

PACS numbers: 61.10.Dp, 61.10.Kw, 61.72.Ss, 68.35.Dv, 68.55.Ln, 68.65.Ac, 81.70.Jb

## **Моделирование дифракции рентгеновских лучей от многослойной структуры с различным градиентом состава на границах слоев**

А. Н. Ефанов, В. П. Кладько

*Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарева НАН Украины,  
просп. Науки, 41,  
03028 Киев, Украина*

Исследовано влияние плавных границ между слоями в многослойных структурах на рентгеновские кривые дифракционного отражения (КДО). Проанализированы различные виды переходных областей и влияние их параметров на КДО. Продемонстрирована принципиальная возможность определения градиента состава между слоями из различных материалов при помощи обыкновенного рентгеноструктурного анализа, не прибегая к более сложным и разрушающим методикам.

Досліджено вплив плавних меж між шарами в багатошарових структурах на Рентгенові криві дифракційного відбиття (КДВ). Проаналізовано різні види перехідних областей та вплив їхніх параметрів на КДВ. Продемонстровано принципову можливість визначення градієнту складу між шарами з різних матеріалів за допомогою звичайної рентгеноструктурної аналізи, не вдаючись до більш складних і руйнівних методик.

With numerical modelling of diffraction curves from multilayered superlattice structure, a good correlation of experimental and modelled satellite peaks' intensities is revealed by taking into account a gradient of concentration on interface between the layers. This fact allows obtaining information about the layer-layer interface on the basis of the analysis of a simple rocking curve instead of using procedures, which are more difficult. An optimal functional dependence of this gradient is determined, and the change of effective thickness of layers depending on the form of a structure gradient is noted. Introduction of various forms of composition gradient on a interface of layers does not influence on the definition of a structure period, however, it has a small influence on the determination of thickness ratio for GaAs and  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  layers. Opportunities of unequivocal determination of the form of a structure gradient on the layer-layer interface by analysing the experimental rocking curves from symmetric and asymmetric reflections are reported.

**Ключевые слова:** дифракция рентгеновских лучей, многослойные структуры, градиент концентрации, интерфейс.

*(Получено 5 октября 2006 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

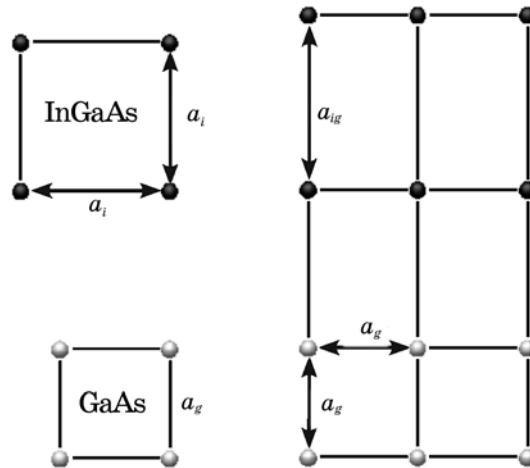
Задача определения структуры выращенной сверхрешетки далека от однозначной реализации и широко применяющиеся на сегодняшний день методы анализа многослойных структур при помощи моделей с резкими границами между слоями могут давать недостоверные результаты о структуре исследуемого образца. Очевидно, что при выращивании многослойной структуры отдельные слои не могут быть идеальными, и особенно это касается их состава. Из физических соображений, очевидно, что при росте кристалла на границах слоев будет переходная область с некоторым градиентом концентрации составляющих эти слои веществ. Поэтому необходимо при моделировании многослойных структур вводить переходную область. Поскольку функциональная зависимость градиента концентрации на интерфейсе не известна, необходимо подобрать ее путем моделирования различных вариантов.

Данный подход не нов и многие авторы [1–3] ранее вводили подобные градиенты для улучшения совпадения экспериментальной и моделированной кривых. Однако, это были либо модели с симметричным профилем [2], либо изменялась только глубина проникновения градиента [1, 3] при неизменной форме. Кроме того, в этих работах не было отмечено изменение эффективных толщин слоев в зависимости от градиента состава.

## 2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Будем рассматривать псевдоморфный рост кристаллов с кубической симметрией. Величина параметра решетки, параллельного отражающим плоскостям, в этом случае остается постоянной и равной соответствующему параметру ненапряженной подложки (это с большой точностью соответствует действительности, поскольку деформация растяжения в более толстом слое периода сверхрешетки на порядки меньше, чем более тонкого слоя), а величина перпендикулярного параметра будет изменяться в зависимости от состава [4]. При этом будем считать, что выращенная структура полностью напряжена (рис. 1) и

$$a_{ig} = a_i + 2(a_i - a_g) \frac{\nu}{1 - \nu},$$



**Рис. 1.** Модель роста InGaAs-пленки на GaAs-подложке. Слева — релаксированные ячейки; справа — напряженный InGaAs.

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона растягиваемого слоя [5].

Изменение локального параметра решетки, нормального отражающим слоям ( $a_{ig}$ ), приводит к изменению вектора дифракции  $h$ , поскольку

$$h = \frac{\sqrt{m_1^2 a_g^2 + m_2^2 a_{ig}^2 + m_3^2 a_{ig}^2}}{a_{ig} a_g},$$

где  $m_1, m_2, m_3$  — индексы Миллера отражающих плоскостей. Таким образом, деформация структуры влияет на пространственное положение дифрагированного луча.

Кривые дифракционного отражения (КДО) моделировались для отражений 400 и 311 для случая двух плоских волн методом [6], что вполне правомерно для планарной структуры. Для увеличения точности волновые векторы считались численно [7]. Кроме того, моделирование было проведено и при помощи уравнений Такаги [8], однако этот метод дал практически те же результаты.

Экспериментальные КДО взяты из работы [9]. Рассматриваемая структура состояла из толстой GaAs-подложки ( $\sim 300$  мкм, ориентация 100) с нанесенными при помощи МЛЭ 8 периодами  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$ -слоев. Технологически заданные толщины отдельных слоев периода составляли соответственно 40 и 113 Å. При моделировании эти слои разбивались на значительно более тонкие (около 0,1 Å) подслои, параметры которых изменялись в соответствии с выбранной моделью градиента состава. На первый взгляд, величина параметра 0,1 Å, который в десятки раз меньше

параметра решетки, кажется нефизичной, однако рентгеновский метод является интегральным в латеральном направлении (площадь поверхности образца, принимающая участие в формировании дифракционной картины, может составлять несколько квадратных миллиметров), поэтому можно считать параметры структуры непрерывно изменяющимися по глубине. Для увеличения скорости расчета та часть образца, состав которой оставался постоянным, не разбивалась на подслои.

Основным параметром материала, который влияет на дифракцию, является кристаллическое строение вещества. Поскольку мы рассматриваем кубическую решетку и некоторый фиксированный рефлекс, то единственным параметром кристаллического строения материала, который мы можем изменять при моделировании, является расстояние между атомами. При рассмотрении псевдоморфного роста латеральные параметры решетки (лежащие в плоскости роста) не изменяются при варьировании состава выращиваемой пленки. Кроме того, при использовании симметричного рефлекса они не оказывают влияния на дифракцию. Соответственно остается только один параметр решетки, отражающий изменение состава, — перпендикулярный к отражающим плоскостям. Именно его мы и будем варьировать для дальнейшего моделирования структур со сложным градиентом состава. Кроме этого параметра надо еще учесть поляризуемость, которая также зависит от материала, на котором происходит дифракция. Однако необходимо заметить, что ее влияние для незапрещенных рефлексов мало. В дальнейшем под изменением состава мы будем понимать изменение параметра решетки, хотя при расчетах описанные ниже подходы в равной мере применялись и к поляризуемости.

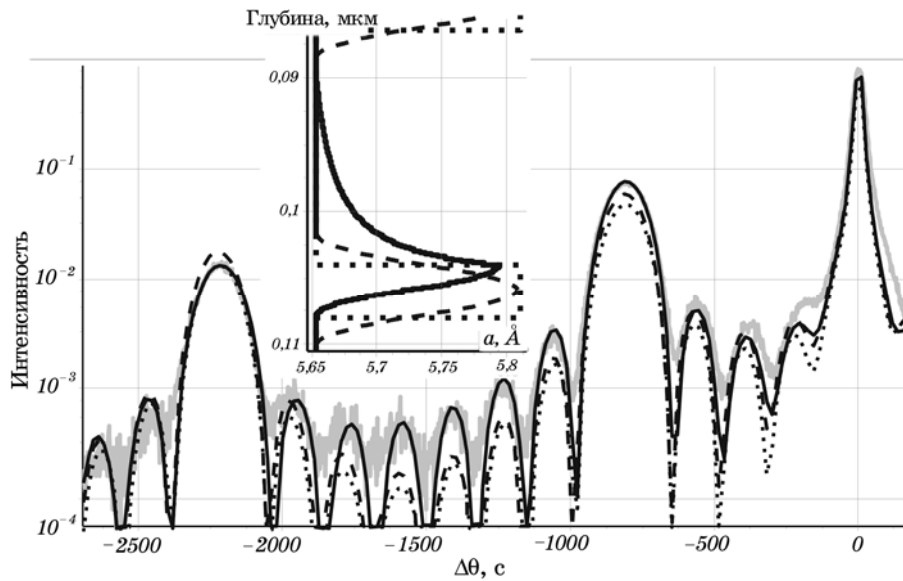
Были рассмотрены 4 вида градиента на границе раздела слоев: 1) резкий (идеальные слои); 2) линейный; 3) квадратичный; 4) квадратично-гиперболический.

Ниже будет показано, каким образом моделировался закон изменения параметров материала для каждого из этих случаев.

Моделируемые кривые качания сравниваются с экспериментальными, полученными от описанной выше 8-слойной структуры.

### 3. РЕЗКИЙ ГРАДИЕНТ

Это самый простой случай (точки на вставке (рис. 2)), который обычно и рассматривают при моделировании многослойной структуры. Используя эту модель, можно определить период структуры (суммарную толщину слоев  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As} + \text{GaAs}$ ) и с некоторой точностью — соотношение толщин этих слоев. Однако при использовании этой модели практически невозможно подогнать интенсивности спутанных пиков на кривой качания для



**Рис. 2.** Экспериментальная (серым) и моделированные КДО для 311-отражения от рассматриваемой структуры с резким (точки), квадратичным (штрихи) и гиперболическим (сплошным черным) градиентом на интерфейсе между слоями (на вставке по оси  $x$  — нормальный параметр решетки, по оси  $y$  — глубина залегания подслоя).

согласия с экспериментом (рис. 2).

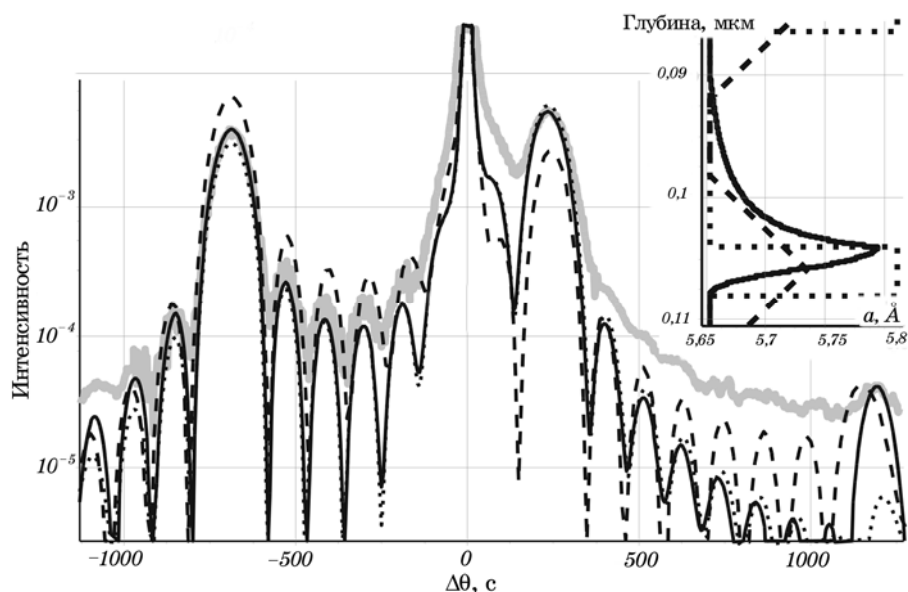
#### 4. ЛИНЕЙНЫЙ ГРАДИЕНТ

Достаточно просто задать градиент, изменяющийся по линейному закону (штрихи на вставке рис. 3). В этом случае мы задавали глубину проникновения градиента ( $e_t$  на рис. 4) в оба слоя и функциональная зависимость градиента состава соответственно сверху и снизу от границы раздела слоев выражалась формулами:

$$a = \frac{1}{2}(a_0 + a_{-1}) + \frac{a_0 - a_{-1}}{2} \frac{x}{e_t},$$

$$a = \frac{1}{2}(a_0 + a_1) + \frac{a_0 - a_1}{2} \frac{t - x}{e_t},$$

где  $x$  — расстояние от границы раздела;  $a$  — текущий параметр;  $a_0, a_{-1}, a_1$  — соответственно параметры текущего, предыдущего и последующего слоев;  $t$  — толщина слоя;  $e_t$  — глубина проникно-



**Рис. 3.** Экспериментальная (серым) и моделированные КДО для 400-отражения от рассматриваемой структуры с резким (точки), линейным (штрихи) и гиперболическим (сплошным черным) градиентом на интерфейсе между слоями.

вения градиента в слой.

Интересный эффект можно заметить для 400-рефлекса (рис. 3): первый спутник сдвинут относительно других модельных кривых — подобный эффект иногда наблюдается на экспериментальных КДО.

Для исследуемых структур подобный вид градиента не позволил добиться удовлетворительного совпадения интенсивностей спутникных пиков (рис. 2 и 3).

## 5. КВАДРАТИЧНЫЙ ГРАДИЕНТ

Более физической (из соображений отсутствия резких изменений состава) кажется квадратичная модель градиента состава на границах слоев (рис. 4). При условии равенства нулю производных в точках *A* и *B* и наличия перегиба в точке *C* его функциональная зависимость соответственно сверху и снизу от границы раздела слоев выражалась формулами

$$a = a_0 - \frac{a_0 - a_{-1}}{2} \frac{(x - e_t)^2}{e_t^2},$$

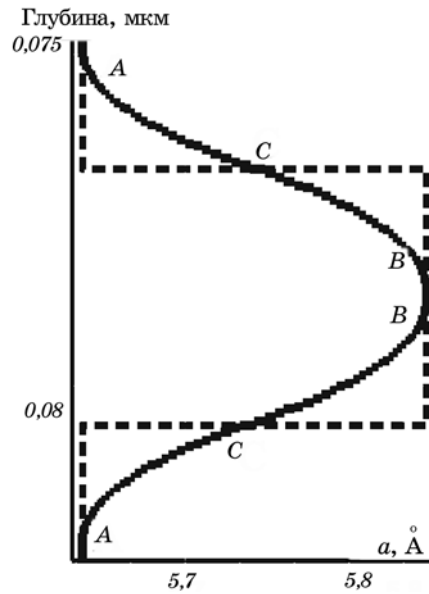


Рис. 4. Квадратичный градиент (сплошная кривая).

$$a = a_0 - \frac{a_0 - a_1}{2} \frac{(x - e_t - t)^2}{e_t^2}.$$

Кривая качания для данного вида градиента показана штрихами на рис. 2.

## 6. ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЙ ГРАДИЕНТ

В процессе роста методом МЛЭ маловероятен процесс одинаковой взаимодиффузии между различными слоями. Особенно это будет заметно при отсутствии пауз при выращивании различных слоев и различной адсорбционной способности материалов, из которых состоят эти слои. В нашем случае ( $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  с более толстым слоем GaAs) возможен градиент состава, показанный на рис. 5. В области с большим параметром решетки (InGaAs — за счет присутствия In) доля In увеличивается почти линейно (для сглаживания углов была выбрана описанная выше квадратичная интерполяция), а в области с меньшим параметром решетки (GaAs) концентрация In уменьшается по гиперболе, описываемой формулой

$$a = a_0 + ch - \frac{(c + 1)h}{(x/ce_t) + 1},$$

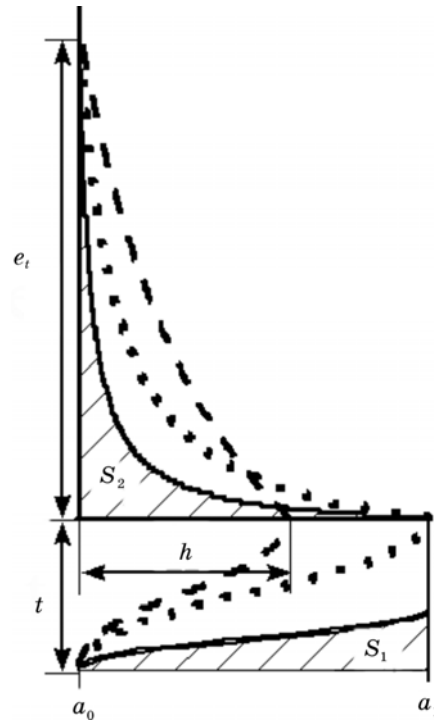


Рис. 5. Гиперболический градиент ( $k = 80\%$  (—),  $k = 50\%$  (---),  $k = 30\%$  (-·-·-)).

где  $h$  — максимальная разность параметров смежных слоев (обычно  $h = a_0 - a_1$  (рис. 5));  $c$  — параметр кривизны гиперболы, изменяющийся от 0 (большая кривизна) до 1 (почти прямая линия).

Площадь  $t(a_1 - a_0)$  пропорциональна количеству In в InGaAs-слое, соответственно площадь  $S_1$  (в качестве параметра модели задается соотношение  $k = \frac{S_1 \cdot 100\%}{t(a_1 - a_0)}$ ) должна быть равна площади

$S_2$  (рис. 5):

$$S_2 = \int_0^{e_t} \left( ch - \frac{(c+1)h}{\frac{x}{ce_t} + 1} \right) dx = \left( ch - c(c+1)h \ln \left| \frac{c+1}{c} \right| \right) e_t.$$

Из этого условия подбирается параметр  $c$ . Однако это уравнение получается существенно нелинейным относительно  $c$ . Конечно, можно решать его численно, однако высокая точность в дан-



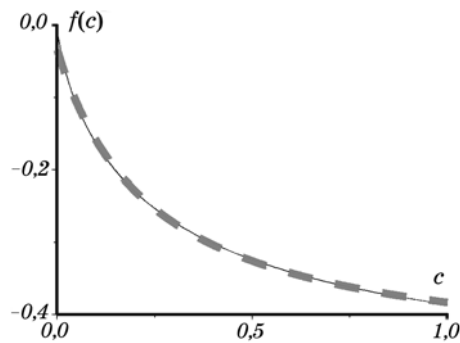


Рис. 6. Аппроксимация функции  $f(c)$ .

ном вопросе не критична, поскольку мы и так делаем значительно более существенные и слабо обоснованные предположения (например, форма кривой, ограничивающей площадь  $S_1$ ). Исходя из этого можно аппроксимировать функцию

$$f(c) = c \left( 1 - (c + 1) \ln \left| \frac{c + 1}{c} \right| \right)$$

в диапазоне значений  $c$  от 0 до 1 следующим образом:

$$f'(c) = \frac{0,10661}{c + 0,2443} - 0,46914$$

(рис. 6). Подставив эту аппроксимацию в выражение для  $S_2$ , легко получить значение параметра

$$c = \frac{0,10661}{0,46914 - \frac{(1 - k)t(a_1 - a_0)}{e_i h}} - 0,2443.$$

Как видно из рис. 2 и 3, подобная модель градиента состава на границах слоев позволяет нам добиться хорошего соответствия интенсивностей пиков на экспериментальной и смоделированной кривых.

## 7. ОБСУЖДЕНИЕ

Если в первых трех формах градиента в качестве толщины слоев выбирается полуширина, то в случае гиперболического градиента этот параметр требует отдельного обоснования. Действительно, судя по рис. 5, достаточно тяжело сказать, где именно измеряет-

ся толщина InGaAs-слоя. На наш взгляд, наиболее физически правильным будет выбор этого параметра исходя из количества вещества, выращенного при создании структуры, т. е. при выращивании в структуру ввели такое количество InGaAs, которое занимает на рис. 5 площадь, равную  $(a_0 - a_1)t$ , где  $t$  — толщина слоя, фигурирующая во всех наших моделях. Далее градиент состава формируется так, чтобы эта площадь оставалась постоянной (выше описано, как это делается).

Заметим, что, если для первых трех моделей толщины слоев  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  при моделировании кривой качания брались равными соответственно  $38,5/163 \text{ \AA}$ , то для последнего случая эти толщины  $39,5/162 \text{ \AA}$ , т. е. распределенные по некоторому объему атомы In дают в дифракцию меньший вклад, чем локализованные в узком слое. Это значит, что если мы будем определять состав выращенных структур методом рентгеноструктурного анализа, подгоняя промоделированную кривую качания к полученной экспериментально и используя при этом предположение о резкости переходной границы между слоями, то мы можем сделать неверные выводы о количестве выращенного того или иного материала. Тем самым мы неверно определим строение многослойной структуры.

## 8. ВЫВОДЫ

1. Введение различной формы градиента состава на границах слоев не влияет на определение периода структуры, однако оказывает слабое влияние на определяемые соотношения толщин слоев  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$ .
2. Благодаря градиенту концентрации можно добиться хорошего совпадения интенсивностей экспериментальных и моделированных спутанных пиков.
3. Для однозначного выяснения формы переходной области между слоями необходим совместный анализ КДО от симметричного и несимметричных отражений либо построение двумерной карты распределения интенсивностей.
4. Для некоторых типов градиента между слоями спутанная структура теряет свою периодичность.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. P. Yashar, M. R. Pillai, J. Mirecki-Millunchick, and S. A. Barnett, *J. Appl. Phys.*, **83**, No. 4: 2010 (1998).
2. C. S. Peng, E.-M. Pavelescu, T. Jouhti et al., *Appl. Phys. Lett.*, **80**, No. 25: 4720 (2002).
3. N. Boudet, J. Eymery, and N. Magnea, *Phys. Rev.*, **55**, No. 23: 15804

- (1997).
4. Ю. А. Тхорик, Л. С. Хазан, *Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах* (Киев: Наукова думка: 1983).
  5. Д. К. Боуэн, Б. К. Таннер, *Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография* (Санкт-Петербург: Наука: 2002).
  6. W. J. Bartels, J. Hornsrta, and D. J. W. Lobeek, *Acta Crystallogr. A*, **42**: 539 (1986).
  7. А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 2: 227 (2006).
  8. А. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford: 2001).
  9. В. В. Стрельчук, В. П. Кладько, М. Я. Валах и др., *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **1**, № 1: 309 (2003).