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

Корчовий Андрій Адамович

УДК: 539.213; 539.23+621.793.79; 539.26

РОЗСІЯННЯ Х-ПРОМЕНІВ ШАРУВАТИМИ ПЕРІОДИЧНИМИ СТРУКТУРАМИ ТА ДІАГНОСТИКА ЇХ ПАРАМЕТРІВ

01.04.07 – фізика твердого тіла

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2007

Дисертацією є рукопис

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

2

Науковий керівник:	доктор фізико-математичних наук,				
	старший науковий співробітник,				
	Кладько Василь Петрович,				
	Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова				
	НАН України (м. Київ), завідувач відділом				
Офіційні опоненти:	доктор фізико-математичних наук, професор,				
	Новиков Микола Миколайович,				
	Київський Національний Університет імені Тараса Шев-				
	ченка,				
	професор кафедри фізики металів				
	доктор фізико-математичних наук, професор,				
	Кисловський Євген Миколайович,				
	Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН Украї-				
	НИ,				
	завідувач дабораторією				
Провідна установа:	Чернівецький Національний Університет ім.				
	Ю.Федьковича, кафедра фізики твердого тіла				

Захист відбудеться "<u>16</u>" <u>березня</u> 2007 р. о 14¹⁵ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К 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).

Автореферат розісланий "15" лютого 2007 р.

Вчений секретар Спеціалізованої вченої ради К 26.199.01 кандидат фізико-математичних наук

О.Б. Охріменко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

В роботі виконано комплекс досліджень в рамках розвитку експериментальних методів дифракції Х-променів з використанням квазізаборонених рефлексів (КЗР) для контролю параметрів багатошарових квантово-розмірних структур, їх деформаційних та композиційних властивостей для подальшої оптимізації фізико-технологічних основ отримання багатошарових напружених структур.

<u>Актуальність теми</u>. Багатошарові структури AlGaAs/GaAs, InGaAs/GaAs є одними із перспективних напівпровідникових матеріалів твердотільної наноелектроніки. При виготовленні ефективних напівпровідникових приладів значні зусилля спрямовані на одержання матеріалу з необхідними електрофізичними властивостями. Однією з основних проблем при керуванні цими властивостями є однозначне визначення кількісних характеристик шарів цих структур, таких як товщини шарів, розподіл компонентного складу та деформацій. Окрім того, виникає цілий ряд проблем в діагностиці таких структур при переході до надграток з товщинами шарів порядку декількох моношарів (МШ), так званих короткоперіодних надграток.

Серед цілого арсеналу методів дослідження параметрів і характеристик таких напівпровідникових структур найбільш чутливими та інформативними є Х-променеві дифракційні методи, які до того ж є неруйнівними та експресними.

Вдосконалені експериментальні методи та чисельне моделювання процесів розсіяння Х-променів реальними кристалами дають унікальну інформацію про розподіл деформацій за товщиною кристалу, ротаційні та дилатаційні складові деформацій кристалічної гратки на глибинах від декілька моношарів до десятків міліметрів.

Отже, аналіз закономірностей розсіяння Х-променів багатошаровими епітаксійними структурами на сьогодні залишається актуальною проблемою і потребує подальшого вивчення з виходом на кількісні оцінки структурних характеристик.

Зокрема, як показали попередні дослідження, для контролю хімічного складу бінарних сполук найбільш інформативними є саме КЗР [1-3]. Однак, їх застосування для аналізу багатошарових структур до постановки даної роботи не набуло великого поширення через неоднозначність інтерпретації дифракційних спектрів від цих об'єктів, внаслідок використання або кінематичної, або динамічної моделей дифракції.

Тому, подальший розвиток відповідних експериментальних основ дифракції на багатошарових планарних структурах з тонкими шарами при використанні КЗР для адекватної їх характеризації є дуже актуальною задачею.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України і виконана у відповідності до тем:

- "Комплексні структурні та морфологічні дослідження гетероепітаксійних (у тому числі нанорозмірних) систем на основі напівпровідників IV групи та сполук А³В⁵ і А²В⁶" (№ державної реєстрації 0103U000380) – виконавець.
- 2. Науково-технічна програма "Розробка науково-технічних методів, засобів і автоматизованих систем контролю параметрів напівпровідникових матеріалів, структур і приладів". Тема "Сертифікація", проект "Рентгеноспектральна методика і апаратура

для контролю хімічного складу в ході технологічного процесу" (№ державної реєстрації 0197U008669) – виконавець.

3. Цільова комплексна програма фундаментальних досліджень "Наносистеми, наноматеріали та нанотехнології" (№ державної реєстрації 0103U006315) – виконавець.

Роль автора у виконанні науково-дослідних робіт полягала в отриманні експериментальних спектрів, їх обробці та аналізі структурних властивостей нанорозмірних епітаксійних шарів.

Мета і завдання роботи.

Мета дисертаційної роботи полягала у подальшому розвитку експериментальних основ дифракції Х-променів на багатошарових квантово-розмірних структурах, а також в дослідженні деформаційних, композиційних властивостей, з метою оптимізації фізико-технологічних основ отримання багатошарових напружених структур з квантовими ямами і точками з наперед заданими властивостями.

Для досягнення поставленої мети, вирішувалися наступні наукові завдання:

- 1. Адаптація методів двокристальної високороздільної Х-променевої дифрактометрії для діагностики короткоперіодних надграток (НГ) AlAs/GaAs. Визначення меж застосування кінематичної теорії дифракції для опису таких структур.
- Аналіз можливостей розробки схем Х-дифрактометрії з високою роздільною здатністю, що базуються на використанні квазізаборонених бреггівських відбиттів від структур, утворених шарами різних матеріалів. Визначення меж практичного використання квазізаборонених рефлексів при дослідженні квантово-розмірних об'єктів.
- 3. Проведення комплексу високороздільних дифрактометричних досліджень структурних та деформаційних характеристик багатошарових структур на основі InGaAs/GaAs в залежності від умов росту.
- 4. Встановлення взаємозв'язку між результатами, отриманими з карт оберненого простору та з кривих дифракційного відбиття (КДВ), отриманих експериментально з допомогою двокристальної дифрактометрії.

Об'єкт дослідження – надграткові структури InGaAs/GaAs і AlGaAs/GaAs з різним вмістом індію та алюмінію та багатошарові структури з квантовими точками.

Предмет дослідження – особливості бреггівської дифракції в багатошарових структурах при використанні квазізаборонених рефлексів; процеси взаємодифузії компонент та деформації на границях шарів, геометричні параметри шарів.

Методи дослідження – комплекс експериментальних та розрахункових методів, який включає в себе двокристальну високороздільну Х-дифрактометрію; комп'ютерне моделювання спектрів дифракції, а також аналіз двовимірних карт розподілу інтенсивності в оберненому просторі.

В даній роботі вперше отримано ряд нових наукових результатів:

• за рахунок поширення області досліджень квазізаборонених рефлексів на об'єкти наноструктурних розмірів – надгратки, багатошарові структури з квантовими точками, – встановлена можливість сепарації внеску в розсіювальну здатність таких структур кожного з шарів окремо, високу чутливість КЗР до складу твердих розчинів субшарів, а також вибіркову чутливість сателітів НГ до дефектної структури того або іншого шару.

• обґрунтовано і реалізовано методику контролю параметрів індивідуальних шарів надграток з використанням квазізаборонених рефлексів. Показано, що в структурах, один з шарів якої утворений елементами, які мало відрізняються атомними номерами, внеском цього шару в формування дифракційної картини можна знехтувати. Цей шар буде давати внесок лише в зміну фази розсіяння;

• встановлено двохшаровий розподіл індію з різним його вмістом в квантовій ямі багатошарової структури InGaAs/GaAs та з'ясовано роль форми цього розподілу в шарах на форму КДВ у випадку дифракції Брегга;

• обґрунтована можливість контролю параметрів короткоперіодних надграток AlGaAs/GaAs, а також їх деформаційного стану з високою точністю при використанні кінематичної теорії розсіяння.

Практичне значення результатів, одержаних здобувачем, полягає в тому, що в дисертації приведені експериментальні методи досліджень з використанням квазізаборонених рефлексів, які можна використовувати для встановлення цілого спектру характеристик багатошарових надграткових структур, зокрема профілів деформації, композиційних профілів, геометричних параметрів з використанням простих експериментальних установок. Отримані результати дозволяють оптимізувати фізико-технологічні основи процесів росту складних багатошарових систем та тонких плівок для створення приладів на їх основі.

Результати дисертації можна рекомендувати для використання в наукових лабораторіях та підприємствах, які займаються вирощуванням та дослідженням властивостей епітаксійних систем, зокрема в Харківському Національному Технічному Університеті напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова, "ХПІ", Інститутах: фізики металофізики ім. Г.В. Курдюмова, фізики НАН України, Київському Національному Університеті Tapaca Шевченка Чернівецькому Національному Університеті імені та ім. Ю.Федьковича, а описані в роботі методичні підходи при вивченні таких спецкурсів, як фізика твердого тіла та структурний аналіз.

Особистий внесок здобувача.

В опублікованих працях [1-9] особистий внесок дисертанта полягає в експериментальних вимірюваннях та моделюванні спектрів відбиття, розрахунку параметрів деформації в шарах НГ структур. Здобувач також приймав участь у дослідженнях профілів розподілу компонентів в областях інтерфейсів в роботах [1-5, 7, 10-14]. Також, в усіх роботах дисертант приймав активну участь у аналізі та інтерпретації результатів досліджень та написанні статей.

Апробація результатів дисертації.

Основні результати досліджень, що викладені у дисертацій роботі, доповідались та обговорювались на наукових конференціях: ІІ Українська наукова конференція з фізики напівпровідників – УНКФН-ІІ (Чернівці, Україна, 20-24.09.2004); ІХ Міжнародної конференції "Фізика і технологія тонких плівок" (Івано-Франківськ, Україна, 19-24.05.2003); Международный украинско-русский семинар «Нанофизика и наноэлектроника». – (Киев, Украина, 2003); Лашкарьовських читаннях (Київ, Україна, 2003); X International Conference on Physics and Technology of Thin Films – ICPTTF-X (Ivano-Frankivsk, Ukraine, 16-21.05.2005), V Національній конференції по застосуванню рент-

генівського, синхротронного випромінювання, нейтронів і електронів для дослідження матеріалів РСНЭ–НАНО–2005 (Росія, Москва 14-19.11.05).

Публікації.

За матеріалами дисертації опубліковано 14 наукових праць, з яких 7 статей в наукових журналах та 7 тез доповідей на конференціях. Список основних публікацій наведено в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації.

Дисертаційна робота складається із вступу, літературного огляду з теми дослідження (розділ 1), чотирьох оригінальних розділів, які присвячені основним результатам роботи, висновків та списку цитованої літератури з 120 найменувань. Дисертація викладена на 120 сторінках тексту, містить 47 рисунків та 7 таблиць.

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 дисертанта, а також відомості про апробацію роботи та публікації.

У першому розділі представлено огляд методів дифракції Х-променів від багатошарових структур на основі кінематичної та динамічної теорій. Окремий підрозділ присвячено загальноприйнятим методам розрахунку параметрів дифракції при використанні напівкінематичної теорії. Крім цього в першому розділі приведено огляд робіт з використанням квазізаборонених рефлексів для масивних монокристалічних напівпровідників.

На основі критичного аналізу приведених даних окреслені рамки завдань дисертації, сформульовані переваги вибору даних методів дослідження багатошарових структур та тонких плівок.

У другому розділі приведено основні експериментальні методики дослідження багатошарових наноструктур.

Коротко викладена теорія трикристальної Х-променевої дифрактометрії. Показано, що результати вимірів на трикристальному дифрактометрі зручно розглядати, використовуючи конструкцію Евальда в оберненому просторі. Були розглянуті особливості одержуваних дифракційних картин, можливість розділення дифузного і когерентного розсіяння, введене поняття псевдопіків, показаний вплив деяких поверхневих порушень на трикристальні криві відбиття.

Один з параграфів присвячений методам контролю такого важливого параметра як товщина зразка. Товщина – фундаментальний параметр для тонких шарів, і є фізичним параметром окремого шару або в комбінації з іншими шарами і підкладкою. Перший з методів контролю базується на зміні величини інтенсивності з товщиною шару: чим тонший шар – тим менший об'єм розсіяння. Це єдине загальне формулювання для всіх типів матеріалу. Товщина шару також визначає відносні інтенсивності піків шару і підкладки.

Інша особливість розсіяння від тонких шарів – наявність на схилах кривих гойдання інтерференційних смуг, період яких пов'язаний з товщинами шарів. Це так звані товщинні осциляції. Для епітаксійного матеріалу з певною будовою ширина дифракційного профілю може зростати при зменшенні товщин шарів і тому інтерференційні смуги можуть розмиватись. Лише математичним моделюванням інтенсивності розсіяння, яке враховує зростання напівширини ліній і наявність інтерференційних смуг, можна досягнути точного вимірювання товщин.

В наступному параграфі обговорюються можливості визначення складу, напруг, параметру невідповідності і розорієнтації шарів з Х-дифрактометричних вимірювань. Кутова відстань між брегівськими піками $\Delta \mathcal{G}$ визначається трьома факторами: різницею міжплощинних відстаней $\Delta \mathcal{G}_B$, різницею напрямків орієнтації $\Delta \phi$, і розорієнтації поверхні Ω . Відмітимо, що $\Delta \phi = 0$ у випадку, коли епітаксійний шар повністю релаксований, а площини кристалічної гратки паралельні до поверхні зразка.

Показані переваги тривісної схеми дифракції перед двокристальною, яка дає можливість розділити розорієнтацію та дилатацію кристалічної гратки. Описано загальновживані методики контролю структурної досконалості шарів та вказані межі використання і допущення при отриманні їх параметрів.

Розділ 3 присвячений розгляду механізмів формування дифракційних спектрів від багатошарових періодичних структур (надграток), а також дослідженням параметрів короткоперіодних надграток з використанням напівкінематичного наближення теорії дифракції.

В першому параграфі розділу досліджується механізм формування спектрів НГ. Зокрема, аналізується залежність видимості сателітної структури спектрів від кількості періодів та товщин шарів, які утворюють період. Використовуючи напівкінематичне наближення теорії розсіювання Х-променів, коли товщини окремих шарів НГ є малими стосовно екстинкційної довжини, (параметру, котрий визначає довжину шляху формування динамічної хвилі в кристалі), розглянуто основні властивості дифракційних спектрів від НГ.

При розрахунках картини дифракції Х-променів за допомогою першої ітерації рівнянь Топена, однорідний епітаксійний шар описується такими параметрами: товщина t, коефіцієнтами Фур'є-поляризовності кристала χ , напругами ε і коефіцієнтом поглинання μ . Характеристиками дифракції епітаксійного шару з товщиною t будуть величини A, яка обернено пропорційна екстинкційній довжині, та Y, які визначаються формулами:

$$A = \frac{\pi \chi_h t}{\lambda_{\sqrt{|\gamma_0 \gamma_h|}}} , \qquad (1)$$

$$Y = -\sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \cdot \frac{\sin(2\vartheta_B)}{|\chi_h|} \cdot \Delta\omega .$$
⁽²⁾

В цих формулах λ – довжина хвилі Х-променів, \mathcal{G}_B – бреггівський кут для підкладки, γ_0 , γ_h – напрямляючі косинуси первинного і дифрагованого променів щодо внутрішньої нормалі до поверхні, $\Delta \omega$ – величина відхилення кристала від бреггівського положення. При розгляді відбивної здатності реальної НГ для заданого Х-випромінювання брались до уваги механічні напруги (деформації) в епітаксійній плівці, оскільки вони можуть бути безпосередньо визначені з аналізу форми КДВ. Позначимо характеристики плівки й підкладки індексами f і s відповідно, а різницю міжплощинних відстаней – $\Delta d = d_f - d_s$. Зазначені напруги (деформації) (як перпендикулярні ε_{\perp} , так і паралельні $\varepsilon_{//}$ поверхні кристала) визначаються в теорії пружності відносною зміною міжплощинних відстаней у підкладці й плівці:

$$\Delta d / d_s = \varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \Psi, \qquad (3)$$

де *Ψ*- кут між площинами і поверхнею кристалу. Диференціальний кут *Δ*ω дорівнює:

$$\Delta \omega = \mathcal{G} - \mathcal{G}_B + (\varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{//} \sin^2 \Psi) tg \mathcal{G}_B \pm (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{//}) \sin \Psi \cos \Psi, \qquad (4)$$

де 9-кут ковзного падіння Х-променів.

Довільний розподіл напруг ε і структурного фактора F епітаксійної плівки по глибині можна представити дискретною структурою, що складається з N субшарів. Нормалізована амплітуда дифракції цієї структури може бути записана за допомогою наступної формули:

$$E_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_{j=1}^{N} a_j \exp[-i(A_j Y_j + \Phi_j)] \frac{\sin(A_j Y_j)}{Y_j} , \qquad (5)$$

де $a_j = \exp\left[-\mu(\frac{\gamma_0 + |\gamma_h|}{2|\gamma_0\gamma_h|})\sum_{i=j+1}^N t_i\right]$ – абсорбційний множник, $a_N = 1$, $\Phi_j = 2\sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i$, – фа-

зовий множник, причому $\Phi_1 = 0$.

В наступному параграфі розглянуто особливості поведінки КДВ в короткоперіодних НГ GaAs-AlAs, які містять різні концентрації точкових дефектів, а також впливу цих дефектів на поведінку сателітних піків за допомогою напівкінематичного наближення теорії розсіяння X-променів.

Для проведення чисельного аналізу і співставлення його з експериментом використано модель дефектів кулонівського типу. Тоді вираз для статичного фактора Дебая-Валлера, можна представити як:

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

де $r_{1,2}$ та $c_{1,2}$ – відповідно, радіуси й концентрації дефектів у шарах періоду гратки. Вираз для дифузно розсіяних хвиль на одному періоді запишеться:

$$I_1^d = 2\left\{\sigma_1^2(1-E_1^2)\int_0^{t_1}\tau_1(\eta,z)dz + \exp(-\mu_1t_1)\sigma_2^2(1-E_2^2)\int_0^{t_2}\tau_2(\eta,z)dz\right\},\$$

де $\tau_{1,2}$ – параметр довжини кореляції Като, які описують ступінь ближнього порядку для відповідних шарів періоду НГ. Параметри $\tau_{1,2}$ для шарів короткоперіодної НГ не залежать ні від глибини *z*, ні від періоду НГ. Як видно з аналізу рис.1, поведінка інтенсивності сателітів залежить від ступеня структурної досконалості верхнього або нижнього шарів НГ.







Рис.2. Розрахункові КДВ для рефлексу 200 (крива 1) для НГ GaAs/AlAs, синусоїдальний (2,3), косинусоїдальний (4) фактори в співвідношенні (6).



Рис.3. Експериментальні (точки) і теоретичні (суцільні лінії) КДВ для КЗР 200 (ω - режим сканування) (a) і (ω - 29 – скани) (б).



Рис.4. КДВ 400 (а) і КЗР 200 (б) (крива 1), розраховані для AlGaAs і GaAs шарів при співвідношенні товщин 2:1 та $\text{Re}F_{ML}$ (2) і $\text{Im}F_{ML}$ (3).

9



Рис.5 Експериментальні КДВ для 200 рефлексу для структури InGaAs з різним вмістом індію (*ліворуч*). "0" і "+1" відповідно сателіти нульового і першого порядків. Цифри відповідають номерам зразків, наведеним у таблиці (*праворуч*).



Рис.6 Залежності відношення інтенсивності сателітів першого порядку до нульового від вмісту індію: 1, 2 – рефлекс 200; 3, 4 – рефлекс 400 (1, 3 - I(+)/I(0); 2, 4 - I(-)/I(0)).



Рис.7. Схематична будова атомних площин (співвідношення міжплощинних відстаней між шарами на схемі відповідає реальним) в інтерфейсах структури і співвідношення між структурними факторами шарів.

10

Відзначимо той факт, що недосконалість верхнього шару НГ зменшує інтенсивність додатних сателітів, а порушення структури нижнього шару приводять до зменшення інтенсивності від'ємних сателітів. Зазначимо, що при розрахунках КДВ враховувалася як когерентна, так і дифузна складові відбиття. Порівнюючи поведінку сателітів на розрахункових і експериментальних КДВ (рис.1), можна зробити висновок, що в досліджуваних НГ більш спотвореним є нижній шар – AlAs. При цьому співвідношення інтенсивностей експериментальних сателітів першого порядку $I_+/I_=0,56$ при величині статфактора 0,68 для шару GaAs задовільно корелює з даними результатів підгонки КДВ. Залежність зазначеного відношення I_+/I_- від величини статфактора одного із шарів L_i при фіксованому рівні спотворень структури іншого шару L_j =const носить чітко виражений нелінійний характер як при однаковій товщині шарів $(t_1=t_2)$, так і у випадку, коли товщина одного із шарів більша ніж іншого $(t_1=2t)$.

Встановлено, що контроль за вирощуванням плівок часто недостатній, тому отримується неспівмірна структура. Кінцева шорсткість поверхні визначається неточним числом осаджених атомів або дифузією атомів вздовж поверхні. Ефективна товщина шару буде складатись з нецілого числа атомних площин і призведе до виникнення нерівностей на атомному рівні. Дифракційний пучок усереднює структуру в межах латеральної довжини когерентності, і тому на дифракційному профілі неспівмірної НГ сателітні піки викликають періодичність, що є близькою до цілого числа атомних шарів і інтенсивностей, які не узгоджують з заданим числом шарів (GaAs)-(AlAs) і може описуватись лише їх комбінаціями (табл.1).

Номер зразка	Задані технологічно	Експериментальні значення пара-	Помилка визначен-	
параметри НГ, нм		мет рів НГ із рефлексу 004, нм	ня параметрів, %	
1	1.13 (AlAs)	1.1 (AlAs)		
	2.26 (GaAs)	0.003 (AlGaAs)	0.2	
		2.24 (GaAs)		
2	1.413 (AlAs)	1.414 (AlAs)		
	2.83 (GaAs)	0.004 (AlGaAs)	0.4	
		2.863 (GaAs)		
3	3ML (AlAs)	0.835 (AlAs)	0.134	
	6ML (GaAs)	1.736 (GaAs)		

Табл.1. Параметри шарів НГ

Наведені тут експериментальні результати й чисельні розрахунки КДВ із застосуванням напівкінематичного наближення теорії розсіяння Х-променів дали можливість зробити висновок про те, що в короткоперіодних НГ зміна співвідношення інтенсивностей сателітів, розташованих з боку менших і більших кутів від головного (нульового) сателіта, залежить як від ступеня структурної досконалості, так і від рівня пружної деформації окремих шарів.

Четвертий розділ присвячений обгрунтуванню застосування квазізаборонених рефлексів для дослідження параметрів шаруватих структур. Зокрема вказано на недоліки існуючих теоретичних підходів та проаналізовано вплив їх наближень та спрощень на результати дослідження параметрів багатошарових структур.

$$R = |F_{ML}|^{2} = (\sigma_{a}E_{a}\frac{\sin(A_{a}t_{a})}{A_{a}} + \cos(y)\sigma_{b}E_{b}\frac{\sin(A_{b}t_{b})}{A_{b}})^{2}.$$
 (6)

З рис.2 видно, що на КДВ можна виділити області з різними періодами маятникових осциляцій інтенсивності.

Косинусоїдальний член у виразі (6) описує період НГ (рис.2, крива 4), а синусоїдальні - товщину шару і внесок у відбивну здатність як AlAs (рис.2, крива 2), так і GaAs (рис.2, крива 3). Легко бачити, що внесок шару арсеніду галію в КДВ на два порядки менший, ніж шару AlAs, оскільки його структурний фактор при використанні КЗР 200 дуже малий. Тому в цьому випадку існує можливість із простого кутового аналізу форми КДВ визначити як товщину всієї структури, так і кожного із шарів зокрема.

Експериментальні і розрахункові КДВ для НГ із застосуванням КЗР 200 наведені на рис.3. Видно, що на КДВ спостерігається не лише сателітна структура, що відповідає за період НГ, але й тонка інтерференційна структура спектру. При цьому спостерігається хороше узгодження в тонких деталях експериментальних і теоретичних спектрів КДВ. Це відноситься як до значень інтенсивностей біля піка нульового порядку, так і до його кутового положення. Описаний результат також свідчить про те, що внесок дифузної компоненти інтенсивності є незначним для КЗР 200.

Крім цього всі результати вказують на те, що внесок в інтенсивність КЗР від шару, який складається з компонентів із близькими атомними номерами (GaAs), є дуже малим. Таким чином, шар з компонентами, атомні номери яких сильно відрізняються, визначає картину розсіяння для 200 КЗР.

Проведені розрахунки показують, що на кутове положення сателітів, а також на їх інтенсивність впливає варіація товщини періоду. На рис.4 показане погасання сателітів 3-го порядку при співвідношенні товщин $t_b/t_a = 2$. Крім того, максимуми сателітів різних порядків можуть як збільшуватися, так і зменшуватись навіть у досконалих структурах. Для з'ясування основних причин цього явища розглянемо поведінку дійсної (Re)

структурного фактору НГ $F^C = \sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} +$ i умовної (Im)частин

 $+\exp(iy)\sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2}$. На рис.4 для співставлення форми КДВ з характером варіацій

Re і Іт наведені розрахункові спектри КДВ НГ для відбиттів 400 і 200. Виявилося, що саме співвідношення між цими двома частинами структурного фактору визначає наявність або загасання сателітів тих або інших порядків. Дифракційні піки спостерігаються в тих місцях, де ($\text{Re}F_{ML}$) досягає максимуму.

Ці результати дозволили сформулювати кількісний критерій погасання сателітів в залежності від співвідношення товщин шарів, що утворюють НГ. Його можна записати

у вигляді емпіричної формули $m = p\left(\frac{t_a}{t_b} + 1\right)$, де p = 1, 2, ...; m – порядок погасаючого

сателіта.

Експериментальні КДВ для симетричного відбиття 200 від зразків з різним вміс-

том індію у твердому розчині (ТР) представлені на рис.5. Спостережувані на них особливості можна якісно пояснити наступним чином. Нульовий максимум, утворений довгоперіодними осциляціями, свідчить про формування в приповерхній області зразків періодичної структури монокристалічних шарів, що відрізняються від підкладки на величину середнього параметра гратки.

Інтерференційна структура на хвостах КДВ є взаємодією хвиль із однаковими періодами коливань. Це виражається в прояві ще одного сателіту (додатний першого порядку "+1"). Його інтенсивність перевищує пік основного (нульового) сателіта. Це є несподіваним результатом, оскільки всі розрахунки для товщин і сполук ТР, заданих технологічно або близьких до них дають дещо інші співвідношення між інтенсивностями сателітів.

Врахування структурної досконалості шарів також не може вплинути в такій мірі на асиметрію розподілу інтенсивностей сателітів.

Для з'ясування причин такої поведінки сателітів високих порядків на спектрах КДВ для 200-відбиттів були проведені чисельні розрахунки (рис.6). З аналізу результатів видно, що відношення інтенсивностей сателітів першого порядку до інтенсивності нульового для рефлексу 200 дуже чутливі до складу ТР.

Асиметрія у відношенні інтенсивностей сателітів проявляється за умови врахування напруг в обидвох підшарах НГ. Неврахування цієї обставини приводить до однакових значень інтенсивностей додатних і від'ємних сателітів. Для рефлексу 400 цей ефект виражений не так сильно (криві 3,4). Тому КЗР дозволяють дуже ефективно контролювати склад ТР субшарів НГ.

Таким чином, аналіз експериментальних спектрів НГ для КЗР дозволяє проводити контроль такого важливого параметра як склад ТР. Також він дозволяє визначити кристалографічну структуру розчину на атомному рівні, оскільки вона зв'язана з двома параметрами: стала гратки і структурний фактор (положення і тип атомів) (рис.7).

Хімічний склад ТР, обчислений з експериментальних спектрів для 200 рефлексу, для всіх зразків значно відрізняється від заданого технологічно (табл.2).

Крім того виявлено, що дифракційні характеристики 002 відбиттів є дуже чутливими до неоднорідностей границь розділу багатошарових структур.

Нарешті, високороздільна дифракція Х-променів дає можливість аналізувати структури з прихованими квантовими точками (КТ). При порівнянні Х-променевих спектрів InGaAs шарів з точками і без них в зразках із точками знайдено зменшення ефективного вмісту індію в змочувальних шарах.

П'ятий розділ присвячений можливостям застосування методів картографування оберненого простору для вирішення конкретних експериментальних задач.

Багатошарову систему, якою є структура з декількома квантовими ямами, можна представити як систему однорідних субшарів. Розрахунок КДВ був проведений за формулами динамічної теорії розсіяння Х-променів, що зводиться до рекурентних співвідношень, які пов'язують амплітуду відбиття від N шарів $R_{h,N}$ з амплітудами відбиття $R_{h,1}$ й проходження $R_{0,1}$ від верхнього шару з амплітудами (N-1) наступних шарів $R_{h,N} = [R_{h,1} + R_{h,N-1}(R_{0,1}R_{0,1} - R_{h,1}R_{h,1})](1 - R_{h,N-1}R_{h,1})^{-1}$. Кожний із шарів характеризується: товщиною t_j , параметром кристалічної гратки a_j і ступенями аморфізації f_j , які пов'язані зі зсувами атомів з регулярних позицій. Для проведення чисельного аналізу й зіставлення його з експериментом зручно використовувати модель дефектів кулонівського типу.

Всі досліджувані зразки вирощувалися на напівізолюючому арсеніді галію (100) методом молекулярно-пучкової епітаксії (МПЕ). П'ять серій зразків були вирощені, з вмістом індію 0.2, 0.25, 0.28, 0.3 та 0.35, відповідно. Вимірювання КДВ для симетричних 400, 200 і асиметричних 311 рефлексів проводилися на двокристальному спектрометрі (монохроматор GaAs(100), Си_α-випромінювання, 400 відбиття).

Використовуючи наведені вище співвідношення, були проведені розрахунки спектрів КДВ для даних структур. Як стартові умови для підгонки теоретичних спектрів КДВ до експериментальних, використовувались технологічні параметри структур.

Експериментальні КДВ, а також результати підгонки теоретичних кривих для симетричного відбиття 004 від зразка з вмістом індію x=0.25 у твердому розчині представлені на рис.8. Видно, що крім піку підкладки і основного максимуму, викликаного середньою граткою структури (нульового сателіта), на хвостах КДВ спостерігається складна інтерференційна структура. Осциляції з малим періодом Δg відповідають за товщину всієї структури, а довгоперіодні – мають яскраво виражений максимум, що свідчить про формування в приповерхній області зразків періодичної структури монокристалічних шарів. Аналіз КДВ (як симетричних 400, так і асиметричних 311) показав, що всі структури, в тій або іншій мірі, є псевдоморфними. З врахуванням цієї обставини була проведена оцінка вмісту індію у квантових ямах (КЯ).

В результаті процедури підгонки для рефлексу 400 були отримані товщини шарів у періоді НГ, розподіл домішки в межах КЯ, а також зміна параметру гратки в напрямку росту структури.

Якщо врахувати підвищену рухливість індію, то можна припустити наявність розмиття КЯ. Зміна складу КЯ відбувається при внутрішній дифузії деякої кількості індію із двох граничних шарів КЯ в бар'єрний шар GaAs, а атоми Ga дифундують в КЯ. Структура квантових ям така, що верхні та нижні її шари виявляються розмитими і з меншим вмістом індію, ніж глибші стосовно інтерфейсу частини квантової ями. Можливі профілі розмиття КЯ для зразків з вмістом індію 0.28 та 0.35 представлені на рис.9.

Отримані значення деформації для напрямку, паралельного гетерограниці, у зразках свідчать про значну релаксацію гратки, тобто про частковий зрив псевдоморфного росту. Це дозволяє зробити деякі висновки про те, що тут реалізується тривимірний ріст острівцевих структур.

Експериментальні КДВ 004 для зразків свідчать про те, що основний об'єм квантового шару складається із двох областей, що відрізняються по складу від заданого. Основний шар з композицією (x=0.17) і додатковий шар з більшим вмістом індію (x=0.9), який імовірно, включає острівцеві структури. Про утворення тривимірних острівцевих структур свідчить як розширення піків сателітів низьких порядків, так і зсув огинаючої лінії в бік менших кутів.

Дифракція на масиві квантових точок

Основні експериментальні спектри КДВ для симетричного 400 відбиття в режимі ω-сканування (1) і ω-29 – з аналізатором (2) наведені на рис.10. Досліджувалися



Рис.8. Розрахункові (суцільна лінія) і експериментальні (маркери) КДВ для рефлексу 004 у структурах з вмістом індію х = 0.25.





Рис.10. Експериментальні дифракційні спектри для 400-відбиття: 1 - ω -сканування (двокристальний варіант); 2 - 2 θ - ω - сканування (трикристальний варіант); QD – піки від квантових точок.



Рис.9. Профілі розподілу індію в моношарах КЯ для зразків з вмістом індію 0.28 (a) і 0.35 (б).

a)



Рис.11. Карти розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі поблизу вузлів 400 (a) і 224 (б) для структури InGaAs/GaAs. Випромінювання – CuK_{α1}. Н – дифракційний вектор, QD – розсіяння від квантових точок.

надграткові структури із квантовими точками 8х(11МШ (In,Ga)As/67МШ GaAs), вирощені на напівізолюючому арсеніді галію (100) методом МПЕ.

На спектрах спостерігається сателітна структура піків основної НГ, а також, викликана наявністю КТ. Крім піку підкладки і основного максимуму, викликаного середньою граткою структури (нульового сателіта) на КДВ спостерігається також система широких сателітів, зміщених по куту відносно надграткових. При цьому їх період аналогічний періоду основної надгратки. Ці сателіти, ймовірно, відповідають розсіянню від КТ. Особливо чітко вони проявляються при ω-20 скануванні без аналізатора.

Підтвердженням вищесказаному є двомірні карти оберненого простору навколо вузлів 400 та 224. На рис.11 наведені карти, зняті в симетричному 400 (а) і асиметричному 224 (б) відбиттях. З рисунка видно, що додаткові сателіти на КДВ 400 дійсно відповідають системі впорядкованих максимумів інтенсивності. Причому це впорядкування спостерігається як у напрямку росту q_z (уздовж вектора дифракції), так і в площині інтерфейсу (у напрямках $q_x(q_y)$). Період цих впорядкованих максимумів відрізняється у двох взаємоперпендикулярних напрямках. Вздовж вектора дифракції він збігається з періодом НГ і трохи збільшується в латеральному напрямку. Сама присутність впорядкованої системи максимумів вже свідчить про високу якість НГ із квантовими точками, наявність яких і підтверджується картиною розсіювання. Ще більш детальну інформацію про структуру деформаційних полів у цих НГ можна одержати з аналізу асиметричних двомірних карт розсіювання Х-променів у оберненому просторі. На цих картах чітко спостерігається розсіювання від підкладки, сателітна структура від НГ, а також піки, зумовлені впорядкованою структурою КТ.

№ структури	Середній склад	Латеральні	Середній латеральний	Висота КТ,
	КТ, %	напруги в КТ, %	розмір КТ, нм	HM
1	58	0.0004	98	7.0
2	63	0.0003	86	7.8

Табл.2. Параметри квантових структур InGaAs за даними Х-дифрактометрії

Аналіз КДВ (для симетричних 400-відбиттів) показав, що структури в тій або іншій мірі є псевдоморфними. З врахуванням цієї обставини проводилася оцінка середнього вмісту індію у квантових ямах. В результаті процедури підгонки для рефлексу 400 були отримані товщини шарів у періоді НГ, а також зміна параметра гратки в напрямку росту структури.

Наявність дальнього порядку в розташуванні максимумів на двовимірних картах оберненого простору свідчить про латеральне і нормальне впорядкування квантових точок з різними періодами. Про це також свідчить і форма ω - кривих поблизу надструктурних максимумів. Однак варто відмітити, що фазові кореляції в напрямку вектора дифракції (оберненої гратки) сильніші, ніж в паралельному поверхні напрямку.

Відзначимо також, що наявність деформованих областей в структурах, викликаних квантовими точками, на відміну від інших типів порушень, істотно не впливає на когерентність дифрагованого випромінювання, а, отже, і на просторову роздільну здатність методу високороздільної Х-дифрактометрії.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі обґрунтовано та апробовано нові експериментальні підходи з використанням КЗР для аналізу спостережуваних одновимірних профілів, які базуються на напівкінематичній теорії дифракції, та карт розподілу дифрагованих інтенсивностей навколо вузлів оберненої гратки. Досліджені параметри багатошарових структур InGaAs/GaAs, AlAs/GaAs, вирощених методом МПЕ. З аналізу отриманих результатів слідують такі висновки:

- За допомогою напівкінематичного наближення теорії розсіяння Х-променів показано, що в короткоперіодних НГ зміна співвідношення інтенсивностей сателітів, розташованих з боку менших і більших кутів від головного (нульового) сателіта, залежить як від ступеня структурної досконалості (фактора Дебая-Валлера, параметра ближнього порядку Като), так і від рівня пружної деформації окремих шарів. Показано, що для верхнього шару, яким є GaAs, це відношення інтенсивностей має немонотонний характер.
- 2. Немонотонний характер поведінки інтенсивностей сателітів НГ викликаний, найбільш імовірно, нерівнозначними фазовими змінами в структурному множнику кожного з шарів. Для високого рівня спотворень структури співвідношення *I₊/I*. може в кілька разів перевищувати значення, характерне для ідеального шару. Варіації характеристики *I₊/I*. у випадку КЗР мають значно меншу амплітуду в порівнянні зі структурними відбиттями. Ця обставина вказує на можливість проведення якісних оцінок ступеня структурної досконалості вирощених шарів НГ по формі КДВ (співвідношенню між інтенсивностями сателітів).
- 3. Застосування КЗР для контролю структурних параметрів НГ має ряд переваг перед звичайними (структурними) рефлексами:

– по-перше, можуть бути використані простіші математичні вирази, що пов'язують такі важливі параметри як товщини шарів і напруги в них;

– по-друге, незначний внесок шарів з малим значенням структурної амплітуди (GaAs) в розсіяння дає можливість розділити вплив кожного із шарів та одержати інформацію про структуру окремих шарів НГ, наприклад, AlAs, InAs.

- 4. КЗР є дуже чутливими до складу твердого розчину в квантових ямах. Причому в залежності від співвідношення величин параметрів a₂/a₁ та F₂/F₁ змінюється поведінка системи сателітів на КДВ від структур. Аналіз відношення інтенсивностей сателітів вищих порядків до інтенсивності нульового дозволяє визначити як склад твердого розчину, так і наявність напруг у субшарах (асиметрія пікових інтенсивностей сателітів вищих порядків). Задовільне узгодження між експериментальними і теоретично розрахованими КДВ для 200 рефлексу свідчить про те, що теоретичні передумови, використані в цій роботі, є правочинними.
- 5. Проведені дослідження показали, що дифракційні характеристики 002 відбиттів є дуже чутливими для виявлення неоднорідностей границь розділу багатошарових структур, а також до хімічних зв'язків, утворених на границях.
- 6. Високороздільна дифракція X-променів є інформативним методом для аналізу закритих квантових точкових структур. При порівнянні рентгенівських спектрів

InGaAs шарів з квантовими точками і без них зменшення ефективного вмісту індію в змочувальних шарах зафіксовано в зразках із точками.

- 7. Аналіз КДВ для симетричних та асиметричних рефлексів показав, що досліджувані структури в тій, або іншій мірі є псевдоморфними. Врахування цієї обставини дозволило провести оцінку середнього вмісту індію у квантових ямах. В результаті процедури підгонки були отримані товщини шарів у періоді НГ, а також зміна параметра гратки в напрямках росту структури і паралельно інтерфейсу.
- 8. Встановлено, що наявність дальнього порядку в розташуванні дифузних максимумів на двовимірних картах в оберненому просторі свідчить про латеральне та нормальне впорядкування квантових точок з різними періодами. Це підтверджено також і формою ω - кривих поблизу надструктурних максимумів. Однак варто відмітити, що впорядкування КТ (фазові кореляції) в напрямку вектора дифракції (напрямку росту) більш сильні, ніж в латеральному (паралельному поверхні) напрямку.
- 9. Запропоновано методику контролю нормальних і латеральних складових деформації шарів в короткоперіодних НГ з точністю до 0.0001, яка полягає у вимірюваннях симетричних та асиметричних КДВ.
- 10. Показано, що при використанні двокристальної схеми дифракції є можливість контролю наявності квантових точок в НГ та їх параметрів за рахунок реєстрації одночасно внеску як когерентного, так і дифузного розсіяння від точок.

Список цитованої літератури

- 1. Schmidbauer M. X-Ray Diffuse Scattering from Self-Organized Mesoscopic Semiconductor Structures. (New York: Springer: 2004).
- 2. Даценко Л.И., Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии. (Київ: Академперіодика: 2002), 352 С.
- 3. Pietsch U., Holy V., Baumbach T. High-Resolution X-Ray Scattering From Thin Films to Lateral Nanostructures. (New York: Springer: 2nd ed., 2004), 408 p.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Kladko V.P., Datsenko L.I., Korchovyi A.A., Machulin V.F., Lytvyn P.M., Shalimov A.V., Kuchuk A.V., Kogutyuk P.P. Investigation of superlattice structure parameters using quasi-forbidden reflections // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2003. – V.6, N3. – P.392-396.

2. Стрельчук В.В., Валах М.Я., Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Корчовий А.А., Гулє Є.Г., Коломис О.Ф., Мазур Ю.І., Wang Z.M., Xiao M., Salamo G.J. Дослідження самоіндукованих квантових точок в InGaAs/GaAs багатошарових структурах // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2003. – Т.1, №1. – С.309-327.

3. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Стрельчук В.В., Прокопенко И.В., Гудыменко А.И., Корчевой А.А. Рентгенодифракционные исследования структурных 2D-3D структурных переходов в наноразмерных многослойных периодических структурах // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2003. – Т.1, №2. – С.447-457.

4. Kladko V.P., Datsenko L.I., Machulin V.F., Domagala J., Lytvyn P.M., Bak-Misiuk J., Kuchuk A.V., Korchovyi A.A. Formation of rocking curves for quasiforbidden reflections in short-periodic superlattices GaAs-AlGaAs // J. Appl. Cryst., – 2004. – V.37, Part 1. – P.150-155.

5. Kladko V.P., Datsenko L.I., Kuchuk A.V., Domagala Ya., Shalimov A.V., Korchovyi A.A. Investigation of GaAs/AlAs Short-Periodic Superlattices by High-Resolution X-Ray Diffractometry // УΦЖ. – 2004. – T.49, №1. – C.79-84.

6. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Прокопенко И.В., Литвин П.М., Когутюк П.П., Корчевой А.А. Применение квазизапрещенных рентгеновских рефлексов для исследования квантово-размерных структур // Металлофизика и новейшие технологии, – 2004. – Т.26, №2. – С.217-227.

7. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б., Первак Е.В., Корчевой А.А., Ефанов А.Н., Когутюк П.П., Скакунова Е.В. Влияние упорядочения в периодических структурах с квантовыми точками на характер брэгговской дифракции // Металлофизика и новейшие технологии. – 2004. – Т.26, №10. – С.1255-1265.

8. Кладько В.П., Єфанов О.М., Мачулін В.Ф., Стрельчук В.В., Корчовий А.А. Дослідження анізотропії залишкових деформацій в багатошарових (In,Ga)As/GaAs структурах з квантовими нитками методом високороздільної рентгенівської дифрактометрії // Матеріали Х-МКФТТП. – Івано-Франківськ, Україна. – 2005. – Т.2. – С.-28-29

9. Корчевой А.А., Гудименко О.Й., Єфанов О.М., Литвин П.М. Исследование низкоразмерных структур с помощью высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии при использовании квазизапрещенных рефлексов // Зб. тез Лашкарьовських читань для молодих вчених. – Київ, Україна, – 2003. – С.51.

10. Кучук А.В., Литвин О.С., Корчовий А.А., Прокопенко І.В., Осадча Н.В. Комплексне використання рентгенівських методів та атомно-силової мікроскопії для дослідження тонкоплівкових структур // Матеріали ІХ-МКФТТП. – Івано-Франківськ, Україна, – 2003. – Т.1. – С.163-164.

11. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Литвин П.М., Прокопенко І.В., Корчовий А.А., Гудименко О.Й. Исследование параметров и структуры квантовых ям In_xGa_{1-x}As методами рентгеновской дифрактометрии// Сб. тезисов 4-го Международного украинско-русского семинара «Нанофизика и наноэлектроника». – Киев, Украина, – 2003. – С.67-68.

12. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Валах М.Я., Литвин П.М., Корчовий А.А., Єфанов О.М., Стрельчук В.В., Мазур Ю.І. Дослідження особливостей вертикального та латерального впо-рядкування квантових точок в надграткових напівпровідникових структурах // Тези доповідей ІІ української наукової конференції з фізики напівпровідників, Чернівці. – 2004. – Т.2, – С.182.

13. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Литвин П.М., Корчовий А.А., Прокопенко І.В., Гудименко О.Й., Єфанов О.М. Діагностика тонкої структури границь розділу фаз в надграткових структурах бінарних напівпровідників методом квазізаборонених відбиттів рентгенівських променів // Тези доповідей ІІ Української наукової конференції з фізики напівпровідників, Чернівці, 2004, – Т.1. – С.175.

14. Кладько В.П., Єфанов А.Н., Мачулин В.Ф., Стрельчук В.В., Корчевой А.А., Маzur Yu.I., Wang Z.M., Salamo G.J. Исследование анизотропии остаточних деформаций в многослойных структурах с квантовими нитями // Тези доповідей V Національної конференції по застосуванню рентгенівського, синхротронного випромінювання, нейтронів і електронів для дослідження матеріалів РСНЭ-НАНО-Росія, Москва - 2005. - С.158.

АНОТАЦІЯ

<u>Корчовий А.А.</u> Розсіяння Х-променів шаруватими періодичними структурами та діагностика їх параметрів. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, 2007.

Дисертація присвячена розробці експериментальних методів дослідження параметрів багатошарових планарних структур, розрахунку основних структурних властивостей плівок із спектрів відбиття Х–променів з використанням квазізаборонених рефлексів (КЗР) в бреггівській геометрії дифракції.

Застосовуючи напівкінематичне наближення теорії розсіювання Х-променів при розрахунках кривих дифракційного відбиття (КДВ) показано, що в короткоперіодних надгратках (НГ) зміна співвідношення інтенсивностей сателітів, розташованих з боку менших і більших кутів від нульового сателіта, залежать як від ступеня структурної досконалості (фактора Дебая-Валлера, параметра ближнього порядку), так і від рівня пружної деформації окремих шарів. Зазначений факт викликаний нерівноцінними фазовими змінами в структурному множнику кожного з реальних шарів.

Встановлено, що для адекватного опису КДВ від багатошарових структур необхідне врахуванням якомога більшого числа дифракційних параметрів, особливо в короткоперіодних надгратках далеко від кута точного бреггівського положення.

Обгрунтовано та апробовано нові експериментальні методи з використанням КЗР для отримання параметрів структур і композиційного розподілу в шарах НГ. При цьому вперше, встановлена можливість розділення внесків у відбивну здатність кожного з шарів структури окремо, висока чутливість КЗР до складу твердих розчинів субшарів, а також чутливість сателітів НГ до дефектної структури того або іншого шару.

Показано, що в структурах, один з шарів якої утворений елементами, які мало відрізняються атомними номерами, внеском цього шару в формування дифракційної картини можна знехтувати. Він буде давати внесок лише в зміну фази розсіяння.

Експериментально встановлений двохшаровий розподіл індію з різним його вмістом в областях квантових ям багатошарової структури InGaAs/GaAs та з'ясовано роль форми цього розподілу на формування КДВ у випадку дифракції Брегга.

Ключові слова: дифракція Х-променів, квазізаборонені рефлекси (відбиття), квантово-розмірні шари, деформація, градієнт складу, надгратки.

АННОТАЦИЯ

<u>Корчевой А.А.</u> Рассеяние Х-лучей слоистыми периодическими структурами и диагностика их параметров. – Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, 2007.

Диссертация посвящена разработке экспериментальных методов исследования параметров многослойных планарных структур, расчета основных структурных свойств пленок по спектрам отражения Х–лучей с использованием квазизапрещенных отражений (КЗО) в геометрии Брэгга.

Применяя полукинематическое приближение теории рассеивания Х-лучей при расчетах кривых дифракционного отражения (КДО) показано, что в короткопериодных сверхрешетках (СР) изменение соотношения интенсивности сателлитов, расположенных со стороны меньших и больших углов от главного (нулевого) сателлита, зависит как от степени структурного совершенства (фактора Дебая-Валлера, параметра ближнего порядка Като), так и от уровня упругой деформации отдельных слоев. Отмеченный факт вызван неравнозначными фазовыми изменениями в структурном множителе каждого из реальных слоев. Показано, что для верхнего слоя, которым является GaAs, это отношение интенсивности имеет немонотонный характер. Отмеченный факт может быть вызван, наиболее вероятно, неравнозначными фазовыми изменениями в структурном множителе каждого из реальных слоев. Для сравнительно высокого уровня искажений структуры, соотношение I_+/I_- может в несколько раз превышать значение, характерное для идеального слоя. Вариации характеристики I_+/I_- в случае КЗР имеют значительно меньшую амплитуду по сравнению со структурными отражениями. Это обстоятельство указывает на возможность проведения качественных оценок степени структурного совершенства выращенных слоев СР даже по внешнему виду КДО (соотношению между интенсивностью сателлитов).

Установлено, что для адекватного описания КДО от многослойных структур необходим учет как можно большего числа дифракционных параметров. Особенно это касается спектров отражения от короткопериодных СР в угловых областях далеких от точного брэгговского положения.

Обоснованы и апробированы новые экспериментальные методы с использованием КЗР для получения параметров структур и композиционного распределения в слоях СР. При этом впервые, установленная возможность разделения вкладов в отражательную способность каждого из слоев структуры отдельно, высокая чувствительность КЗР к составу твердых растворов субслоев, а также чувствительность сателлитов СР к дефектной структуре того или иного слоя.

Показано, что в структурах, один из слоев которых образован элементами, мало отличающимися атомными номерами, вкладом этого слоя в формирование дифракционной картины можно пренебречь. Этот слой будет давать только вклад в изменение фазы рассеяния. КЗР являются очень чувствительными к составу твердого раствора в квантовых ямах. Причем в зависимости от соотношения величин параметров решеток a_2/a_1 и структурных факторов F_2/F_1 изменяется поведение системы сателлитов на КДО. Анализ отношения интенсивности сателлитов высших порядков к интенсивности нулевого позволяет определить как состав твердого раствора, так и наличие напряжений в субслоях (асимметрия пиковой интенсивности сателлитов высших порядков).

Проведенные исследования показали, что дифракционные характеристики 002 отражений являются очень чувствительными для выявления неоднородности границ раздела в многослойных структурах.

Экспериментально установлено двухслоевое распределение индия с различным содержанием в квантовых ямах многослойной структуры InGaAs/GaAs и выяснена роль формы этого распределения на формирование КДО в случае дифракции Брэгга.

Ключевые слова: дифракция Х–лучей, квазизапрещенные отражения, квантоворазмерные слои, деформация, градиент состава, сверхрешетки.

ABSTRACT

Korchovyi A.A. X-Rays scattering by layered periodical structure and diagnostic of their parameters. – Manuscript.

Dissertation for the Ph.D. degree by speciality 01.04.07 – solid state physics. V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2007.

Dissertation is devoted to the development of experimental methods of planar multilayered structures characterization, calculation of basic structural properties of the films from the reflection spectra of X-Rays with the use of the quasi-forbidden reflection (QFR).

With the use of the semi-kinematics approximation of dispersion X-rays theory at the calculations of rocking curves (RC), it is shown that in short-period superlattices (SL) change of intensities correlation of the satellites located from the side of less and greater corners from a zero satellite, depends both on the degree of structural perfection (factor of Debye-Waller, short-range parameter) and from the level of strain deformation of separate layers. The noted fact is caused by the unequivalent phases changes in the structural multiplier of each of the real layers.

It is established that for adequate description of RC from multi-layered structures it is necessary to take into account as possible greater number of diffractions parameters as possible, especially in short-period superlattices far from the corner of exact Bragg position.

New experimental methods with the use of QFR for the determination of parameters of structures and composition division in the layers of SL were substantiated and verified. Thus, for the first time, the possibility of separation of contribution in the reflectivity of each of layers of structure separately was shown, as well as high sensitiveness of QFR in the content of solid solution of sublayers, and also sensitiveness of satellites of SL to the defects structure of that or other layer.

It is shown that in structures, one of layers of which is formed by elements which slightly differ by atomic numbers, it is possible to ignore contribution of this layer in formation of diffraction picture. It will give contribution only to the change of phase of dispersion.

Two-layers indium distribution with its different content in the region of quantum wells of the multi-layered structure of InGaAs/GaAs was experimentally established and aslo the role of form of this division is established out on the formation in the case of Bragg diffraction.

Keywords: X-ray diffraction, quasiforbidden reflections, quantum layers, deformation, gradient of composition, superlattices.