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

На правах рукопису УДК: 539.213; 539.23+621.793.79; 539.26

Слободян Микола Васильович

# ВПЛИВ ТРИВИМІРНОГО ВПОРЯДКУВАННЯ ТА ДЕФОРМАЦІЙ НА ДИФРАКЦІЮ Х-ПРОМЕНІВ В РЕАЛЬНИХ БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ

(01.04.07 – фізика твердого тіла)

### **ДИСЕРТАЦІЯ**

на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

> Науковий керівник: Доктор фізико-математичних наук, професор Кладько Василь Петрович

Київ – 2009

## **3MICT**

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1. БАГАТОШАРОВІ СТРУКТУРИ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ ТА	13
ДРОТАМИ: ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ, СТРУКТУРНИХ ПЕРЕТВО-	
РЕНЬ ТА ЇХ ХАРАКТЕРИЗАЦІЇ (ОГЛЯД)	
Вступ	13
1.1 Просторова самоорганізація	14
1.2 Вплив ростових умов на впорядкування квантових точок	18
1.3 Вплив зовнішніх чинників на властивості багатошарових структур	22
1.4 Роль та місце високороздільної Х-променевої дифрактометрії в мето-	22
дах характеризації багатошарових структур	
Висновки та постановка задачі	27
РОЗДІЛ 2. Х-ПРОМЕНЕВА ДИФРАКТОМЕТРІЯ БАГАТОШАРОВИХ	28
СТРУКТУР	
Вступ	28
2.1. Трьохвісна Х-променева дифрактометрія	30
2.2. Застосування високороздільної Х-променевої дифрактометрії для до	36
слідження багатошарових структур	
2.2.1 Напруги в епітаксійних шарах	36
2.2.2 Дифракція від періодичних об'єктів	38
2.2.3 Напружені шари надграток: нахили площин, тераси, мозаїч-	44
ний розподіл	
2.2.4 Особливості дифракції за умов ковзного падіння на самоорга-	47
нізованих нанорозмірних острівцях	
2.3. Теоретичний розрахунок процесів розсіяння та автофітування кривих	49
дифракційного відбиття	
2.3.1. Метод матриць Абеле	49
2.3.2. Рівняння Такагі-Топена	49
2.3.3. Алгоритм матриці проходження (ТМА)	50

2.3.4. Алгоритм рекурсивних матриць (РМА)	51
2.3.5. Розрахунок Х-променевої дифракції від багатошарових лате-	
ральних кристалів довільної форми та хімічного складу по глибині структури	
2.3.6. Автофітування кривих дифракційного відбиття	55
2.4. Область доступності в оберненому просторі	
2.4.1. Формули для побудови області доступності	59
Висновки до розділу 2	63
РОЗДІЛ З. СТРУКТУРНІ ОСОБЛИВОСТІ НАНОРОЗМІРНИХ	64
БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР, ОТРИМАНИХ ПРИ РІЗНИХ УМОВАХ	
РОСТУ	
3.1. Вплив латеральних модуляцій та компонентного складу на структур-	64
ні переходи в In <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As/GaAs надгратках	
3.2. Структурна анізотропія в In <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As/GaAs надгратках з ланцюгами	72
квантових точок	
3.3. Самоорганізація квантових точок в структурах, вирощених в різних	77
молекулярних потоках. Просторова гратка	
3.4. Х-променеві дослідження деформаційного стану гетероструктур In-	85
GaAsSbN/GaAs з квантовими ямами	
Висновки до розділу 3	92
РОЗДІЛ 4. ЗОВНІШНІ ВПЛИВИ НА СТРУКТУРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ	93
БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР	
4.1. Вплив радіуса кривизни багатошарових наноструктур на дифракцію	93
Х-променів	
4.2. Термічно-стимульована модифікація структурних властивостей впо-	100
рядкованих InGaAs/GaAs надграток	
4.3. Вплив температури росту і наступного термовідпалу на деформацій-	104
ні та структурні характеристики БШС. Дислокації в шарах з квантовими точ-	
ками	

	4
Висновки до розділу 4	117
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ	119
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	121
СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ	138

### ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ВРХД – високороздільна Х-дифрактометрія

- КТ квантова точка
- КН квантова нитка
- МШ моношар
- МПЕ молекулярно-пучкова епітаксія
- НГ надгратка
- КДВ крива дифракційного відбивання
- є механічна деформація
- θ кут Брегга
- МОП мапа оберненого простору
- Λ довжина екстинкції
- ШТВ швидкий термічний відпал

#### ВСТУП

#### Актуальність теми

В останні роки спостерігається значний інтерес до отримання самоорганізованих наноструктурних елементів (квантових точок (КТ), квантових ниток (КН) та їх варіацій) на основі сполук  $A^3B^5$  на напівпровідникових підкладках епітаксійними методами росту, які є найбільш прийнятною та контрольованою технологією, що застосовується для вирощування нанорозмірних дво-, одно- та нульвимірних гетероструктур. Прототипи новітніх оптоелектронних приладів, в яких використовуються КТ, продемонстрували можливість роботи при нижчих порогових густинах струмів, кращу оптичну ефективність, кращу термостабільність у порівнянні із аналогами, виготовленими з використанням квантових ям. Однак, до теперішнього часу не досягнуто теоретично передбачених значень параметрів приладів на основі наноструктур. Залишається багато невирішених питань, що стосуються механізмів росту, хімічного складу, форми, процесів латерального та вертикального впорядкування самоіндукованих КТ і КН, в тому числі для практично важливих систем Ge/Si та (In,Ga)As/GaAs.

Вертикально-корельоване впорядкування КТ в багатошарових гетероструктурах можна реалізувати за рахунок напружено-деформаційного стану розмежовуючих шарів, спричиненого КТ у попередніх шарах. В той же час латеральне впорядкування КТ (в площині гетеромежі), а тим більше утворення одновимірних ланцюгів або поверхневої впорядкованої 2D-сітки залишається на сьогодні найбільш актуальною задачею.

Післяростовий швидкий температурний відпал (ШТВ) є простим і найкоротшим шляхом модифікації профілю і ширини енергетичної структури зон наноелектронних приладів. Як правило, оптимальна ШТВ обробка КТ та КН може сприяти зсуву піку фотолюмінесценції у голубу область та зменшенню його півширини. Цей ефект ШТВ зумовлений процесами дифузійного перемішування КТ(КН) із матеріалом бар'єрів (розмежовуючих шарів), що в багатошарових структурах проявляється у зміні форми, розмірів, складу та деформацій в наноструктурних елементах. Переважна більшість робіт, які опубліковані в останні роки за даною тематикою присвячені оптичним дослідженням впливу ШТВ, а питання особливостей структурної перебудови в багатошарових структурної перебудови в багато-

Фізичні властивості та подальше застосування приладів визначаються якістю кристалічної структури матеріалів і характером розподілених в їх об'ємі дефектів. Найбільш ефективним, неруйнуючим і експресним способом дослідження кристалічних гетероструктур, включаючи нанорозмірні шари (квантові ями), є метод високороздільної Х-дифрактометрії в різних режимах зйомки (аналіз кривих гойдання та вимірювання й аналіз карт розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі).

Стрімкий розвиток методів високороздільної Х-дифрактометрії і використання нових джерел синхротронного випромінювання супроводжується активним розвитком теорій дифракції Х-променів на наноструктурах різного ступеня гетерогенності та впорядкованості. Оскільки найбільш передові технології не дозволяють створювати структури з ідеальною кристалічною граткою, аналіз дифракційної картинки вимагає врахування когерентного і дифузного розсіяння. Когерентний канал розсіяння визначається станом "середньої" (напруженої) кристалічної гратки. Формування ж дифузного поля розсіяння відбувається в результаті взаємодії Х-випромінювання з дефектами кристалічної гратки, які завжди присутні в реальних кристалах.

Безпосередня взаємодія Х-випромінювання з речовиною супроводжується формуванням різного роду дифракційних процесів, за які відповідають як когерентна, так і дифузна складові Х-променевого поля. Отже, кутовий розподіл коефіцієнта дифракційного відбиття і розподіл інтенсивності на двовимірних картах оберненого простору містять важливу інформацію про структурні характеристики кристалічних нанооб'єктів. Тому їх аналіз та інтерпретація також є актуальним завданням даної роботи.

#### 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:

1. "Комплексні структурні та морфологічні дослідження гетероепітаксійних (у тому числі нанорозмірних) систем на основі напівпровідників IV групи та сполук А<sup>3</sup>В<sup>5</sup> і А<sup>2</sup>В<sup>6</sup>" (№ державної реєстрації 0103U000380); – (виконавець).

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

#### Мета і завдання дослідження.

Викладені вище тенденції у розвитку технології нанорозмірних структур та коло актуальних фундаментальних і прикладних завдань, які на сьогодні вимагають вирішення, визначили предмет та мету наших досліджень.

<u>Метою дисертаційної роботи</u> є подальший розвиток методик дифракційного аналізу складних структур для визначення фізичних механізмів відповідальних за процеси релаксації деформацій, динаміку зміни просторового впорядкування масивів квантових точок в багатошарових наноструктурах і встановлення оптимальних режимів росту і термообробок, які забезпечують отримання найбільш однорідного впорядкування квантових точок заданого розміру, форми та складу.

Для досягнення поставленої мети, вирішувалися наступні наукові завдання:

- розробка експериментальних методик дослідження параметрів просторової гратки квантових точок з карт розподілу інтенсивності дифрагованих Х-променів в оберненому просторі та проведення комплексу досліджень структурних та фізичних властивостей багатошарових структур (БШС);
- розробка і створення методів моделювання карт оберненого простору для латерально періодичних нанооб'єктів, а також підходів до розрахунку спектрів;
- дослідження механізму початкової стадії переходу від пошарового росту плівки до утворення тривимірних (3D) острівців, зокрема, залежності 2D-3D переходу від різних факторів, що впливають на процес самоорганізованого формування

InGaAs острівців (температури росту, швидкості осадження, компонентного складу, орієнтації підкладки). Встановлення ролі поверхневої сегрегації індію в структурних та композиційних змінах і спонтанній латеральній модуляції складу;

- дослідження впливу зовнішніх чинників (температура росту, температура відпалу, молекулярний потік арсену) на деформаційний стан багатошарової системи та просторове впорядкування КТ;
- встановлення взаємозв'язку між макродеформацією багатошарових структур (кривизною системи) та мікродеформаційними параметрами і геометричними характеристиками та його впливу на дифракційну картину.

**Об'єкт дослідження** – структури з одиничними квантовими ямами та багатошарові структури InGaAs/GaAs, вирощені методом молекулярно-променевої епітаксії на напівізолюючих підкладках GaAs (001) при різних температурах підкладки, молекулярних потоках миш'яку, вмісті індію.

Предмет дослідження – фізичні особливості дифракції Х-променів в складних багатошарових структурах з планарним (впорядкованим та розупорядкованим) розподілом нанооб'єктів, механізми структурної релаксації деформацій та фізичні процеси формування тривимірних впорядкованих масивів квантових точок при змінах технологічних параметрів епітаксійного росту та післяростових температурних обробок.

*Методи дослідження* – комплекс експериментальних та аналітичних методів, який включає в себе високороздільну Х-променеву дифрактометрію (ВРХД), картографування оберненого простору навколо вузлів оберненої гратки, обчислювальні методи та комп'ютерне моделювання.

#### Наукова новизна одержаних результатів.

В результаті дослідження *вперше* отримані та узагальнені наступні наукові результати:

- встановлено і пояснено механізм початкової стадії переходу від пошарового росту плівки до утворення тривимірних (3D) острівців, який визначається процесами поступового самоорганізованого формування InGaAs острівців на латеральних областях з модульованим складом індію, вилаштуваних вздовж кристалографічного напрямку [1-10].
- встановлено і дано пояснення ефекту розщеплення когерентних сателітів і нахилу латеральних сателітів на дифракційних картинах від БШС з КТ, яке полягає в прямому і похилому (вздовж кристалографічного напрямку [110]) наслідуванні КТ при рості структур та зміною співвідношення складу в різних областях структур;
- запропоновано методику реконструкції просторової гратки квантових точок з експериментальних карт розподілу інтенсивності в оберненому просторі, яка полягає в аналізі поведінки дифракційних максимумів при азимутальній зміні площини дифракції для симетричних рефлексів;
- експериментально встановлено і пояснено природу зміни періоду багатошарової структури після ШТВ, яка обумовлена впливом макрокривизни на зсуви положень піків сателітної структури когерентної НГ. В результаті проведених досліджень була встановлена область температурної стабільності структурних характеристик БШС.

**Практичне значення одержаних результатів.** Проведені комплексні Х-променеві дослідження динаміки формування наноструктурних елементів, трансформації їх планарного та вертикального впорядкування при зміні топології структур і швидкому температурному відпалі дозволили вперше визначити основні фізичні механізми та їх конкурентний вклад, як у формування надграткових (НГ) напівпровідникових наноструктур In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs(100) з квантовими точками з наперед заданими розмірами і розташуванням, так і їх післяростового коригування.

На основі отриманих результатів встановлено оптимальні технологічні параметри вирощування зазначених наноструктур, які є перспективними для створення на їх основі новітніх оптоелектронних приладів з покращеними параметрами. Результати досліджень можуть бути використані при відпрацюванні вітчизняних технологій виробництва елементної бази наноелектроніки, зокрема при створенні ефективних напівпровідникових лазерів на базі сполук A<sup>3</sup>B<sup>5</sup>.

Особистий внесок здобувача. У всіх опублікованих працях [1-20], особистий внесок дисертанта полягає у проведенні високороздільних експериментальних вимірювань, розрахунку параметрів багатошарових структур, таких як товщини шарів (період надгратки), механічних напруг. Здобувач також приймав участь у моделюванні дифракційних спектрів [2,3,6,14,19,20], розробці програмного забезпечення [7,15] та розрахунках карт оберненого простору для латеральних структур в роботах [1,4,5,7-14,16-19]. Окрім обробки отриманих результатів, в усіх роботах дисертант приймав активну участь у аналізі та інтерпретації результатів досліджень, написанні статей.

Апробація результатів дисертації. Основні результати досліджень, що викладені у дисертацій роботі, доповідались та обговорювались на наукових конференціях: International meeting on Clusters and nanostructured materials (CNM'2006) (Uzhgorod-'Karpaty', Ukraine). – 9-12 October, 2006; 3-ій Міжнародний науковий семінар "Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)" (Росія, В. Новгород 23-26.05.06); The Sixth International Conference on Low Dimensional Structures and Devices (The Archipelago of San Andres, Colombia). – 15-20 April, 2007; XI International conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems (Ivano-Frankivsk, Ukraine). – 7-12 May, 2007; Semiconducting & Insulating Materials Conference, SIMC XIV, University of Arkansas (Fayetteville, AR, USA). – May 15-20, 2007; Конференції "Нанорозмірні системи. Будова-властивості-технології" (Київ, Україна). – 21-23 листопада, 2007; 8<sup>th</sup> Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP-2006) (Baden-Baden/Karlsruhe, Germany, 19-22. 09. 2006), 9<sup>th</sup> Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP-2008) (Linz, Austria, 15-19. 09. 2008). Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 20 наукових праць, з яких 8 статей та 12 тез доповідей на конференціях. Список публікацій наведено в кінці дисертації.

Структура дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, літературного огляду з теми дослідження (розділ 1), трьох оригінальних розділів, які присвячені основним результатам роботи, висновків та списку цитованої літератури з 171 найменувань. Дисертація викладена на 140 сторінках тексту, і містить 47 рисунків та 7 таблиць.

# РОЗДІЛ 1. БАГАТОШАРОВІ СТРУКТУРИ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ ТА ДРОТАМИ: ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ, СТРУКТУРНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ ТА ЇХ ХАРАКТЕРИЗАЦІЇ (ОГЛЯД)

#### Вступ

Для гетероструктур з квантовими точками (КТ), в яких реалізується просторове обмеження носіїв заряду, характерний крайній випадок розмірного квантування [1]. Тобто, відбувається найбільш виражена модифікація електронних властивостей матеріалу. Так, незважаючи на те, що КТ представляє собою набір з сотень тисяч атомів, її електронний спектр відповідає електронному спектру одиночного атома. Це дає змогу вирішити ряд проблем сучасної оптоелектроніки, наприклад, "розмиття" носіїв заряду в енергетичному вікні порядка *kT*, що спричиняє деградацію приладів при підвищенні робочої температури. Крім того, від геометричних розмірів та форми КТ сильно залежать такі характеристики матеріалу, як час випромінювальної рекомбінації, коефіцієнти оже-рекомбінації, та ін. Це дозволяє виготовляти найрізноманітніші прилади на основі однієї напівпровідникової системи.

Однак, до теперішнього часу не досягнуто теоретично передбачених значень параметрів приладів на основі наноструктур. Залишається багато невирішених питань, що стосуються механізмів росту, хімічного складу, форми, процесів латерального та вертикального впорядкування самоіндукованих масивів квантових точок (КТ) і ланцюжків КТ, в тому числі для практично важливих систем Ge/Si та (In,Ga)As/GaAs.

Фізичні властивості та подальше застосування приладів визначаються якістю кристалічної структури матеріалів і характером розподілених в їх об'ємі дефектів. Найбільш ефективним, неруйнуючим і експресним способом дослідження кристалічних гетероструктур, включаючи нанорозмірні шари (квантові ями), є метод високороздільної Х-дифрактометрії в різних режимах зйомки (аналіз кривих гойдання та вимірювання і аналіз карт розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі).

#### 1.1. Просторова самоорганізація

Необхідність в отриманні напівпровідникових наноструктур з характерними розмірами порядку 1–100 нм викликає інтерес до процесів їх спонтанного впорядкування, оскільки вони дають основу для опто- та мікроелектроніки нового покоління. Такі періодичні структури можуть утворювати надгратки [2], що складаються з квантових ям, точок та дротів.

На протязі тривалого часу спроби отримання КТ та приладів на їх основі не давали очікуваних результатів. КТ, вирощені "традиційними методами", такими як селективне травлення структур з квантовими точками [3], ріст на профільованих підкладках та на сколах [4], конденсація в скляних матрицях, не володіли атомноподібним спектром густини станів в напівпровідниковій макроструктурі і тому не могли використовуватись в приладобудуванні. Однак, саме використання ефектів самоорганізації в епітаксійних напівпровідникових наноструктурах дало можливість отримати високодосконалі структури з високою однорідністю розмірів КТ порядка 10% та успішно застосувати їх в отриманні оптоелектронних приладів, наприклад, інжекційних гетеролазерів на КТ.

Розрізняють два механізми спонтанного формування впорядкованих наноструктур. Перший реалізується в замкнутих системах, наприклад при тривалому перериванні процесу росту та відпалі матеріалу. Другий має місце у відкритих системах, під час росту кристала.

Спонтанно впорядковані наносистеми прийнято розділяти такі типи:

- Епітаксійні плівки твердого розчину напівпровідників з латеральною модуляцією складу.
- Періодичні фасетовані поверхні.
- Впорядковані системи когерентно напружених тривимірних острівців.

Структури з модульованим складом виникають тоді, коли вільна енергія твердого розчину з неоднорідним профілем складу менша, ніж для твердого розчину з однорідним складом. Області з різним складом володіють різними значеннями рівноважної постійної гратки. Їх сполучення відбувається шляхом пружної деформації. Релаксація пружних напруг поблизу поверхні сприяє спонтанному формуванню наноструктур, а пружна анізотропія матеріалу визначає їх орієнтацію.

При фасетуванні поверхні кристалу відбувається трансформація її структури на "горби та ямки". Таким чином, незважаючи на збільшення площі, зменшується вільна енергія поверхні. Виникнення періодичної фасетованої структури пояснюють капілярними явищами на поверхні твердих тіл [5]. За рахунок того, що поверхневі атоми знаходяться в іншому оточенні, ніж об'ємні, їх рівноважні стани відрізняються і поверхню кристалу можна розглядати як пружно-деформований шар.

Періодичні фасетовані поверхні дають прямий шлях до вирощування впорядкованих масивів квантових дротів. Можливі варіанти росту тут залежать від того, змочує осаджуваний матеріал фасетовану підкладку, чи ні. При повному змочуванні осаджуваний матеріал рівномірно розподіляється на поверхні. В протилежному випадку утворюються ізольовані кластери в "канавках" періодичної фасетованої поверхні. Експериментальні результати по дослідженню фасетованих систем AlAs/GaAs (001), GaAs/AlAs(001), GaAs/AlAs(311) можна знайти в [6-8].

Щодо росту епітаксійних систем, то тут розрізняють три моделі:

- Франка-ван дер Мерве в ньому реалізується пошаровий двовимірний ріст матеріалу на підкладці;
- Фолмера-Вебера на відкритій підкладці ростуть тривимірні острівці;
- Странскі–Крастанова формування тривимірних острівців після росту шару деякої критичної товщини.

Перші два режими характерні для епітаксійних систем з узгодженими параметрами граток і відрізняються тільки співвідношенням поверхневих енергій та енергії границі розділу. В третьому випадку, коли параметри граток шарів розузгоджені, пошаровий ріст відбувається тільки до певного моменту, коли система намагатиметься зменшити свою пружну енергію шляхом формування ізольованих когерентно напружених острівців. Можливість формування таких бездислокаційних острівців була експериментально показана на InGaAs/GaAs(001) [9] та Ge/Si(001) [10,11] структурах. Подальші роботи показали формування острівців не тільки з малим розкидом по розмірам [12,13], але й корельованих по взаємному розташуванню [14–16]. В роботі Дарубера та Кроста методами фотолюмінесценції та високороздільної Хпроменевої дифрактометрії вивчався вплив товщини осадженого шару In<sub>0.55</sub>Ga<sub>0.45</sub>As/GaAs на перехід режиму росту від Франка–ван дер Мерве до Странскі– Крастанова [17]. Було показано, що формування системи КТ супроводжується зменшенням вмісту індію у змочуючому шарі [18].

Теоретичні розрахунки показують, що лазери на КТ володіють набагато кращими властивостями, ніж лазери на квантових ямах [19]. Вони володіють більшим коефіцієнтом підсилення, повністю нечутливі до температури гратки, краще піддаються контролю енергії кванта випромінювальної рекомбінації (тобто можна контролювати колір випромінювання). Однак, це накладає строгі рамки на структурні характеристики квантових точок, як от форма, розмір, однорідність та густина. Мінімальний розмір КТ повинен відповідати наявності в ній принаймні одного електронного рівня. Так для структури InAs-AlGaAs необхідний мінімальний діаметр КТ складає 40 Å. Реально ця величина дещо більша, оскільки тепловий викид носіїв з КТ такого розміру призводитиме до її спустошення. Для реалізації розмірного квантування верхня межа розмірів КТ не повинна перевищувати 200 Å [1]. Крім того КТ мають бути бездислокаційними та не містити точкових дефектів. В великих масивах КТ повинні бути якомога більш однорідні за формою та густиною. В більшості випадків необхідна їх гарна просторова періодичність. Відомо [20,21], що дисперсія розмірів самоорганізованих КТ як в InAs/GaAs, так і в Ge/Si системах корелює з їх розташуванням. Тобто, чим краще впорядкування, тим менший розкид розмірів. Це пов'язане з впливом полів пружних напруг вертикально впорядкованих колонок КТ. В загальному, точки зародження острівців задаються морфологією ростової поверхні та неоднорідністю поверхневої напруги, спричиненої прихованими острівцями та сусідніми острівцями на поверхні. Так, хвиляста морфологія з великою кількістю сходинок (step-bunched) поверхні може служити шаблоном для періодичного розташування острівців [22-24] і дає можливість задавати середню відстань між ними шляхом зміни кута розорієнтації підкладки. Проте, тут виникає проблема впорядкування КТ не тільки поперек цих сходинок (bunches), але й вздовж них.

Взаємовплив острівців в одному шарі є достатньо слабким і може спостерігатися експериментально тільки для дуже повільного росту в методі рідинно-фазної епітаксії (liquid-phase epitaxy) біля положення термодинамічної рівноваги [25]. Мейхнер та ін. [26] показали, що SiGe острівці на Si(001) вилаштовуються в ланцюжки паралельно до пружно–м'яких напрямків <100>, що було підтверджено атомносиловою мікроскопією (ACM) [27].

В багатошаровій структурі локальна поверхнева напруга, спричинена КТ, прихованими в різних інтерфейсах, акумулюється і як наслідок проявляє себе у вигляді стовпчикового розташування острівців, що спостерігалось для InAs/GaAs [20]. В цілому критична товщина росту Странскі-Крастанова для другого шару менша в порівнянні із першим. Ця різниця спричинена впливом локальних напруг, що проростають від прихованих КТ [28-30]. Модуляція поверхневих напруг також призводить до періодичного впорядкування КТ при певних умовах росту, що спостерігалось експериментально на АСМ та трансмісійній електронній мікроскопії (ТЕМ) для SiGe/Si НГ [31]. Збільшення кількості періодів призводить до того, що масиви острівців стають більш періодичними, середні розміри КТ збільшуються, а їх дисперсія – зменшується. Терзоф [32] дав просте теоретичне пояснення цього ефекту, що базується на припущенні, що КТ зароджуються на поверхні росту в локальних мінімумах хімічного потенціалу адатомів. В результаті пружної ізотропності локальні мінімуми потенціалу знаходяться прямо над прихованим острівцем.

В роботах [33-36] спостерігалось похиле вилаштовування острівців в надгратці. Таке впорядкування можна пояснити пружною анізотропією кристалічної гратки основного матеріалу, що оточує приховані КТ. Виходячи з цього, хімічний потенціал мігруючих по поверхні адатомів може володіти декількома локальними мінімумами, для яких можливе зародження острівця. Прихований острівець є джерелом напруг, що впливає на густину пружної енергії поверхні. В залежності від пружної анізотропії кристалічної матриці та орієнтації поверхні можливі різні картини розподілу густини енергії. Мінімуми енергії розташовуються в основному вздовж пружно м'яких напрямків. Так на (001) поверхні кристалів цинкової обманки в залежності від величини пружної анізотропії знаходиться або чотири, або один локальний мінімум хімічного потенціалу. Кінцеве розташування КТ, крім того, залежить і від їх середнього розміру. Якщо мінімуми глибокі і відстань між ними більша за розміри точок, то прихована КТ індукує появу чотирьох КТ в наступному шарі. В періодичній НГ така ситуація призводить до утворення центрованої тетрагональної комірки з КТ. Якщо ж мінімуми не дуже глибокі і відстань між ними менша за розміри точок, то мігруючі адатоми не "відчувають" різницю між мінімумами, тобто він тільки один. В такому випадку ми отримаємо строго вертикальну кореляцію КТ з гіршою латеральною впорядкованістю, яка в основному задається максимумами хімічного потенціалу в пружно жорстких напрямках. Така ситуація характерна для надграток SiGe/Si на Si(001) та InAs на GaAs(001), в яких пружна анізотропія відносно мала.

Таким чином, ми спостерігаємо очевидні переваги механізмів самоорганізації в напівпровідниках A<sub>3</sub>B<sub>5</sub> в порівнянні, наприклад, з тими ж методами літографії [37,38], які вимагають більшої кількості технологічних етапів і схильні до індукування дефектів в КТ.

#### 1.2. Вплив ростових умов на впорядкування квантових точок

Властивості багатошарових структур, а особливо структурні, суттєво залежать від умов росту, кількості та складу осаджуваного матеріалу. Зазвичай при вирощуванні надграток типу InGaAs/GaAs методом молекулярно-променевої епітаксії температура підкладки вибирається в межах 400–500 °C. Такий вибір обумовлений різким збільшенням концентрації точкових дефектів при низьких температурах росту та розмиттям інтерфейсів при високих температурах внаслідок процесів сегрегації та дифузії індію [39]. В [40] автори досліджували 35–періодні НГ InGaAs/GaAs, вирощені при 480 °C та 520 °C. В першому випадку формувались зразки з багатьма квантовими ямами, а в другому – в шарах відбувалось зародження КТ. Інтерес дослідників також викликав ріст InAs-GaAs надграток при дуже низьких температурах порядку 200 °C [41]. Незважаючи на високу концентрацію дефектів, зумовлених наявністю надлишку миш'яку, надгратки володіли достатньо високою кристалічною досконалістю. Високотемпературний відпал, який супроводжувався утворенням кластерів арсену та дифузією індію, призвів до значних структурних перетворень в матриці GaAs та на інтерфейсах, а також до розмиття картин Х-променевої дифракції.

В роботі [42] було показано, що суттєве збільшення потоку арсену при осадженні призводить до зменшення характерного розміру КТ та появи мезоскопічних InAs кластерів з дислокаціями. При зменшенні потоку арсену утворення дислокацій не відбувається, але в той же час подавляється ріст тривимірних острівців. На зміни морфології впливає також і переривання росту, яке в залежності від часу затримки дає можливість острівцям з осадженого матеріалу досягати певних оптимальних розмірів (для InAs порядка 140 Å).

Морфологія осаджуваного шару суттєво залежить від кінетики росту. Так, при низькій температурі підкладинки поверхнева дифузія подавлена і тому дуже ймовірним є утворення дислокацій невідповідності [43]. В роботах [44-46] теоретично та експериментально досліджувалось умови рівноважної конфігурації дислокацій в острівцях. Більшість з них утворюються на інтерфейсі точка-шар з тенденцію до сегрегації дислокацій з різними векторами Бюргерса.

Суттєвий вплив на 2D-3D перехід та мофологію КТ має температурний відпал під час росту. Так в роботі [47] вивчалися особливості одношарової In-GaAs/GaAs структури в залежності від температури та часу відпалу. Була показана залежність зміни розмірів та форми КТ при зміні температури відпалу та виявлено впорядкування утворених острівців в ланцюги КТ вздовж кристалографічного напрямку [1-10]. Цей ефект пояснювався різними значеннями коефіцієнтів поверхневої дифузії адатомів вздовж напрямків [1-10] та [110]. Аналогічні ефекти спостерігались також і в роботах [48-49]. Переважна більшість робіт, які опубліковані в останні роки за даною тематикою присвячено оптичним дослідженням впливу швидкого температурного відпалу, а от питання особливостей структурної перебудови в багатошарових структурах з КТ та квантовими нитками (КН) і досі залишається відкритим.

Ступінь вертикального впорядкування КТ в InGaAs/GaAs структурах залежить від товщини розділяючого шару, яка також впливає і на оптичні властивості [50]. Зменшення товщини розділяючого шару призводить до зміщення піку фотолюмінесценції в "синю" область внаслідок деформаційно-стимульованого процесу інтердифузії індію та галію. Однак, підвищення швидкості росту сильно подавляє цей процес і робить такі структури дуже привабливими для їх використання в якості активного середовища у високоякісних 1.3 мкм лазерів.

Гарний системний підхід до вивчення властивостей InGaAs/GaAs КТ був реалізований в роботі [51]. Авторами було проаналізовано вплив усіх релевантних ростових параметрів на формування InAs КТ при молекулярно-пучковій епітаксії (МПЕ). В кінцевому випадку вони хотіли отримати КТ з фотолюмінесценцією в діапазоні 1 еВ. Вивчався вплив кількості осадженого матеріалу, температури росту (від 485-535 °С), співвідношення тиску As:Ga (від 9:1 до 130:1), різних молекулярних потоків арсену (As<sub>2</sub> та As<sub>4</sub>), швидкості росту під час осадження InAs (0,0056-0,09 МШ/с) та часу переривання росту перед напиленням прикриваючого шару (2-180 с). Перехід режиму росту від 2D до 3D спостерігався починаючи з осаджених 1.8 МШ InAs. При збільшенні тиску арсену відбувалося зменшення густини КТ та збільшення їх розмірів. В зоні великих тисків [42] розмір КТ зменшується із підвищенням тиску арсену. Загалом ж, як відмічають автори, в літературі існують великі розбіжності щодо пояснення впливу потоку As. Вони пов'язують цей факт з тим, що даний ефект є інструментально залежним, тому порівняльний аналіз можна проводити тільки на якісному рівні. Зниження швидкості росту матеріалу дає можливість для утворення однорідних КТ великих розмірів, адже при малих швидкостях система має час для досягнення умов термодинамічної рівноваги. Аналогічного ефекту збільшення розмірів КТ можна також досягти підвищенням температури підкладки та часу переривання росту. Однак, для вибраних інтервалів переривання росту автори не змогли досягти однорідного розподілу острівців по розмірам. Крім того, для великих значень цього параметра спостерігалось утворення дислокацій в КТ. Таким чином для поставлених задач були отримані наступні оптимальні параметри росту: низька швидкість росту 0,0056 МШ/с, температура підкладки в межах 500-510 °C, кількість осаджуваного InAs 2.4 МШ. ТЕМ показав, що утворюються КТ з високим ступенем однорідності по розмірам та великою концентрацією індію.

Багатошарові структури з самовпорядкованими квантовими нитками представляють не менший практичний інтерес [52]. Однак, незважаючи на те, що (In,Ga)As/GaAs (100) системи є широко вивченими, залишається проблематичним

отримання гарної дротоподібної структури методами самоорганізації. Проте, в деяких роботах [53] було досягнуто певних успіхів шляхом поєднання формування наноострівців при підвищених температурах з відпалом після росту кожного шару, а також шляхом переривання росту GaAs розділяючого шару на початкових етапах його формування. Під час температурного відпалу КТ, внаслідок анізотропії поверхневої міграції, витягуються вздовж напрямку [1-10] та з'єднуються між собою [54]. Цей процес продовжується від шару до шару і як наслідок формуються квантові дроти довжиною в декілька мкм і орієнтовані в напрямку [1-10]. Такий механізм сильно пов'язаний з величиною вертикальної та латеральної модуляцій полів напруг і здійснюється шляхом їх релаксації. По-перше, необхідно сформувати структуру з сильно напруженими КТ. По-друге, вздовж напрямку дротів неможлива пружна релаксація напруг. Тому, як прекурсор для утворення квантових дротів використовують десорбцію індію під час пошарового відпалу. З іншого боку, релаксація напруг не повинна бути достатньо великою, щоб утворювані КТ вертикально корелювали і не формувались довільним чином. З ростом кількості періодів (більше десяти) протяжні мікронні квантові дроти виявляють гарну латеральну періодичність порядку 100 нм. На думку авторів саме квантові дроти, утворені таким чином, являють собою шаблон для утворення на них впорядкованої системи ланцюгів КТ [55].

Ступенем впорядкування КТ також можна керувати вибором підкладки з різними параметрами, наприклад, орієнтацією поверхні [56]. Так, для поверхонь GaAs (001) більш характерний ріст дротоподібних структур мікронної довжини, в той час як для високоіндексних GaAs (*n*11)В (де *n* змінюється) — ріст ансамблю InGaAs КТ. Оскільки формування острівців супроводжується перерозподілом напруг, то в шарах можуть утворюватися небажані дефекти невідповідності. Тому підкладку слід вибирати виходячи з певного оптимуму. Найкраще для цього підходить GaAs (511)В, що забезпечує гарне латеральне впорядкування КТ і як наслідок – вузький та інтенсивний пік фотолюмінесценції.

Змінюючи умови росту можна для поверхні GaAs (001) отримати не тільки ланцюги КТ, але й іншу їх просторову конфігурацію. Наприклад, в роботі [57], вказують на можливість формування впорядкованої структури, вирощеної в потоці As<sub>4</sub>, у вигляді гексагона. Автори вказують на наявність дальнього порядку в розташуванні КТ як в [011], так і в {001} напрямках.

#### 1.3. Вплив зовнішніх чинників на властивості багатошарових структур

Х-дифракційне вивчення впливу  $\gamma$ -випромінювання на структурні зміни в багатошарових структурах на прикладі з'єднань AlGaAs/InGaAs/GaAs [58] показало, що при опроміненні дозою ~  $3 \cdot 10^7$  рад починається руйнування шару GaAs, який знаходиться на поверхні структури. В той же час суттєвих структурних змін в шарі InGaAs не відбувається. При збільшення дози до  $10^8$  рад планарність поверхні значно погіршується, а шорсткість досягає декількох нанометрів. Крім того в приповерхневому шарі відбувається утворення дислокацій.

Недавня робота по вивченню впливу протонного випромінювання та подальшого температурного відпалу [59] показала можливість покращення характеристик КТ (розмір, склад та розподіл напруг) в структурі за рахунок індукції Іп/Ga взаємодифузії.

Можливість структурного 2D–3D переходу для шарів докритичної товщини була показана в роботі [60] при використанні температурного відпалу щойно вирощених зразків. Нове значення критичної товщини, при якій відбувались морфологічні перетворення 2D шару, залежало від умов його росту.

## 1.4. Роль та місце високороздільної Х-променевої дифрактометрії в методах характеризації багатошарових структур

Існує багато методик вивчення наноструктур, проте кожна з них має свої переваги та обмеження. Саме тому для повної структурної характеризації зазвичай потрібна їх комбінація. Так, у випадку неприкритого верхнього шару на питання величини та форми острівців може дати відповідь АСМ чи скануюча тунельна мікроскопія (СТМ). Кроссекційна СТМ та ПЕМ є потужним інструментом для вивчення прихованих острівців. Високороздільна Х-променева дифрактометрія (ВРХД) та фотолюмінесценція також дають змогу визначати розмір та форму нанооб'єктів. Однак, у АСМ, СТМ та ПЕМ вища точність. З іншого боку, Х-променева дифракція та фотолюмінесценція дають аналіз одразу багатьох КТ. Крім того, Х-променева дифрактометрія є дуже потужним засобом вимірювання полів деформацій.

ВРХД є єдиним методом неруйнівного дослідження надграток та впорядкування КТ в них. Вона дозволяє отримати такі параметри надграток як товщина, склад, напруги в окремих шарах та ін [61,62]. Однак, ріст кількості параметрів НГ, які треба визначити, стає однією з основних проблем структурного аналізу. Деякі з них можна отримати безпосередньо з кривих дифракційного відбиття, інші — тільки після симуляції спектрів та процедури фітування. В більшості випадків при дослідженні явищ самоорганізації в надгратках з квантовими точками не обійтись без зйомки мап оберненого простору.

Цікаво, що і в електронній мікроскопії атомарної роздільної здатності виникли ті ж проблеми, оскільки контраст на поперечних перерізах структур з КТ в основному деформаційний. Для виконання аналізу задається початковий розподіл атомів в перерізі, вирішується задача про механічну рівновагу і про проходження електрона крізь переріз. Після цього картина порівнюється з експериментальною, і варіюванням параметрів вихідної моделі ітераційно знаходиться розв'язок.

На відміну від АСМ, яка дає інформацію тільки про морфологію поверхні, та ТЕМ, високороздільна Х-променева дифрактометрія не є локальним методом. Тобто отриманий сигнал дифрагованого Х-променя є інтегральним від опроміненої області зразка. Оскільки, розмір цієї області набагато більший за середню відстань між острівцями в структурі, то таке усереднення дає інформацію про весь статистичний ансамбль можливих просторових конфігурацій КТ. Якщо розташування острівців в зразку корельоване, то в розподілі розсіяної інтенсивності Х-променів в оберненому просторі проявляються періодично розміщені дифракційні максимуми. Висновок про ступінь впорядкування можна зробити з ширини цих піків.

Перші дослідження в цій області почалися з роботи [63], в якій автори помітили латеральні максимуми, що супроводжували когеретні сателіти від вертикальної структури SiGe/Si надгратки. Схожі дослідження проводились для InAs/GaAs надграток [64]. З дифракційних даних, отриманих на лабораторному Х-променевому дифрактометрі, були отримані усереднені властивості КТ. Було показано, що дані вимірювання є дуже чутливими до напруг всередині острівців та поза ними, в кристалічній матриці основного матеріалу. З мап оберненого простору, отриманих в синхротронному випромінюванні, були отримані композиційні профілі одиночних SiGe острівців на Si(001) [65,66]. В цих роботах на основі припущень, отриманих з ACM та TEM даних, методом скінченних елементів були розраховані деформаційні профілі. На основі кінематичної теорії дифракції та отриманих профілів було розраховано мапи розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі для даних зразків.

Зйомка мап оберненого простору дає пряму інформацію про двовимірне чи тривимірне впорядкування острівців. Такий підхід був застосований для дослідження багатоперіодних PbSe/PbEuTe надграток [67-69,36]. З ширини дифракційних максимумів та їх розташування в залежності від азимутального положення зразка були отримані дані про латеральне та вертикальне впорядкування PbSe KT. Високий ступінь впорядкування точок в таких структурах, яке починається вже в першому PbSe шарі, спричинений значною анізотропією пружних модулів розділяючого шару і ростом острівців вздовж м'яких пружних напрямків. Виявилось, що острівці формують тригональну комірку з KT у вузлах, причому параметром такої "гратки" можна керувати, змінюючи період HГ. Крім того, автори показали, що одночасного впорядкування у обох напрямках (як вертикальному, так і латеральному) можна досягти тільки при певних значеннях періоду надгратки.

Тією ж групою авторів методами АСМ та ВРХД вивчалось впорядкування КТ у SiGe/Si структурах [69]. Вони показали, що використання масиву сходинок (step bunching) при рості на віцинальних (001) поверхнях підкладки зменшує флуктуацію латеральних відстаней між точками та й в цілому покращує характерні параметри багатошарової структури. Також відомі спроби отримання латерального впорядкування технологічно важливих Ge острівців шляхом використання полів напруг від сітки дислокацій невідповідності для контролю зародження точок [70]. Однак, така сітка нерегулярна і дефектна, що не є сприятливим для практичного застосування.

В роботі [71] методами GID та зйомки мап оберненого простору було пока-

зано, що компонентний розподіл всередині КТ не є однорідним. Автори показали, що вміст галію від основи точки до її вершини змінюється від 25% до 8%. Крім того така геометрія дифракції дозволяє окрім композиційного складу отримати також інформацію про розподіл напруг всередині точки шляхом аналізу розсіяння Хпроменів в оберненому просторі від різних ізонапружених областей всередині КТ [72,73]. На відміну від геометрії ковзного падіння звичайна Х-променева дифракція дає тільки усереднену інформацію про напруги в точці.

Застосування методу картографування оберненого простору при вивченні дротоподібних структур дозволяє отримати повну інформацію про такі їх геометричні та структурні параметри: висота, ширина, нахил стінок та період, а також напруги та кристалічну досконалість [74].

Останнім часом зріс інтерес до довгохвильових лазерних діодів (1,3-1,55 мкм) [75]. У багатьох роботах [76-78] було продемонстровано, що хорошою основою для отримання таких діодів є, вирощені молекулярно-променевою епітаксією багатошарові структури з квантовими ямами (КЯ) типу InGaAs, серед яких особливо перспективний InGaAsN/GaAs. Проте із-за великої межі розчинності цих матеріалів залишаються поки труднощі при отриманні випромінювання на довжинах хвиль, більших 1,3 мкм. До того ж, величезні труднощі представляє отримання сполук InGaAsN і GaNAs хорошої якості. Їх структурна досконалість досить швидко погіршується із збільшенням вмісту N, який приводить до швидкого збільшення локальної деформації і кластеризації в деформованих шарах [79]. Для поліпшення структурних характеристик КЯ квантової ями в процесі зростання використовують Sb як поверхнево-активної речовини [80].

Слід зазначити, що в плівках напівпровідникових сполук III-V має місце спонтанна поперечна модуляція складу, яка приводить до сильних змін оптоелектричних властивостей напівпровідникових матеріалів. Серед спонтанно впорядкованих наноструктур, характерних для сполук InGaNAs при високій концентрації азоту і індію особливо можна виділити як утворення неоднорідностей складу по індію і азоту, так і утворення періодичних структур плоских доменів [81]. У всіх таких системах сусідні домени розрізняються постійною кристалічної гратки і структурою

поверхні, а, отже, доменні межі є джерелами далекодіючих полів пружних деформацій.

Ці чинники ускладнюють, а деколи роблять неможливою інтерпретацію і аналіз рентгенівських дифракційних спектрів, одержаних від цих структур. У багатьох роботах [82-84] досліджувалися речовини подібного типу. Так в роботі [85] при дослідженні комплексної лазерної структури InGaAs/GaAs автори спостерігали незвичайний дифракційний ефект осцилюючого розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі, відомий як "wiggles". Подібний ефект також спостерігався і для інших структур (SiGe, AlGaAs), як багатошарових, так і одношарових. Проте спроби інтерпретувати ці спектри і одержати достовірні структурні параметри, не увінчалися успіхом.

Описані вище структурні особливості напівпровідникових матеріалів, як вирощених, так і підданих різним зовнішнім діям, а також їх вплив на дифракцію Хпроменів приводять до необхідності застосування для досліджень комплексу високороздільних методів. Проте, навіть не дивлячись на це, проблема пояснення дифракції від такого роду структур все ще далека від завершення.

#### Висновки та постановка задачі

Із проведеного розгляду очевидно, що обернена задача визначення складу і пружної деформації в квантових точках по Х-дифракційному спектру не має простого вирішення. Для кількісного аналізу доводиться застосовувати деякі модельні уявлення і уточнювати обмежений набір параметрів моделі. Основна трудність Хдифракційного аналізу самосформованих когерентних острівців – низька інтенсивність когерентного розсіяння на острівцях. Малі розміри острівців приводять до дуже широких дифракційних піків. Труднощі створює також неоднорідність складу острівця по його об'єму і неоднорідність форми і складу острівців в масиві. В Хдифракційному експерименті бере участь велике число острівців, тому інформація завжди усереднена по масиву. Найбільш інформативні Х-дифракційні експерименти вдається провести на синхротронних джерелах. Зокрема, найбільш достовірні Хдифракційні дані про розподіл складу усередненого по масиву острівця вдалось отримати, використовуючи дифракцію на двох довжинах хвиль – до і після Кстрибка поглинання аналізованого елемента, Ge в Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>-острівцях.

Варто відмітити, що в 90-і роки дискусійним було питання про утворення твердого розчину в КТ, оскільки температури підкладки дуже низькі для проходження звичайної об'ємної дифузії, а осаджується чиста речовина Ge на Si, або InAs на GaAs. Для оперативного аналізу актуальним є також питання про похибки аналізу острівців в наближенні плоского шару. Складним і не до кінця осмисленим і зараз залишається питання про дифракцію на періодичній багатошаровій структурі з КТ. Наприклад, чи входить в "усереднену гратку" острівець, а значить, чи можна за сателітними піками отримати дані про острівці.

Отже, метою даної дисертаційної роботи є подальший розвиток методик дифракційного аналізу складних структур для визначення фізичних механізмів відповідальних за процеси релаксації деформацій, динаміку зміни просторового впорядкування масивів квантових точок в багатошарових наноструктурах і встановлення оптимальних режимів росту і термообробок, які забезпечують отримання найбільш однорідного впорядкування квантових точок заданого розміру, форми та складу.

## РОЗДІЛ 2. **Х-ПРОМЕНЕВА ДИФРАКТОМЕТРІЯ** БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР

#### Вступ

Основною перевагою Х-дифракційних методів є висока роздільна здатність в оберненому просторі. Тому високороздільна Х-променева дифрактометрія успішно використовується для неруйнівного та експресного вивчення епітаксійних структур і забезпечує точною інформацією про їх деформацію, кристалічну якість та інші структурні характеристики [86,87].

Х-промені слабо взаємодіють з матерією, а виходячи з того, що доля наноструктур, які припадають на глибину проникнення випромінювання, дуже мала, то виникає проблема в аналізі розсіяння від них в порівнянні з великим сигналом від матеріалу підкладки. Тому, для досліджень часто застосовують поверхнево чутливі методи або високопотужні джерела синхротронного випромінювання. Оскільки розмір пучка, який падає на зразок зазвичай складає декілька квадратних міліметрів, то розсіяне випромінювання статистично усереднюється по доволі великому ансамблю нанооб''ктів. Однак, ми можемо отримати кількісні дані тільки в тому випадку, коли розсіяння відбувається переважно на нанооб'єктах одного типу. В протилежному випадку, коли скажімо в нас є КТ різних розмірів та форми, аналіз отриманих експериментальних даних сильно ускладнюється.

Виходячи з того, що досліджувані об'єкти достатньо малі, дифракцію від них можна описувати простою кінематичною теорією. В цьому велика перевага Хпроменевого розсіяння в порівнянні з електронною дифракцією. Сильна взаємодія електронів з матерією призводить до багатохвильових ефектів і в цьому випадку потрібно застосовувати складну динамічну теорію. У випадку ж кінематичного розсіяння амплітуда розсіяної хвилі просто пропорційна Фур'є трансформанті електронної густини. Її періодична частина розсіює у тонкі бреггівські піки. На електронну густину впливають як латеральна форма зразків, так і поле зміщення атомів з положення рівноваги  $u(\mathbf{r})$  в зразку, тобто поля деформацій в шарах. Останній фактор визначається його добутком  $Hu(\mathbf{r})$  на дифракційний вектор **H**. Це дозволяє відділити вплив форми і напруг на розподіл дифрагованої інтенсивності на мапах оберненого простору.

Усі неперіодичні відхилення від структури ідеального кристалу дають свій внесок у дифузне розсіяння в околі бреггівського піка. Незалежно від розглядуваної теорії в дифузно розсіяній інтенсивності міститься інформація про розмір, форму, просторову кореляцію, локальний хімічний склад та поля напруг у наноструктурах. Розділення такої "суміші параметрів" є доволі складною задачею. Тому постає необхідність об'єднання декількох методик розсіяння Х-променів з різною чутливістю до цих структурних властивостей. Більше того, оскільки в оберненому просторі втрачається інформація про фазу, то розсіяну інтенсивність не можна прямо транслювати в прямий простір і одразу отримати усю необхідну інформацію. Тому в межах вибраної дифракційної теорії застосовують комп'ютерне моделювання процесів розсіяння, що базується на певній вибраній моделі в прямому просторі. Послідовними ітераціями модель переглядається до задовільного узгодження теорії та експерименту.

Дослідження Х-променевого розсіяння від малих об'єктів накладає строгі умови на параметри експерименту. В рамках даної роботи усі дослідження проводились ангулярно-дисперсійними методами, тобто шляхом перебору напрямків падаючого та розсіяного променів та реєстрації розсіяної інтенсивності. Вимоги до експерименту можна охарактеризувати так:

- Основна частина розсіяного дифузного випромінювання зосереджується в околі вузлів оберненої гратки. Тому слід використовувати високу кутову роздільну здатність та монохроматизоване Х-випромінювання.
- Оптимальна довжина Х-променевої хвилі при дослідженні нанооб'єктів складає 1-2 Å.
- Так як глибина проникнення Х-променів в напівпровідниковий матеріал складає декілька мікрон, то доля сигналу отриманого від нанорозмірних структур досить мала. Більше того, дифузно розсіяна інтенсивність широко розподіляється по оберненому простору. Тому слід використовувати дуже потужне та когерентне джерело Х-променів.

Форма та поля напруг нанооб'єктів призводять до складного (тривимірного) розподілу розсіяної інтенсивності Х-променів в оберненому просторі. Тому зазвичай недостатньо зйомки одних тільки кривих дифракційного відбиття, що інтегрують інтенсивність з частини оберненого простору і не містять усієї необхідної інформації. Потрібно мати хоча б декілька двовимірних перерізів розподілу інтенсивності (мап оберненого простору).

#### 2.1. Трьохвісна Х-променева дифрактометрія

Двохвісна Х-променева дифрактометрія дозволяє вимірювати інтенсивність дифракції в залежності від одного параметра — кута падіння пучка на зразок. Так як в такій схемі лічильник з широко відкритим вікном фіксує розсіяну інтенсивність по всіх кутах в межах апертури детектора, то вона є інтегральною. В принципі і в цьому випадку можна проводити вимірювання, якщо перед детектором встановити тонку щілину. Такий підхід широко використовується в класичному структурному та дифракційному аналізі порушених приповерхневих шарів та дифузного розсіяння. Однак, низька роздільна здатність, зумовлена обмеженням самої щілини (≈ 30 кут. сек. та вище) та геометрією пучка (щілинний аналізатор аналізує не геометричний, а просторовий розподіл інтенсивності) робить такі схеми незастосовними для дослідження дифузного розсіяння від нанооб'єктів в тонкому приповерхневому шарі.

В трьохвісній схемі, з метою обмеження приймаючої апертури детектора по куту, перед ним поміщають кристал-аналізатор, який може налаштовуватись на різні напрямки відбиття. Це дає можливість вимірювати дифузне розсіяння в залежності від двох кутових параметрів: кутів падіння та відбиття, та розділити вплив деформацій та розорієнтацій на результати вимірювань. В термінах оберненої гратки перетин в оберненому просторі кутових розходжень монохроматора та аналізатора, кожен з яких може складатись з декількох кристалів, визначає малий об'єм оберненого простору, який реєструється детектором. Це дає змогу отримати двовимірні мапи розподілу інтенсивності в оберненому просторі, що містять детальну інформацію про тонкі шари та стан поверхні зразка.

Яким же чином можна провести різницю між орієнтацією та дилатацією? Нехай у нас є зразок, який містить області, розорієнтовані по відношенню одна до одної, та деформовані області з різними параметрами граток. Як відомо із закону Вульфа-Брегга, кут розсіяння визначає міжплощинну віддаль зразка, який вивчається. Коли ми повертаємо зразок, то області з різною орієнтацією будуть послідовно задовільняти умові дифракції. Області з іншою міжплощинною віддалю не дадуть вкладу в розсіяння при повороті тільки самого зразка. Тепер нехай зразок та аналізатор обертаються синхронно, а саме – аналізатор рухається з швидкістю вдвічі більшою, ніж зразок (т.зв.  $\omega$ -2 $\theta$  сканування) і обидва рухаються з певного нульового положення (за нульове положення візьмемо виведену у відбивне положення область зразка з параметром d). В цьому випадку жодна з областей з тим же параметром гратки, але орієнтована в іншому напрямку, не дасть розсіяння, що попадає в детектор. Однак, область з іншим значенням міжплощинної віддалі d' може попасти в положення, яке задовільнить умові дифракції.

Широке застосування високороздільної трьохвісної дифрактометрії почалося ще з роботи Іїди та Кори [88], в якій вони розглядали особливості отримання дифракційної картини, можливість поділу дифузного і когерентного розсіяння, ввели поняття псевдопіків. Отже, в трьохвісній схемі Х-випромінювання, яке йде від фокуса трубки, послідовно дифрагує від кристала-монохроматора, кристала-зразка, кристала-аналізатора та фіксується детектором з широким вікном. За нульове положення береться таке, при якому всі три кристала знаходяться в центрі інтерференційної області вибраного відбиття, тобто в брегівському положенні. Зазвичай на практиці монохроматор є нерухомим і закріпленим в максимумі падаючого на нього випромінювання. Зразок та аналізатор можуть обертатися навколо брегівського положення з відповідними кутами відхилення  $\alpha$  та  $\eta$ . Результати таких вимірювань зручно розглядати з побудови Евальда в оберненому просторі [89]. Нехай площина дифракції є перерізом оберненого простору площиною розсіяння, в якій лежать напрямки падаючого на зразок пучка  $k_{\theta}$ , відбитого  $k_h$  та нормаль до поверхні (компланарна геометрія дифракції). Згідно кінематичної теорії дифракції брегівське відбиття має місце, коли вектор дифракції

$$\vec{Q} = \vec{k}_h - \vec{k}_0 \tag{2.1}$$

співпадає з вектором оберненої гратки H(|H| = 1/d), де d – міжплощинна віддаль), тобто коли кінець вектора H знаходиться на сфері Евальда (рис. 2.1а). Будемо вважати це положення нульовим положенням зразка ( $\alpha = 0$ ). Центральний напрямок падаючого пучка  $k_0$  закріплено, оскільки монохроматор нерухомий. Нульове положення аналізатора ( $\eta = 0$ ) визначається тим, що промінь  $k_h = k_0 + H$  падає на нього під брегівським кутом.



Рис. 2.1 а) Побудова Евальда; б) можливі лінії сканування оберненого простору.

Введемо нову систему координат з центром у вузлі H та двома осями  $q_H$  та  $q_a$ , відповідно паралельній та перпендикулярній вектору оберненої гратки (рис. 2.16). Кінець вектора дифракції Q визначає точку спостереження в оберненому просторі, яка при використанні монохроматизованого випромінювання завжди знаходиться на сфері Евальда. При нульовому положенні усіх трьох кристалів ця точка знаходиться у вузлі оберненої гратки *H*. При довільних напрямках  $k_{\theta}$ ,  $k_{h}$  (поблизу бреггівських напрямків) її положення в площині розсіяння можна задати деяким вектором q з координатами  $q_{H}$  і  $q_{\alpha}$ : q = Q - H. Для кристала довільної форми та досконалості, а особливо багатошарової квантової структури, дифрагована інтенсивність не локалізована у вузлі *H*, а певним чином розподілена навколо нього. Тобто розсіяна інтенсивність є функцією вектора q. Таким чином, змінюючи положення точки спостереження шляхом зміни значень кутів повороту зразка та аналізатора, можна побудувати контури рівної інтенсивності (ізодифузні лінії), що дають змогу вивчати симетрію деформаційних полів дефектів, KT, квантових дротів [90,91].

При повороті аналізатора ми виводимо у положення відбиття хвилі з різним значенням  $k_H$ , тобто точка спостереження рухається по сфері Евальда, яку в межах малих відхилень можна замінити дотичною, яка складає кут  $\theta_B$  з віссю  $q_H$ . При повороті на кут  $\eta$  точка Q зміститься на  $q_\eta = k \cdot \eta$ . При повороті зразка ми відводимо вузол оберненої гратки зі сфери Евальда або, оскільки система координат закріплена в цьому вузлі, повертаємо сферу відносно нього. В такому випадку точка спостереження зміщується по нормалі до вектора H, тобто по осі  $q_a$ . Довжина відрізку зміщення рівна  $q_a = Ha = 2ka \sin \theta_B$ . Вісь  $q_a$  є геометричне місце точок, для яких строго закріплено напрямок дифрагованої хвилі, тобто залишається постійним кут розсіяння  $2\theta$ .

Координати точки спостереження в системі (*q*<sub>*a*</sub>, *q*<sub>*H*</sub>) пов'язані з кутами відхилення зразка та аналізатора наступними співвідношеннями:

$$q_H = -k\eta \cos\theta_B, \tag{2.2}$$

$$q_{\alpha} = k \sin \theta_B (2\alpha + \eta). \tag{2.3}$$

Фактично інтенсивність, яка фіксується в точці *q* в площині розсіяння, являє собою інтеграл по деякій області оберненого простору, яка визначається роздільною здатністю монохроматора та аналізатора, тобто шириною їх інтерференційних областей.

На відміну від двокристальних кривих, криві дифракційного відбиття на тривісному дифрактометрі можна отримати декількома різними способами, які називаються модами сканування:

- $\omega$ -*сканування*. Виконується обертання зразка при нерухомому положенні аналізатора. Точка спостереження при цьому зміщується разом зі сферою Евальда по прямим  $q_H = -k\eta_0 \cos\theta_B = const.$
- 2 $\theta$ -сканування. Обертання аналізатора при незмінному положенні зразка ( $\alpha = const$ ). Переріз площини розсіяння відбувається по прямим, паралельним осі  $q_{\eta}$ :  $q_{H} = -q_{\alpha} \text{ctg}\theta_{B} + q_{H0}$ , де  $q_{H0} = H\alpha_{0} \text{ctg}\theta_{B}$ .
- ω-2θ-сканування. Зразок та аналізатор обертаються з співвідношенням швидкостей 1:2, тобто η = -2(α-α<sub>0</sub>), де α<sub>0</sub> початковий кут розвороту зразка відносно брегівського положення. Звідси випливає, що точка спостереження зміщується вздовж прямих, паралельних вектору оберненої гратки q<sub>α</sub> = q<sub>α0</sub> = const.

Криві, зняті на тривісному дифрактометрі, мають складну структуру. Залежить вона не тільки від характеру розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі. Так на кривих дифракційного відбиття можлива поява додаткових максимумів, що викликані "хвостами" відбивної здатності монохроматора та аналізатора. Ці максимуми називають "псевдопіками", враховуючи їх інструментальне походження. Якщо в розподілі інтенсивності розсіяння від зразка є декілька максимумів (наприклад, для епітаксійних систем), то відповідно росте і кількість псевдопіків. За рахунок цього криві дифракційного відбиття можуть стати досить складними для аналізу.

Небажану інтенсивність від псевдопіків можна суттєво зменшити. Для цього в сучасному приладобудуванні для дифракційних вимірювань в якості монохроматора та аналізатора використовують монокристали з прорізним каналом для багатократного відбиття Х-випромінювання. Вплив таких кристалів на формування картини дифракції показано на рис. 2.2, на якому зображено розрахунок [92] розподілу інтенсивності поблизу вузла оберненої гратки (111) для СиК<sub> $\alpha$ </sub>-відбиття в режимах 1-P-1, 3-P-1, 4-P-3 та 5-P-5. Цифри відповідають за кількість відбиттів від монохроматора та аналізатора відповідно, а "Р" відповідає за ідеальний зразок. В розрахунку картин був опущений вплив термічного дифузного розсіяння.



Рис. 2.2 Розрахунок розподілу інтенсивності поблизу вузла оберненої гратки (111) для СиК<sub>α</sub>-відбиття в режимах 1-P-1, 3-P-1, 4-P-3 та 5-P-5.

В усіх випадках в напрямку  $q_z$  видно чіткий стрижень, що відповідає основному піку. Два інших чіткі стрижні (псевдопіки) спостерігаються для 1-Р-1 під кутами  $\pm \theta_B$ до основного. Вони спричинені відбиттям від монохроматора та аналізатора відповідно. Використання багатократного відбиття від цих кристалів, особливо 5-Р-5, суттєво зменшують інтенсивність псевдопіків. В такому випадку контури рівної інтенсивності поблизу вузла оберненої гратки зосереджені біля вузького основного максимуму, витягнутого вздовж  $q_z$  за рахунок динамічної дифракції від зразка. Ширина цього максимуму зумовлена вихідною розбіжністю відбиття монохроматора та вхідною – аналізатора. Варто також відмітити, що на відміну від дифузної інтенсивності цей максимум зміщений з вузла оберненої гратки на поправку на заломлення.

Таким чином зрозуміло, що слабке дифузне розсіяння від приповерхневих нанооб'єктів найкраще досліджувати поблизу вузла оберненої гратки та з максимальною кількістю відбиттів від монохроматора та аналізатора. Проте в такому випадку виникає необхідність у використанні високопотужних джерел Х-променів.

Двовимірну мапу розсіяння від зразка отримують шляхом реєстрації інтенсивності від набору незв'язаних положень зразка та аналізатора, які поєднуються таким чином, щоб утворювати сітку в оберненому просторі. Зручна стратегія вимірювання мап оберненого простору полягає в наступному. Виконується цикл сканувань, при якому зразок встановлюється під певним кутом, після чого виконується  $\omega$ -2 $\theta$  сканування. Після цього зразок встановлюють в наступне кутове положення і знову здійснюють  $\omega$ -2 $\theta$  сканування. Таким чином набирають дані по квадратній сітці в оберненому просторі. Потім відповідне програмне забезпечення конвертує дані в координати оберненого простору.

## 2.2. Застосування високороздільної Х-променевої дифрактометрії для дослідження багатошарових структур

#### 2.2.1. Напруги в епітаксійних шарах

Під час псевдоморфного росту епітаксійних структур на монокристалічних підкладках параметри граток шарів змінюються. Поява додаткових напруг впливає
на властивості цих структур і завданням Х-променевої дифрактометрії постає визначення цих напруг та їх впливу. Коли шар пружно деформується до його відповідності з підкладкою в *x* та *y* напрямках (в площині паралельній підкладці) з'являється *тетрагональна дисторсія* (рис. 2.3) і параметр гратки шару в напрямку *z* змінюється по закону Пуассона. В цьому випадку існує певний кут  $\Delta \varphi$  між [101] напрямками підкладки та плівки. Як видно з рисунка для тетрагональної дисторсії  $\Delta \varphi_1 = \Delta \varphi_2$ . У випадку анізотропного характеру розподілу напруг, наприклад як це може спостерігатись для In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs [93,94], дисторсія гратки може бути відмінною від тетрагональної (рис. 2.3*б*), що значно впливає на дифракційну картину. Нехтування цього факту може призвести до невірного трактування результатів експериментальних даних.



Рис. 2.3 Тетрагональна дисторсія осадженого шару з більшим параметром гратки.

i

Компоненти тензора деформацій задаються наступним чином:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0^S - a_0^L}{a_0^L} \tag{2.4}$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{a_z^L - a_0^L}{a_0^L} \text{ afo } \varepsilon_{zz} = -(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \frac{v}{1 - v}, \qquad (2.5)$$

де  $a^{s}_{0}$  – параметр гратки підкладки,  $a^{L}_{0}$  – власний параметр гратки шару,  $a^{L}_{z}$  – параметр гратки шару вздовж напрямку *z* внаслідок тетрагональної дисторсії, *v* – коефіцієнт Пуассона.

Слід відмітити, що Х-промені в симетричній геометрії дифракції чутливі тільки до *z*-вої компоненти напруг шару. У випадку частково релаксованої структури, наприклад, коли товщина шару перевищує критичне значення і з'являються дислокації невідповідності, параметри гратки шарів та підкладки вже не рівні між собою. Для отримання латеральних напруг слід використовувати асиметричні геометрії дифракції, в яких обидві компоненти напруг вносять вклад в процес розсіяння і формування дифракційної картини.

### 2.2.2. Дифракція від періодичних об'єктів

Для періодичних багатошарових структур усі вузли оберненої гратки (*hkl*) супроводжуються появою додаткових сателітних точок вздовж напрямку росту структури, іншими словами вздовж напрямку модуляції хімічного складу. Конструкція сфери Евальда для симетричного (002) рефлексу від типової надгратки зображена на рис. 2.4. Сателітні піки розташовуються вздовж вектора оберненої гратки  $H_{002}$ . За рахунок присутності розупорядкування, наприклад дислокацій невідповідності, ці піки розширюються в напрямку паралельному до поверхні. Витягнутість вздовж напрямку росту викликається кінцевою кількістю відбиваючих площин, що вносять вклад в дифракцію. Розширення та видовження сателітних максимумів можна виміряти шляхом правильного вибору скануючої моди.



Рис. 2.4 Побудова сфери Евальда для симетричного 002 рефлексу від типової надгратки.

Таким чином для надгратки з періодом D на дифракційній картині (рис. 2.5), окрім максимуму від підкладки S, спостерігається ряд послідовних піків вздовж  $q_z$ , позначених як  $SL_0$ ,  $SL_{\pm 1}$ ,  $SL_{\pm 2}$ , і т.д. Пік  $SL_0$  називається "нульовим" сателітом і відповідає за розсіяння від усередненої надгратки з певним середнім періодом, деформаційним станом та компонентним складом. В оберненому просторі відстань між сателітами вздовж напрямку росту обернено пропорційна періоду надгратки:  $\Delta q_z = 2\pi/D$ . Відстань між піком підкладки та нульовим сателітом  $SL_0$  визначається середньою невідповідністю параметрів гратки в надгратці:  $\Delta q_z = -h_z < \varepsilon_{zz} >$ .



Рис. 2.5. Схема дифракційної картини від надгратки в оберненому просторі.

Розглянемо одновимірну періодичну множину квантових дротів, утворену літографією і наступним реактивним іонним травленням цієї НГ [95]. Трансляційна група симетрії цієї структури містить у собі трансляційну симетрію звичайної кристалічної гратки, вертикальну періодичність НГ і горизонтальну періодичність дротової структури *L*. Всі ці елементи симетрії проявляють себе на мапах оберненого простору. Розглянемо мапу оберненого простору біля точки оберненої гратки Н. Вертикальна періодичність НГ викликає появу точок сателітів НГ SL<sub>m</sub>. Горизонтальна періодичність множини дротів викликає горизонтальні сателіти, і по аналогії з вертикальною періодичністю надгратки відстань між ними складає  $\Delta q_x = 2\pi/L$ , де L — період множини дротів. Розподіл інтенсивності складається при цьому з ряду максимумів в оберненому просторі та перебуває близько до точки оберненої гратки *H*. Положення цих піків можуть бути охарактеризовані двома індексами (*m*, *p*) (рис. 2.5*б*). Їх вертикальна ширина обернено пропорційна повній товщині НГ. Горизонтальна нирина максимумів буде визначатися освітленою областю зразка (в межах кінематичної теорії).

Така ситуація в оберненому просторі схожа на дифракцію від двовимірного

масиву точок в надгратці. Якщо латеральна картина не зовсім періодична, то ширина латеральних максимумів збільшується пропорційно середньоквадратичному відхиленню позицій точок/дротів. Для дротової і точкової структури відповідно до латеральної картини внутрішні напруження релаксують пружно [95]. Однак, оскільки латеральна структура вимагає ідеальної періодичності, результуючі поля напруг є також періодичними з тим же самим періодом і латеральними позиціями, а ширина латеральних максимумів інтенсивності не залежить від напруг [96]. Напруги змінюють тільки форму обвідної функції цих максимумів. У латеральному напрямі максимум обвідної функції зміщується від максимуму підкладки на величину  $-h_x < \varepsilon_{xx} >$ , де  $< \varepsilon_{xx} >$ — латеральна усереднена напруга по об'єму зразка. Якщо напруга в дротах однорідна, то розподіл інтенсивності вздовж  $q_z$  зміститься лише на  $-h_z < \varepsilon_{zz} >$  від максимуму підкладки. У випадку неоднорідної напруги цей розподіл інтенсивності деформований і тому можна визначити тільки усереднену напругу <*ε*<sub>zz</sub>>. У симетричній дифракції  $h_x = 0$  і латеральна обвідна функції розподілу інтенсивності є симетричною щодо максимуму підкладки. Це справедливо, якщо немає нахилів між площинами шару і підкладки. Практично, через пластичну релаксацію, яка виникає унаслідок формування дислокацій в шарі, має відбутися нахил оберненої ґратки надґраткової структури, що в свою чергу призводить до асиметричного профілю відносно  $q_z$ осі навіть у симетричних відбиттях.



Рис. 2.6 Вплив форми перерізу об'єкта на дифракційну картину.

Форма перерізу гравірованих структур також має вплив на розподіл інтенсивності в оберненому просторі. Це показано схематично на рис. 2.6. Зазначимо, що для ідеально прямокутних дротів пряма послідовність піків дотримана, в той час як трапецієподібна форма утворює характерну перехресну картину піків. Унаслідок неоднорідної напруги в напрямі росту  $\varepsilon_{zz}$ , яка порушує симетрію вздовж  $q_z$ , обвідна цих піків може бути зміщена вздовж  $q_z$  так, що можна спостерігати лише верхні вітки перерізів.



Рис. 2.7 Лінії розміщення дифракційних максимумів від повністю напружених, частково релаксованих та повністю релаксованих багатошарових структур.

Вертикальна невідповідність параметра гратки шару проявляє себе у вигляді розділення вузлів оберненої гратки шару та підкладки вздовж напрямку  $q_z$ . Латеральна невідповідність зміщує пік від шару в напрямку  $q_x$ . Її ненульове значення є прямим свідченням того, що ступінь релаксації шару R відмінна від нуля. Як показано на рис. 2.7, при R = 0 піки від шару та підкладки розділені строго вздовж  $q_x$ . При R = 1 обидва піки розташовуються на лінії, яка з'єднує початок оберненого простору з вузлом оберненої гратки підкладки. Лінія, що з'єднує точки для R = 0 та R = 1 називається релаксаційною лінією. На ній розташовуються піки шарів з різними ступенями релаксації в межах R = 0..1.

Вирощування короткоперіодних НГ часто призводить до гетероструктур зі

спонтанними латеральними змінами складу в сполуці. Особливо значна й упорядкована композиційна модуляція виникає при рості номінально погодженої короткоперіодної НГ при наявності в періодах близько чотирьох моношарів (МШ). Ця стимульована ростом модуляція вперше спостерігалася авторами праці [97]. Залежно від системи сплаву горизонтальна модуляція може бути за характером або одновимірною [98,99], або двовимірною [100]. Одновимірна модуляція утворює подібні до дротів області, в той час як двовимірна —гратку або подібні до точки області. У більш товстих короткоперіодних НГ модульовані області можуть безупинно самовирівнюватися вертикально.

Наявність модуляцій складу в площині росту викликає виникнення латеральної впорядкованості в системі сателітів. Хвилястості товщини в подвійних шарах НГ є основною причиною латеральних модуляцій складу (ЛМС), стандартна модель яких зображена на рис. 2.8a [101]. Інша модель полягає в тому, що найбільш товсті частини шарів хвилястості зміщені один від одного на певну частину довжини хвилі хвилястості, яка закінчується вертикальним періодом, зміненим щодо вихідної НҐ. Паралелограм на рисунку — це ділянка одиниці надструктури, що відповідає і вертикальним, і горизонтальним структурам. Нахил основи комірки відносно площини (001) приводить до рівного нахилу вертикальних сателітних піків відносно напряму [001]. На рис. 2.86 схематично зображено відповідні дифракційні піки в оберненому просторі для обох моделей. Наявність дальнього порядку в розташуванні дифракційних максимумів на двовимірних мапах в оберненому просторі свідчитиме про латеральне й нормальне впорядкування областей з різними модуляціями складу. Однак варто зазначити, що фазові кореляції в напрямі вектора дифракції (оберненої гратки) більш сильні, ніж у паралельному напрямі.



Рис. 2.8. Схематичне зображення латеральних модуляцій складу та їх вертикального (а) та похилого (б) наслідування.

#### 2.2.3. Напружені шари надграток: нахили площин, тераси, мозаїчний розподіл

В загальному випадку середній параметр гратки надграткової структури відрізняється від підкладки, а також від параметра проміжного буферного шару. В оберненій гратці кожна точка підкладки супроводжується точкою буферного шару і відповідних точок напружених шарів НГ. Відносне положення точок залежить від періоду НГ та напруг в напрямку росту і перпендикулярно.

На рис. 2.9 схематично представлено процес утворення терас в НГ, де кут α — кут між напрямком латеральних модуляцій і нормаллю до кристалографічних площин. Це показує, що напрям модуляцій не паралельний до площин гратки. Крім того НГ може бути нахилена до підкладки, як показано на рис. 2.96.



Рис. 2.9. Схема утворення терас в НГ: а) без; б) з додатковим нахилом по відношенню до підкладки.

Це допускає, що шар може бути напруженим в порівнянні з граткою підкладки, обидва вздовж терас мають однаковий міжфазний крок (когерентний ріст). На рис. 2.96 показаний інший кут  $2\beta$ , який презентує середній нахил повної НГ (епітаксійного шару) до підкладки. Значення  $\beta$  можна записати:

$$\beta \approx \frac{\alpha(a_{x1} - a_0)}{a_0} \approx \alpha(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}) \cdot \frac{\Delta a}{a_0}.$$
 (2.6)

де  $a_0$  і  $a_{x1}$  параметри гратки в сусідніх кроках вздовж тераси,  $\Delta a$  – різниця параметрів ґраток потрійної і бінарної сполук в шарах.  $a_{x1}$  можна записати як:

$$a_{x1} \simeq a_x + \frac{2C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \cdot \Delta a.$$
 (2.7)

Таким чином, значення  $a_{x1}$  можна розрахувати з коефіцієнтів Пуассона для кубічної комірки, які стиснуті вздовж двох країв. З рівності  $C_{11} = 2C_{12}$ , яка є наближено справедливою для структури цинкової обманки для кута нахилу повністю когерентної системи слідує:

$$\beta = 2\alpha\epsilon. \tag{2.8}$$

де  $\varepsilon = \Delta a/a_0$  – напруга невідповідності.

Ця модель описує механізм нахилу в режимі малих деформацій, тобто за відсутності процесу формування дислокацій невідповідності в шарах.

Наступний ефект — це ефект деформацій, терас і мозаїчного розширення вузлів оберненого простору (рис. 2.10) для напружених шарів НГ структури в напрямку росту [001] [102,103]. На рис. 2.10 представлено лише точки оберненого простору (004), (224) і (-2-24). Положення нульового піка напруженої НГ позначено (0), тобто його положення залежить лише від нормальних і латеральних деформацій по відношенню до напрямку росту. Положення наступних сателітів визначається періодом НГ в напрямку росту. В системі без жодних нахилів площин ці сателіти будуть вибудовуватись точно вздовж напрямку росту. Картина для асиметричних рефлексів схожа на симетричну. Якщо виникають тераси, НГ піки будуть обертатись навколо нульового сателіта на кут  $\alpha$ , а сателіт нульового порядку буде повернутий відносно початку координат (000) на кут  $\beta$ , як відмічалось вище.

Далі покажемо схематично вплив мозаїчності, флуктуацій періоду, поверхневих неоднорідностей і випадкових деформацій на форму вузлів оберненої гратки.

Ефект мозаїчності приводить до симетричного розмиття вузлів оберненої гратки (рис. 2.10*a*) і викликає додаткове розширення, пов'язане з формою блоків, вздовж  $\omega/2\theta$  напрямку та його нахил відносно ефекту мозаїки блоків в напрямку  $\omega$ сканування.

Для асиметричних вузлів видовження будуть відбуватись в напрямку  $\omega$  повороту, більш далекі від (000) вузла сателіти будуть більше розширеними.

Для поверхневих неоднорідностей листи контурів не будуть нахиленими відносно осі росту. З ростом порядку сателітів їхнє розширення перпендикулярно осі росту зростає, при цьому нульовий сателіт залишається незмінним (неспотвореним).

Флуктуації періоду НГ проявляють себе у розширенні сателітних піків НГ вздовж напрямку росту, залишаючи при цьому незмінними сателіти нульового порядку.



Рис. 2.10 Схематичне зображення впливу мозаїчного розширення, терас і неоднорідностей інтерфейсу в ненапружених шарах НГ

2.2.4. Особливості дифракції за умов ковзного падіння на самоорганізованих нанорозмірних острівцях

Серед найбільш використовуваних методик для дослідження самоорганізованих острівців вирізняється малокутова ковзна геометрія розсіяння Xвипромінювання (GISAXS) [104,105] та дифракція ковзного падіння (GID) [106,107].

У GISAXS-методах виявляються флуктуації концентрації електронів, усеред-

нені за атомістичною структурою, тому цей метод чутливий головним чином до морфологічних властивостей зразка, наприклад розмірів острівця, форми, композиційної і позиційної кореляції острівців. Всі ці топологічні елементи можуть бути також виявлені GID-методом, який, крім того, є чутливим до деформацій гратки в зразку.

GID- і GISAXS-методи успішно застосовувались для аналізу нанорозмірних структур [108-110]. Однак подальше використання цих методів «страждає» через відсутність зручних підходів, які могли б пояснити механізми формування та розподіл розсіяної інтенсивності в оберненому просторі. Це особливо характерно для острівців з розвинутою структурою грані, де ділянка поверхні кристала без компонентів перекручування не може бути розрахована аналітично в межах наближення лінійної теорії пружності. Хоча чутливість до поверхні і границі поділу, досягнута при ковзному падінні і/або виході в розсіювальному експерименті, збільшується, головна проблема полягає в тому, що кінематична теорія розсіяння в її найпростішому вигляді не може використовуватись. З одного боку, ефекти заломлення приводять до істотної зміни напряму хвильового вектора всередині і зовні зразка. З іншого боку, внаслідок малих ковзних кутів падіння, а також більшого потоку пучків, які відбиваються від поверхні, нижче критичного кута відбувається повне зовнішнє відбиття.

Отже, відбита хвиля бере участь в розсіянні і можна очікувати значного впливу кута падіння на розподіл дифузної інтенсивності в оберненому просторі. Унаслідок теореми взаємності це властиво також для залежності інтенсивності від кута виходу і впливає переважно на вимірювання «з площини» в GISAXS- або GIDконфігураціях. Такі явища ускладнюють інтерпретацію даних з розсіяного Хвипромінювання. Для належної обробки даних в цьому випадку зазвичай використовують напівкінематичний підхід, т. зв. наближення спотвореної хвилі Борна (DWBA).

# **2.3.** Теоретичний розрахунок процесів розсіяння та автофітування кривих дифракційного відбиття

З огляду на те, що досліджувані структури все більше ускладнюються, а можливість їх практичного застосування вимагає великої точності в діагностиці їх структурних параметрів, необхідним стає застосування комп'ютерного моделювання дифракційних спектрів на основі вибраної моделі. Порівняння деталей форми, а згодом і інтенсивностей теоретичної та експериментальної кривих дає можливість поступово наближувати модельну структуру до реальної. Це робить моделювання кривих дифракційного відбиття потужним методом аналізу складних структур.

Коротко розглянемо основні підходи, які використовуються для моделювання процесів розсіяння.

#### 2.3.1. Метод матриць Абеле

Цей підхід лежить в основі більшості методів моделювання дифракції Хпроменів від багатошарових структур. Він базується на розгляді граничних умов на межах багатошарової структури, для якої розв'язуються рівняння Максвела, що описують взаємодію Х-променів з періодичним середовищем. Оскільки граничні умови між шарами являють собою систему лінійних рівнянь, то їх зручно представляти у матричному вигляді. Матриці для кожного шару формують так, щоб при їх добутку для двох сусідніх шарів отримувати для них єдину матрицю.

#### 2.3.2. Рівняння Такагі-Топена

Система рівнянь Такагі-Топена виводиться з рівнянь Максвела в припущені слабо-змінних хвильових полів та відкидання другої похідної цих полів по координаті (нехтування дзеркальним відбиттям). Для надграток, властивості яких залежать тільки від однієї координати *z* вздовж напрямку росту, ця система дуже просто записується у вигляді диференційного рівняння першого ступеню [94]:

$$\frac{dX}{dz} = iG(AX^2 + 2BX + E) , \qquad (2.9)$$

де  $X=D_h/D_0$  – коефіцієнт дифракції, z –координата зміни параметрів структури, A, B, E, G – змінні залежні від Фур'є компонент поляризуємості, фактора асиметрії, параметра відхилення. З розв'язку рівняння, яке можна проінтегрувати аналітично [94], для напівнескінченної підкладинки знаходять вираз для коефіцієнта дифракції.

Головною перевагою даного підходу є його швидкість за рахунок аналітичності розв'язку та введення параметра кутового відхилення  $\beta_H$  замість знаходження хвильових векторів. До недоліків можна віднести неможливість застосування методу для малих кутів падіння, відсутність інформації про дзеркально відбитий промінь, напівнескінченна підкладинка. Проте, для висококутової дифракції ці обмеження не мають суттєво впливу на розрахунок спектрів розсіяння.

#### 2.3.3. Алгоритм матриці проходження (ТМА)

Даний підхід базується на інтерпретації методу матриць Абеле Степановим [111]. Для кожного шару багатошарової структури знаходиться розв'язок дисперсійного рівняння із знаходженням усіх хвильових векторів як падаючої, так і дифрагованої хвиль. Далі з розгляду граничних умов між шарами з номером *j* – *l* та *j*:

$$C_{j-1}\Phi_{j-1}E_{j-1} = C_jE_j,$$
 (2.10)

записується рівняння

$$\mathbf{E}_{0} = \Phi_{0}^{-1} \mathbf{C}_{0}^{-1} \mathbf{C}_{1} \Phi_{1}^{-1} \mathbf{C}_{1}^{-1} \mathbf{C}_{2} \dots \Phi_{N-1}^{-1} \mathbf{C}_{N-1}^{-1} \mathbf{C}_{N} \Phi_{1}^{sub} \mathbf{E}_{sub} = \mathbf{M} \mathbf{E}_{sub}.$$
 (2.11)

з розв'язку якого можна знайти дифраговану всією структурою хвилю  $E_h$  та дзеркально відбиту  $E_R$ .

Матриці  $C_j$  та  $E_j$  задаються наступним чином:

$$\mathbf{C}_{j} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_{01z}^{j} & k_{02z}^{j} & k_{03z}^{j} & k_{04z}^{j} \\ c_{1}^{j} & c_{2}^{j} & c_{3}^{j} & c_{4}^{j} \\ k_{h1z}^{j} & k_{h2z}^{j} & k_{h3z}^{j} & k_{h4z}^{j} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{E}_{j} = \begin{pmatrix} E_{01}^{j} \\ E_{02}^{j} \\ E_{03}^{j} \\ E_{04}^{j} \end{pmatrix}$$
(2.12)

а матриця  $\Phi_j$ , яка відповідає за поглинання та фазовий зсув *j*-м шаром:

$$\Phi_{j} = \begin{pmatrix} e^{-ik_{01s}^{j}t_{j}} & 0 & 0 & 0\\ 0 & e^{-ik_{01s}^{j}t_{j}} & 0 & 0\\ 0 & 0 & e^{-ik_{01s}^{j}t_{j}} & 0\\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_{01s}^{j}t_{j}} \end{pmatrix}$$
(2.13)

Даний метод враховує всі хвилі в кристалі, але не може бути застосований для товстих шарів та дуже далеко від точного кута Вульфа-Брега. Крім того метод працює тільки для підкладинки нескінченної товщини.

#### 2.3.4. Алгоритм рекурсивних матриць (РМА)

Метод РМА – один з найкращих на сьогодні методів розрахунку двохвильової дифракції в багатошарових структурах. Він базується на описаному вище методі ТМА, але може бути застосовним для структур з товстими шарами. Це досягається за рахунок застосування запропонованого В.Г. Коном [112] підходу сортування коренів, наприклад в порядку спадання уявної частини, та розбивки ТМА матриць розміром [ $4 \times 4$ ] на матриці [ $2 \times 2$ ]. Таким чином метод є придатним для дифракції в товстих шарах та підкладинки кінцевої товщини.

# 2.3.5. Розрахунок Х-променевої дифракції від багатошарових латеральних кристалів довільної форми та хімічного складу по глибині структури

Усі описані вище методи працюють для не релаксованих багатошарових структур із лінійною зміною структурних параметрів вздовж однієї осі, напрямку росту. Латеральна періодичність нанооб'єктів в таких структурах вимагає інших підходів до розрахунку спектрів.

Нещодавно В.І. Пунєговим [113] було запропоновано ефективний метод розрахунку Х-променевої дифракції від багатошарових латеральних кристалів довільної форми та хімічного складу по глибині структури. В кінематичному (борнівському) наближенні амплітуда дифракційної хвилі від кристала обмежених латеральних розмірів та товщини *l* може бути записана у вигляді [114]:

$$E_h(q_x, q_z) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_0^l dz \, e^{(iq_z - \mu)z} \int_{\Omega_L(z)}^{\Omega_R(z)} dx a_h(x, z) e^{iq_x x} \Phi(x, z), \tag{2.14}$$

де коефіцієнт  $a_h(x, z)$  характеризує відбивну здатність кристала,  $\mu$  – коефіцієнт поглинання. Вектор q визначає відхилення вектора розсіяння від  $k_h - k_0$  від вузла оберненої гратки h, де  $h = 2\pi/d_{hkl}$ , де  $d_{hkl}$  – міжплощинна віддаль. Під інтегралом в (2.14) присутній двовимірний фазовий фактор  $\Phi(x, z) = exp(-ihu(x,z))$ , який залежить від вигляду деформації кристалічної гратки в латеральному x та вертикальному z напрямках. Межі інтегрування  $\Omega_L(z)$  та  $\Omega_R(z)$  задаються формою латеральних границь досліджуваного кристала. Строго кажучи, співвідношення (2.14) може слугувати вихідною формулою для чисельного інтегрування при розрахунку кутового розподілу інтенсивності розсіяння від кристалів довільної форми та композиційного хімічного складу. Однак такий підхід еквівалентний в деякій мірі трудомісткому методу кінцевих елементів та потребує великих часових затрат при розрахунку мап оберненого простору. Крім того така процедура неминуче призводить до накопичення помилок в процесі чисельного інтегрування.

Дана проблема суттєво спрощується, якщо латеральний кристал можна представити у вигляді шаруватої структури [115]. В межах кожного шару хімічний склад (відбивна здатність кристала), латеральна та вертикальна деформація гратки залишаються постійними величинами, а переріз цього шару в загальному випадку має форму трапеції, яка при певних умовах трансформується в прямокутник або паралелограм. Іншими словами, ми вибираємо переріз кристала, ліва і права границі якого представляють собою кусково-неперервні лінійні функції координати *z*.



Рис. 2.11 Модель багатошарової латеральної структури з довільною формою перерізу.

Кристал розбивається на окремі трапеції шляхом проведення горизонтальних прямих  $z = L_0$ ,  $z = L_1$ , ...,  $z = L_n$  через кожну точку злому кусково-неперервних функцій  $\Omega_L(z)$  та  $\Omega_R(z)$ , де n – кількість отриманих трапецій (рис. 2.11) Таким чином, інтеграл по z в формулі (2.14) розбивається на суму інтегралів:

$$E_h(q_x, q_z) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \sum_{p=1}^n a_h^{(p)} \int_{L_{p-1}}^{L_p} dz \, e^{iq_z^{(p)_z}} \int_{\Omega_L^{(j,p)}(z)}^{\Omega_R^{(k,p)}(z)} e^{iq_x^{(p)_x}} dx.$$
(2.15)

Оскільки область інтегрування в кожному доданку с номером р являє собою

трапецію, то кусково-неперервні функції  $\Omega_L(z)$  та  $\Omega_R(z)$  можна замінити відповідними лінійними функціями  $\Omega_L^{(j,p)}(z) = K_L^{(j,p)}z + B_L^{(j,p)}$  та  $\Omega_R^{(k,p)}(z) = K_R^{(k,p)}z + B_R^{(k,p)}$ , які описують бокові сторони кожної трапеції з номером p. Коефіцієнти  $K_L^{(j,p)}$ ,  $B_L^{(j,p)}$ ,  $K_R^{(k,p)}$ ,  $B_R^{(k,p)}$  визначаються з координат точок злому кусково-неперервних функцій. У виразі (2.15)  $q_z^{(p)} = q_z + i\mu^{(p)} + h_z\varepsilon_z^{(p)}$ ,  $q_x^{(p)} = q_x + h_x\varepsilon_x^{(p)}$ , де  $\varepsilon_{x,z}^{(p)}$  – деформації гратки шару з номером p в латеральному та вертикальному напрямках, а  $h_{x,z}$  – відповідні проекції вектора оберненої гратки. Проводячи інтегрування по координаті x в (2.15) та вводячи позначення  $q_L^{(p)} = q_x^{(p)}K_L^{(j,p)} + q_z^{(p)}$ ,  $q_R^{(p)} = q_x^{(p)}K_R^{(j,p)} + q_z^{(p)}$ , отримуємо

$$E_h(q_x, q_z) = \sum_{p=1}^n e^{i\psi_p} E_h^{(p)}(q_x, q_z), \qquad (2.16)$$

де  $\psi_p = q_z^{(p)}(L_p + L_{p-1})/2 + q_x^{(p)}[B_L^{(j,p)} + K_L^{(j,p)}(L_p + L_{p-1})/2] - фазовий множник, який залежить від глибини залягання шару з номером$ *p*та його форми перерізу в площині дифракції. Амплітуда відбиття від цього шару представляється у вигляді

$$E_{h}^{(p)}(q_{x}, q_{z}) = \frac{a_{h}^{(p)}l_{p}}{\sqrt{2\pi} q_{x}^{(p)}} \left( \exp(i\varphi_{p})\sin c\left(q_{R}^{(p)}l_{p}/2\right) - \sin c\left(q_{L}^{(p)}l_{p}/2\right) \right).$$
(2.17)  
Tyr  $\varphi_{p} = q_{x}^{(p)} \left[ (B_{R}^{(k,p)} - B_{L}^{(j,p)}) + (K_{R}^{(k,p)} - K_{L}^{(j,p)})(L_{p} + L_{p-l})/2 \right] \operatorname{sinc}(x) = \sin(x)/x.$ 

Таким чином, через простий розв'язок для елементарного латерального шару В.І. Пунєговим отримано вираз для обчислення амплітудного коефіцієнта відбиття від багатошарових латеральних кристалів довільної форми та хімічного складу в вертикальному напрямку. Розрахунок мап оберненого простору за допомогою цього методу відрізняється швидкістю та легкістю, оскільки не містить процедур інтегрування. В середньому час розрахунку мап розсіяння інтенсивності з масивом 100 х 100 на сучасному комп'ютері займає декілька секунд. Однак, слід відмітити, що для застосування запропонованого методу до розрахунку картини дифракції від латерально впорядкованих прихованих нанооб'єктів в надгратках його слід дещо розвинути. А саме, транслювати розглядувані елементарні латеральні шари в горизонтальному та вертикальному напрямках та врахувати фазові співвідношення на границі між нанооб'єктами та матрицею, в якій вони знаходяться.

#### 2.3.6. Автофітування кривих дифракційного відбиття

Незважаючи на велику кількість та потужність методів розрахунку спектрів, неможливо, задавши теоретичну модель, одразу отримати повне співпадіння розглядуваних спектрів, а отже отримати точний розв'язок оберненої задачі. Це пов'язано з тим, що розрахункова модель будується з міркувань про однакові структурні параметри періодів багатошарової структури. Однак на практиці це не так і потрібно розраховувати параметри кожного шару окремо. Зрозуміло, що виходячи з кількості невідомих параметрів фізично неможливо підібрати їх вручну. Саме тому використовують методи підгонки (автофітування) кривих дифракційного відбиття.

Процедура підгонки полягає в наступному. Для вибраної моделі проводиться розрахунок дифракційного спектру, який порівнюється з експериментальним з подальшим визначенням функції помилок (різниці між симульованим та експериментальним спектрами). Потім на основі вибраних оптимізаційних алгоритмів модель переглядається і спектр розраховується знову. Процедура ітеративно продовжується до досягнення функцією помилок певного мінімуму.

Серед застосовуваних методів оптимізації можна виділити метод Монте-Карло, генетичний алгоритм Вормінгтона [116] та метод градієнтного спуску. Перевага цих методів одних над іншими залежать від часу розрахунку та можливості подолання ними деяких проблем розрахунку. Так, наприклад, за рахунок великої кількості незалежних параметрів підгонки, функція помилок, яка від них залежить, окрім глобального мінімуму може мати (і досить часто доволі багато) локальні мінімуми, які алгоритму потрібно вміти передбачити та обійти. Крім того, в параметричному просторі глобальний мінімум займає достатньо малий об'єм і тому при вибраних розрахункових кроках важливо його не "проскочити".

До проблем з боку математичного підходу до розв'язку поставленої задачі додаються також її фізичні аспекти. Так, в [117] показано, що кількість розв'язків, які призводять до одного і того ж вигляду кривих дифракційного відбиття, рівна  $2^N$ , де N– кількість підшарів, на які розбивається приповерхневий шар. Ця проблема може бути вирішена в рамках моделювання великої кількості відбиттів від різноманітних сімейств відбиваючих площин, а одночасна підгонка [118] дозволяє відновити профілі деформацій та встановити істинні параметри досліджуваних структур.

#### 2.4. Область доступності в оберненому просторі

Явище дифракції зручно описувати і пояснювати із залученням понять оберненого простору та оберненої ґратки. Тим більш, що деякі методи Х-променевого структурного аналізу безпосередньо дають явний вигляд оберненої гратки. У більшості книжок по структурі кристалічних речовин та дифракції на таких структурах поняття оберненого простору вводиться дуже схематично [119,120]. Зважаючи на те, що деякі з демонстрацій (наприклад, різні типи сканування оберненого простору) дуже важко зобразити у вигляді статичних картинок, ми рекомендуємо завантажити розроблену нами навчальну програму XViz [121] з веб-сторінки відділу дифракційдосліджень структури Інституту фізики напівпровідників: http://xних ray.net.ua/XViz.html. Також там можна знайти анімації для найбільш складних демонстрацій.

Дифракцію будемо розглядати без прив'язки до природи випромінювання: це може бути як дифракція Х-променів, так і дифракція електронів чи нейтронів. Звичайно, видиме світло розглядати немає сенсу, тому що його довжина хвилі не співмірна з характерними розмірами кристалічної ґратки. У тих випадках, коли існує принципова різниця дифракційних явищ в залежності від довжини хвилі опромінення чи його природи, це буде вказано явно (наприклад при багатохвильовій дифракції).

Для заданої довжини хвилі та геометрії експерименту можна отримати дифракцію тільки від деякої області оберненого простору, яку називають областю доступності. Під геометрією експерименту зазвичай розрізняють два випадки: *Брегга*, коли дифрагований промінь виходить з тієї ж поверхні кристалу, з якої входить падаючий та *Лауе*, коли дифрагований промінь виходить з іншої поверхні кристалу скінченої товщини. Крім того, є ще одна ступінь свободи при описі геометрії експерименту, яка пов'язана з обертанням кристалу відносно нормалі до поверхні. Тому, для визначеності, будемо працювати в системі координат, в якій зафіксовано площину падіння XZ, а вісь Z спрямована вздовж нормалі до поверхні. Падаючий промінь потрапляє на поверхню кристалу в напрямку зменшення значень Z (інакше він повинен був би виходити з кристалу).



Рис. 2.12 Області доступності в геометрії Брегга: а) правильна; б) неправильна.

Зрозуміло, якщо довжина хвилі  $\lambda$ , то область оберненого простору, яка розташована за межами сфери радіусом 2*K* з центром в початку координат, буде недоступна для аналізу. Тобто, вектор дифракції **Q** = **K**<sub>h</sub> – **K**<sub>0</sub> точок, доступних для аналізу, повинен бути по модулю менше 2*K* і досягає свого максимального значення 2*K* при антипаралельному розташуванні **K**<sub>h</sub> та **K**<sub>0</sub>. Тобто перше обмеження (зовнішнє) на область доступності в оберненому просторі - сфера радіусом 2*K*.

Оскільки хвильовий вектор падаючої хвилі  $K_0$  лежить в площині падіння, точки, які розташовані на відстані більшій ніж *K* від цієї площини, також неможливо дослідити за допомогою дифракції (для даного положення площини падіння). Тобто, до таких точок вектор  $K_h$  просто "не дотягується".

Наступним обмеженням буде те, що для даного кута падіння (кут між падаючим променем  $K_0$  і поверхнею) геометричне місце точок оберненого простору, які можуть приймати участь у дифракції, являє собою полу сферу радіуса *K*. Тобто, початок вектора  $K_h$  зафіксований, тому що він завжди збігається з початком вектора  $K_0$ , а його кінець описує, зрозуміло, сферу – так звану сферу Евальда. Якщо розглянути всі можливі положення  $K_0$  в площині падіння, тобто якщо обертати центр отриманої сфери відносно осі Y отримаємо тор. Однак частина цього тору буде недоступна, бо для її досягнення необхідно, щоб падаючий промінь прийшов з кристалу, що протирічить постановці задачі. Тому область доступності зменшується. Але необхідно відмітити, що ця фігура, на відміну від сфери Евальда вже не порожниста – всі точки всередині принципово доступні (ця фігура утворена зміщенням порожнистої сфери, однак оскільки точки на поверхні сфери можуть давати дифракцію, вся область всередині фігури теоретично доступна – рухому демонстрацію цього факту можна подивитись на Сайті XViz.



Рис. 2.13 Область доступності в оберненому просторі в компланарній геометрії: а) Брегга; б) Лауе.

Тепер необхідно врахувати згадану раніше геометрію експерименту Брегга. В геометрії Брегга дифрагований промінь  $K_h$  може виходити тільки з тієї самої сторони кристала, на яку падає промінь  $K_0$ , тобто  $K_{hz}=0$ . Таким чином, з тора ще вирізається частина, для якої  $K_{hz} < 0$ . Уявити побудову цієї фігури досить нескладно – її описує напівсфера радіусу K, центр якої переміщують по напівколу радіусу K відносно осі Y (просторова орієнтація напівсфери відносно поверхні зберігається), і всі точки, через які проходить при цьому поверхня напівсфери, доступні в геометрії Брегга. Необхідно відмітити, що область недоступності, що лишається біля осі Y і заглиблюється до початку координат, не має форми внутрішньої поверхні тора, а являє собою дещо більш складну фігуру з лінійчатим ребром у верхній частині. Таким

чином можна побачити, що тривимірна область доступності в геометрії Брегга суттєво відрізняється від приведеної в деяких книгах та статях [122,4] – рис. 2.12. В геометрії Лауе необхідно відкинути точки, для яких K<sub>hz</sub> > 0.

Треба відмітити, що область доступності в компланарній геометрії Брегга (рис. 2.13), яка зображена в багатьох книгах [123,124] є правильною. Однак тут не можна говорити, що один з недоступних "півкругів" це область, в якій падаючий промінь виходить з кристала, а інший - дифрагований входить в кристал, тому що працює принцип взаємності: можна поміняти місцями падаючий і дифрагований промені – і нічого не зміниться. Тобто порожнисті напівкруги на рис. 2.13*а* відповідають обом заборонам геометрії Брегга ( $K_{0z}>0$  та  $K_{hz}<0$ ).

Звичайно, при зміні довжини хвилі всі описані області оберненопропорційно змінюють свої розміри не змінюючи форму. В деяких експериментах фіксується кут падіння (наприклад, його обирають рівним критичному), в той час як зразок може обертатись (площина падіння не зафіксована). Якщо врахувати всі можливі азимутальні орієнтації заразку, можна отримати області фундаметнально доступні в обох геометріях.

Навіщо потрібні всі ці тривимірні картинки? Справа в тому, що для дослідження сучасних структур з квантовими точками та квантовими дротами необхідно використовувати некомпланарну дифракцію - коли падаючий промінь  $K_0$ , нормаль до поверхні **n** і дифрагований промінь  $K_h$  не лежать в одній площині. Тому необхідно визначити геометрію експерименту, при якій можна досліджувати необхідну область оберненого простору.

### 2.4.1. Формули для побудови області доступності

Для математичного пояснення області доступності наведемо формули, за якими вони були побудовані. Основні формули для довільної геометрії такі:

$$|\mathbf{K}_0| = K; \tag{2.18}$$

$$\left| \mathbf{K}_{\mathbf{h}} \right| = K; \tag{2.19}$$

$$\mathbf{K}_{\mathbf{h}} = \mathbf{K}_{\mathbf{0}} + \mathbf{Q}; \tag{2.20}$$

$$(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{P}) = 0; \tag{2.21}$$

$$(\mathbf{K}_0 \mathbf{N}) \le 0 \tag{2.22}$$

де вектор **P** - перпендикуляр до площини падіння, а **N** - нормаль до поверхні зразка. Для геометрії Брегга:

$$(\mathbf{K}_h \, \mathbf{N}) > 0 \tag{2.23}$$

I для геометрії Лауе:

$$(\mathbf{K}_h \mathbf{N}) < 0 \tag{2.24}$$

У випадку, коли  $(\mathbf{K}_{\mathbf{h}} \cdot \mathbf{N}) = 0$ , обидві геометрії дають однаковий результат.

Наведемо пояснення записаних формул. Як вже було сказано вище, формули (2.18) та (2.19) справедливі для пружної взаємодії, коли довжина хвилі зберігається. Формула (2.20) є означенням вектора дифракції **Q**. Формула (2.21) вказує на те, що  $K_0$  лежить в площині падіння (перпендикулярній до її нормалі **P**), а формула (2.22) доповнює це тим фактом, що хвиля падає на "лицьову" поверхню зразка. Звичайно для геометрії Брегга дифрагована хвиля поширюється з того ж боку кристалу, що і падаюча (формула (2.23), а у випадку Лауе в протилежному (2.24).

Для того, щоб скористатися наведеними векторними формулами, перейдемо до декартових координат. Для точки оберненого простору з вектором  $\mathbf{Q}$  ( $|\mathbf{Q}| = \mathbf{Q} \le 2\mathbf{K}$ ) і площини падіння, заданою її нормаллю  $\mathbf{P}$ , знайдемо падаючий промінь  $\mathbf{K}_0$ . Для цього з рівнянь (2.18)–(2.20) отримаємо рівняння, яке пов'язує вектори  $\mathbf{K}_0$  та  $\mathbf{Q}$ :

$$(\mathbf{K_0} \cdot \mathbf{Q}) = -\frac{Q^2}{2},\tag{2.25}$$

далі рівняння (2.25) та (2.21) можна представити в скалярному вигляді відносно К<sub>0х</sub>:

$$((Q_y P_z - P_y Q_z)^2 + (Q_z P_x - P_z Q_x)^2 + (Q_y P_x - P_y Q_x)^2)K_{0x}^2 - Q^2 (Q_z P_x P_z + Q_y P_x P_y - Q_x (P_y^2 + P_z^2))K_{0x} + \frac{Q^4 (P_y^2 + P_z^2)}{4} - K^4 (Q_y P_z - P_y Q_z)^2 = 0,$$
(2.26)

а інші складові К<sub>0</sub> тоді будуть:

$$K_{0y} = \frac{-P_z Q^2 / 2 + (P_x Q_z - P_z H_x) K_{0x}}{P_z H_y - P_y H_z};$$
(2.27)

$$K_{0z} = \frac{-P_y Q^2 / 2 + (P_x Q_y - P_y H_x) K_{0x}}{P_y H_z - P_z H_y}.$$
(2.28)

Дифрагований промінь К<sub>h</sub> легко знайти з рівняння (2.20) в скалярному вигляді:

$$K_{hx} = K_{0x} + Q_x; \quad K_{hy} = K_{0y} + Q_y; \quad K_{hz} = K_{0z} + Q_z.$$
 (2.29)

Ці формули можуть бути використані для знаходження експериментальної геометрії при дослідженні деякої точки оберненого простору. Тобто, якщо необхідно отримати дифракцію від точки оберненого простору, яку задано вектором **Q**, то за формулами (2.26)–(2.28) можна розрахувати, як треба спрямувати падаючий промінь, а по формулі (2.29) розрахувати положення детектора для фіксації дифрагованого променя. Зазначимо, що формули (2.26)–(2.29) справедливі для довільної декартової системи координат. Якщо перейти до описаної вище системи координат, де вісь Z параллельна зовнішній нормалі, а вісь X лежить в площині падіння, то вектори N, P та K<sub>0</sub> будуть представлені як: N = (0,0,N<sub>z</sub>); P = (0,P<sub>y</sub>,0); K<sub>0</sub> = (K<sub>0x</sub>,0,K<sub>0z</sub>). Звичайно довільну систему координат можна звести до цієї за допомогою максимум двох поворотів. Для зручності можна ще вектори N та P задати як орти: |N| = 1 та |P| = 1. В такій системі координат рівняння (2.22) зводиться до

$$\mathbf{K}_{0z} \le 0, \tag{2.30}$$

а рівняння (2.26)–(2.28) приймають вигляд:

$$(Q_z^2 + Q_x^2)K_{0x}^2 + Q^2Q_x^2K_{0x} + \frac{Q^4}{4} + K^4Q_z^2 = 0; (2.31)$$

$$K_{0y} = 0;$$
  $K_{0z} = \pm \sqrt{K^2 - K_{0x}^2}.$  (2.32)

Якщо з рівнянь (2.18)–(2.22) виключити К<sub>0</sub> та К<sub>h</sub> в описаній системі координат фундаментально доступна область оберненого простору приймає вигляд:

$$Q_z^4 + 2(Q_x^2 + Q_y^2 - 2K^2)Q_z^2 + (Q_x^2 + Q_y^2)^2 - 4K^2Q_x^2 = 0.$$
 (2.33)

Тут і далі -2K  $\leq Q_x \leq$  2K та -K  $\leq Q_y \leq$  K задаються, а  $Q_z$  розраховується. По цій формулі знаходяться лише позитивні значення  $Q_z$ , а поверхня для  $Q_z < 0$  визначається рівнянням K<sub>0z</sub>=0, яке буде розглянуто далі.

Щоб знайти границі області доступності для геометрії Лауе та Брега необхідно розв'язати рівняння поверхні, для якої К<sub>h</sub> паралельне до поверхні кристала (K<sub>hz</sub> = 0):

$$Q_z^4 + 2(Q_x^2 - Q_y^2)Q_z^2 + (Q_x^2 + Q_y^2)^2 - 4K^2Q_x^2 = 0.$$
(2.34)

Необхідно підкреслити, що це не є поверхня розмежування двох геометрій, а просто одні корені є граничною поверхнею для першого випадку, інші – для другого. Ще два корені від'ємні і недосяжні завдяки наявності поверхні, описаної нижче.

Границя області оберненого простору з  $Q_z < 0$ , яку можна досліджувати (звісно тільки в геометрії Лауе), а також нижня границя області доступності в геометрії Брегга, визначаються умовою паралельності  $K_0$  поверхні кристала ( $K_{0z} = 0$ ):

$$Q_z^2 = -Q_x^2 - Q_y^2 + 2K|Q_x|. (2.35)$$

Області доступності для геометрій Брегга та Лауе перетинаються, тобто, як було вже зазначено, для деяких точок оберненого простору можуть бути реалізовані обидві геометрії.

Область доступності для випадку зафіксованого кута падіння (K<sub>0z</sub> = const) задається рівнянням:

$$Q_z^2 + 2K_{0z}Q_z + Q_x^2 + Q_y^2 - 2\sqrt{(K^2 - K_{0z}^2)(Q_x^2 + Q_y^2)} = 0.$$
 (2.36)

#### Висновки до розділу 2

Як вже зазначалось на початку даного розділу, для аналізу розсіяння від нанооб'єктів в приповерхневих шарах досліджуваних структур, зручно користуватись кінематичною теорією дифракції. Зрозуміло що і самі об'єкти, і динамічне розсіяння від них є доволі складними, але слід чітко усвідомлювати, що для епітаксійних структур як мінімум підкладка розсіює динамічно і про кінематичне розсіяння вже не може йти мови. Це призводить до того, що розраховані структурні параметри не є точними. Тому, майбутнє X-променевої дифрактометрії багатошарових структур з латерально-впорядкованими нанооб'єктами автор вбачає саме в розвитку динамічних підходів до процесів розсіяння в них.

Окрім того, аналіз розсіяння від нанооб'єктів в приповерхневих шарах досліджуваних структур за допомогою мап оберненого простору є потужним методом дослідження таких структур, і ним зручно користуватись навіть для якісного і експресного аналізу багатьох параметрів наноструктур.

### РОЗДІЛ З. СТРУКТУРНІ ОСОБЛИВОСТІ НАНОРОЗМІРНИХ БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР, ОТРИМАНИХ ПРИ РІЗНИХ УМОВАХ РОСТУ

## 3.1. Вплив латеральних модуляцій та компонентного складу на структурні переходи в In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs надгратках [125,126]

Дослідженню механізмів формування та властивостей InGaAs KT присвячено велику кількість робіт [36,54,127,128], Отримані теоретичні та експериментальні дані дозволяють феноменологічно пояснити механізм початкової стадії переходу від пошарового росту плівки до утворення тривимірних (3D) острівців. В літературі часто вказують на значну залежність 2D-3D переходу від різноманітних факторів, що впливають на процес самоорганізованого формування InGaAs острівців. До них можна віднести температуру росту, швидкість осадження, компонентний склад, орієнтація підкладки та її розорієнтація [129-132]. Крім того відомо, що поверхнева сегрегація індію призводить до структурних та композиційних змін в змочуючому шарі та KT. До того ж при деяких умовах має місце спонтанна латеральна модуляція складу [133], яка може слугувати шаблоном до утворення одновимірних квантових дротів та нульвимірних KT. Як наслідок, при осаджені InAs острівців на GaAs, вони видовжуються вздовж поверхневого [1-10] напрямку [134-135].

Для розуміння механізмів релаксації пружних деформацій в напружених гетероструктурах особливо важливими є дослідження структурних змін в шарах гетероструктури в околі областей інтерфейсу, де утворюються КТ.

Розглянемо експериментальні результати X-променевих досліджень 2D-3D переходів в 8-ми періодних InGaAs/GaAs структур, які були вирощені на напівізольованій (001) підкладці методом молекулярно-променевої епітаксії. Буферний шар арсеніду галію товщиною 0.5 мкм був вирощений при температурі підкладки 580 °C. Потім температура підкладки зменшувалась до 540 °C для вирощування восьми періодів (14 МШ InGaAs/40 МШ GaAs). Номінальна концентрація індію в шарі In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As складала 0.20, 0.25, 0.28, 0.30 та 0.35.

Для всіх зразків проводилась зйомка мап оберненого простору в симетричній 004 та асиметричній 113 та 224 геометріях дифракції (ковзні кути падіння). Криві дифракційного відбиття знімались для двох взаємо перпендикулярних напрямків площини розсіяння (110) та (1-10). Схему дифракційного експерименту зображено на рис. 3.1. Тобто площину дифракції було вибрано таким чином, що в одному випадку вона проходила вздовж ланцюгів КТ (які спостерігались при атомно-силовій мікроскопії), а в іншому випадку – перпендикулярно до них.



Рис. 3.1 Схема дифракційного експерименту для різних азимутальних напрямків площини дифракції.

Структурні зміни в даних структурах при формуванні  $In_xGa_{1-x}As$  шарів з різною концентрацією індію визначають їх електронні та оптичні властивості. На рис. 3.2 представлено дані атомно-силової мікроскопії зразка з вмістом індію x = 0.28. Їх аналіз дозволяє констатувати, що на початковому етапі 2D-3D переходу формуються два типи квантових структур: 3D острівки, збагачені індієм, та 2D острівки з меншою концентрацією індію, що характеризуються маленькою висотою та порівняно більшими латеральними розмірами (близькими до форми 2D пластинок). Останні можна розглядати як прекурсори для зародження більших 3D острівців.



Рис. 3.2 Зображення фрагменту поверхні структури  $In_{0.28}Ga_{0.72}As/GaAs$  розміром *1 х 1* мкм.

На рис. 3.3 представлено окремі трьохкристальні скани для багатошарових структур з різним вмістом індію. Аналіз цих кривих дифракційного відбиття свідчить про те, що багатошарова структура має гарну кристалічну якість, а границя розділу між бар'єрними шарами GaAs та квантовою ямою  $In_xGa_{1-x}As$  з вмістом індію 0.20-0.25 є чіткою і когерентною. Подальше підвищення концентрації індію в твердому розчині призводить до виникнення дифузного фону, який трохи замиває "швидкі" товщинні осциляції. Це ймовірно пов'язане із впливом деформаційних полів, викликаних латеральними модуляціями складу. Однак, відповісти на це питання мо-

жна тільки за допомогою мап розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі навколо вузлів оберненої гратки, які дають можливість відділити вплив латеральних модуляцій складу від недосконалості інтерфейсів.



Рис. 3.3 Радіальні 004 скани для НГ з вмістом індію x = 0.20 – 0.35. S – пік від підкладинки.

На рис. 3.4 приведено 113 мапи оберненого простору для зразків з різним вмістом індію. Виміряні мапи виявляють гострі піки при  $q_x = 0$ , які позначені  $SL_0$  та  $SL_{\pm l}$ . Горизонтальні ширини цих максимумів визначаються роздільною здатністю дифрактометра і представляють когерентний розподіл інтенсивності, який залежить тільки від латерально усередненої структури зразка. Однак, слід відмітити, що для площини дифракції (110) відмічається уширення цих максимумів, а також смуг інтерференції між ними. Це свідчить про латеральні розвороти гратки вздовж певних напрямків. Найбільш ймовірно, що вони є результатом латеральних модуляцій складу вздовж напрямку [110] і таким чином їх утворення відбувається вже при вмісті індію в квантовій ямі порядку 0.25.



Рис. 3.4 Мапи розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі поблизу вузла 113 для площин дифракції (110) та (1-10) для структури In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs з різним вмістом індію.

Піки, позначені як S відповідають дифракції від підкладинки, а  $SL_n - n$ -й сателітний пік латерально усередненої НГ. Відстань між сателітами рівна  $2\pi/D$  (D – пері-

од НГ), а відстань між *SL*<sub>0</sub> та піком підкладинки пропорційна відносній різниці вертикального параметра гратки підкладки та середнього параметра НГ.

Самоорганізовані КТ породжують дифузне розсіяння Х-променів, яке супроводжує когерентну дифракцію. Воно викликане різницею розсіюючих факторів InAs та GaAs, а також полем пружних деформацій в матриці GaAs, яка оточує квантові точки. У випадку відбиття Х-променів тільки перший механізм вносить вклад, а коли ж вектор дифракції близький до вектора оберненої гратки H, то розсіяна інтенсивність чутлива до h-ї Фур'є компоненти кристалічної поляризуємості  $\chi(r)$ . В даному випадку дифузне розсіяння в більшій мірі відбувається від поля деформацій як за межами, так і всередині КТ.

Латеральний розподіл точок визначає розсіяння інтенсивності в  $q_x$  напрямку. Цей розподіл буде давати латеральні сателіти в положеннях  $q_x = 2\pi p/L$ , де L – середня відстань між точками, p – ціле число. Ширина латеральних сателітів пропорційна дисперсії розподілу по відстаням, а форма не залежить від вертикальної кореляції КТ.

Оскільки об'єм спотвореної навколо точок областей набагато більший, ніж самі точки, то вклад поля деформацій навколо точок в розсіяну інтенсивність буде більшою частиною сконцентрований в безпосередній близькості біля  $SL_0$ . Тому на розподіл інтенсивності далеко від  $SL_0$  впливає більшою мірою центр розсіяння, а саме деформація гратки точки. Тому, можна визначити напругу в точках з розподілу інтенсивності в цій області [136-138].

На мапах оберненого простору, знятих в асиметричній геометрії дифракції (рис. 3.4), дифузні піки проявляють явну асиметрію відносно осі  $q_z$ . Максимум дифузної інтенсивності навколо  $SL_0$  зсунутий в додатному  $q_x$  напрямку, що відповідає деформації стиску гратки GaAs матриці навколо точок. Біля  $SL_1$  дифузні піки навпаки зміщені в напрямку від'ємних  $q_x$ , тобто вони отримані від розтягнутих областей гратки, а саме від об'ємів КТ. Середня величина деформації в площині в точках, се-

Параметри/склад	D, нм	εGaAs	ε InGaAs	L, нм	σ, нм
0.20	$21.7 \pm 0.2$	_	_	—	—
0.25	$21.9 \pm 0.3$	_	_	_	_
0.28	$22.2 \pm 0.6$	-0.00030	0.0034	$62 \pm 2$	$15 \pm 6$
0.30	$22.4 \pm 0.1$	-0.00025	0.0040	$55 \pm 2$	$17 \pm 7$
0.35	$22.9 \pm 0.7$	0.00036	0.0044	$51 \pm 2$	$18 \pm 7$

редня латеральна відстань між точками та її статистична дисперсія представлені в табл. 3.1.

Табл. 3.1 Параметри зразків, отримані з Х-дифракційних вимірювань.

На рис. 3.5 приведено проекції дифузних піків  $SL_0$  сателіту для 113 відбиття на вісь  $q_x$  для зразків з вмістом індію 0.20, 0.28, 0.35. Чітко видно, що латеральні максимуми виникають тільки для площини розсіяння (110). При цьому спостерігається тільки один латеральний максимум. Латеральні максимуми вищих порядків погашені за рахунок великої дисперсії відстаней між КТ. У випадку симетричної дифракції латеральні максимуми теж спостерігаються, не дивлячись на значно меншу проекцію когерентної довжини падаючого випромінювання на вісь  $q_x$  в порівнянні з асиметричною дифракцією. Для площини розсіяння (1-10) латеральні максимуми відсутні майже для всіх зразків. Аналогічна картина спостерігається і для перерізу  $SL_1$  сателіту вздовж осі  $q_x$  (рис. 3.6).

Таким чином з положень сателітних піків можна визначити середню відстань між точками (табл. 3.1) в зразках з вмістом індію від 0.28. Для зразків з меншою концентрацією індію (0.20, 0.25) латеральний розподіл точок визначити неможливо, оскільки для них не спостерігаються дифузні піки. Отримані дані узгоджуються з даними ACM в межах експериментальної точності.



Рис. 3.5 Проекції дифузних піків  $SL_0$  сателіту для 113 відбиття на вісь  $q_x$  для зразків з вмістом індію 0.20, 0.28, 0.35 в напрямках площини дифракції (110) та (1-10).



Рис. 3.6 Проекції дифузних піків  $SL_1$  сателіту для 113 відбиття на вісь  $q_x$  для зразків з вмістом індію 0.20, 0.28, 0.35 в напрямках площини дифракції (110) та (1-10).

Наявність чітко вираженої асиметрії в появі дифузних піків наводить на думку про те, що латеральні сателіти викликані латеральними модуляціями складу в певному кристалографічному напрямку. Ці модуляції призводять до того, що точки, які утворюються на лініях збагачених індієм, володіють кращим впорядкуванням в напрямку [110] (напрямку модуляції складу), ніж в напрямку [1-10].

З ширини сателітів  $\delta Q = (\sigma \cdot q_x)^2 / L$  можна оцінити середньоквадратичну дисперсію  $\sigma$  відстаней між точками. Значення  $L/\sigma \approx 3 \pm 1$  для зразків зі складом 0.30, 0.35 свідчить, що положення КТ є корельованими до третього сусіда, тобто присутній тільки ближній порядок КТ.

Таким чином аналіз експериментальних кривих дифракційного відбиття свідчить про те, що розглядувана багатошарова структура має гарну кристалічну якість, а границя розділу між бар'єрними шарами GaAs та KЯ In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As з концентрацією індію 0.20-0.25 є чіткою та когерентною. Подальше підвищення концентрації індію в твердому розчині призводить до виникнення латеральних модуляцій складу з подальшим зародженням на них тривимірних утворень у вигляді острівців. При цьому формування латеральних модуляцій складу відбувається в строго визначених кристалографічних напрямках [1-10], що викликано анізотропією в розподілі пружних постійних та поверхневих зв'язків для напрямків [110] та [1-10] в структурі цинкової обманки. Ці модуляції складу і задають латеральне впорядкування утворюваних острівців в визначених напрямках, в нашому випадку вздовж [110] з періодичністю латеральних модуляцій. В напрямку [1-10] це впорядкування при малих концентраціях індію незначне, про що свідчать мапи розподілу дифузної інтенсивності в оберненому просторі.

### 3.2. Структурна анізотропія в In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs надгратках з ланцюгами квантових точок [139]

Незважаючи на велику кількість теоретичних та експериментальних даних існує ще велика кількість відкритих питань в інтерпретації результатів Х-променевої дифрактометрії від структур з квантовими точками та дротами. Наприклад, в деяких
випадках спостерігається розщеплення когерентної сателітної структури від надгратки [17,101]. В літературі існує декілька пояснень цього ефекту. Деякі пояснюють його існуванням двох просторово розділених областей в надструктурі, що виникають внаслідок латеральних модуляцій складу в короткоперіодних надгратках [101]. Також припускають існування двох надграток з дещо різними періодами [131]. Тим не менш не існує детального пояснення механізму розщеплення сателітів.

Нами досліджувались 17-періодні надгратки з ланцюгами квантових точок, для яких спостерігався описаний ефект. Зразки були вирощені методом молекулярно-променевої епітаксії на напівізольованих GaAs(001) підкладинках з розорієнтацією меншою 0.1°. Після росту 0.5 мкм буферного шару при 580 °C температуру було знижено до 540 °C для вирощення 17-періодної (7.6 МШ In<sub>0.4</sub>Ga<sub>0.6</sub>As/60 МШ GaAs) багатошарової структури з КТ.

Усі Х-променеві вимірювання проводились за методикою описаною в попередньому параграфі, а саме – зйомка мап оберненого простору та кривих дифракційного відбиття в різних геометріях для двох взаємо перпендикулярних площин дифракції з азимутальними кутами відповідно  $\Phi = 0^{\circ}$  та  $\Phi = 90^{\circ}$  по відношенню до напрямку [110].

На рис. 3.7 представлено радіальні скани, отримані поблизу 004 брегівського максимуму для  $\Phi = 0^{\circ}$  та  $\Phi = 90^{\circ}$ , та розрахована крива для ідеальної багатошарової системи з тетрагональною дисторсією. Пік від підкладинки, нульовий сателіт та сателіти вищих порядків позначено відповідно як *S*, *SL*<sub>0</sub> та *SL*<sub>±n</sub>. Для обох азимутальних напрямків чітко видно розщеплення сателітної структури.



Рис. 3.7 ВРХД скани поблизу 004 брегівського піку для  $\Phi = 0^{\circ}$  (червона),  $\Phi = 90^{\circ}$  (голуба) напрямків та, розрахований на базі динамічної теорії, скан (чорна лінія).

Для більш чіткого розуміння спостережуваних ефектів, проводилася зйомка мап оберненого простору в симетричній та асиметричній геометріях дифракціях. На рис. 3.8 приведено мапи для 224 відбиття. Розщеплення когерентних сателітів чітко видно для обох напрямків площини дифракції. Воно спостерігалось на мапах для усіх вибраних рефлексів. З отриманих даних були отримані такі значення періодів надгратки:  $L_1 = 19.7 \pm 0.1$  нм та  $L_2 = 19.02 \pm 0.08$  нм.

Не можна погодитись з авторами [140], які пояснюють розщеплення когерентних сателітів латеральними модуляціями складу за рахунок присутності в структурі ланцюгів квантових точок. Ланцюги напрямлені вздовж [1-10] кристалографічного напрямку і падаючий промінь для різних напрямків площини дифракції (110) та (1-10) відчував би їхній вклад в картину дифракції по різному. А в нашому ж випадку розщеплення когерентних сателітів проявляється однаково для обох вибраних площин дифракції. Крім того відомо [141], що система квантових точок, впорядкована вона чи ні, не дає вкладу в розсіяння від надгратки, а проявляє себе у вигляді дифузного розсіяння, яке супроводжує когерентну дифракцію. Те що спостерігали автори [140] на двокристальних сканах – простий вклад КТ в картину розсіяння, оскільки (як зазначалось в розд. 2) в двохвісній схемі з широко відкритим детектором інтегрується певна частина оберненого простору, і появу піків від КТ можна очікувати [141].



Рис. 3.8 224 мапи розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі для  $\Phi = 90^{\circ}$  (а) та  $\Phi = 0^{\circ}$  (б). *S* – максимум від підкладинки, *SL*<sub>0</sub>, *SL*<sub>1</sub>, *SL*'<sub>0</sub>, *SL*'<sub>1</sub> – ко-герентні сателіти від двох надграток.

Також, навряд цей ефект можна пояснити дисторсією кристалічної гратки шарів [142], оскільки тоді б він теж був азимутально залежним. Найбільш ймовірно розщеплення вертикальних сателітів пов'язано з існуванням двох дискретних періодів в НГ структурі [143]. Це підтвердили результати розрахунків спектрів (рис. 3.7, чорна лінія). Період надгратки формується змочуючим шаром та розділяючим GaAs шаром. Квантові точки не вносять вклад у формування цього періоду.

Повернемось до рис. 3.8. Розсіяння від впорядкованої системи квантових точок зосереджується у вигляді латеральних максимумів резонансного дифузного розсіяння. Поява цієї сателітної системи тільки для одного напрямку площини дифракції стає зрозумілим з огляду на попередній параграф. Слід зазначити, що на рисунку (*a*) ми бачимо чіткі латеральні аж до другого порядку. Це свідчить про високий ступінь впорядкування ланцюгів квантових точок в даному напрямку з періодом латеральних модуляцій складу, який складає  $L_{LCM} = 82 \pm 0.3$  нм. Атомно-силова мікроскопія дає це значення на поверхні  $L_{LCM} \approx 80$  нм. В той час як АСМ вимірювання характеризують тільки морфологію поверхні, дані Х-променевої дифрактометрії усереднюються по всьому об'єму зразка, що в нашому випадку включає усі 17 періодів надгратки.



Рис. 3.9 Кореляція між центрами розсіяння в прямому просторі (зліва) та сателітною структурою в оберненому просторі (справа) для строго вертикального та похилого наслідування центрів розсіяння.

Цікавим є факт, що ми спостерігаємо системи латеральних сателітів для обох різних областей НГ, причому одна з систем є нахиленою відносно нормалі до поверхні (напрямку росту [001]). Таким чином застосування високороздільної Хпроменевої дифрактометрії для зйомки двовимірних мап розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі не тільки підтвердило припущення про існування в зразку областей з двома різними значеннями періоду НГ, але й вказало також на те, що в одній з них система КТ є вертикально нахиленою на кут  $30.0^\circ \pm 2.5^\circ$ . Для підтвердження останнього факту було проведено Фур'є перетворення модельної структури (рис. 3.9).

# **3.3.** Самоорганізація квантових точок в структурах, вирощених в різних молекулярних потоках. Просторова гратка [144]

Застосування самоорганізованих систем КТ для виробництва приладів досить часто вимагає не тільки однорідності форми та розмірів КТ, але й їх чіткого просторового розташування [145]. Проте, отримати таку ідеальну надструктуру із наперед заданими властивостями є доволі складною задачею. Досягти необхідного ступеня як вертикального, так і латерального впорядкування можливо методами літографії [146-148], проте вони є занадто дорогими. Крім того існує велика ймовірність появи дефектів під час росту структур. Застосування ж класичного механізму Странскі-Крастанова для росту InGaAs КТ на GaAs(001) обмежене хаотичністю в розташуванні утворених острівців. Тим не менш під час росту КТ пружно взаємодіють між собою, що може покращити як однорідність, так і латеральну періодичність острівців.

В подоланні даної проблеми були зроблені певні успіхи. Наприклад, використання методики вертикального упакування КТ при відносно високих температурах росту [149] дало можливість отримати ланцюги впорядкованих КТ [146,148]. Також відомо про успішний підхід до впорядкування КТ на високоіндексних підкладинках [150]. Значного покращення оптичних властивостей InAs острівців було досягнуто при використанні молекулярного потоку As<sub>2</sub> замість As<sub>4</sub> [151,152], проте в цих роботах не розглядалось як зміна потоку впливає на впорядкування КТ.



Рис. 3.10 ACM зображення морфології поверхні зразків та швидке перетворення Фур'є, отриманих зображень. а,б – As<sub>4</sub>; в,г – As<sub>2</sub>.

Для вивчення цього впливу було взято два типи зразків InGaAs/GaAs, вирощених в середовищі As<sub>2</sub> та As<sub>4</sub> методом молекулярно-променевої епітаксії на напівізолюючих підкладинках GaAs(001). На підкладинці при температурі 580 °C був вирощений буферний шар GaAs товщиною 0.3 мкм. На нього при температурі 540 °C було нанесено 15 шарів InGaAs з KT, розділених 60 МШ шаром GaAs. Для обох типів зразків співвідношення тисків III/V компонент складав 15:1. Молекули As<sub>2</sub> отримувались шляхом розщеплення молекул As<sub>4</sub> при температурі 900 °C. Концентрацією індію в зразках складала x = 0.5, для яких товщина осаджуваного шару InGaAs складала відповідно 5.7 МШ (25% вище критичної товщини 2D-3D переходу).

На рис. 3.10 зображено морфологію зразків, на яких видно принципову різницю в виборі потоків  $As_4$  та  $As_2$ . В той час як для першого характерний анізотропний розподіл КТ вздовж напрямків [110] та [1-10] (утворення ланцюгів квантових точок), для  $As_2$  острівці чітко розділені і в межах ланцюгів, і поза ними. Вертикальне наслідування КТ дає надію сподіватись, що вони так само латерально впорядковані і в прихованих шарах. Тоді  $As_2$  можна використовувати для отримання ізотропного тривимірного впорядкування квантових точок. Однак відповідь на це змогла дати тільки Х-променева дифрактометрія, що усереднює розсіяння від усього статистичного ансамблю впорядкованої системи КТ.

Аналіз кривих дифракційного відбиття для симетричного 004 рефлексу (рис. 3.11) дав змогу отримати структурні параметри зразків, які приведено в табл. 3.2. Результати, отримані різними підходами, корелюють між собою. Як видно, рівень деформації для структур, вирощених в потоці As<sub>2</sub>, значно нижчий порівняно з As<sub>4</sub>.



Рис. 3.11 Симетричні 004 криві дифракційного відбиття. Синя крива – As<sub>2</sub>; Чорна крива – As<sub>4</sub>. S – пік підкладки, SL<sub>±n</sub> – когерентні сателіти.

			Середні	значення						
	Дефор	омація	вертик	ального	Параметри елементарної комірки КТ					
Потік	$\epsilon_z \times 10^{-3}$		періоду БШС							
		<i>d</i> , нм								
	GaAs*	InGaAs*	Номін.	Експер.	а, нм	<i>b</i> , нм	С, НМ	α,	β,	γ,
								град	град	град
As <sub>4</sub>	1.71/1.48	19.2/17.5	18.6	18.5	84±3	56±3	18.5±0.2	87±2	85±2	83±2
As <sub>2</sub>	1.41/1.16	18.4/17.0	18.6	18.8	100±3	66±3	18.8±0.2	82±2	79±2	87±2

Таблиця 3.2 Анізотропія деформацій в шарах GaAs та InGaAs і параметри елементарної комірки КТ (\* значення деформацій в кристалографічних напрямках [110] і [1-10])

Незважаючи на велику кількість отриманих даних, зйомка кривих дифракційного відбиття не дала відповідь на головне питання про впорядкування КТ в зразках. Для цього в різних дифракційних геометріях (004 та 404, 113) були зняті мапи оберненого простору, частина з яких приведена на рис. 3.12. Наявність системи латеральних сателітів вказує на гарне просторове впорядкування КТ. З відстані між боковими сателітами та їх нахилу по відношенню до напрямку росту було отримано значення латерального періоду НГ та кути вертикального нахилу системи КТ. Наявність розщеплених латеральних сателітів на мапах (рис. 3.12a) дає підставу вважати, що в цих зразках кут нахиленого росту КТ не є постійним.

Для зразків з вмістом індію x = 0.5 було додатково виміряно 004 мапи для різних азимутальних напрямків площини дифракції (рис. 3.13). Як виявилось, відстань між латеральними сателітами є азимутально залежною. Цього слід було очікувати виходячи з того, що площина дифракції для кожного азимутального напрямку по різному січе латеральну комірку КТ. Крім того, значення латерального періоду для азимутів  $\Phi = 45^{\circ}$  та  $\Phi = 135^{\circ}$  виявились різними. Це може свідчити про те, що латеральна комірка КТ є косокутною і до того ж нахиленою до напрямку [1-10] під кутом, як показали наші розрахунки, 7-8°. Це підтверджується і результатами АСМ.

Виходячи з усіх отриманих даних (латеральні та вертикальні періоди НГ, нахил системи сателітів для різних азимутальних напрямків) вдалося побудувати просторову гратку з квантовими точками у вузлах. В нашому випадку вона є примітивною триклинною (спотвореною кубічною) з кутами  $\alpha = 87^{\circ}$ ,  $\beta = 85^{\circ}$ ,  $\gamma = 83^{\circ}$  (Табл. 3.2). Схематично ця комірка зображена на рис. 3.14.



Рис. 3.12 Мапи оберненого простору, зняті в симетричних та асиметричних геометріях в площинах дифракції (110) та (1-10). Зразок з вмістом індію 0.5, вирощений в атмосфері As<sub>4</sub>.



Рис. 3.13 Деякі з симетричних 004 мап оберненого простору поблизу 0-го сателіта когерентної НГ для різних азимутальних напрямків площини дифракції. Зразок вирощено в As<sub>2</sub>.



Рис. 3.14 Схематичне зображення тривимірного кристала КТ.

Використання молекулярного потоку  $As_2$  для розщеплення КТ вздовж ланцюга можна пояснити, якщо розглядати поверхневу дифузію адатомів. Молекулам  $As_2$ , на відміну від  $As_4$ , не потрібно розриватись на поверхні GaAs для з'єднання з Ga. Тому вони достатньо довго можуть рухатися по поверхні, не змінюючи своєї енергії, і знайти сприятливе місця для зв'язку з Ga, перш ніж десорбуватись назад у парову фазу. Таким чином, молекули  $As_2$  заліковують поверхню швидше, ніж  $As_4$ , зменшуючи при цьому дифузію Ga та збільшуючи довжину дифузії In. Це зменшує латеральне перемішування InGaAs вздовж напрямку [1-10] при формуванні КТ і, як наслідок, останні гарно просторово розділені та однорідні по розміру та формі в кожному з шарів. Таке тривимірне впорядкування наноострівців сприятливо впливає на їх оптичні властивості.



Рис. 3.15 ω-скани, зняті поблизу нульового сателіта для різних азимутальних напрямків площини дифракції. Зразки вирощено в молекулярних потоках миш'яку: а) As<sub>2</sub>; б) As<sub>4</sub>.

Наостанок хочеться звернути увагу на одну особливість, яка проявлялась на 004 мапах для зразку з вмістом індію x = 0.5, вирощеного в потоці As<sub>2</sub>. Незалежно від азимутального напрямку площини дифракції на усіх цих мапах поблизу нульового сателіту від усередненої надгратки окрім латеральних сателітів, що відповідають за впорядкування КТ в площині, спостерігається також інша пара побічних максимумів, відстань між якими є постійною. Перерізи цих мап у вигляді  $\omega$ -сканів зображено на рис. 3.15. Аналіз літературних даних [153] вказує на наявність у НГ корельованої системи дислокацій невідповідності, які з'являються внаслідок великої невідповідності між шарами In<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>As та GaAs матрицею. Їх кореляція зумовлюється кінетичними (дія скінченої кількості джерел дислокацій) та енергетичними (перерозподіл дислокацій з метою мінімізації пружної енергії) факторами. Такий дифузний розподіл розсіяної інтенсивності Х-променів від дислокацій, *d* – товщина шару з дислокаціями. Збільшення густини дислокацій призводить до зникнення бокових максимумів та уширення основного піку.

Звичайно, поява дислокацій невідповідності в шарах зменшує напруги в системі, вирощеній в  $As_2$ . Проте в нашому випадку їх невелика кількість не може так суттєво зменшити рівень деформацій в порівнянні зі зразком, вирощеним в  $As_4$ . Тобто використання  $As_2$  для росту багатошарових структур з просторово впорядкованою системою КТ є більш привабливішим, ніж  $As_4$ .

# 3.4 Х-променеві дослідження деформаційного стану гетероструктур In-GaAsSbN/GaAs з квантовими ямами [154,155]

Метою даного параграфа є пояснення ефекту "wiggles" (осцилюючого характеру розподілу дифрагованої інтенсивності вздовж вектора дифракції), описаного в розділі 1. Нами проведено дослідження впливу анізотропії деформаційних полів і латерального розподілу компонент в КЯ і прилеглих до неї шарах на дифракційні спектри і двомірні карти розподілу інтенсивності в оберненому просторі.

Схема багатошарової структури з описаною КЯ представлена на рис. 3.16. Товщина КЯ - 6 нм, x = 0.22 (In). Товщина шару значно менше критичної товщини утворення дислокацій невідповідності.



Рис. 3.16 Схематичне зображення досліджуваних зразків.

Відомо, що легування азотом (N) в трикомпонентному  $In_xGa_{1-x}As$  не тільки веде до локальних структурних змін при замащенні As, але і до можливих змін локальної структури навколо домішок In. Додавання атомів In в GaAs збільшує постійну гратки і заборонену зону, тоді як впровадження атомів N в GaAs зменшує і постійну гратки, і заборонену зону [156,157]. Більше того, введення In і N може дати збільшення деформацій стиснення і розтягування в тонких плівках  $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$ , осаджених на GaAs. Тому, можливо, що морфологія гетерограниці розділу відіграє активну роль у формуванні фізичних властивостей такої багатошарової структури. При цьому, не дивлячись на те, що додавання N в InGaAs зменшує невідповідність граток між InGaAsN і GaAs, можливий так званий 3D-ріст (острівцевий) шару InGaAsN [80].

Далі з метою вивчення, як деформацій, так і розорієнтацій в лазерних структурах були одержані двомірні карти розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої гратки як симетричних 400, так і асиметричних 113 і 224. Карти оберненого простору для вузла 400 показали коливний розподіл інтенсивності вздовж нормалі до поверхні структури відоме в літературі як "змійка" (wiggles) (рис. 3.17).



Рис. 3.17 Карти розподілу інтенсивності навколо вузла 004 для структури InGaAsN для різних азимутальних напрямків відносно [110]: 1) 0; 90; 180 и 270 градусів.

Азимутальні дослідження розподілу інтенсивності для цього вузла показали наявність цієї змії для різних кристалографічних напрямів. Проте в азимутальному напрямі [110] цей розподіл виявився дуже широким на ω-скані. Цей скан, одержаний для піку підкладки, має в деяких зразках дуже велику напівширину (рис. 3.18).

Причому в деяких випадках виразно спостерігається декілька максимумів, що свідчить про наявність декількох розорієнтованих областей (блочна структура), які відповідають шарам арсеніду галію, в структурі.



Рис. 3.18 Поперечні скани поблизу вузла 004 шарів GaAs для структур InGaAsN.

Аналіз карт розподілу інтенсивності в оберненому просторі приводить до наступної моделі деформації і розорієнтації в цих структурах. Наявність "змії-wiggles" в усьому інтервалі азимутальних кутів свідчить про те, що розорієнтації не мають яскраво вираженого одного напрямку, тобто, мають різну кристалографічну прив'язку.

Як зазначалось в п.3.1, під час епітаксійного осадження InGaAs-GaAs шарів процес формування латеральних модуляцій складу істотно змінює характер розподілу пружних деформацій у порівнянні з плоскими шарами. При цьому реалізується анізотропний характер розподілу деформацій відносно кристалографічних напрямків типу <011>, що обумовлює анізотропію структурних параметрів (наприклад, пониження структурної симетрії), котра спостерігається в планарних гетерострукту-

рах. При наявності напруг композиція сполуки буде варіюватись вздовж напрямку хвилястості, тому що, більші атоми прагнуть об'єднуватись в кластери, коли гратка розширена, а менші – коли гратка стиснута.

Симетрія періодичних структур плоских доменів (модуляцій складу) визначається як симетрією тензора поверхневих натягів, так і симетрією об'ємних пружних модулів підкладки. Головні осі тензорів поверхневих натягів GaAs i InAs — [1-10] і [110], а об'ємні пружні властивості матеріалів визначаються напрямками осей найлегшого стиску [100] і [010]. Таким чином, існує перехід від орієнтації пружних доменів при субмоношаровому покритті в напрямку [1-10], що спостерігалось в роботах [158,159], до орієнтації в напрямку [100] і [010] при покритті 1.0-1.5МШ. Цей перехід може бути інтерпретований як результат росту внеску розузгодження параметрів гратки в полі пружних напруг в порівнянні з внеском, обумовленим стрибком тензора поверхневих натягів на границі двох фаз, таке зростання пов'язане із збільшенням об'єму осадженого InAs. Тобто, відбувається плавне закручування кристалографічних площин гратки від напрямку [1-10] до напрямку [100] в більш близьких до поверхні квантової ями областях, яке викликане наявністю областей з різним складом. Те, що ці перетворення відбуваються в ямі і ближніх інтерфейсах підтверджує і поведінка розподілу інтенсивності на асиметричних рефлексах (рис. 3.19).

Ефект "змії" не спостерігається ні для 224, ні для 113 рефлексів. Чисельні розрахунки також підтвердили, що область ями не дає внеску в асиметричну дифракцію, а визначається вона в основному захисним шаром.

Оскільки домени не спостерігаються в структурах із складом індію 0.2, то можна зробити висновок про те, що стимулятором цих формувань є значення концентрації атомів Іп. Підтвердженням цьому є результати, продемонстровані в п.4.1. Структурна анізотропія впливає на дифракцію рентгенівських променів, що дозволяє використовувати високороздільну Х-променеву дифрактометрію для дослідження анізотропії пружних деформацій.



Рис. 3.19 Карта розподілу інтенсивності навколо вузла 113 для структур InGaAsSbN.

Вивчення структур з когерентно напруженою InGaAs(N) одиничною квантовою ямою методами ВРХД доводить, що введення сурми приводить до поліпшення меж розділу в гетеропереході навіть в потенційних ямах, що містять азот, вирощених при відносно високих температурах. Проте, це не може запобігти утворенню розширених дефектів, які видно на картах ВРХД як коливання інтерференційної картини у напрямі нормалі до (100) поверхні, відоме як "змія". "Змія" спостерігається у всіх досліджуваних структурах, і припускається, що вона викликана дією двох чинників: симетрії власного тензора зовнішньої напруги і симетрії пружного модуля матеріалу підкладки, який приводить до змини нахилів кристалографічних площин з глибиною як в потенційній ямі, так і в межі бар'єрного шару. Останнє приводить до формування анізотропного характеру розподілу деформацій, а також розорієнтацій гратки в багатошаровій структурі, що викликає орторомбічні відхилення від тетрагональної псевдоморфної деформації, характерної для гетеросистеми з плоскими шарами.

#### Висновки до розділу 3

В цьому розділі досліджено та дано пояснення деяким дифракційним ефектам, які спостерігаються на картах розподілу інтенсивності в оберненому просторі.

Зокрема, показано, що:

- розщеплення когерентних сателітів і нахил латеральних сателітів на дифракційних картинах від БШС з КТ, викликані прямим і похилим наслідуванням ланцюгів КТ при рості структур внаслідок збою в латеральній модуляції складу.
- існують особливі умови 2D-3D переходів в багатошарових структурах In-GaAs/GaAs, відмінні від класичного методу Странскі-Крастанова та дано пояснення стартовим умовам латерального впорядкування КТ;
- існують значні відмінності самонаправленого впорядкування структур з масивами КТ при застосуванні в технологічному процесі росту потоків миш'яку різного молекулярного складу. Вони визначаються процесами поверхневої дифузії та формуванням полів пружних деформацій в епітаксійних структурах;
- 4. природа коливного характеру інтерференційної картини на картах оберненого простору у напрямі нормалі до (100) поверхні, відомого як "змія" ("wiggles"), викликана симетрією власного тензора зовнішньої напруги і симетрією пружного модуля матеріалу підкладки, який приводить до зміни нахилів кристалографічних площин з глибиною як в потенційній ямі, так і в межі бар'єрного шару;

# РОЗДІЛ 4. ЗОВНІШНІ ВПЛИВИ НА СТРУКТУРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР

## 4.1. Вплив радіуса кривизни багатошарових наноструктур на дифракцію Хпроменів [160]

Для досягнення оптимальних умов росту напівпровідникових гетероструктур InGaAs/GaAs з квантовими точками необхідно встановити механізми взаємодії між пружною релаксацією деформацій та ступенем впорядкування утворених квантових точок. Це потребує інформації про цілий ряд структурних та деформаційних характеристик, зокрема, товщини шарів та період, значення деформації гратки в шарах та на границях.

В літературі можна знайти розбіжності, щодо трактування змін в значенні періодів НГ структур під впливом змін деформаційних полів, викликаних процесами самовпорядкування квантових точок, та різними зовнішніми факторами [161,162,17]. Питання зміни періоду багатошарової періодичної структури при розорієнтації підкладки досліджувалось в роботах [142,163]. Однак, існують певні неясності в розумінні факторів, які впливають на процес зміни положення нульових сателітів НГ (середню деформацію в періоді). Пошук інформації про вплив пружного згину багатошарової системи на поведінку картин дифракції не дав бажаного результату. В той же час в роботі [164] було показано, що при пружному згині монокристалу виникає лінійна зміна  $\Delta d$  міжплощинної віддалі  $d: \Delta d/d \cong -ctg \theta_B \Delta \theta^{(bent)}$ , що наряду з рефракцією викликає додаткове зміщення  $\Delta \theta^{(bent)}$  кута Брегга. Причому ця величина зміщення залежить від глибини проникнення випромінювання в кристал та радіусу згину кристалу в площині дифракції та в перпендикулярній площині і товщини кристалу.

Теоретичним дослідженням впливу кривизни кристала на кутове положення і розширення дифракційних піків присвячений цілий ряд робіт [165-167]. Проблемі взаємозв'язку деформації з кривизною для багатошарових структур була присвячена робота [168]. Однак, цілий ряд дифракційних ефектів залишається без пояснення і відповідного трактування.

Тому, виникло питання встановлення зв'язку між середньою деформацією в шарах структури та її кривизною, а також впливу цієї кривизни на періодичність НГ, визначену з Х-променевих вимірювань.

Другою важливою задачею є встановлення причин зміни періоду НГ з температурою відпалу, а також моделювання впливу зміни кривизни та рівня деформацій в періоді НГ на віддаль між сателітами, на основі отриманих експериментальних даних.

Для вирішення поставлених задач були вирощені 17-періодні надгратки  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  з ланцюгами квантових точок на напівізольованій підкладці арсеніду галію (100) на установці МПЕ. Буферний шар GaAs товщиною 0.5 мкм вирощувався при температурі підкладки 580 °C. Потім температуру підкладки знижували до 500 °C для нанесення епітаксійних шарів з параметрами приведеними в табл. 4.1. Зразки підлягали швидкому термічному відпалу в атмосфері аргону протягом 30 секунд (зразок №1) та 75 секунд (зразок №2) при різних температурах.

№ зразка	t <sub>1</sub> , InGaAs	t <sub>2</sub> , GaAs	х, вміст індію
1	5,7 ML	67 ML	0,5
2	7,6 ML	67 ML	0,4

Табл. 4.1 Технологічні параметри досліджуваних зразків.

Для визначення кривизни, періоду надгратки, параметру гратки та деформацій проводилася зйомка кривих дифракційного відбиття *СиК*<sub>α</sub> випромінювання для симетричного 004 рефлексу.

На рис. 4.1 представлено результати дифракційних вимірювань. Дифракційні криві відбиття відображають латерально усереднену НГ-кову структуру зразків. На цих кривих видно сателіти НГ високих порядків, котрі служать якісним критерієм структурної досконалості зразків у вихідному стані. Пік, позначений, *S* відповідає дифракції від підкладки, а  $SL_n - n$ -ий сателітний пік латерально усередненої НГ. Віддаль між сателітами дорівнює  $2\pi/T$  (T – період НГ), а віддаль між SL<sub>0</sub> і піком під-кладки пропорційна відносній різниці вертикального параметра гратки підкладки і



Рис. 4.1 Симетричні 004 криві дифракційного відбиття а) зразок №1: сіра крива – вихідний (відпалений при 630 °С), чорна крива – відпал при 700 °С; б) зразок №2: сіра крива – вихідний, чорна крива – відпал при 600 °С;

середнього параметра НГ. Тут варто відмітити, що для досліджуваних зразків величина періоду не залежить від їх азимутального положення відносно кристалографічного напрямку площини дифракції, тому його зміну не можна пояснювати дисторсією гратки [94].Із графіків на рис. 4.1 видно, що при зміні температури відпалу змінюється період НГ (віддаль між сателітами НГ). Отримані з експерименту значення періодів НГ, а також їх зміна з температурою приведені на рис. 4.2.

Положення сателітів нульового порядку по відношенню до піка від підкладинки вказує на середній по періоду рівень деформації, а також концентрацію індію в шарі In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs. Він змінює своє положення із зміною температури відпалу (рис. 4.1). В основному, ці зсуви нульових сателітів відносно GaAs підкладки з ростом температури відпалу можуть бути викликані релаксацією напруг під впливом інтердифузії. Однак, це не може пояснити зміну величини періоду тобто віддалі між сателітами при термічному впливі.

Зразок	t <sub>відпалу</sub> , °С	Т <sub>експер.</sub> , Å	T <sub>reoper.,</sub> Å	R, м	$\Delta a/a \cdot 10^3$ , по (2)	$\Delta a/a \cdot 10^3$ , IIO (1)
	иарінгодаций	10/ 0				7 52+0 04
	нсвідпалении	194.0	-	-	-	7.32±0.04
	570	212.0	209.58	11.95	6.76±0.07	7.27±0.08
1	630	211.5	209.38	12.98	6.61±0.02	7.20±0.07
	650	202.0	202.69	13.54	6.21±0.04	7.02±0.07
	700	198.2	197.31	15.67	5.31±0.05	6.33±0.02
	невідпалений	188.4	188.29	8.91	10.11±0.02	4.74±0.03
2	600	197.9	200.82	7.26	11.82±0.04	4.52±0.04
	750	182.5	-	-	-	4.77±0.04

Табл. 4.2 Залежності величини періодів НГ, кривизни системи та деформацій в періоді НГ від температури відпалу для різних зразків.

Для усіх зразків спостерігалася зміна вертикального періоду надгратки із температурою відпалу (рис. 4.1, 4.2). Аналогічний ефект спостерігався в роботі [169], хоча й без його пояснення. В роботі [170] було показано, що зміна розмірів та складу квантових точок після швидкого термічного відпалу пов'язане з інтердифузією атомів Іп та Ga на інтерфейсі між шарами. Для температур швидкого відпалу порядку 600-700 °C значних змін в структурних та оптичних властивостях не спостерігається, незважаючи на зростання швидкості інтердифузії атомів Іп та Ga між квантовими точками та змочуючим шаром [161]. Незважаючи на те, що ці процеси є домінуючими під час відпалу, вони не мають такого впливу на періодичність надгратки. Середня надгратка залишається незмінною, оскільки матеріал з кристалу нікуди не дівається. Єдиним реальним поясненням зміни періоду надгратки може бути вплив кривизни, якою володіють усі епітаксійні структури з пружними деформаціями в шарах.

Результати вимірювань показали, що для зразка №1 радіус кривизни в процесі швидкого термічного відпалу зростає, в той час як для зразка №2 – навпаки зменшується. Це можна пояснити релаксацією напруг між шарами надгратки.

Лінійна залежність середнього параметру надгратки від величини зсуву в двошаровому наближенні задається співвідношенням [164]:

$$\Delta a_c / a_c \cong -ctg\theta_B \Delta \theta \quad , \tag{4.1}$$

де  $a_c$  – середній параметр надгратки,  $\Delta \theta$  – величина зсуву нульового сателіту.

Згідно [168] можна визначити величину деформації через радіус кривизни кристалу:

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{t_0^2}{6t_1} \frac{1 + 6(t_1/t_0)}{R} \frac{1 + \nu}{1 - \nu},$$
(4.2)

де t<sub>0</sub> – товщина підкладки, t<sub>1</sub> – товщина надгратки, *R* – виміряний радіус кривизни, v – коефіцієнт Пуассона.

Результати розрахунку деформацій за формулами (4.1) і (4.2) приведені в табл. 4.2.

Як видно, розрахунки деформацій для зразка №1 корелюють між собою, чого не можна сказати для зразка №2. Ймовірно це пов'язано зі складною структурою самого зразка (див. п.4.2). Наявність у цьому зразку двох окремих областей з різними періодами. Це видно і на спектрі, приведеному на рис. 4.1б (розщеплення когерентних сателітів). Тобто для такої структури неможливе застосування двошарового на-



Рис. 4.2 Залежність вертикального періоду надгратки від температури відпалу. Штрихова та суцільна лінії відображають значення технологічно заданих періодів, відповідно, для зразка №1 та №2.

Як видно з результатів вимірювань, приведених у табл. 4.2, збільшення радіуса кривизни кристалу призводить до зменшення періоду надгратки.

Для обох зразків характерна однакова поведінка залежності вертикального періоду надгратки від температури відпалу (рис. 4.2). Як видно з цього рисунку періоди вихідних зразків значно менші за технологічно задані. Це пов'язано з тим, що в процесі росту епітаксійних структур, зразок набуває певної кривизни, викликаної пружними деформаціями між шарами надгратки внаслідок різниці їх постійних гратки. До температур відпалу 600-630 °С період зростає, в той час як радіус кривизни зменшується (зразок №2). Для температур 600-700 °С період надгратки зменшується, а радіус кривизни – зростає. При збільшенні температури відпалу (вище 750 °С) період прямує до технологічно заданого. При цих температурах йде повне розчинення квантових точок [161].



Рис. 4.3 Залежність періоду надгратки від деформацій, викликаних кривизною структури.

В табл. 4.2 наведено теоретично розраховані та експериментальні значення періодів досліджуваних надграток. Різниця між ними не перевищує 2 %. Період надгратки розраховувався через кутове положення сателітів в спектрі розсіяної інтенсивності з урахуванням деформації, викликаної кривизною кристалу:

$$T = \frac{\lambda - 2l_2 K x \varepsilon \sin \theta_B}{2 \cos \theta_B \Delta \theta}, \qquad (4.3)$$

де  $l_2$  – товщина шару In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, *x* – концентрація індію в шарі,  $\varepsilon$  – деформація,  $K = (C_{11} + 2C_{12})/C_{11}$  – множник, що враховує тетрагональну дисторсію кристалічної гратки; тут  $C_{11}$  і  $C_{12}$  – пружні постійні. На графіку (рис. 4.3) наведено залежність періоду НГ від деформації системи (радіуса кривизни). За початковий період ми прийняли технологічно заданий для зразка №1.

Таким чином, з приведених результатів слідує основний висновок, що величина періоду надграткової системи, виміряна за допомогою Х-променевих методів, залежить від радіусу згину зразка. Тому при визначенні періоду багатошарової структури з експериментальних КДВ необхідно враховувати поправку на цю кривизну.

Очевидно, що невідповідність технологічно заданих значень періодів та отриманих експериментально безпосередньо після вирощування для деяких випадків пояснюється саме цим ефектом. Зміна радіуса кривизни багатошарової структури в процесі термовідпалів корелює з рівнем макродеформації, отриманим різними методами.

# 4.2. Термічно-стимульована модифікація структурних властивостей впорядкованих InGaAs/GaAs надграток

Характер Х-променевого розсіяння від надграток може бути ще складнішим, ніж це описано в попередньому параграфі. Так для одного з зразків спостерігалась цікава картина дифракції, яка змінювалась при температурному відпалі.

Досліджуваний зразок являв собою 17-періодну In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs надгратку дротоподібного типу з товщинами 33/189 Å. Тобто технологічно задане значення періоду НГ становило 222 Å.

Суть проблеми полягає в тому, що на дифракційних картинах (рис. 4.4) спостерігається нахилений характер системи когерентних сателітів, причому нахил сателіту збільшується з ростом його порядку. Крім того, дуже розширеними є максимуми в напрямку осі  $q_x$ . Нахили та ширини сателітів змінюються для кожної з температур відпалу, причому вони різні для різних напрямків площини дифракції (азимутальний кут  $\Phi = 0^{\circ}$  та 90°). Варто відмітити, що вже для вихідного зразка, картина розсіяння відрізнялась від класичної. Широкі максимуми та їх нахили хоч невеликі, але спостерігались. Для температури відпалу 850 °C дифракційній мапи стали ідентичними для обох напрямків площини дифракції.

Нахил системи когерентних сателітів свідчить про існування в структурі надгратки різних розорієнтованих областей з плавною зміною періоду. Для обох напрямків площини дифракції в рамках одного зразка та різних температур відпалу значення періодів D відрізняються як за величиною, так і за інтервалом зміни. Їх значення та напівширини максимумів на  $\omega$ -скані в області підкладинки наведено в таблиці 4.3:

	Ф=	= 0°	$\Phi = 90^{\circ}$		
	FWHM,			FWHM,	
	D, Å	Кут.сек	D, Å	Кут.сек	
Вихідний	203-209	90	200-208	76	
650 °C	188-193	266	182-201	572	
750 °C	197-200	126	204-212	242	
850 °C	227	-	229		

Табл. 4.3 Значення вертикального періоду НГ та напівширини максимумів для азимутальних напрямків площини дифракції 0° та 90° по відношенню до напрямку [1-10].

Слід відмітити, що до цього нами спостерігалась азимутальна залежність періоду надгратки [163] даного зразка внаслідок розорієнтації підкладинки, але це не пояснює складної картини дифракції для кожної вибраної площини розсіяння.

3 отриманих даних слідують такі міркування:

- Навіть для вихідного зразка середнє значення періоду НГ не відповідає технологічно заданому;



Рис. 4.4 Мапи оберного простору для симетричного 004 рефлексу від досліджуваних зразків знятих для напрямків площини дифракції а) (110) та б) (1-10).

- При температурі відпалу 650 °С період надгратки ще більше зменшується. З підвищенням температури відпалу він починає рости і при 850 °С досягає технологічного значення;

Для різних напрямків площини дифракції періоди НГ при однакових температурах відпалу відрізняються між собою як за значенням, так і за межами зміни.
 При Т<sub>відп.</sub> = 850 °C вони обидва прямують до технологічного значення;

- Такий характер зміни періоду НГ неможливо пояснити тільки зміною кривизни зразка. Тут присутні й інші фактори, що були закладені ще під час росту зразка.

Подальше збільшення температури відпалу призвело до практично повного розчинення КН. Це підтверджується наступними фактами. По-перше, зростання вертикального періоду НГ (зростання товщини змочувального шару). По-друге, на картах зникає система нахилених когерентних сателітів, тобто зникає як концентраційна, так і деформаційна неоднорідність квантових ям. По-третє, зникнення латеральних сателітів в різних кристалографічних напрямках на поверхні та прямування періоду НГ до технологічно заданого свідчить про те, що структура стає аналогічною до двохвимірної планарної.

Той факт, що із збільшенням температури відпалу змінюється період структури, може бути пов'язаний із зміною "ефективної" товщини 2D шарів внаслідок сильних процесів масопереносу в інтерфейсних областях між КН і оточуючими їх матеріалом (змочуючий шар та GaAs розділяючий шар). Це приводить до "виведення" цих областей з процесу когерентного розсіяння Х-променів (зміні періоду структури) та істотному розширенню інтерференційних максимумів. Підтвердженням зробленого висновку служить і поява сильного дифузного розсіяння, що оточує вузол оберненої гратки GaAs підкладки, яке набагато сильніше того, що спостерігається для невідпалених дротоподібних зразків. 4.3. Вплив температури росту і наступного термовідпалу на деформаційні та структурні характеристики БШС. Дислокації в шарах з квантовими точками

Як зазначалось вище у вступі, до теперішнього часу залишаються відкритими багато проблем пов'язаних з механізмами впорядкування та покращенням однорідності за розмірами та складом квантових точок, особливо в багатошарових структурах. Одним з можливих засобів впливу на трансформацію цих параметрів є варіації ростової температури, а також термічний відпал вирощених структур. Даний параграф і буде присвячено дослідженням зміни структурних і деформаційних характеристик багатошарових структур  $In_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs$  при варіації температур росту та відпалу. А оскільки, як було відмічено в попередньому розділі для зразків, вирощених в молекулярному потоці  $As_2$ , характерним є наявність дислокацій невідповідності, то тут ми поствили завдання прослідкувати, як змінюється кількість дислокацій невідповідності (ДН) з температурою росту і відпалу. Другою задачею було вияснити їх (ДН) роль в процесах релаксації структур.

Досліджувалась серія зразків, вирощених в потоці  $As_2$  при різних температурах підкладки 510°C, 520°C, 530°C, 540°C, 555°C. В подальшому, кожний із зразків піддавався швидкому температурному відпалу при наступних температурах 650, 750 та 825 °C.

Зразок	Тросту, °С	Період, D	ε·10 <sup>3</sup>
sc192	510	195	6.2751
sc199	520	201	5.2884
sc202	530	204	6.2783
sc203	540	211	6.5055
sc200	555	200	4.3469

Табл. 4.4 Вихідні параметри досліджуваних зразків



Рис. 4.5 Симетричні 004 мапи оберненого простору для вихідних зразків, зняті для двох взаємо перпендикулярних площин дифракції (110) та (1-10).

Для усіх зразків було проведено вимірювання симетричних 004 та асиметричних 224, 113 кривих дифракційного відбиття та мап оберненого простору в двох взаємоперпендикулярних площинах дифракції (110) та (1-10). Серія КОП для вузла 004 приведена на рис. 4.5.

Для всіх радіальних ω-20 сканів характерна асиметрія розподілу інтенсивності поблизу когерентних сателітів, яка збільшувалась з порядком сателіта (рис.4.6). Найбільш явно вона проявилась для зразків, вирощених при найнижчій (510°C) та найвищій (555°C) температурах підкладки, причому з правого та лівого боків сателітів відповідно. З огляду на проміжні температури росту можна стверджувати, що ця асиметрія плавно "рухалася" від крайнього правого до крайнього лівого положення.



Рис.4.6 Симетричні 004 криві дифракційного відбиття для вихідних зразків, вирощених при різних температурах підкладинки.

Дана асиметрія зберігалась для усіх температур відпалу зразків. Шляхом процедури фітування експериментальних кривих з теоретичними було встановлено, що дана асиметрія відповідає неоднорідному розподілу індію в шарах БШС. Нами було також проаналізовано поведінку деформаційних і геометричних параметрів в залежності від температури росту структур (рис.4.7).



4.7. Значення середньої висоти КТ (синя), вертикального періоду НГ (червона) та середнє значення деформації в НГ (фіолетова) для вихідних зразків.

На даному рисунку приведено залежності середньої деформації в періоді НГ, а також середня висота КТ в залежності від температури росту. Як видно з цих графіків, для проміжних температур росту (530, 540 °C) деформація є максимальною, але разом з тим зростає і висота КТ. Тобто з одного боку, великі деформації свідчать про досконалий когерентний ріст, а з іншого – зростають розміри КТ, що є не дуже хорошим показником. Варто відмітити, що вертикальне значення періоду БШС також досягає певного максимуму в області температури 540 °C. Звідси слідує досить фундаментальний висновок, що період БШС задається не тільки товщиною розділяючих арсенід-галієвих шарів і змочуючого шару InGaAs, а цими параметрами плюс висота КТ. Основні характеристики БШС для різних температур росту приведені в табл.4.4. Деякі перетворення відбуваються і з латеральним періодом КТ. Як видно з рис.4.8 він плавно зростає.

Цей факт можна пояснити зростанням вертикального періоду, оскільки значення латерального періоду L визначається співвідношенням  $L \propto 3.5 \cdot T_{vert}$ .



Рис. 4.8. Значення латерального періоду НГ для напрямків площини дифракції (1-10) (синя), (110) (червона) та з даних АСМ (зелена).



Рис. 4.9. Поперечні 004 ω-скани поблизу нульового сателіту для вихідних зразків, вирощених при різних температурах підкладинки.
Для поперечних  $\omega$ -сканів поблизу нульового сателіта теж була виявлена певна особливість (рис. 4.9). На всіх сканах присутні латеральні сателіти для кутових положень -500, -300, -100, 100, 300, 500 кут.сек. Хоча тут теж кожен із зразків "поводив" себе по різному. Для деяких з них також проявлялась асиметрія в інтенсивності піків, деякі латеральні сателіти зовсім випадали. Але для всіх зразків, з підвищенням температури відпалу, зникали сателіти більш високих порядків, а дифузний фон зростав і поступово перетворювався на дзвоноподібний. Найбільш, скажімо так, "стій-ко" проявив себе зразок sc202(530 °C) для якого навіть при найвищій температурі відпалу 825°C, незважаючи на значне уширення загального дифузного фону, ще було видно латеральні сателіти в положеннях -300 та 300 кут. сек.

Наступна частина даного параграфа присвячено дослідженням впливу термовідпалу на зміни параметрів БШС, вирощених при різних температурах. На рис. 4.10 приведені КДВ ( $\omega$ -2 $\theta$  скани) для зразка вирощеного при T = 510 °C, як вихідного, так і після відпалів при трьох температурах.



Рис. 4.10 Симетричні 004 криві дифракційного відбиття для зразка, вирощеного при температурі підкладки 510°С та відпаленого при температурах 650, 750 і 825°С

На наступному рисунку 4.11 приведено *ω*-скани, зняті в області нульового сателіта когерентної надгратки.



Рис. 4.11 Симетричні 004 ω-скани в області нульового сателіта для зразка, вирощеного при температурі підкладки 510°С та відпаленого при температурах 650, 750 і 825°С

Аналізуючи ці рисунки, можна відмітити, що з ростом температури навколо нульового сателіта сильно зростає рівень дифузного фону. Це є свідченням того, що в структурі відбуваються релаксаційні процеси. Збільшення кута положення максимуму огинаючої дифузного фону свідчить про зменшення параметра гратки арсеніду галію. Релаксація може відбуватися в даному випадку шляхом перерозподілу компонентного складу, або виникнення дислокацій невідповідності на границях. Про перебіг релаксаційних процесів свідчать і  $\omega$ -2 $\theta$  скани. Для температури відпалу (750 °C) наплив з боку більших кутів дифракції зменшується, що є свідченням більш симетричного профілю розподілу індію в шарах структури.



Рис. 4.12 Симетричні 004 криві дифракційного відбиття для зразка, вирощеного при температурі підкладки 530 °C та відпаленого при температурах 650, 750 і 825 °C

Розглянемо тепер поведінку рентгенівських спектрів для БШС, вирощених при температурі 530°С. Тобто для температури, де вже при рості структур відбуваються певні перетворення. Розглянемо спектри відбиття для цієї структури, та їх еволюцію з відпалом.  $\omega$ -2 $\theta$  скани приведені на рис. 4.12, а  $\omega$ -скани відповідно, на рис. 4.13.

На відміну від попередньої температури росту, ці зразки з відпалом ведуть себе дещо інакше. По-перше, дифузний фон (він значно вищий ніж в попередньому випадку) практично не змінюється з ростом температури відпалу. Однак, положення максимуму огинаючої на  $\omega$ -сканах та нульового сателіта в іншому скані змінюють своє положення немонотонно. Тобто, деформаційні зміни відбуваються без особливо очевидного процесу дефектоутворення. Це можна швидше пояснити процесами дифузійного характеру.



Рис. 4.13 Симетричні 004 ω-скани в області нульового сателіта для зразка, вирощеного при температурі підкладки 530°С та відпаленого при температурах 650, 750 і 825°С

I нарешті, розглянемо поведінку з термовідпалом зразків, вирощених при температурі 555 °С. Аналогічні спектри відбиття приведені на рис. 4.14 та 4.15.

Як показує аналіз цих графіків, наряду з високим рівнем дифузного фону спостерігається досить чітко виражена симетрія дифузних максимумів на  $\omega$ -сканах. Це може свідчити про те, що в латеральному напрямку ніяких змін в деформаційному стані практично не відбувається. Те саме можна сказати і з аналізу  $\omega$ -2 $\theta$ -сканів. Тобто з точки зору деформаційного стану — це найбільш стабільна структура. Але наявність досить значного дифузного фону та чітко виражені латеральні сателіти при малих кутових відхиленнях є свідченням того, що в структурі присутні дислокації [153]. Про значну ступінь релаксації структури свідчать і відносно малі значення (найменші з усіх зразків) деформації в обох напрямках, як латеральному, так і вертикальному.



Рис. 4.14 Симетричні 004 криві дифракційного відбиття для зразка, вирощеного при температурі підкладки 555°С та відпаленого при температурах 650, 750 і 825°С



Рис. 4.15 Симетричні 004 ω-скани в області нульового сателіта для зразка, вирощеного при температурі підкладки 555°С та відпаленого при температурах 650, 750 і 825°С

Зведена інформація про стан середніх деформацій в структурах, періодах БШС приведена в табл. 4.4.

Зразок	Т <sub>відп</sub> , °С	Період, D	ε·10 <sup>3</sup>
sc192#2	650	192	6.2392
sc192#3	750	193	6.1342
sc192#4	825	192	5.9448
sc199#2	650	197	5.2272
sc199#3	750	197	5.2749
sc199#4	825	-	-
sc202#2	650	209	6.0370
sc202#3	750	201	6.2714
sc202#4	825	194	6.1163
sc203#2	650	205	6.9070
sc203#3	750	211	6.6474
sc203#4	825	199	6.6474
sc200#2	650	199	4.1742
sc200#3	750	200	4.1888
sc200#4	825	200	4.2260

Табл. 4.4. Параметри зразків, отримані з Х-дифракційних даних.

В гарній теоретичній роботі Каганера [153] було показано, що описаний нами характер появи латеральних сателітів пов'язаний з наявністю в шарах сітки 60°-х дислокацій невідповідності, положення яких корелює між собою. Такий дифузний розподіл розсіяної інтенсивності Х-променів від дислокацій невідповідності характерний для їх малої густини  $\rho d \ll 1$ , де  $\rho$  – густина дислокацій, d – товщина шару з дислокаціями. Збільшення густини дислокацій призводить до зникнення бокових максимумів та уширення основного дифузного фону. Тому можна стверджувати, що

в нашому випадку під час швидкого температурного відпалу в зразках збільшується кількість дислокацій невідповідності.

Тут слід відмітити, що для зразків sc192 та sc200 вертикальний період надгратки зберігався з відпалом, чого не можна сказати про зразок sc202. Забігаючи наперед можна припустити, що в нашому випадку вертикальний період НГ зберігався саме за рахунок збільшення кількості дислокацій невідповідності, і відповідного збільшення ступеню релаксації шарів.

Кутова відстань 200 кут. сек. між латеральними сателітами в оберненому просторі відповідає значенню 1490 Å в прямому. В роботі [171] автори стверджували, що ця відстань відповідає товщині шару з дислокаціями, а асиметрія в інтенсивності відповідних парних сателітів пов'язана з різницею  $\delta\rho$  в компонентах нахилу вектора Бюргерса  $\delta\rho = \rho_+ - \rho_-$ , де  $\rho_+$  і  $\rho_-$  густини дислокацій з протилежними *z*компонентами вектора Бюргерса. Проте, якщо з останнім твердженням можна погодитись, то перше підлягає великому сумніву, оскільки невідомо, як з Х-променевих даних, усереднених по латеральній періодичності шару, можна отримати його товщину.

Нами були проаналізовані віддалі між сателітами навколо 004 і 113 відбиттів для всіх зразків. Аналіз показує, що сателітна віддаль  $\delta$  не залежить від кристалографічного напрямку. З положень сателітів різних порядків, виміряних з обох боків брегтівського піку  $\pm \delta \cdot n$ , була визначена середня віддаль  $\delta$  для всіх зразків.

Віддаль між дислокаціями в нашому випадку визначається формулою  $D = 2\pi/\delta$ . У випадку якби всі деформації невідповідності були викликані 90° дислокаціями невідповідності, то віддаль між дислокаціями  $D = |\mathbf{b}|/f_m$  складала б приблизно 75-80Å. Однак оцінка результатів показує, що дислокаційна віддаль завжди значно більша, ніж приведена вище.

Релаксація шару є результатом виключно 90° дислокацій, якщо значення  $\delta$  і  $\Delta q_x$ ( $\Delta q_x$  – латеральне зміщення піків шарів і підкладки) однакові, а якщо присутні інші релаксаційні процеси, то вони відрізняються. Результати аналізу показують, що для всіх кристалографічних напрямків значення  $\delta$  є меншим, ніж  $\Delta q_x$ , але різниця між ними є співмірною з помилкою в  $q_x$  для всіх шарів. Ця різниця свідчить про те, що не всі напруги викликані 90° дислокаціями, а незначна частина, близько 1.5% від повного значення напруження, викликана іншими механізмами. Скоріше за все ці додаткові напруження, як свідчать літературні джерела, викликані 60° дислокаціями.

## Висновки до розділу 4

Структура шарів InGaAs вирощених МПЕ на арсенід-галієвих (001) підкладках вивчалась методом ВРХД. Проаналізована роль дислокацій невідповідності в процесах релаксації шарів структур. Встановлено, що релаксація великої граткової невідповідності в значній мірі відбувається завдяки двом регулярним масивам 90° дислокацій, які вибудувані вздовж [110] і [1-10] напрямків. Щільність дислокацій змінюється з товщиною але дислокації залишаються локалізованими в інтерфейсах і обидва InGaAs і арсенід-галієві підшари будуть спотворені. Інтервал між дислокаціями як в [110] так і [1-10] напрямках зменшується, в той час як релаксація збільшується при збільшенні товщини шару. Встановлено, що інтервали між дислокаціями, релаксація і залишкові напруги вздовж [110] і [1-10] напрямків не виявляють сильної асиметрії, хоча суміжні {110} площини в структурі цинкової обманки не еквівалентні. При цьому встановлено такі результати:

- з'ясовано, що величина періоду надграткової системи залежить від радіусу вигину зразка. Показано, що невідповідність технологічно заданих значень періодів та отриманих експериментально безпосередньо після вирощування для деяких випадків пояснюється саме цим ефектом;
- 2. встановлено, що із збільшенням температури відпалу змінюється період структури, що пов'язано із зміною "ефективної" товщини 2D шарів внаслідок сильних процесів масопереносу в інтерфейсних областях між КН і оточуючими їх матеріалом (змочуючий шар та GaAs розділяючий шар). Це приводить до "виведення" цих областей з процесу когерентного розсіяння Х-променів (зміні періоду структури) та істотному розширенню інтерференційних максимумів. Підтвердженням зробленого висновку служить поява сильного дифузного розсіяння, що оточує вузол оберненої гратки GaAs підкладки, в порівнянні з тим, що спостерігається для вихідних (без відпалу) дротоподібних зразків;
- 3. запропоновано модель структурних перетворень БШС під час ШТВ, яка полягає в інтенсифікації процесів масопереносу в інтерфейсних областях.

Результати показують що ВРХД є неруйнуючим методом вивчення процесів росту, релаксацій і дислокаційної структури тонких плівок і для забезпечення детальної кількісної інформації про спотворення, викликані дислокаціями невідповідності в епітаксійних шарах.

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. Вперше виділено та досліджено особливі умови 2D-3D переходів в багатошарових структурах InGaAs/GaAs та дано пояснення стартовим умовам латерального впорядкування КТ.

2. Експериментально, шляхом Х-променевих дифракційних досліджень, виявлено особливості самонаправленого впорядкування структур з масивами КТ при застосуванні в технологічному процесі росту потоків миш'яку різного молекулярного складу. Відмінності в фізичних механізмах вбудовування адатомів із потоків As<sub>2</sub> та As<sub>4</sub> визначаються процесами поверхневої дифузії та формуванням полів пружних деформацій в епітаксійних структурах.

3. Встановлено і дано пояснення ефекту розщеплення когерентних сателітів і нахилу латеральних сателітів на дифракційних картинах від БШС з КТ, яке полягає в прямому і похилому наслідуванні ланцюгів КТ при рості структур, викликане збоєм в латеральній модуляції складу.

4. Запропоновано модель структурних перетворень БШС під час ШТВ, яка полягає в інтенсифікації процесів масопереносу в інтерфейсних областях.

5. З'ясовано, що величина періоду надграткової системи, виміряна за допомогою Х-променевих методів, залежить від радіусу вигину зразка. Тому при визначенні періоду багатошарової структури з експериментальних КДВ необхідно враховувати поправку на цю кривизну. Показано, що невідповідність технологічно заданих значень періодів та отриманих експериментально безпосередньо після вирощування для деяких випадків пояснюється саме цим ефектом. Зміна радіуса кривизни багатошарової структури в процесі термовідпалів корелює з рівнем макродеформації, отриманим різними методами.

6. Встановлено, що із збільшенням температури відпалу змінюється період структури, що пов'язано із зміною "ефективної" товщини 2D шарів внаслідок сильних процесів масопереносу в інтерфейсних областях між КН і оточуючими їх матеріалом (змочуючий шар та GaAs розділяючий шар). Це приводить до "виведення" цих областей з процесу когерентного розсіяння Х-променів (зміні

періоду структури) та істотному розширенню інтерференційних максимумів. Підтвердженням зробленого висновку служить поява сильного дифузного розсіяння, що оточує вузол оберненої гратки GaAs підкладки, в порівнянні з тим, що спостерігається для вихідних (без відпалу) дротоподібних зразків.

7. Дано пояснення природи коливного характеру інтерференційної картини на картах оберненого простору у напрямі нормалі до (100) поверхні, відоме як "змія" ("wiggles"). Зроблено припущення, що вона викликана дією двох чинників: симетрії власного тензора зовнішньої напруги і симетрії пружного модуля матеріалу підкладки, який приводить до зміни нахилів кристалографічних площин з глибиною як в потенційній ямі, так і в межі бар'єрного шару.

8. Створено програму XVis для демонстрації різних дифракційних явищ, таких як побудова оберненого простору, зв'язок між реальним і оберненим простором через дифракційні явища, різні методи сканування оберненого простору, доступні області оберненого простору для компланарної і некомпланарної схем дифракції для Лауе та Брег-геометрій, *N*-променеві дифракційні явища, обернений простір для двошарових систем і експериментальні приклади. Всі демонстрації розраховані з використанням реальних структурних параметрів.

Таким чином, проведені комплексні Х-променеві та АСМ дослідження динаміки формування наноструктурних елементів, трансформації їх планарного та зміні топології вертикального впорядкування при структур і швидкому температурному відпалі дозволили вперше визначити основні фізичні механізми та їх конкурентний внесок, як у формування багатошарових напівпровідникових нананоструктур In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs(100) з квантовими точками та нитками з наперед заданими розмірами і розташуванням, так і їх просторове впорядкування. На основі отриманих результатів встановлено оптимальні області значень технологічних параметрів вирощування зазначених наноструктур, які є перспективними для створення на їх основі оптоелектронних приладів.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры / Н. Н.
 Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин [и др.] // Физ. и техн. полупр. – 1998. – Т. 32,
 № 4. – С. 385–410.

2. Shuller I. K. New Class of Layered Materials / I. K. Shuller // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 44, № 24. – P. 1597–1600.

3. Optical processes in quantum dots and wires (Proceedings Paper) / C. M. Sotomayor Torres, F. D. Wang, N. N. Ledentsov [et al.] // Proc. SPIE. The International Society for Optical Engineering. – 1994. – V. 2141. – P. 2–19.

4. Stangl J. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures / J. Stangl, V. Holy, G. Bauer // Rev. Mod. Phys. – 2004. – V. 76. – P. 725–783.

5. Марченко В. И. Об упругих свойствах поверхности кристаллов / В. И. Марчен-ко, А. Я. Паршин // ЖЭТФ. – 1980. – Т. 79. – С. 257–260.

6. Kasu M. Equilibrium multiatomic step structure of GaAs(001) vicinal surfaces grown by metalorganic chemical vapor deposition / M. Kasu, N. Kobayashi // Appl. Phys. Lett. – 1993. – V. 62, № 11. – P. 1262–1264.

7. Direct synthesis of corrugated superlattices on non-(100)-oriented surfaces / R.
Nötzel, N. N. Ledentsov, L. Däweritz [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1991. –V. 67, № 27. – P.
3812–3815.

8. High-Density GaAs/AlAs Quantum Wires Grown on (775)B-Oriented GaAs Substrates by Molecular Beam Epitaxy / M. Higashiwaki, M. Yamamoto, T. Higuchi // Jpn. J. Appl. Phys. – 1996. – V. 35. – P. L606–L608.

9. Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strainedlayer superlattices / L. Goldstein, F. Glas, J. Y. Marzin [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1985. – V. 47, № 10. – P. 1099–1101.

10. Eaglesham D. E. Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100) /
D. E. Eaglesham, M. Cerullo // Phys. Rev. Lett. – 1990. – V. 64, № 16. – P. 1943–1946.

11. Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001) / J.-W. Mo, D.
E. Savage, B.S. Swartzentruber [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1990. – V. 65, № 8. – P. 1020–

1023.

12. Self-organized growth of regular nanometer-scale InAs dots on GaAs / J. M. Moi-son, F. Houzay, F. Barthe [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1994. – V. 64, № 2. – P. 196–198.

13. Direct formation of quantum-sized dots from uniform coherent islands of InGaAs on GaAs surfaces / D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1993. –V. 63, № 23. – P. 3203–3205.

14. Ordering phenomena in InAs strained layer morphological transformation on GaAs (100) surface / G. Cirlin, G. M. Guryanov, A. O. Golubok [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1995. – V. 67, № 1. – P. 97–99.

15. Self-organization processes in MBE-grown quantum dot structures / D.
Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov [et al.] // Thin Sol. Films. – 1995. – V. 267. – P.
32–36.

16. Structural characterization of (In,Ga)As quantum dots in a GaAs matrix / S. S. Ru-vimov, P. Werner, K. Scheerschmidt [et al.] // Phys. Rev. B. – 1995. – V. 51, № 20. – P. 14766–14769.

17. High-resolution x-ray diffraction of self-organized InGaAs/GaAs quantum dots structure / A. Krost, F. Heinrichsdorff, D. Bimberg [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1996. –V.
68, №6. – P. 785–787.

18. Self-formed InGaAs/GaAs quantum dot superlattice and direct observation on strain distribution in the capped superlattice / Dong Pan, Y. P. Zeng, J. Wu [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1997. – V. 70, №18. – P. 2440–2442.

19. Arakawa Y. Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current / Y. Arakawa, H. Sakaki // Appl. Phys. Lett. – 1982. – V. 40, № 11. – P. 939–941.

20. Vertically Self-Organized InAs Quantum Box Islands on GaAs(100) / Q. Xie, A. Madhukar, P. Chen [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1995. – V. 75, № 13. – P. 2542–2545.

21. Tersoff J. Self-Organization in Growth of Quantum Dot Superlattices / J. Tersoff, C. Teichert, M. G. Lagally // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 76, № 10. – P. 1675– 1678. 22. Nucleation Transitions for InGaAs Islands on Vicinal (100) GaAs / R. Leon, T.
J. Senden, Y. Kim [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1997. – V. 78, № 26. – P. 4942–4945.

23. Alignment of Ge three-dimensional islands on faceted Si(001) surfaces / K. Saka-moto, H. Matsuhata, M. O. Tanner [et al.] // Thin Solid Films. – 1998. – V. 321. – P. 55–59.

24. Self-organized periodic arrays of SiGe wires and Ge islands on vicinal Si substrates / K. Brunner, J. Zhu, C. Miesner // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2000. – V. 7. – P. 881–886.

25. Strain-induced island scaling during Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> heteroepitaxy / W. Dorsch, H. P. Strunk, H. Wawra [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1998. – V. 72, № 2. – P. 179–181.

26. Formation of island chains in SiGe/Si heteroepitaxy by elastic anisotropy / M. Meixner, E. Scholl, M. Schmidbauer [et al.] // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 64, № 24. – P. 245307.

27. Lateral arrangement of self-assembled quantum dots in an SiGe/Si superlattice /
V. Holy, J. Stangl, S. Zerlauth [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1999. – V. 32, № 10A. –
P. A234–A238.

28. Schmidt O. G. Multiple layers of self-asssembled Ge/Si islands:
Photoluminescence, strain fields, material interdiffusion, and island formation / O. G.
Schmidt, K. Eberl // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 61, № 20. – P. 13721–13729.

29. The effect of strain field seeding on the epitaxial growth of Ge islands on Si(001) / A. Dunbar, M. Halsall, P. Dawson [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2001. – V. 78, № 12. – P. 1658–1660.

30. Denker U. Probing the Lateral Composition Profile of Self-Assembled Islands / U. Denker, M. Stoffel, O. Schmidt // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 90, № 19. – P. 196102.

31. Stress-induced self-organization of nanoscale structures in SiGe/Si multilayer films / C. Teichert, L. J. Peticolas, J. C. Bean [et al.] // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 53, № 24. – P. 16334–16337.

32. Tersoff J. Stress-Driven Alloy Decomposition during Step-Flow Growth / J. Tersoff // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77, № 10. – P. 2017–2020.

33. Gain studies of (Cd, Zn)Se quantum islands in a ZnSe matrix / M. Strassburg, V.

Kutzer, U. W. Pohl [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1998. – V. 72, № 8. – P. 942–944.

34. Control of the electronic properties of CdSe submonolayer superlattices via vertical correlation of quantum dots / I. L. Krestnikov, M. Strassburg, M. Caesar [et al.] // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 60, № 12. – P. 8695–8703.

35. Self-organized ordering in self-assembled quantum dot superlattices / G. Springholz, V. Holy, P. Mayer [et al.] // Mater. Sci. Eng. B. – 2002. – V. 88. – P. 143–152.

36. Self-Organized Growth of Three- Dimensional Quantum-Dot Crystals with fcc-Like Stacking and a Tunable Lattice Constant / G. Springholz, V. Holy, M. Pinczolits [et al.] // Science. – 1998. – V. 282. – P. 734–737.

37. Fabrication of strained InAs island ensembles on nonplanar patterned GaAs(001) substrates / A. Konkar, R. Heitz, T. R. Ramachandran [et al.] // J. Vac. Sci. Technol. B. – 1998. – V. 16. – P. 1334–1338.

38. Strain-engineered self-assembled semiconductor quantum dot lattices / H. Lee,
J. A. Johnson, M. Y. He [et al.] // Appl. Phys. Lett. - 2001. - V. 78, № 1. - P. 105-107.

39. Chang L.L. Molecular beam epitaxy and heterostructures / L.L. Chang, K.Ploog. – Italy : Springer, 1984. – 728 p.

40. Structural characterization of InGaAs/GaAs quantum dots superlattice infrared photodetector structures / Q. D. Zhuang, J. M. Li, Y. P. Zeng [et al.] // J. Cryst. Growth. – 1999. – V. 200. – P. 375–381.

41. Высокоразрешающие рентгенодифракционные исследования сверхрешеток InAs-GaAs, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии при низкой температуре / Н. Н. Фалеев, В. В. Чалдышев, А. Е. Куницын [и др.] // Физ. и Тех. Полупр. – 1998. – Т. 32, № 1. – С. 24–31.

42. Ordered arrays of quantum dots: Formation, electronic spectra, relaxation phenomena, lasing / N. N. Ledentsov, M. Grundmann, N. Kirstaedter // Sol. St. Electron. – 1996. – V. 40. – P. 785–798.

43. Tersoff J. Competing relaxation mechanisms in strained layers / J. Tersoff, F. K. LeGoues // Phys. Rev. Lett. – 1994. – V. 72, № 22. – P. 3570–3573.

44. Spencer B. J. Dislocation energetics in epitaxial strained islands / B. J. Spencer,
J. Tersoff // Appl. Phys. Lett. - 2000. - V. 77, № 16. - P. 2533-2535.

45. Spencer B. J. Stresses and first-order dislocation energetics in equilibrium Stranski-Krastanow islands / B. J. Spencer, J. Tersoff // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 63, № 20. – P. 205424.

46. Ovidko I. A. Relaxation Mechanisms in Strained Nanoislands / I. A. Ovidko // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V. 88, № 4. – P. 046103.

47. Dong Jun Kim Annealing induced transition of flat strained InGaAs epilayers into three-dimentional islands / Dong Jun Kim, E. Addison Everett, Haeyeon Yang // J. Appl. Phys. – 2007. – V. 101, № 10. – P.106106(1–3).

48. Assembling strained InAs islands on patterned GaAs substrates with chemical beam epitaxy / S. Jeppensen, M. S. Miller, D. Hessmann [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1996. – V. 68, № 16. – P. 2228–2230.

49. Fabrication of (In,Ga)As quantum-dot chains on GaAs(100) / Z. M. Wang, K. Holmes, Y. I. Mazur [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2004. – V. 84, № 11. – P. 1931–1933.

50. Optical and structural properties of vertically stacked and electronically coupled quantum dots in InAs/GaAs multilayer structures / J. S. Wang, S. H. Yu, Y. R. Lin [et al.] // Nanotechnology. -2007. - V. 18, No 1. - P. 015401(1-5).

51. Systematic investigation into the influence of growth conditions on InAs/GaAs quantum dot properties / T. Passow, S. Li, P. Feinaugle [et al.] // J. Appl. Phys. – 2007. – V. 102, № 7. – P. 073511(1–9).

52. Shchukin V. A. Epitaxy of nanostructures / Shchukin V. A., Ledentsov N. N., Bim-berg D. – Berlin : Springer, 2004. – 387 p.

53. Role of In desorption for formation of self-organized (In,Ga)As quantum wires on GaAs(1 0 0) during superlattice formation / T. Mano, R. Notzel, G. J. Hamhuis [et al.] // J. Cryst. Growth. – 2003. – V. 251. – P. 264–268.

54. Effect of annealing on formation of self-assembled (In,Ga)As quantum wires on GaAs (100) by molecular beam epitaxy / T. Mano, R. Notzel, G.J. Hamhuis [et al.] // J. Appl. Phys. – 2002. – V. 92, № 7. – P. 4043–4046.

55. Direct imaging of self-organized anisotropic strain engineering for improved one-dimensional ordering of (In,Ga)As quantum dot arrays / T. Mano, R. Notzel, G.J. Hamhuis [et al.] // J. Appl. Phys. – 2004. – V. 95, № 1. – P. 109–114.

56. Photoluminescence linewidths from multiple layers of laterally self-ordered InGaAs quantum dots / Zh. M. Wang, Y.I. Mazur, Sh. Seydmohamadi [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2005. – V. 87, № 21. – P. 213105.

57. Self-organized hexagonal ordering of quantum dot arrays / W. Q. Ma, Y. W. Sun, X. J. Yang [et al.] // Nanotechnology. – 2006. – V. 17. – P. 5765–5768.

58. Рентгенодифракционные и электронно-микроскопические исследования вли-яния γ-излучения на многослойные гетероструктуры / А. В. Бобыль, А. А. Гуткин, П. Н. Брунков [и др.] // Физ. и Тех. Полупров. – 2006. – Т. 40, № 6. –С. 707–710.

59. Inhomogeneous broadening and alloy intermixing in low proton dose implanted InAs/GaAs self-assembled quantum dots / Z. Zaaboub, B. Ilahi, L. Sfaxi [et al.] // Nanotechnology. – 2008. – V. 19. – P. 285715(1–6).

60. Iwasaki S. Shape transition of InAs from two-dimensional islands to threedimensional dots by annealing / S. Iwasaki, K. Yamaguchi // Appl. Surf. Sci. – 2003. – V. 216. – P. 407–412.

61. Tapfer L. Improved assessment of structural properties of  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  heterostructures and superlattices by double-crystal x-ray diffraction / L. Tapfer, K. Ploog // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 33, No 8. – P. 5565–5574.

62. Рентгенодифракционные исследования многослойных гетероструктур
InAs-GaAs с квантовыми точками / Н. Н. Фалеев, К. М. Павлов, В. И. Пунегов [и др.]
// Физ. и Техн. Полупров. – 1999. – Т. 33, № 11. – С. 1359–1368.

63. High-resolution x-ray diffraction from multilayered self-assembled Ge dots / A. A. Darhuber, P. Schittenhelm, V. Holy [et al.] // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55, № 23. – P. 15652–15663.

64. Influence of Long-Range Lateral Ordering in Structures with Quantum Dots on the Spatial Distribution of Diffracted X-Ray Radiation / N. Faleev, K. Pavlov, M. Tabuchi [et al.] // Jpn. J. Appl. Phys. – 1999. – V. 38. – P. 818–821.

65. Strain and composition in SiGe nanoscale islands studied by x-ray scattering / T. Wiebach, M. Schmidbauer, M. Hanke [et al.] // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 61, № 8. – P. 5571–5578.

66. Strain and composition distribution in uncapped SiGe islands from x-ray diffraction / J. Stangl, A. Daniel, V. Holy [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2001. – V. 79, № 10. – P. 1474–1476.

67. Lateral and vertical ordering of self-assembled PbSe quantum dots studied by high-resolution X-ray diffraction / V. Holy, J. Stangl, G. Springholtz [et al.] // Physica B. – 2000. – V. 283. – P. 65–68.

68. Vertical alignment of multilayered quantum dots studied by x-ray grazing-incidence diffraction / I. Kegel, T. H. Metzger, J. Peisl [et al.] // Phys. Rev. B. – 1999. – V.
60, № 4. – P. 2516–2521.

69. Strain-induced self-organized growth of nanostructures: From step bunching to or-dering in quantum dots superlattices / J. Stangl, T. Roch, V. Holy [et al.] // J. Vac. Sci. Technol. B. -2000. - V. 18, No 4. - P. 2187-2192.

70. Nanoscale Structuring by Misfit Dislocations in Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si Epitaxial Systems /
S. Yu. Shiryaev, F. Jensen, J. Lundsgaard Hansen [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1997. – V.
78, № 3. – P. 503–506.

71. Determination of Ga interdiffusion in InAs:GaAs(001) islands by X-ray reciprocal space mapping / A. Malachias, W. N. Rodrigues, M.V. Moreira // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2003. – V. 36, № 10A. – P. A249-A252.

72. Nanometer-Scale Resolution of Strain and Interdiffusion in Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots / I. Kegel, T. H. Metzger, A. Lorke [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85, № 8. – P. 1694–1697.

73. Strain status of self-assembled InAs quantum dots / K. Zhang, Ch. Heyn, W. Hansen [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77, № 9. – P. 1295–1297.

74. X-ray reciprocal space mapping of GaAs/AlAs quantum wires and quantum dots / A. A. Darhuber, E. Koppensteiner, G. Bauer [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1995. – V. 66, № 8. – P. 947–949.

75. Ustinov V. M. GaAs-based long-wavelength lasers / V. M. Ustinov, A. E. Zhukov // Semicond. Sci. Technol. – 2000. – V. 15. – P. R41–R54.

76. Nitrogen incorporation in group III–nitride–arsenide materials grown by elemental source molecular beam epitaxy / S. G. Sprutte, M. C. Larson, W. Eampler [et

al.] // J. Cryst. Growth. - 2001. - V. 227. - P. 506-515.

77. Long-wavelength nitride lasers on GaAs / M. Pessa, C. S. Peng, T. Jouhti [et al.] // Microel. Eng. – 2003. – V. 69. – P. 195–207.

78. Kondow M. Molecular beam epitaxy of GaNAs and GaInNAs / M. Kondow, T. Ki-tatani // Semicond. Sci. Technol. – 2002. – V. 17, № 8. – P. 746–754.

79. Correlations between structural and optical properties of GaInNAs quantum wells grown by MBE / J.-M. Chauveau, A. Trampert, M.-A. Pinaults [et al.] // J. Cryst. Growth. – 2003. – V. 251. – P. 383–387.

80. Effect of growth temperature on the luminescent and structural properties of In-GaAsSbN/GaAs quantum wells for 1.3  $\mu$ m telecom application / L. Borkovska, O. Ye-fanov, O. Gudymenko [et al.] // Thin Solid Films. – 2006. – V. 515. – P. 786–789.

81. Quantum dot heterostructures: Fabrication, properties, lasers (Review) / N. N.
Le-dentsov, V. M. Ustinov, V. A. Shchukin [et al.] // Semiconductors. – 1998. – V. 32. – P.
343–365.

82. Исследование квантовых ям In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs методами
низкотемпературной фотолюминесценции и рентгеновской дифрактометрии / С. В.
Евстигнеев, Р. М. Имамов, А. А. Ломов [и др.] // ФТП. – 2000. – Т. 34. – С. 719–725.

83. Структурные характеристики квантовой ямы In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As по рентгенодифрак-ционным данным / А. М. Афанасьев, М. А. Чуев, Р. М. Имамов [и др.] // Кристалло-графия. – 2000. – Т. 45, № 5. – С. 781–790.

84. Formation of nonradiative defects in molecular beam epitaxial  $GaN_xAs_{1-x}$ studied by optically detected magnetic resonance / N. Q. Thinh, I. A. Buyanova, W. M. Chen [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2001. – V. 79, No 19. –P. 3089–3091.

85. Fewster P. E. X-ray diffraction from low-dimensional structures / P. E. Fewster // Semic. Sci. Technol. – 1993. –V. 8. – P. 1915–1934.

86. Fewster P. F. Determining the lattice relaxation in semiconductor layer systems by x-ray diffraction / P.F. Fewster, N.L. Andrew // J. Appl. Phys. – 1993. – V. 74, № 5. – P. 3121–3125.

87. Fewster P. F. Applications of multiple-crystal diffractometry / P. F. Fewster, N. L. Andrew // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1995. – V. 28, № 4A. – P. A97–A103.

88. Iida A. Separate measurements of dynamical and kinematical X-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer / A. Iida, K. Kohra // Phys. Stat. Sol. (A). – 1979. – V. 51. – P. 533–542.

89. Holy V. High-resolution X-ray Scattering From Thin Films and Multilayers / V. Holy, U. Pietch, T. Baumbach. – Berlin: Springer, 1998. – 254 p.

90. The resolution function of a triple-crystal diffractometer for high-energy synchro-tron radiation in nondispersive Laue geometry / H. B. Neumann, U. Rutt, R. Bouchard [et al.] // J. Appl. Cryst. – 1994. – V. 27. – P. 1030–1038.

91. X-ray-diffraction measurements from imperfect GaAs crystals: Evidence for near-surface defects / R. Bloch, D. Bahr, J. Olde [et al.] // Psys. Rev. (B). – 1990. – V. 42, № 8. – P. 5093–5099.

92. Zaumzeil P. Triple crystal diffractometer investigations of silicon crystals with different collimator-analyzer arrangements / P. Zaumzeil, U. Winter // Phys. Stat. Sol. (a). -1982. - V 70. - P. 497-505.

93. Gianini G. Observation of a triclinic lattice distortion of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (100)oriented epitaxial layers by high-resolution double-crystal X-ray diffraction / G. Gianini,
L. De Caro, L. Tapfer // Solid State Commun. – 1994. – V. 91, № 8. – P. 635–638.

94. Observation of non-trigonal lattice distortion in pseudomorphic InGaAs/GaAs su-perlattices grown on misoriented (111)B GaAs / A. Sanz-Hervas, M. Aguilar, J. L. San-chez-Rojas [et al.] // J. Appl. Phys. – 1997. – V. 82, № 7. – P. 3297–3305.

95. Dekard L. Elastic lattice deformation in quantum-wire heterostructures / L. Dekard, L. Tapfer // Phys. Rev. (B). – 1994. – V. 49, № 16. – P. 11127–11133.

96. Elastic Strains in Gaas/Alas Quantum Dots Studied by High-Resolution X-Ray-Diffraction / V. Holy, A. Darhuber, G. Bauer [et al.] // Phys. Rev. B. – 1995. – V. 52. – P. 8348–8357.

97. Hsieh K. C. Compositional modulation and long-range ordering in GaP/InP short-period superlattices grown by gas source molecular beam epitaxy / K. C. Hsieh, J. N. Baillargeon, K. J. Cheng // Appl. Phys. Lett. – 1990. – V. 57, № 21. – P. 2244–2246.

98. Effect of substrate misorientation on the growth of GaxIn1 – xP lateral quantum wells / A. C. Chen, A. M. Moy, L. J. Chou [et al.] // Appl. Phys. Lett. –1995. – 66. – P.

2694-2696.

99. Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As quantum wire heterostructures formed by strain-induced lateral-layer ordering / S. T. Chou, K. J. Chen, L. J. Chou [et al.] // J. Appl. Phys. – 1995. – V. 78, № 10. – P. 6270–6275.

100. Strain-dependent morphology of spontaneous lateral composition modulations in (AlAs)m(InAs)n short-period superlattices grown by molecular beam epitaxy / A. G. Normann, S. P. Achrenkiel, H. Moutinho [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1998. – V. 73, № 13. — P. 1844–1846.

101. Lateral composition modulation in InAs/GaSb superlattices / D. W. Stokes, R.
L. Forrest, J. H. Li [et al.] //J. Appl. Phys. – 2003. – V. 93, № 1. – P. 311-315.

102. The diffuse X-ray scattering in real periodical superlattices / V. Holy, J.
Kubena, I. Ochlidal [et al.] // Superlattices and microstructures. – 1992. – V. 12. – P. 25–35.

103. X-ray double and triple crystal diffractometry of mosaic structure in heteroepitaxial layers / V. Holy, J. Kubena, E. Abramof [et al.] // J. Appl. Phys. – 1993. – V. 74, № 3. – P. 1736–1743.

104. Grazing-incidence small-angle X-ray scattering: new tool for studying thin film growth / J. R. Levine, J. B. Cohen, Y. W. Chung [et al.] // J. Appl. Cryst. – 1989. – V. 22. – P. 528–532.

105. Ordering of self-assembled Si1-xGex islands studied by grazing incidence small-angle x-ray scattering and atomic force microscopy / M. Schmidbauer, T. Wiebach, H. Raidt [et al.] // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 58, № 16. – P. 10523–10531.

106. Lateral ordering of coherent Ge islands on Si(001) studied by triple-crystal grazing incidence diffraction / I. Kegel, T. H. Metzger, J. Peisl [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1999. – V. 74, № 20. – P. 2978–2980.

107. Nanometer-Scale Resolution of Strain and Interdiffusion in Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots / I. Kegel, T. H. Metzger, A. Lorke [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85, № 8. – P. 1694–1697.

108. Grazing incidence small angle x-ray scattering from free-standing nanostructuresM.Rauscher, R. Paniago, H. Metzger [et al.] // J. Appl. Phys. – 1999. – V.

86, № 12. – P. 6763–6769.

109. Determination of strain fields and composition of self-organized quantum dots using x-ray diffraction / I. Kegel, T. H. Metzger, A. Lorke [et al.] // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 63, № 3. – P. 035318(1–13).

110. Influence of GaN domain size on the electron mobility of two-dimensional electron gases in AlGaN/GaN heterostructures determined by x-ray reflectivity and diffraction / Z. Zhong, O. Ambacher, A. Link [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2002. – V. 80, № 19. – P. 3521–3523.

111. Stepanov S. A Method of Tranfer Matrices and Dynamical Thick-Crystal Approximation in Surface X-ray Diffraction by Multilayer structures / S. Stepanov // Crystallogr. Reports – 1994. – V. 39, №2. – P. 182–187.

112. Kohn V. G. A theory of multiple Bragg diffraction of X-rays in multilayer crystal systems / V. G. Kohn // J. Moscow Phys. Soc. – 1977, – V. 1. – P. 425–434.

113. К расчету дифракции рентгеновских лучей от многослойных латеральных кристаллических структур произвольных композиционного состава и формы / В. И. Пунегов, А. И. Максимов, С. И. Колосов [и др.] // Письма в ЖТФ. – 2007. – Т. 33, № 3. – С. 64–71.

114. Nesterets Ya. I. The statistical kinematical theory of X-ray diffraction as applied to reciprocal-space mapping / Ya. I. Nesterets, V. I. Punegov // Acta. Cryst. A. – 2000. – V. A56,  $N_{2}$  6. – P. 540–548.

115. Analysis of the mosaic structure of an ordered (Al,Ga)N layer / L. Kirste, K. M. Pavlov, S. T. Mudie [et al.] // J. Appl. Cryst. – 2005. – V. 38. – P. 183–192.

116. Characterization of structures from X-ray scattering data using genetic algorithms / M. Wormington, C. Panaccione, K. M. Matney [et al.] // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. – 1999. – V. 357. – P. 2827–2848.

117. Афанасьев А. М. О восстановлении профилей нарушений тонких приповерхностных слоев по рентгенодифракционным данным. / А. М. Афанасьев, С. С. Фанченко // ДАН СССР. – 1986. – Т. 287, № 6. – С. 1395–1399.

118. Ломов А.А. Параметры многослойной гетероструктуры по результатам со-вместного анализа кривых дифракционного отражения от разных

кристаллографи-ческих плоскостей / А. А. Ломов, М. А. Чуев, Г. В. Ганин // Письма в ЖТФ. – 2004. – Т. 30, № 10.– С. 89–95.

119. Сиротин Ю. И. Основы кристаллографии / Ю. И. Сиротин, М. А. Шасколь-ская. — Москва: Наука, 1979. — 361 с.

120. Шаскольская М. П. Кристаллография / М. П. Шаскольская. — Москва: Высш. шк., 1976. — 390 с.

121. XVis: educational open source program for demonstration of reciprocal space con-struction and diffraction principles / O. Yefanov, V. Kladko, M. Slobodyan [et al.] // J. Appl. Cryst. – 2008. – V. 41, № 3. – P. 647–652.

122. Schmidbauer M. X-ray diffuse scattering from self-organized mesoscopic semi-conductor structures / M. Schmidbauer. – Berlin, Heidelberg, New-York: Springer-Ver-lag, 2006. – 202 p.

123. Боуэн Д. К. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топогра-фия / Д. К. Боуэн, Б. К. Таннер. – С.-П.: Наука, 2002. – 275 с.

124. Fewster P. F. X-ray scattering from semiconductors / P. F. Fewster. – London: Imperial College Press, 2003. – 300 p.

125. Влияние латеральных модуляций состава на зарождение и упорядочение мас-сива квантовых островков в многослойных периодических структурах In<sub>x</sub>Ga<sub>1</sub>. <sub>x</sub>As/GaAs / B. П. Кладько, В. В.Стрельчук, Н. В.Слободян [и др.] // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2007. – Т. 5, № 3. – С. 729–738.

126. Microstructural aspects of nucleation and growth of (In,Ga)As/GaAs(001) islands with low indium content / V. P. Kladko, V. V. Strelchuk, A. F. Kolomys [et al.] // Journal of Electronic Materials. – 2007. – V. 36, № 12. – P. 1555–1561.

127. Anisotropy of elastic deformations in multilayer (In,Ga)As/GaAs structures with quantum wires: X-ray diffractometry study / V. V. Strelchuk, V. P. Kladko, O. M. Efanov [et al.] // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2005. – V. 8,  $N_{\rm P}$  1. – P. 36–46.

128. Investigation of indium distribution in InGaAs/GaAs quantum dot stacks using high-resolution x-ray diffraction and Raman scattering / Yu. I. Mazur, Z. M. Wang, G. J. Salamo [eta l.] // J. Appl. Phys. – 2006. – V. 99, № 2. – P. 023517(1-10).

129. Pal D. Structural characterization of InAs/GaAs quantum-dot nanostructures /
D. Pal, E. Towe, S. Chen // Appl. Phys. Lett. – 2001. – V. 78, № 26. – P.4133-4137.

130. High-resolution x-ray diffraction of self-organized InGaAs/GaAs quantum dot structures / A. Krost , F. Heinrichsdor, D. Bimberg [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1996. – V.
68, № 6. – P. 785–789.

131. X-ray analysis of self-organized InAs/InGaAs quantum dot structure / A. Krost,
F. Heinrichsdorff, D. Bimberg [et al.] // Cryst. Res. Technol. – 1999. – V. 34. – P.89–96.

132. Grazing incidence x-ray diffraction at free-standing nanoscale islands: fine structure of diffuse scattering // D. Grigoriev, M. Hanke, M. Schmidbauer [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2003. – V. 36, № 10A. – P. A225–A230.

133. Characterizing composition modulations in InAs/AlAs short-period
superlattices / R. D. Twesten, D. M. Follstaedt, S. R. Lee [et al.] // Phys. Rev. B. – 1999. –
V. 60, № 19. – P. 13619–13635.

134. Observation of Reentrant 2D to 3D Morphology Transition in Highly Strained Epitaxy: InAs on GaAs / R. Heitz, T. R. Ramachandran, A. Kalburge// Phys. Rev. Lett. – 1997. – V. 78, № 21. – P. 4071–4074.

135. On the tunnel injection of excitons and free carriers from In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.23</sub>Al<sub>0.24</sub>As quantum well to InAs/In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.23</sub>Al<sub>0.24</sub>As quantum dashes / P. Podemski, R. Kudrawiec, J. Misiewicz [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2006. – V. 89, No 6. – P. 061902(1-3).

136. Рентгенооптичні ефекти в багатошарових періодичних квантових структурах / [Кладько В. П., Мачулін В. Ф., Григор'єв Д. О. та ін.]. – К: Наукова думка, 2006. – 288 с.

137. Рентгенодифракционные исследования 2D-3D структурных переходов в на-норазмерных многослойных периодических структурах / В. П. Кладько, В. Ф. Мачу-лин, О. И. Гудыменко [и др.] // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології, – 2003. – Т. 1, №. 2. – С. 447–457.

138. Влияние упорядочения квантовых точек в многослойных периодических структурах на характер брэгговской дифракции / В. П. Кладько, В. Ф. Мачулин, В. Б. Молодкин [и др.] // Металлофизика и новейшие технологии. – 2004. – Т. 26, № 10. – C. 1255-1267.

139. Structural anisotropy of InGaAs/GaAs(001) quantum dot chains structures / V.
P. Kladko, M. V. Slobodian, V. V. Strelchuk [et al.] // Phys. Stat. Sol. (a). – 2007. – V. 204,
№ 8. – P. 2567–2571.

140. Structural and photoluminescence characteristics of molecular beam epitaxygrown vertically aligned  $In_{0.33}Ga_{0.67}As/GaAs$  quantum dots / T. Srinivasan, S. N. Singh, U. Tiwari // J. Cryst. Growth. – 2005. – V. 280. – P. 378–384.

141. Корчовий А. А. Розсіяння Х-променів шаруватими періодичними структура-ми та діагностика їх параметрів : дис. кандидата фіз.-мат. наук : 01.04.07 / Корчовий Андрій Адамович. – К., 2007. – 140 с.

142. Fields of deformation anisotropy exploration in multilayered (In,Ga)As/GaAs structures by high-resolution X-ray scattering / O. Yefanov, V. Kladko, O. Gudymenko [et al.] // Phys. Stat. Sol. (a). -2006. - V. 203,  $N_{2} 1. - P. 154-157$ .

143. Mogilyanski D. Characterization of the islands nucleation in LPOMVPE grown In<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As/GaAs multilayer in the near substrate/buffer interfacial regions / D. Mogilyan-ski, E. Gartstein // J. Cryst. Growth. – 2002. – V. 234. – P. 646–653.

144. Engineering of 3D self-directed QD ordering in multi-layer InGaAs/GaAs nanostructures by flux gas composition / P. M. Lytvyn, Yu. I. Mazur, Jr. E. Marega [et al.] // Nanotechnology. – 2008. – V. 19, № 50. – P. 505605(1–7).

145. Phillips J. Evaluation of the fundamental properties of quantum dot infrared de-tectors / J. Phillips // J. Appl. Phys. – 2002. – V. 91, № 7. – P. 4590–4594.

146. Controlled ordering and positioning of InAs self-assembled quantum dots / H. Lee, J. A. Johnson, J. S. Speck [et al.] // J. Vac. Sci. Technol. B. -2000. - V. 18, No 4. - P. 2193-2196.

147. Vertical alignment of laterally ordered InAs and InGaAs quantum dot arrays on patterned (0 0 1) GaAs substrates / Y. Nakamura, O. G. Schmidt, N .Y. Jin-Phillipp [et al.] // J. Crystal. Growth. – 2002. – V. 242. – P. 339–344.

148. Application of atomic-force-microscope direct patterning to selective positioning of InAs quantum dots on GaAs / C. K. Hyon, S. C. Choi, S. H. Song [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77, № 16. – P. 2607–2609.

149. Structure of (001) GaAs surfaces during epitaxial growth by organometallic chemical vapor deposition / D. Leonard, M. Krishnamorthy, C. M. Reaves [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1993. – V. 63, № 23. – P. 3203–3208.

150. Two-dimensional ordering of (In,Ga)As quantum dots in vertical multilayers grown on GaAs(100) and (n11) / P. M. Lytvyn, V. V. Strelchuk, O. F. Kolomys [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2007. – V. 91, № 17. – P. 173118(1–3).

151. Sugaya T. Improved optical properties of InAs quantum dots grown with an As2 source using molecular beam epitaxy / T. Sugaya, T. Amano, K. Komory // J. Appl. Phys.  $-2006. - V. 100, N_{\odot} 6. - P. 063107(1-4).$ 

152. InGaAs quantum dots grown with  $As_4$  and  $As_2$  sources using molecular beam epitaxy / T. Sugaya, S. Furue, T. Amano [et al.] // J. Crystal Growth. – 2007. – V. 301. – P. 801–804.

153. X-ray diffraction peaks due to misfit dislocations in heteroepitaxial structures /
V. M. Kaganer, R. Kohler, M. Schmidbauer [et al.] // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55, № 3. –
P. 1793–1810.

154. Исследование структурно–деформационного состояния InGaAs(Sb,N)/GaAs гетероструктур с квантовыми ямами / В. П. Кладько, Н. В. Слободян, Л. В. Борков-ская [и др.] // Металлофизика и новейшие технологии. – 2007. – Т. 29, № 10. – С. 1323–1332.

155. Investigation of defect structure of InGaNAsSb/GaAs quantum wells / L. Borkovska, N. Korsunska, V. Kladko [et al.] // Materials Science and Engineering C. – 2007. – V. 27. – P. 1038–1042.

156. Vurgaftman I. Band parameters for III–V compound semiconductors and their al-loys / I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan // J. Appl. Phys. – 2001. – V. 89, № 11. – P. 5815–5875.

157. Comparison of nitrogen incorporation in molecular-beam epitaxy of GaAsN, GaInAsN, and GaAsSbN / J. C. Harmand, G. Ungaro, L. Largeau [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77, № 16. – P. 2482–2484.

158. Cahn J. W. Spinodal Decomposition / J. W. Cahn // Trans. Met. Soc. – 1968. – V. 242. – P. 166–180.

159. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых раство-ров / А. Г. Хачатурян. М.: Наука, 1974. – 384 с.

160. Кладько В. П. Вплив радіуса кривизни багатошарових структур на спектри дифракції Х-променів / В. П. Кладько, М. В. Слободян, В. Ф. Мачулін // Український фізичний журнал. – 2008. – Т. 53, № 2. – С. 167–171.

161. Effect of thermal annealing in the microstructural and the optical properties of un-capped InAs quantum dots grown on GaAs buffer layers / K. H. Lee, J. Y. Lee, D. U. Lee [et al.] // Sol. State Comm. -2005. - V. 133,  $N_{\rm P} 1. - P. 65-70$ .

162. Zhuang Q. D. Arsenic/phosphorus exchange and wavelength tuning of in situ an-nealed InAs/InP quantum dot superlattice / Q. D. Zhuang, S. F. Yoon, H. Q. Zheng // Sol. State Comm. – 2001. – V. 117, № 8. – P. 465–469.

163. Влияние анизотропии полей деформации в многослойных структурах на спектры отражения рентгеновских лучей / А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, А. И. Гудыменко [и др.] // Металлофизика и новейшие технологии. – 2006. – Т. 28, № 4. – С. 441–448.

164. Chukovskii F. N. X-ray focusing optics. I. Applications of wave optics to doubly curved crystals with a point x-ray source / F. N. Chukovskii, W. Z. Chang, E. Förster // J. Appl. Phys. – 1995. – V. 77, № 5, – P. 1843–1848.

165. Podorov S. G. Theory of X-Ray Diffraction on Asymmetrically Cut and Bent Crystals / S. G. Podorov, E. Förster // Phys. Stat. Sol. (b). – 2000. – V. 220, № 2. – P. 829– 836.

166. Чен Т. К вопросу об аналитическом решении уравнений Такаги в случае об-ратной дифракции рентгеновского излучения на цилиндрически изогнутом кристал-ле / Т. Чен // Письма в ЖТФ. – 2004. – Т. 30, № 8. – С. 34–39.

167. Чен Т. Модифицированный закон Брэгга для дифракции рентгеновского излу-чения изогнутым кристаллом в обратном направлении / Т. Чен // Письма в ЖТФ. – 2003. – Т. 29, № 6. – С. 38–41.

168. Misfit stress in InGaAs/InP heteroepitaxial structures grown by vapor-phase epi-taxy / S. N. G. Chu, A. T. Macrander, K. E. Strege [et al.] // J. Appl. Phys. – 1985. – V. 57, № 2. – P. 249–257.

169. Influence of rapid thermal annealing on a 30 stack InAs/GaAs quantum dot infra-red photodetector / K. Stewart, M. Buda, J. Wong-Leung [et al.] // J. Appl. Phys. – 2003. – V. 94, № 8. – P. 5283–5289.

170. Influence of interdiffusion processes on optical and structural properties of pseu-domorphic In<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As/GaAs multiple quantum well structures / S S. Bürkner, M. Bae-umler, J. Wagner [et al.] // J. Appl. Phys. – 1996. – V. 79, № 9. – P. 6818–6825.

171. Asymmetry of misfit-dislocation induced satellite peaks in semiconductor heterostructures / J. Leininger, G. D. U'Ren, C. D. Moore [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1998. – V. 32, № 10A. – P. A8–A11.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ

- 1\*. Investigation of defect structure of InGaAsSb/GaAs quantum wells / L. Borkovska,
  N. Korsunska, V. Kladko [et al.] // Materials science and engineering C. 2007. V. 27.
   P. 1038–1042.
- 2\*. Microstructural aspects of nucleation and growth of (In,Ga)As-GaAs(001) islands with low indium content / V. P. Kladko, V. V. Strelchuk, A. F. Kolomys [et al.] // Journal of Electronic Materials. 2007. V. **36**, No 12. P. 1555–1561.
- 3\*. Structural anisotropy of InGaAs/GaAs(100) quantum dot chains structures / V. P. Kladko, M.V. Slobodian, V. V. Strelchuk [et al.] // Phys. Stat. Sol. (a) 2007. V. 204, No. 8. P. 2567-2571.
- 4\*. Рентгенодифрактометрические исследования деформационного состояния гетероструктур InGaAsSbN/GaAs с квантовыми ямами / В. П. Кладько, Н. В. Слободян, Л. В. Борковская [и др.] // Металлофизика и новейшие технологии. 2007. Т. 29, № 10. С. 1323—1332.
- 5\*. Влияние латеральных модуляций состава на зарождение и упорядочение массива квантовых островков в многослойных периодических структурах In<sub>x</sub>Ga<sub>1</sub>. <sub>x</sub>As/GaAs / B. П. Кладько, В. В. Стрельчук, Н. В. Слободян [и др.] // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. 2007. Т. 5, вип.3. С. 729–738.
- 6\*. Кладько В. П. Вплив кривизни багатошарових структур на дифракцію Хпроменів / В. П. Кладько, М. В. Слободян, В. Ф. Мачулін. // Український фізичний журнал. – 2008. – Т. 53. №2. – С. 167-171.
- 7\*. XVis: educational open source program for demonstration of reciprocal space construction and diffraction principles / O. Yefanov, V. Kladko, M. Slobodyan [et al.] // Journal of Applied Crystallography. 2008. V. 41. Part 3. P. 647–652.
- 8\*. A new type of structural defects in CdZnSe/ZnSe heterostructures / L. Borkovska,
  N. Korsunska, V. Kladko [et al.] // Microelectronics Journal. 2008. V. 39, Issue 3-4. –
  P. 589–593.
- 9\*. Новый подход для анализа анизотропных деформаций в многослойных структурах : Материалы третьего международного научного семинара "Современные методы анализа дифракционных данных (топография,

дифрактометрия, электронная микроскопия)" (Великий Новгород, Россия, 22–25 мая 2006 г.) / НовГУ им. Ярослава Мудрого. – 306 с.

- 10\*. Исследование латеральных модуляций состава и 2D-3D структурных переходов в многослойных периодических структурах In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs методом высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии : Материалы третьего международного научного семинара "Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)" (Великий Новгород, Россия, 22–25 мая 2006 г.) / НовГУ им. Ярослава Мудрого. 306 с.
- 11\*. Structural anisotropy and optical properties InGaAs/GaAs(100) quantum dot chains structures : Abstracts of 8<sup>th</sup> Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (Baden-Baden/Karlsruhe, Germany, Sept. 19–22 2006). – 212 p.
- 12\*. HRXRD investigations of deformation fields InGaAsSbN/GaAs heterostructures with quantum well : Abstracts of 8<sup>th</sup> Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (Baden-Baden/Karlsruhe, Germany, Sept. 19–22 2006). – 212 p.
- 13\*. HRXRD study of deformation fields and 2D-3D structural transitions in multilayered periodic structures In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs : Materials of international meeting on Clusters and nanostructured materials CNM'2006 (Uzhgorod-'Karpaty', Oct. 9–12 2006) / Ужгородський національний університет. – XLII c + 329 c.
- 14\*. Нові підходи в діагностиці нанорозмірних структур : Збірник тез конференції молодих вчених з фізики напівпровідників "Лашкарьовські читання 2007" (Київ, 25-26 квітня, 2007 р.) / Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова. К: Відділ оптичних та оптоелектронних реєструючих середовищ Інституту фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України. 88 с.
- 15\*. Високороздільна Х-променева діагностика структурної анізотропії багатошарових InGaAs/GaAs(100) структур з ланцюгами квантових точок : Матеріали XI міжнародної конференції "Фізика і технологія тонких плівок та наносистем" (Івано-Франківськк, 7–12 травня 2007) / За заг. ред. заслуженого діяча науки і техніки України, д.х.н., проф. Фреїка Д. М. Івано-Франківськ: Видавничо-

дизайнерський відділ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника. – 240 с.

- 16\*. Thermally induced modification of structural properties in ordered (In,Ga)As/GaAs quantum dots : Abstracts of Semiconducting & Insulating Materials Conference SIMC XIV (Fayetteville, AR, USA, May 15–20 2007) / University of Arkansas. S1225058.
- 17\*. Влияние быстрого термического отжига на структурную перестройку сверхрешеток с массивами квантовых точек : Сборник материалов и программа Первой международной научной школы-семинара «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)» (Великий Новгород, Россия, 21–25 мая, 2007 г.) / НовГУ им. Ярослава Мудрого. 171 с.
- 18\*. Вплив деформацій на тривимірне впорядкування квантових точок в багатошарових структурах : Матеріали конференції "Нанорозмірні системи. Будова-властивості-технології" (Київ, 21–23 лист., 2007 р.) / Ин-т металлофизики им. Г. В. Курдюмова. – К: ТОВ НВК "Комункомплекс". – 628 с.
- 19\*. Macrodeformation influence on the three-dimensional quantum dots ordering in multilayer structures : Abstracts of 9<sup>th</sup> Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (Linz, Austria, Sept. 15–19, 2008) / Johannes Kepler University. 196 p.
- 20\*. Self-organized three-dimensional spatial ordering of quantum dot arrays in In-GaAs/GaAs : Abstracts of 9th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (Linz, Austria, Sept. 15–19 2008) / Johannes Kepler University. 196 p.

Перш за все хочу висловити подяку своєму вчителю та керівнику професору Василю Петровичу Кладьку, який відкрив для мене цей науковий шлях та по-батьківськи веде по ньому. Він є взірцем не тільки науковця, але й людини із високими моральними якостями. Без нього ця робота ніколи б не побачила світ.

Крім того хочу щиро подякувати усьому колективу 19-го відділу, зокрема Проскуренко Наталі Миколаївні, Кучуку Андріану Володимировичу, Гудименку Олександру Йосиповичу, Єфанову Олександру Миколайовичу, Сафрюк Надії Володимирівні, Максименко Зої Василівні, які за ці декілька років стали для мене справжніми друзями. Неможливо навіть описати їхню допомогу, і не тільки при написанні даної роботи. Я радий, що потрапив у цей колектив.

Також, окремо хочеться подякувати доктору фіз.-мат. наук Стрельчуку Віктору Васильовичу за його невід'ємний вклад у дану роботу. Він – висококласний фізик і його поради є дуже корисними. Хоч і не завжди я з ним погоджуюсь, проте мені дуже приємно з ним співпрацювати.

Неможливо перерахувати багатьох гарних людей, з якими я познайомився у стінах інституту. Поруч із цими багатогранними людьми і сам стаєш трішки кращим.

Дякую моїй дружині та маленькому сину, а також усім членам моєї великої родини за віру у мене та безмежну моральну підтримку.

Хочеться вірити, що ця робота внесе вклад у розвиток на краще моєї рідної країни України.