

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ**

PACSnumbers: 61.10.Dp, 61.10.Kw, 61.72.Dd, 68.35.Gy, 68.65.Ac, 68.65.Cd, 78.70.Ck

### **Влияние анизотропии полей деформации в многослойных структурах на спектры отражения рентгеновских лучей**

А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, А. И. Гудыменко, В. В. Стрельчук,  
Ю. Мазур\*, Чж. Ванг\*, Г. Саламо\*

*Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарёва НАН Украины,  
просп. Науки, 41,  
03028 Киев, Украина  
\*Department of Physics,  
University of Arkansas,  
72701 Fayetteville, Arkansas, USA*

Рассмотрено влияние анизотропных искажений кристаллической решетки в сверхрешетке на кривые дифракционного отражения (КДО), полученные методами высокоразрешающей рентгеновской спектроскопии. Методами динамической теории дифракции определены параметры искаженной кристаллической решетки слоев. Из анализа интенсивностей спутанных пиков экспериментальных и моделированных КДО определены форма и параметры интерфейса между слоями.

Розглянуто вплив анізотропних спотворень кристалічної ґратниці у надґратниці на криві дифракційного відбиття (КДВ), отримані методами високороздільної рентгенівської спектроскопії. Методами динамічної теорії дифракції визначено параметри спотвореної кристалічної ґратниці шарів. З аналізу інтенсивностей спутаних піків експериментальних і модельованих КДВ визначено форму й параметри інтерфейсу між шарами.

The results of investigation of superlattice with quantum wires by high-resolution x-ray scattering are presented. The influence of lattice distortions on rocking curves (RC) are analysed within the framework of the dynamical theory of diffraction. It allows to explain the azimuth dependence of experimental rocking curves. Anisotropic changes in the shape of lattice unit cell are revealed and measured. An influence of the smooth boundaries between heterolayers is analysed. Comparative analysis of different gradient functions on the heteroboundary influence on the rocking curves is carried out. Using RC modeling, the parameters of heterojunctions in specimens at issue are determined.

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, анизотропия, много-

слоиные структуры.

*(Получено 5 октября 2005 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

С уменьшением размеров объектов, применяемых в современной электронике, все более жесткие требования предъявляются к точности измерения их параметров. В связи с этим необходимо пересматривать некоторые общепринятые методики измерения и даже ставшую уже классической методику измерения параметров слоев в многослойных структурах методами рентгеноструктурного анализа. Одним из факторов, который может привести к неверным выводам о структуре, является анизотропия деформаций. Если по каким-либо причинам кристаллу энергетически выгодно деформировать свою решетку так, чтобы напряжения в различных направлениях были разными, то для правильного определения структуры необходимо проводить измерения в различных направлениях.

Исследование влияния разориентации подложки на кривые дифракционного отражения (КДО) вошло в учебники по рентгеноструктурному анализу [1], однако при выращивании многослойной структуры на такой подложке обычно возникают дополнительные разориентации в отдельных слоях [2]. Для минимизации деформационной энергии в слоях, состоящих из материалов с различными параметрами ячейки, их кристаллическая решетка может анизотропно искажаться [3].

В связи с подобными деформациями структуры, для корректного определения ее параметров, необходимо производить азимутальное сканирование образца. Кроме того, подобное сканирование дает дополнительные сведения о структуре, а именно параметры анизотропных деформаций.

Хоть эти факты и были описаны прежде [2, 3], однако они наблюдались для больших углов разориентации и не все параметры деформаций были определены.

Асимметричное искажение решетки приводит к сдвигу брэгговского пика относительно азимутальной ориентации образца. Эти сдвиги могут приводить к ошибкам при анализировании кривых, так как они могут быть интерпретированы как композиционные колебания либо наклоны плоскостей в релаксационных механизмах. Поэтому корректное определение параметров разориентированных псевдоморфных образцов должно базироваться на допущении об асимметричном искажении деформированных элементарных ячеек.

Еще одним источником информации об исследуемых образцах

являются амплитуды сателлитных пиков на КДО [4]. Подгоняя теоретически рассчитанные КДО под экспериментальные, можно получить информацию о структуре (толщине и форме) переходной области между слоями.

В этой статье мы предлагаем модель, которая позволяет рассчитать дифракционный профиль псевдоморфных мультислоев, выращенных на произвольно ориентированной подложке. Сосредоточим также внимание на некоторых геометрических аспектах, связанных с изучением дифракции рентгеновского излучения на разориентированных подложках.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МЕТОДИКА

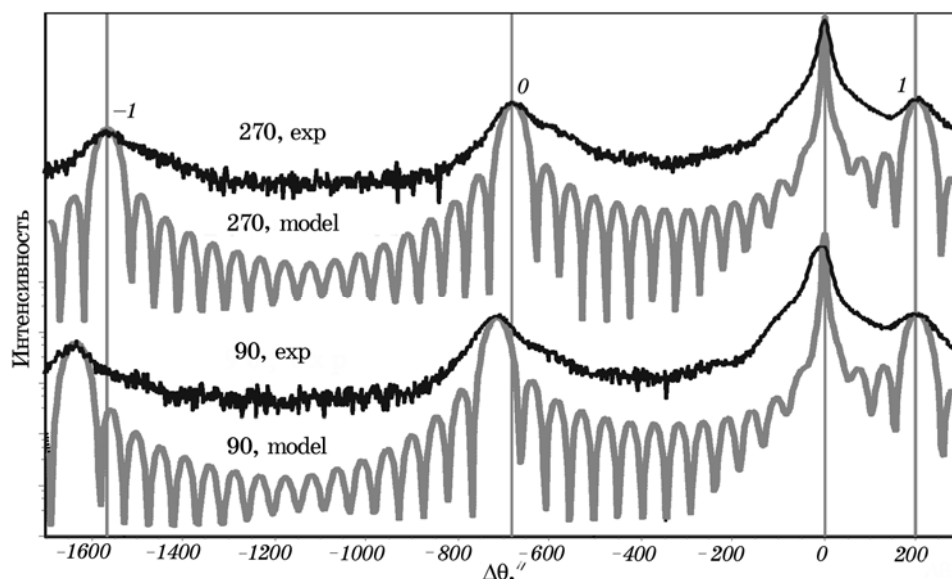
Исследуемые образцы были выращены на GaAs-подложке с ориентацией 100 при помощи МЛЭ и состояли из 17 периодов  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$ -слоев с толщинами 33/189 Å соответственно. Дополнительную информацию об этих слоях можно найти в [5].

Рентгеновские КДО измерялись в диапазоне  $3^\circ$  вблизи точного угла Вульфа–Брэгга для отражения 400 в режиме  $\omega/2\theta$  на двухкристальном спектрометре (GaAs(100)-монокроматор,  $\text{CuK}_\alpha$ -излучение). КДО измерялись для азимутальных углов 0, 45, 90, 135, 180, 225, 270,  $315^\circ$  по отношению к направлению [110]. Вся информация о структурах была получена сопоставлением экспериментальных и моделированных КДО.

## 3. АЗИМУТАЛЬНО-ЗАВИСИМОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КДО

Для моделирования КДО использовали плосковолновой рекуррентный метод [6], вполне адекватный для планарных структур, а также решение уравнений Такаги [7]. Оба метода дали идентичные результаты. Для повышения точности волновые векторы находились численно [8]. Изменение азимутального угла моделировалось при помощи изменения углов разориентации InGaAs-слоев и всей структуры в целом по гармоническому закону.

Кроме описанных выше подходов, результаты были проверены при помощи чистого трехмерного моделирования, основанного на методе моделирования многолучевой дифракции, предложенном в [9]. В данном подходе рассматриваются  $x$ -,  $y$ -,  $z$ -проекции векторов обратной решетки и всех  $4N$  волновых векторов (где  $N$  — количество точек обратного пространства, принимающих участие в дифракции), благодаря чему достаточно просто реализовать азимутальное сканирование образца. Данный метод был модифицирован нами для многослойных структур и применен для анализируемых образцов. Результаты моделирования полностью сов-



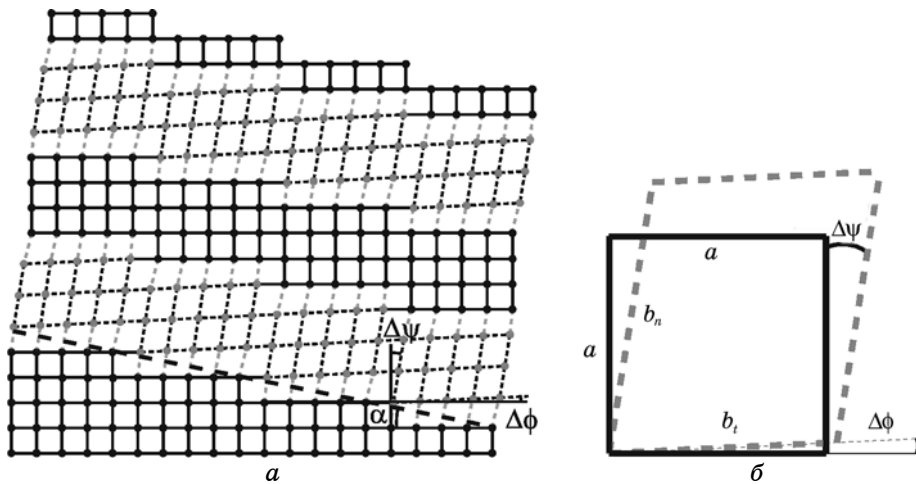
**Рис. 1.** Экспериментальная (черная) и моделированная (серая и гладкая) КДО для азимутальных углов 90 (2 верхние кривые) и 270° (2 нижние кривые).

пали с описанными выше двухмерными подходами.

На рис. 1 показаны две пары экспериментальных и смоделированных КДО для азимутальных углов 90 и 270°. Как видно, расстояние между сателлитными пиками различно для разных азимутальных углов. Это объясняется наличием разориентации подложки, которая в нашем случае составляла около 40°. Отметим, что эта разориентация сохраняется и во всех выращенных слоях.

Однако можно видеть, что нулевой пик тоже сдвинут, и для объяснения этого факта было предположено, что вектор дифракции некоторых слоев наклонен относительно вектора дифракции подложки. Поскольку InGaAs имеет большую постоянную решетки, чем GaAs, то вполне закономерно, что при наличии анизотропии в структуре, вызванной разориентацией вектора дифракции подложки относительно поверхности, могут возникнуть деформации, направленные на увеличение локального параметра решетки для InGaAs-слоев (рис. 2).

На рис. 2, *a* представлена модель искаженной описанным выше образом решетки, а на рис. 2, *б* — искаженная ячейка для InGaAs и неискаженная для GaAs. Поскольку параметр решетки для InGaAs  $b_i$  больше  $a$  для GaAs, подобная деформация становится энергетически выгодной [3]. Кроме того, необходимо отдельно отметить что подобная деформация не сопровождается об-



**Рис. 2.** Модель деформации кристаллической решетки  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$ -образца с разориентацией ( $\square$  — атомы GaAs;  $\square$  — атомы InGaAs);  $a$  — вся многослойная структура;  $b$  — элементарная ячейка ( $\alpha$  — угол разориентации подложки;  $a$  — параметр решетки GaAs;  $b_n$  и  $b_t$  — нормальный и тангенциальный параметры решетки напряженного InGaAs;  $\Delta\psi$  и  $\Delta\phi$  — нормальный и тангенциальный углы разориентации атомных плоскостей InGaAs).

разованием дислокаций, так что увеличения энергии за счет их появления не происходит.

Для доказательства данной модели деформации было проведено сравнение моделированных КДО с экспериментальными. Очень хорошее совпадение положения спутных пиков наблюдалось для всего диапазона азимутальных углов, что подтверждает описанную модель.

Из анализа КДО для отражения 400 было определено, что угол разориентации всей структуры  $\alpha = 40'$ , а локальный угол разориентации InGaAs-слоев  $\Delta\phi = 145''$  в направлении [011]. Что же касается измерения угла  $\Delta\psi$  — это несколько более сложная задача, поскольку на дифракцию от плоскостей типа {100} он не оказывает влияния. Для измерения угла  $\Delta\psi$  необходим анализ КДО для несимметричных отражений. К сожалению, экспериментальные КДО для 224- и 311-рефлексов были недостаточно качественными, однако из этих измерений можно утверждать, что угол  $\Delta\psi \approx 1^\circ$ .

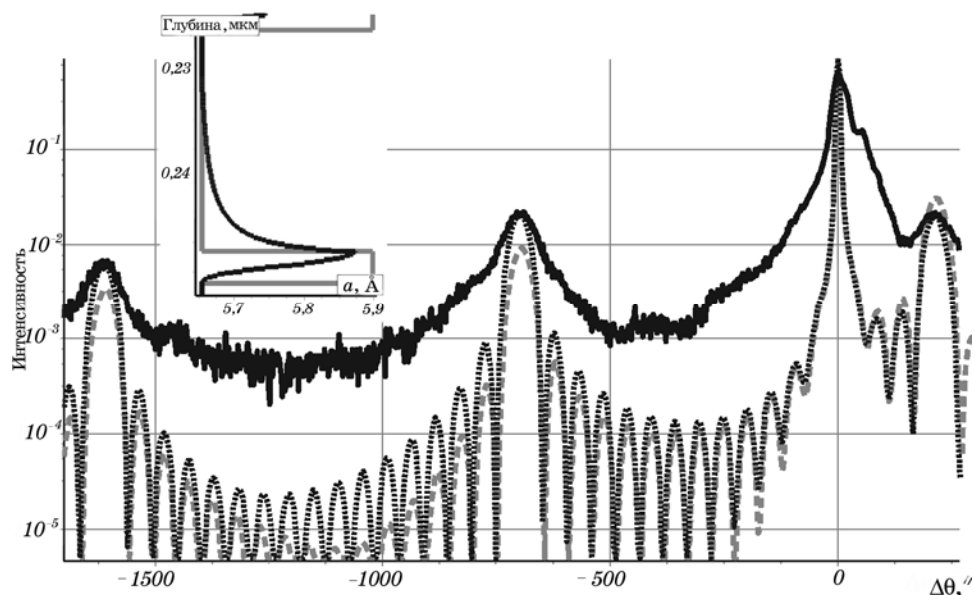
#### 4. ПЕРЕХОДНАЯ ОБЛАСТЬ МЕЖДУ СЛОЯМИ

Дополнительную информацию о исследуемой структуре можно

получить, сравнивая интенсивности смоделированных и экспериментальных КДО. Из этого сравнения можно выяснить вид и параметры переходной области между слоями из различного материала.

Для этого слои InGaAs и GaAs разбивались на значительно более тонкие (около  $0,2 \text{ \AA}$ ) подслои, в которых по определенному закону менялась концентрация (реально в программе менялись параметры решетки и поляризуемость [4]). На первый взгляд, величина параметра  $0,2 \text{ \AA}$ , который в десятки раз меньше параметра решетки, кажется нефизичной, однако рентгеновская дифракция является интегральным в латеральном направлении методом (площадь поверхности образца, принимающего участие в формировании дифракционной картины, составляет несколько квадратных миллиметров), поэтому можно считать параметры структуры изменяющимися по глубине непрерывно.

Попытки моделировать КДО при линейном или квадратичном градиенте концентрации In при одинаковой глубине проникновения градиента в оба контактирующих слоя не дали удовлетворительного результата. Поэтому была выбрана модель изменения



**Рис. 3.** Экспериментальная (черным) КДО для рефлекса 400, КДО для модели с резким градиентом (светлые штрихи) и КДО с гиперболическим градиентом на интерфейсе между слоями (черные точки). На вставке представлены параметр решетки в ангстремах по оси  $x$  и глубина подслоя в микрометрах по оси  $y$ : черным — гиперболический, серым — резкий градиент.

параметров, представленная на вставке рис. 3. В этой модели считается, что концентрация In, который адсорбируется на поверхности хуже, чем Ga, увеличивается постепенно в InGaAs-слое, а избыток In оказывается в GaAs-слое, где его концентрация падает по гиперболическому закону.

Как видно из рис. 3, подобным образом достигается хорошее соответствие интенсивностей основных пиков, однако между ними интенсивность экспериментальной кривой значительно выше, чем у моделированной. Это объясняется дисперсией толщин слоев в различных периодах [11].

## 5. ВЫВОДЫ

Из анализа приведенных результатов, можно сделать следующие выводы:

- неучет анизотропного характера деформации при определении параметров исследуемых структур приводит к неверным выводам о структуре исследуемых образцов и даже физике их вращения;
- азимутальные зависимости КДО позволяют определить параметры анизотропной деформации кристаллической решетки, которая наблюдается даже для очень малых углов разориентации структуры (меньше одного градуса);
- анализируя в комплексе КДО для симметричных и асимметричных рефлексов, можно определить все параметры искаженной ячейки кристаллической решетки;
- подгонкой интенсивностей спутанных пиков, моделированных КДО, под экспериментальные можно определить параметры интерфейса между различными слоями.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. D. K. Bowen and B. K. Tanner, *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography* (T&F Tanner: SPb: 1998), p.149.
2. A. Sanz-Hervas et al., *J. Appl. Phys.*, **82**: 3297 (1997).
3. R. M. Fleming et al., *J. Appl. Phys.*, **51**: 357 (1980).
4. А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 5: 635 (2006).
5. В. В. Стрельчук, В. П. Кладько, М. Я. Валах и др., *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **1**, вып. 1: 309 (2003).
6. W. J. Bartels, J. Hornsrta, and D. J. W. Lobeek, *Acta Crystallogr. A*, **42**: 539 (1986).
7. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (New York: Oxford Univ. Press: 2001), chap. 11.
8. А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 2:

227 (2006).

9. Yu. P. Stetsko and S.-L. Chang, *Acta. Crystallogr. A*, **53**: 28 (1997).
10. O. M. Yefanov and V. P. Kladko, *N-Beam 3D Plane Wave Algorithm for Diffraction Calculation in Multilayers for Any Geometry and with no Numerical Errors* (to be published).
11. P. Fewster, *Superlattices in X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction Theory and Applications* (New York: Plenum Press: 1996).