsilon_h$  в іонно-імпантованих шарах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  показана на вставці (рис. 11) у вигляді різниці деформаційного стану вихідного зразка та, відповідно, імпантованих і відпалених зразків. Отже, імплантація призводить до зміни деформації в композиційно-градієнтному шарі на практично однакову величину по всій товщині шару. Відпал призводить до суттєвого зменшення деформацій практично до вихідного рівня.

На рис. 12 показано визначені моделюванням спектрив усереднені по всьому шару  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  радіуси та концентрації дефектів. Параметри дефектів визначалися з відтворених профілів статистичного фактора Дебая-Валлера та кореляційної довжини Като, усереднення проводилося по всьому градієнтному шарові. Імплантація призводить до зменшення радіуса дефектів та збільшення їх концентрації. Після відпалу концентрація дефектів суттєво зменшується одночасно зі збільшенням їх середнього радіуса.

Також в досліджуваних зразках присутня велика кількість дислокацій ( $10^8 \dots 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ), але зміна їх густини та конфігурації найбільш ймовірна лише після відпалу. При моделюванні спектрів для досліджуваних іонно-імпантованих структур вплив дислокацій включався до статистичного фактора Дебая-Валлера разом з точковими дефектами. Для додаткового вивчення змін дефектного стану після іонної імплантації та відпалу, було досліджено ВРХД  $\omega$  скани рефлексу (0002) від підкладки GaN і шару  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Аналіз нахилу хвостів  $\omega$  сканів від підкладки GaN та градієнтного шару  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , який в основному залежить від конфігурації

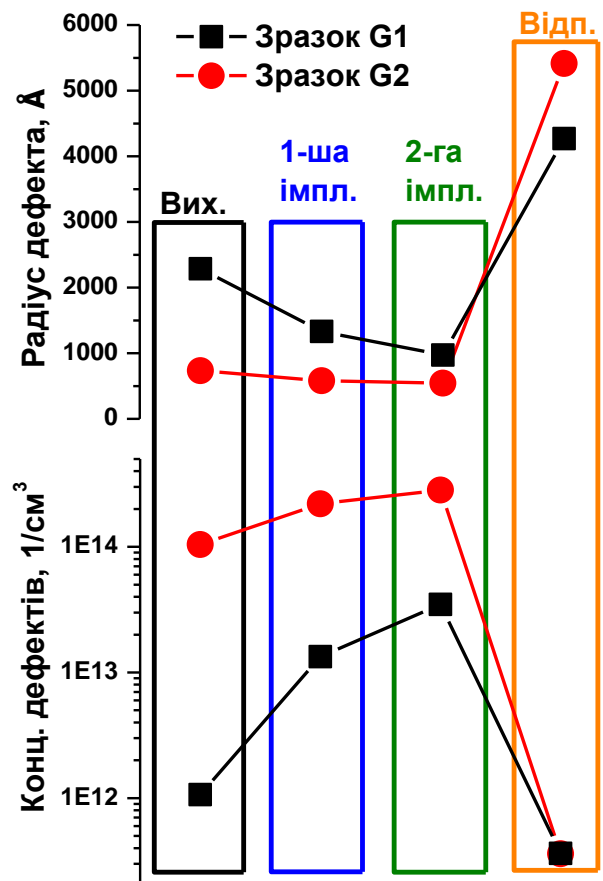


Рис. 12 Зміни середнього радіуса  $R_d$  та концентрації  $C_d$  дефектів після імплантацій та відпалу.



дислокацій, показав, що нахил практично не змінюється після імплантацій та відпалу. Отже, можна зробити висновок, що імплантація та відпал не призводять до значних змін у дислокаційній структурі гетеросистеми  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  при розглянутих в цій роботі параметрах технологічних процесів.

На рис. 13 показано визначені ширини піків (0002)  $\omega$  сканів на половині інтенсивності (FWHM). З рисунка видно, що після імплантацій FWHM як градієнтного шару, так і підкладки GaN збільшується, що вказує на збільшення густин структурних дефектів. Після відпалу FWHM зменшується, що пояснюється зменшенням кількості точкових дефектів. Зміна конфігурації та густини дислокацій після імплантації при кімнатній температурі мало ймовірна, тому це розширення  $\omega$  сканів пов'язане із зміною концентрації точкових дефектів. (що для III-нітридів слабо досліджено через те, що для вихідних зразків вплив дислокаційного розширення домінуючий) та впливом зміни деформаційного стану після імплантації. Розширення  $\omega$  сканів від підкладки GaN не могло бути спричинено порушеннями при імплантації в градієнтний шар, тому розширення  $\omega$  сканів від підкладки (рис. 13) спричинене перерозподілом деформацій в досліджуваній структурі  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -підкладка GaN – буфер GaN – композиційно-градієнтний шар  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  та міграцією дефектів по структурі.

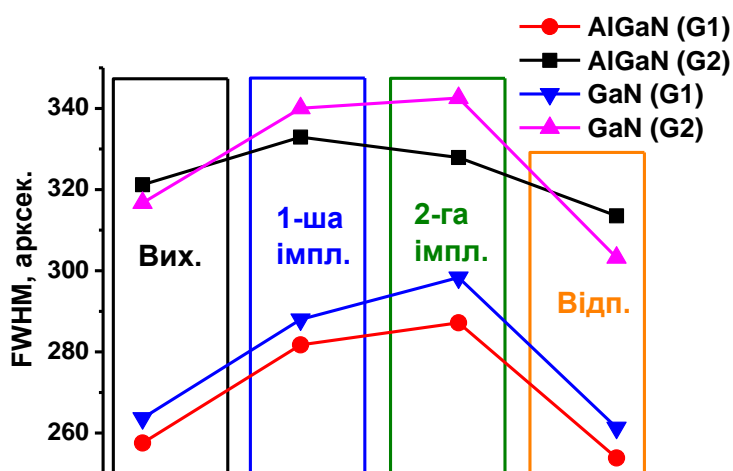


Рис. 13 FWHM (0002)  $\omega$  сканів від шару  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  і підкладки GaN зразків G1 і G2.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі апробовано комплекс методів високороздільної X-променевої дифрактометрії для характеристики структури, деформаційного та дефектного стану іонно-імплантованих монокристалів GaN та InSb а також III-нітридних гетероструктур Al(Ga)N до і після іонної модифікації. З аналізу отриманих результатів слідують такі висновки:

1. Запропоновано спосіб відтворення профілів деформації шляхом моделювання спектрів дифракційного відбиття X-променів з використанням напівкінематичної моделі дифракції для імплантованих монокристалів InSb та GaN.

2. Використовуючи модель динамічної дифракції проведено дослідження неідеальних надграткових структур AlN/GaN та встановлено, що:

- Зміни товщини шарів НГ по глибині структури призводять до виникнення асиметрії сателітних піків різної величини та форми на дифракційних спектрах.

- Шорсткість поверхні та інтерфейсів призводить до згладжування дифракційних спектрів, але при малому значенні шорсткості (1...2 моношари), її вплив на спектри незначний.
- Запропоновано спосіб врахування впливу дислокацій при моделюванні рентгенодифракційних спектрів від багат шарових структур. Показано, що дислокації призводять до суттєвого розширення піків на дифракційних  $2\theta$ -ω сканах високих порядків та до згладжування їх тонкої сателітної структури.
- Розроблена модель застосована для інтерпретації експериментальних спектрів від НГ з дислокаціями та неоднорідністю товщини шарів по глибині структури.

3. З використанням комплексу досліджень іонно-модифікованої НГ AlN/GaN, проведеного за допомогою ВРХД, ВІМС, раманівської та фотолюмінесцентної спектроскопії отримано наступні результати:

- Показано, що зміна деформаційного стану НГ  $\Delta c/c$  після імплантації іонами  $Ag^+$  енергією 100 кеВ та дозою  $1 \cdot 10^{14}$  ат./см<sup>2</sup> складає 0,28% за даними Х-променевої дифрактометрії та 0,25% за даними фотолюмінесценції.
- Встановлено наявність неоднорідного перерозподілу напружень після імплантації по всій структурі НГ та у підкладці GaN.
- Вторинна іонна мас-спектрометрія показала зміну швидкості травлення НГ після імплантації, що пов'язано із зміною деформаційного та дефектного стану структури.
- Раманівська та фотолюмінесцентна спектроскопії показали збільшення кількості дефектів внаслідок радіаційних порушень структури НГ після імплантації, зміну деформаційного стану багат шарової системи і перерозподіл напружень між НГ AlN/GaN та підкладкою GaN.

4. На основі статистичної теорії динамічної дифракції Х-променів розроблено метод для відтворення профілів розподілу статистичного фактора Дебая-Валлера та кореляційної довжини Като (параметрів, які характеризують структурну досконалість) і профілів деформації по глибині в іонно-імплантованих композиційно-градієнтних структурах  $Al_xGa_{1-x}N$ .

5. Удосконалено алгоритми підгонки та розроблено програмне забезпечення для Х-променевої діагностики деформаційного та дефектного стану багат шарових гетеросистем.

Таким чином, представлено методи для ефективного дослідження деформаційного стану, розподілів, типу і концентрації дефектів у гетероструктурах  $Al_xGa_{1-x}N$ , AlN/GaN та імплантованих монокристалах InSb і GaN на основі лабораторної Х-променевої дифрактометрії. Дані підходи можуть бути використані для оцінки змін дефектного та деформаційного стану в іонно-модифікованих структурах для калібрування процесу іонної імплантації та для проведення поляризаційної інженерії в структурах на базі AlN і GaN матеріалів.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Liubchenko O. Modeling of X-ray rocking curves for layers after two-stage ion-implantation / O. Liubchenko, V. Kladko, O. Gudymenko // Semiconductor Physics

Quantum Electronics and Optoelectronics. — 2017. — Vol. 20, No. 3. — P. 355–361. DOI: [10.15407/spqeo20.03.355](https://doi.org/10.15407/spqeo20.03.355)

2. Голтвянский Ю. В. Дослідження процесів формування фотодіодів в InSb при іонній імплантації берилію / Ю. В. Голтвянский, О. Й. Гудименко, О. В. Дубіковський, О.І. Любченко, О. С. Оберемок, Т. М. Сабов, С. В. Сапон, К. І. Чуніхіна // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. — 2017. — Vol. 52. — P. 141–150.

3. Liubchenko O. I. Simulation of X-ray diffraction spectra for AlN/GaN multiple quantum well structures on AlN(0001) with interface roughness and variation of vertical layers thickness / O. I. Liubchenko, V. P. Kladko // Metallofizika i Noveishie Tekhnologii. — 2018. — Vol. 40, No. 6. — P. 759–776. DOI: [10.15407/mfint.40.06.0759](https://doi.org/10.15407/mfint.40.06.0759)

4. Liubchenko O. I. X-ray analysis for micro-structure of AlN/GaN multiple quantum well systems / O. I. Liubchenko, V. P. Kladko, T. M. Sabov, O. V. Dubikovskiy // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. — 2019. — Vol. 30, No. 1. — P. 499–507. DOI: [10.1007/s10854-018-0315-3](https://doi.org/10.1007/s10854-018-0315-3)

5. Liubchenko O. Modification of elastic deformations and analysis of structural and optical changes in Ar<sup>+</sup>-implanted AlN/GaN superlattices / O. Liubchenko, T. Sabov, V. Kladko, V. Melnik, V. Yukhymchuk, B. Romanyuk, O. Kolomys, O. Hreshchuk, O. Dubikovskiy, Z. Maksimenko, O. Gudymenko, and A. Belyaev // Applied Nanoscience. — 2019. — P. 1–9. DOI: [10.1007/s13204-019-01000-w](https://doi.org/10.1007/s13204-019-01000-w)

6. Liubchenko O. I. The effect of ion implantation on structural damage in compositionally graded AlGaIn layers / O. I. Liubchenko, V. P. Kladko, H. V. Stanchu, T. M. Sabov, V. P. Melnik, S. B. Kryvyi, and A. E. Belyaev // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. — 2019. — Vol. 22, No. 1. — P. 119–129. DOI: [10.15407/spqeo22.01.119](https://doi.org/10.15407/spqeo22.01.119)

7. Романюк Б.М. Дослідження механізмів дефектоутворення та сегрегації антимонію у поверхневих шарах InSb, імплантованих іонами берилію та магнію / Б.М. Романюк, В.П. Мельник, В.Г. Попов, В.П. Кладько, О.Й. Гудименко, О.І. Любченко, В.В. Стрельчук, Ю.М. Насека // VII українська наукова конференція з фізики напівпровідників "УНКФН-7", Збірник тез. — Дніпро, Україна. — 26-30 вересня 2016.с.362.

8. Liubchenko O.I. XRD investigation of structural transformations in InSb induced by ion implantation / O.I. Liubchenko, V.P. Kladko, G.V. Stanchu, S.B. Kryvyi, O.Yo. Gudymenko // Summer school International research and practice conference: Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2017) Abstract book — Migove-Chernivtsi region, Ukraine. — 19-26 August, 2017. — P.64.

9. Любченко О.І. Рентгенівська діагностика структурної неоднорідності надграток GaN/AlN з дислокаціями / О.І. Любченко, В.П. Кладько, С.Б. Кривий, Г.В. Станчу, О.В. Дубіковський, Т.М. Сабов // IV міжнародна науково-практична конференція "Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка" НМІТФ-2018. Збірник тез. — Кременчук, Україна. — 17-19 травня 2018. — с.56.

10. Liubchenko O.I. Modification of the strain state and analysis of crystalline changes in the ion implanted AlN/GaN superlattices / O.I. Liubchenko, T.M. Sabov, V.P. Melnik, V.P. Kladko, B.M. Romanyuk, V.O. Yukhymchuk, O.F. Kolomys, O.V. Dubikovskiy, O.Yo. Gudymenko, A.E. Belyaev // 6th International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2018)”. Abstract book — Kiev, Ukraine. — 27-30 September 2018. — P.473.

11. Liubchenko O.I. Dynamical theory of X-ray diffraction for micro-structure of AlN/GaN MQW / O.I. Liubchenko, V.P. Kladko // The 14th Biennial Conference on High-Resolution X-Ray Diffraction and Imaging XTOP 2018. Abstract book — Bari, Italy. — 3-7 September 2018. — P.135.

12. Сабов Т.М. Вплив деформаційних полів на швидкість розпилення іонним пучком надграток AlN/GaN / Т.М. Сабов, О.В. Дубіковський, О.В. Косуля, О.І. Любченко, В.П. Мельник, З.В. Максименко // I міжнародна науково-практична конференція “Елементи, прилади та системи електронної техніки” (ЕПСЕТ-18). Збірник тез. — Запоріжжя, Україна. — 14-16 листопада 2018. — с.62.

## АНОТАЦІЯ

**Любченко О. І.** Високороздільна X-променева дифрактометрія поверхневих шарів монокристалів та багатошарових структур при іонному опроміненні. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

*Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук (доктора філософії) за спеціальністю 01.04.07 “Фізика твердого тіла”. – Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, 2019.*

В дисертації викладено результати дослідження впливу іонної імплантації на структурно-деформаційний стан надграток AlN/GaN, градієнтних шарів  $Al_xGa_{1-x}N$ , приповерхневих шарів монокристалів InSb і GaN та розробки методик рентгенодифракційного аналізу цих ефектів.

Розглянуто підхід до моделювання рентгенодифракційних спектрів в іонно-імплантованих кристалах InSb і GaN та методику відтворення профілів деформації в них. Проведено детальний аналіз неідеальних надграткових структур AlN/GaN з неоднорідностями товщини шарів НГ та з врахуванням впливу дислокацій. Показано, що розраховані з одночасним врахуванням цих порушень структури спектри для AlN/GaN НГ добре пояснюють спостережуване на експериментальних спектрах розширення і асиметрію піків сателітів, особливо для рефлексів вищих порядків. Встановлено, що іонна імплантація – потужний метод для трансформації структурного і деформаційного стану градієнтних шарів і НГ. Показано, що імплантація іонами  $Ar^+$  в композиційно-градієнтні сплави  $Al_xGa_{1-x}N$  та НГ AlN/GaN призводить до зміни деформаційного стану і відносно низького пошкодження кристалічної структури.

**Ключові слова:** Високороздільна X-променева дифрактометрія, іонна імплантація, монокристали InSb та GaN, градієнтні  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  плівки, надгратки AlN/GaN, кінематична та динамічна теорії дифракції.

## ABSTRACT

**Liubchenko O. I.** High-resolution X-ray diffractometry of single crystals near-surface layers and multilayered structures under ion irradiation. – Qualifying scientific work on the rights of manuscript.

*The Ph.D thesis for a scientific degree of the candidate of science (Doctor of Philosophy) on physics and mathematics, field 01.04.07 – “solid state physics”. V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine, Kyiv, 2019.*

The thesis presents the results of complex investigation of the influence of ion implantation on the strain state of III-nitride superlattices (SL), compositionally graded  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layers, and ion-implanted InSb and GaN single crystals. New methods based on high-resolution X-ray diffraction analysis for the characterization of these effects have been developed. In particular, an approach for simulating the X-ray diffraction spectra of  $\text{Be}^+$  implanted InSb crystals was considered. The method is based on the semi-kinematic theory of X-ray diffraction in Bragg geometry. The depth profiles of strain and structural disordering in the ion-modified layers were determined by a fitting procedure that was developed on the base of the direct search minimization algorithms, simplex method and differential evolution algorithm. The thickness of the implanted layer and strain maximum value for the ion-modified layers of InSb were determined. For the two-stage implantation with energies of 66 keV and 80 keV, and doses of  $1.563 \cdot 10^{14}$  at./ $\text{cm}^2$  and  $3.125 \cdot 10^{14}$  at./ $\text{cm}^2$ , the thickness of the buried layer is about 500 nm with a strain maximum about 0.1%. The developed model was also used to investigate the structural changes in the single crystals of GaN implanted with  $\text{Ar}^+$  and  $\text{Mg}^+$  ions with various doses and energies.

A detailed analysis of non-ideal AlN/GaN superlattices grown on GaN substrates was carried out. The influence of thickness variation with depth and interfaces roughness on the symmetrical  $2\theta$ - $\omega$  scans were investigated. It was shown that the thickness changes in GaN quantum wells and AlN barriers with depth lead to an asymmetrical broadening of the satellite peaks, while roughness is the cause of their symmetrical broadening. This makes possible to distinguish the influence of these effects on the diffraction pattern. The effectiveness of the developed method is shown by numerical simulation of X-ray diffraction spectra.

Based on the dynamical theory of X-ray diffraction and using the model of mosaic crystal, a new method to investigate the influence of dislocations on the high-resolution X-ray diffraction spectra has been developed. Simulation of the XRD spectra from the AlN/GaN SLs simultaneously takes into account the variation of the SL layers thickness and the presence of dislocations. This model explains well the broadening and the asymmetry of the satellite peaks, especially for higher-order reflections.

It is established that the classical Williamson-Hall method for dislocation densities estimation confirms the correctness of the developed model at dislocation

densities larger than  $1 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ . The developed methods allow to determine quickly and reliably the layers thicknesses, the density of dislocations and strain profiles in multi-layered structures.

Ion implantation is a powerful method for transforming the structural and strain state (strain or polarization engineering) in compositionally-graded layers and SL. It has been shown that implantation with  $\text{Ar}^+$  ions in graded  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layers and  $\text{AlN}/\text{GaN}$  SL leads to change of strain state and relatively low structural damage. After the implantation, the density of microdefects mainly increases, while the configuration of dislocations practically does not change. The density of microdefects is significantly reduced as a result of post-implantation annealing. The structural quality of the  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layers is strongly depends on the Al concentration and deteriorates with the increase of Al. The structural changes induced by ion implantation in highly defected samples with larger dislocations densities are less pronounced.

Ion-implantation leads to crystal quality deterioration of both  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{GaN}$  layers, which can be explained by migration of the point defects and redistribution of strain fields within the heterostructure.

**Key words:** High resolution X-ray diffraction, ion implantation, single crystal  $\text{GaN}$  and  $\text{InSb}$ , graded  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  films,  $\text{AlN}/\text{GaN}$  superlattice, kinematical and dynamical theory of X-ray diffraction.