

СЫКТЫВКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет

На правах рукописи

КАЗАКОВ Дмитрий Витальевич

**КОГЕРЕНТНОЕ И ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА ПЛАНАРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Сыктывкар 2007

Работа выполнена на кафедре физики твердого тела физического факультета
Сыктывкарского государственного университета

Научный руководитель	доктор физико-математических наук, профессор В. И. Пунегов
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, А. А. Ломов кандидат физико-математических наук, К. Д. Щербачев;
Ведущая организация	Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН

Защита состоится “__” _____ 200__ года в _____ часов на заседании диссертационного совета К 501.001.02 в Московском государственном университете им. М. В. Ломоносова по адресу: 119992, ГСП-2, г. Москва, Ленинские горы, МГУ, физический факультет, аудитория _____.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова.

Автореферат разослан “__” _____ 200__ года.

Ученый секретарь
диссертационного совета К 501.001.02
кандидат физико-математических наук

И. А. Никанорова

Актуальность темы

Развитие современных полупроводниковых технологий ставит новые задачи перед современной физикой. Полупроводниковые приборы, размеры которых порядка нанометров, требуют строгого анализа их атомно-кристаллической структуры. Физические свойства и дальнейшее применение приборов определяются качеством кристаллической структуры материалов и характером распределенных в их объеме дефектов. Наиболее эффективным, неразрушающим и экспрессным способом исследования кристаллических гетероструктур, включая наноразмерные слои (квантовые ямы), является метод высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии в различных режимах съемки. Стремительное развитие методов высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии и вступление в строй новых источников синхротронного излучения сопровождается активным развитием теорий дифракции рентгеновских лучей на наноструктурах различной степени гетерогенности и упорядоченности. Поскольку самые передовые технологии не позволяют создавать структуры с идеальной кристаллической решеткой, анализ дифракционной картинки требует учета когерентного и диффузного рассеяния. Когерентный канал рассеяния определяется состоянием «средней» (напряженной) кристаллической решетки. Формирование диффузного поля рассеяния происходит в результате взаимодействия рентгеновского излучения с дефектами кристаллической решетки, которые всегда присутствуют в реальных кристаллах. Непосредственное взаимодействие рентгеновского излучения с веществом сопровождается различного рода вторичными процессами, при этом за выход вторичных процессов отвечают как когерентная, так и диффузная составляющие рентгеновского поля. Следовательно, угловое распределение коэффициента дифракционного отражения и выход вторичных процессов содержат важную информацию о структурных характеристиках кристаллических нанобъектов.

Цель работы

Цель работы состоит в разработке общей теории дифракции на планарных многослойных системах с учетом когерентного и диффузного рассеяния, а именно:

1. Развитие статистической динамической теории выхода вторичных процессов в условиях когерентного и диффузного рассеяния рентгеновских лучей от многослойной среды. Сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными измерениями рентгеновской дифракции и выхода вторичных процессов от кристалла InP, имплантированного ионами Fe^{+}

2. Развитие статистической теории дифракции от многослойных кристаллов применительно к методу высокоразрешающей трехкристальной схемы рентгеновской дифракции. Использование разработанной теории для получения информации о структурных характеристиках планарных многослойных систем In-GaN/GaN/AlN/Al₂O₃ и InP/InGaAsP/InP с квантовыми ямами.

3. Построение кинематической теории дифракции от полупроводниковых сверхрешеток сложного композиционного состава. Исследование когерентного и диффузного рассеяния от таких модулированных структур. Использование результатов теории для сравнения с экспериментальными измерениями с целью получения информации о структурных характеристиках сверхрешеток сложного композиционного состава.

Научная новизна

Основные, существенно новые результаты диссертационной работы состоят в следующем:

1. В рамках статистической теории получены выражения для углового распре-

деления выхода вторичных процессов из градиентного (многослойного) кристалла, содержащего статистически распределенные дефекты. Показано, что кривые выхода вторичных процессов чувствительны к наличию хаотически распределенных дефектов и малых искажений кристаллической решетки в тонких приповерхностных слоях градиентного кристалла. По экспериментальным данным двух-, трехкристальной дифрактометрии и выхода фотоэлектронов получены характеристики кристалла InP, имплантированного ионами Fe⁺.

2. В рамках статистического подхода впервые рассмотрена дифракция рентгеновских лучей на наноразмерных гетероструктурах с учетом когерентного и диффузного рассеяния. Получены аналитические выражения для угловых распределений когерентной и диффузной компонент рассеянной интенсивности рентгеновского излучения вблизи узла обратной решетки. Показано влияние напряжений и дефектов на угловые зависимости рассеянной интенсивности. Теория использована для исследования гетероструктур InGaN/GaN/AlN/Al₂O₃ и InP/InGaAsP/InP с ультратонкими слоями. Сравнение экспериментальных данных и теоретических расчетов позволило получить информацию о структуре многослойных систем.

3. В рамках статистического подхода впервые получены выражения для угловых распределений когерентной и диффузной компонент интенсивности рассеяния рентгеновских лучей в обратном пространстве от сверхрешетки со сложным композиционным составом. Изучено влияние структурных параметров сверхрешетки на угловые зависимости интенсивности рассеяния. Показана связь полученных выражений с решениями для двухкомпонентной сверхрешетки. Установлено, что дополнительная структурная модуляция сверхрешетки приводит к изменению углового распределения когерентной интенсивности рассеяния. Сравнением экспериментальных данных с результатами численного моделирования угловых распределений интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки вычислены структурные параметры сверхрешетки InSb/InGaSb/InSb/InAs.

Научная и практическая значимость

Полученные результаты дают возможность развития теоретических и экспериментальных методов исследований структурного совершенства материалов современной микро-, нано- и оптоэлектроники. Для практических целей могут быть использованы:

- выражения для углового распределения выхода вторичных процессов в условиях динамической дифракции рентгеновских лучей для определения структурных параметров градиентных кристаллов;
- аналитические выражения для углового распределения когерентной и диффузной составляющих рассеянной интенсивности рентгеновского излучения от гетероструктур с деформациями решетки и хаотически распределенными дефектами; решения для углового распределения когерентной и диффузной составляющих интенсивности рассеяния рентгеновских лучей от сверхрешеток сложного композиционного состава для изучения их структурных характеристик.

Защищаемые положения

1. Общие выражения для интенсивности когерентной и диффузной компонент выхода вторичных процессов от градиентной кристаллической структуры с произвольным законом изменения межплоскостного расстояния.

2. Аналитическое решение для углового распределения когерентной и диффузной составляющих интенсивности от гетероструктур применительно к трехосевой дифракции.

3. Аналитические выражения для углового распределения когерентной и диффузной составляющих интенсивности рассеяния рентгеновских лучей от сверхрешеток сложного композиционного состава.

Апробация работы

Результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях и семинарах: «Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого тела» (Санкт-Петербург, 2004), РСНЭ-2003 (Москва, 2003), второй научный семинар с международным участием «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)» (Великий Новгород, 2004), третий международный научный семинар «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)» (Великий Новгород, 2006), «Рентгеновская оптика – 2004» (Нижний Новгород, 2004), РСНЭ-2005 (Москва, 2005), ВНКСФ-10 (Москва, 2004). Результаты работы также докладывались на научных семинарах Сыктывкарского государственного университета (2003 – 2006).

Публикации

По теме диссертации опубликовано 6 статей и 5 тезисов докладов в сборниках материалов указанных выше конференций, семинаров и совещаний (всего 11 печатных работ).

Личный вклад диссертанта

Диссертант внес основной вклад в развитие теоретических положений, отраженных в диссертационной работе. В обсуждении и интерпретации работ, выполненных в соавторстве, его вклад был определяющим.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, литературного обзора, трех глав, заключения, списка использованной литературы и одного приложения. Работа изложена на 151 странице машинописного текста, включая 71 рисунок и список литературы из 114 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во *введении* обоснована актуальность выбранной темы; сформулированы основные цели, научная новизна и практическая значимость работы; выдвигаются защищаемые положения; приводится краткое содержание диссертации по главам.

Первая глава отведена обзору литературы по проблемам наблюдения вторичных процессов (ВП) в условиях стоячей рентгеновской волны и методам исследования кристаллических структур с помощью угловых распределений интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки. Дается краткое рассмотрение экспериментальной техники и основных методов исследования. В разделе «Вторичные процессы в рентгеновской дифракции» дается обзор развития метода, описываются основные особенности в кривых углового распределения ВП и приводятся существующие теоретические описания. В разделе «Угловое распределение интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки» изложены основы метода, его связь со сферой Эвальда и основными способами углового сканирования кристалла. Рассмотрены особенности формирования угловых распределений интенсивности рассеяния вблизи узла обратной

решетки различных кристаллических структур. Приводятся наиболее распространенные схемы регистрации рассеянной интенсивности, их преимущества и недостатки.

Во второй главе «Статистическая динамическая теория вторичных процессов в условиях дифракции рентгеновских лучей в многослойных структурах» решается задача выхода вторичных процессов из кристалла с градиентным нарушенным слоем в геометрии дифракции Брэгга. Для решения поставленной задачи используется модель дискретно-слоистого кристалла, в которой нарушенный слой представлен в виде многослойной гетероструктуры (Пунегов, Харченко, 1998). Нарушенный слой разбивается на M слоев параллельно поверхности кристалла. Каждый слой пронумерован, начиная с подложки (подложка – нулевой слой). Каждому слою в такой системе присваиваются собственные значения структурных характеристик и своя система координат, в которой значение z отсчитывается от его поверхности. Например, слой с номером m имеет набор структурных параметров: l_m – толщина слоя; $d^{(m)} = d(z_m)$ – межплоскостное расстояние; $f^{(m)} = f(z_m)$ – статический фактор Дебая – Валера, $g^{(m)}(\zeta) = g(\zeta, z_m)$ – корреляционная функция Каго; z_m – координата в слое с номером m , она изменяется в интервале от 0 до l_m ; ζ – координата, связанная с областью дефекта. Поле рентгеновской волны в кристалле описывается системой уравнений Такаги. Решение системы Такаги для модели многослойного (дискретно-слоистого) кристалла имеет вид:

$$\begin{cases} E_h^{(m)}(z) = \frac{T^{(m)}}{1-Q^{(m)}} \left(R_1^{(m)} e^{i\varepsilon_1^{(m)}z} - R_2^{(m)} Q^{(m)} e^{i\varepsilon_2^{(m)}z} \right) \\ E_0^{(m)}(z) = \frac{T^{(m)}}{1-Q^{(m)}} \left(e^{i\varepsilon_1^{(m)}z} - Q^{(m)} e^{i\varepsilon_2^{(m)}z} \right) \end{cases}, m = 1, \dots, M; \quad (1)$$

$$\varepsilon_v^{(m)} = \frac{-\eta^{(m)} \pm q^{(m)}}{2}, R_v^{(m)} = \frac{-\psi \pm q^{(m)}}{2f^{(m)}a_{\pm h}^{(m)}}, T^{(m-1)} = T^{(m)} \left(\frac{e^{i\varepsilon_1^{(m)}l_m} - Q^{(m)} e^{i\varepsilon_2^{(m)}l_m}}{1-Q^{(m)}} \right);$$

$$R_a^{(m)} = \frac{R_1^{(m)} - R_2^{(m)}Q^{(m)}}{1-Q^{(m)}}, Q^{(m)} = \frac{R_1^{(m)} - R_a^{(m-1)}}{R_2^{(m)} - R_a^{(m-1)}} e^{i(\varepsilon_1^{(m)} - \varepsilon_2^{(m)})l_m};$$

$$q^{(m)} = \sqrt{\psi^2 - 4(f^{(m)})^2 a_h^{(m)} a_{-h}^{(m)}}, \psi = 2a_0^{(m)} + \eta^{(m)} + 2i\rho^{(m)}\tau^{(m)},$$

где $a_0^{(m)} = \pi\chi_0^{(m)}/\lambda\gamma_0^{(m)}, a_{\pm h}^{(m)} = \pi\chi_{\pm h}^{(m)}C/\lambda\gamma_0^{(m)}, \rho^{(m)} = a_h^{(m)}a_{-h}^{(m)}\left(1 - (f^{(m)})^2\right),$

$$\gamma_0^{(m)} = \sin \vartheta_B^{(m)}, \eta^{(m)} = \frac{4\pi}{\lambda} \Delta \vartheta^{(m)} \cos \vartheta^{(m)}, \tau^{(m)}(\Delta \vartheta) = \int_0^{\infty} g^{(m)}(\xi) \exp(i \cdot (2a_0^{(m)} + \eta^{(m)}) \cdot \xi) d\xi.$$

Интенсивность диффузного поля равна:

$$I_{g,d}^{(m)}(z) = \sum_{\nu=1}^2 B_{g\nu}^{(m)} e^{\nu_\nu^{(m)}z} + \sum_{\nu=1}^2 C_{g\nu}^{(m)} e^{-\mu_\nu^{(m)}z} + \text{Re} \left(C_g^{(m)} e^{-\mu_{12}^{(m)}z} \right); \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
s_1^{(m)} &= \sqrt{(\mu_s^{(m)})^2 - (\sigma^{(m)})^2}, s_2^{(m)} = -\sqrt{(\mu_s^{(m)})^2 - (\sigma^{(m)})^2}, \mu_s^{(m)} = (\mu/\gamma_0)^{(m)} + \sigma_s^{(m)}; \\
B_{0v}^{(m)} &= \frac{\sigma^{(m)} B_{lv}^{(m)}}{\mu_s^{(m)} + s_v^{(m)}}, \sigma_s^{(m)} = 2 \operatorname{Re}(\rho^{(m)} \cdot \tau^{(m)}), \sigma^{(m)} = 2 |a_h^{(m)}|^2 \left(1 - (f^{(m)})^2\right) \operatorname{Re}(\tau^{(m)}); \\
C_{gv}^{(m)} &= \sigma^{(m)} \frac{\sigma^{(m)} |A_{gv}^{(m)}|^2 + (\mu_s^{(m)} + b_g \mu_v^{(m)}) |A_{g'v}^{(m)}|^2}{(s_1^{(m)})^2 - (\mu_v^{(m)})^2}; \\
C_g^{(m)} &= 2\sigma^{(m)} \frac{\sigma^{(m)} A_{g1}^{(m)} A_{g2}^{(m)*} + \sigma^{(m)} (\mu_s^{(m)} + b_g \mu_{12}^{(m)}) A_{g'1}^{(m)} A_{g'2}^{(m)*}}{(s_1^{(m)})^2 - (\mu_{12}^{(m)})^2} b_0 = 1, b_h = -1, g' \neq g.
\end{aligned}$$

Интенсивность когерентной и диффузной компонент ВП (выход фотоэлектронов), индуцированного в слое с номером m на поверхность кристалла, равна (Бушуев, 1995):

$$X_c^{(m)} = \left(|E_0^{(m)}|^2 + \beta_{hh} |E_h^{(m)}|^2 + 2f^{(m)} \operatorname{Re}(\Phi_c^{(m)} E_0^{(m)} E_h^{(m)*}) \right) P^{(m)}; \quad (3.1)$$

$$X_i^{(m)} = (I_{0,i}^{(m)} + \beta_{hh} I_{h,i}^{(m)}) P^{(m)}; \quad (3.2)$$

$$P^{(m)} = \exp\left(-\frac{\alpha}{L} \left(\sum_{p=m}^M l_p\right)\right), \beta_{0h} = f_T \chi_{hi} / \chi_{0i}, \Phi_c^{(m)} = e^{i \cdot h \cdot u^{(m)}}.$$

Нормированная кривая выхода ВП из кристалла с градиентным нарушенным слоем:

$$\chi = \frac{\alpha \gamma_0 + \mu L}{2L \gamma_0} \left(\sum_{m=1}^M (X_c^{(m)} + X_c^{(m-1)}) l_m + \sum_{m=1}^M (X_i^{(m)} + X_i^{(m-1)}) l_m \right). \quad (4)$$

Выражения (1) – (4) используются для определения структурных параметров кристалла InP. Кристалл InP был подвергнут ионной имплантации ионами Fe⁺ энергией 8 кЭв и дозой 2·10¹² атом/см². Структурные параметры кристалла определяются сравнением результатов численного моделирования с экспериментальными данными двух-, трехкристалльной дифрактометрии и выхода фотоэлектронов. В результате найдены значения следующих структурных параметров кристалла InP: толщина нарушенного слоя 0,32 мкм, средний радиус дефектов, профиль деформаций – рис. 1 и профиль статфактора – рис. 2. Экспериментальные и расчетные кривые представлены на рис. 3 – 5.

В третьей главе в рамках статистической теории выводятся выражения для углового распределения рассеянной интенсивности рентгеновского излучения вблизи узла обратной решетки для произвольной кристаллической структуры применительно к схеме трехкристалльной дифрактометрии.

Пусть на поверхность кристалла вблизи угла отражения Брэгга падает рентгеновская волна с длиной волны λ . Угол падения рентгеновской волны на поверхность обозначается θ_1 , угол отражения от поверхности – θ_2 ($\theta_{1,2} = \theta_B \pm \varphi$, θ_B – угол Брэгга, φ – угол асимметрии). Вводится вектор $\vec{q} = \vec{q}(q_x, q_z)$, определяющий отклонение вектора рассеяния \vec{Q} от вектора обратной решетки \vec{h} .

Координаты обратного пространства связаны с углами отклонения от направления Брэгга падающего (ω) и отраженного (ε) излучения. В приближении малых углов отклонения они связаны соотношениями:

$$\begin{cases} q_x = k(\omega(\sin \theta_1 + \sin \theta_2) - \varepsilon \sin \theta_2); \\ q_z = -k(\omega(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) + \varepsilon \cos \theta_2). \end{cases} \quad (5)$$

Для симметричных отражений от кристаллов с равномерным распределением дефектов когерентные составляющие поля рентгеновской волны в кристалле равны:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_0^c(q_x, z)}{\partial z} = i[a_0 - q_x \text{ctg} \theta_1]E_0^c(q_x, z) + ia_{-h} f \cdot \exp(-i\Delta q_z z)E_h^c(q_x + \Delta q_x, z); \\ -\frac{\partial E_h^c(q_x, z)}{\partial z} = i[ba_0 + \eta - q_x \text{ctg} \theta_2]E_h^c(q_x, z) + ia_h f \cdot \exp(i\Delta q_z z)E_0^c(q_x - \Delta q_x, z); \end{cases} \quad (6)$$

$$a_0 = \frac{\pi\chi_0}{\lambda\gamma_0}, a_{-h,h} = \frac{\pi C\chi_{-h,h}}{\lambda\gamma_{0,h}}, \eta = \frac{2\pi\omega \sin 2\theta_B}{\lambda\gamma_h}, \gamma_{0,h} = \sin \theta_{1,2}, b = \frac{\gamma_0}{\gamma_h}.$$

Интенсивность диффузно отраженной интенсивности равна:

$$I_h^d(q_x, q_z) = |a_h|^2 (1 - f^2) \tau(q_x; q_x) \cdot L_x \int_0^l dz' \exp(-[1 + b] \mu z') I_0^c(z'); \quad (7)$$

$$\tau(q_x; q_x; x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_z \exp(-i[(q_x + \Delta q_x)\rho_x + (q_z + \Delta q_z)\rho_z]) G(\rho_x, \rho_z);$$

$$G(x, z) = \left[\langle \tilde{\phi}^*(\rho_x, \rho_z) \tilde{\phi}(0, 0) \rangle - f^2 \right] / [1 - f^2],$$

где f – статфактор, $\mu = \text{Im}(2\pi\chi_0/\lambda\gamma_h)$, $\tau(q_x; q_x; x, z)$ – площадь корреляции, $\Delta q_x = h(\Delta a/a) \sin \varphi$, $\Delta q_z = h(\Delta c/c) \cos \varphi$, $h = 2\pi/d_{hkl}$, a и c – постоянные решетки гексагональной системы, Δa и Δc – рассогласования параметров решетки верхнего и нижнего слоев.

Теория используется для исследования структурного совершенства кристаллов. Сравнением экспериментальных данных трехкристалльной дифрактометрии определяются структурные характеристики мозаичной структуры InGaN/GaN/AlN/Al₂O₃ с наномасштабным слоем In_{1-x}Ga_xN и напряженной структуры InP/InGaAsP/InP с ультратонким слоем In_{1-y}Ga_yAsP. В качестве искомого параметров кристалла InGaN/GaN/AlN/Al₂O₃ рассматриваются параметры мозаичности, кристалла InP/InGaAsP/InP – концентрационные профили элементов Ga и As, диффундирующих в слой InP. Схемы кристаллов приведены на рис. 6 и 9. Обозначение ML означает монослой.

В рамках разработки темы исследуется InP/InGaAsP/InP – гетероструктура с квантовой ямой. Для создания квантовой ямы на подложке из InP методом металлоорганической газовой эпитаксии выращен наноразмерный слой GaAs толщиной 2 – 3 монослоя. Условия в реакторе, концентрация Ga и As в исходных газах и толщина наращиваемого слоя подобраны таким образом, чтобы параметр решетки в нанослое GaAs был таким же, как и в подложке InP. Сверху тонкий слой GaAs покрыт тонким слоем InP. Ожидалось, что гетерограницы будут резкими и ровными. Вследствие взаимной диффузии часть атомов Ga и As проникли в соседние слои InP, в результате чего в кристалле возникли напряжения. Численным моделированием угловых распределений интенсивностей рассеяния рентгеновского излучения вблизи узла обратной ре-

шетки определяются профили концентрации Ga и As. Угловое распределение интенсивности рассеяния рентгеновского излучения вблизи узла обратной решетки InP (002) показано на рис. 7. Профили распределения относительной концентрации элементов Ga и As по глубине приведены на рис. 8.

Образец InGaN/GaN/AlN/Al₂O₃ с наномасштабным активным слоем InGaN (20 нм) получен в ходе металлоорганической газофазной эпитаксии. Образец выращен на сапфирной (0001) подложке. Тонкий низкотемпературный AlN (30 нм) и толстый GaN (2 мкм) слои служат буферной зоной между оптоэлектронным слоем InGaN и сильно рассогласованной по параметру решетки сапфирной подложкой. В кристалле имеет место частичная релаксация упругих напряжений решетки InGaN относительно буферного слоя GaN. Относительная деформация несоответствия решеток ультратонкого InGaN и буферного GaN слоев составила $\varepsilon_{zz} = \Delta c/c = 6,42 \cdot 10^{-3}$. Численным моделированием установлено, что наномасштабный слой InGaN имеет следующие структурные параметры: вертикальный размер блоков составляет 14 нм, латеральный размер равен 100 нм. Средняя угловая разориентация блоков равна 150 угловых секунд. Параметры буферного слоя равны: вертикальный размер блока – 1990 нм, латеральный – 100 нм, разориентация блоков – 400 угловых секунд. Шероховатость поверхности образца соответствовала среднеквадратичной дисперсии высоты шероховатости в 0,5 нм, в латеральном направлении – корреляционной длине $\Lambda = 0,01$ мкм. Результаты численных расчетов и данные эксперимента по регистрации углового распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки GaN (0004) представлены на рис. 10 – 12.

В четвертой главе с помощью выражений, полученных в третьей главе, решается задача формирования углового распределения когерентной и диффузной интенсивности рассеяния рентгеновского излучения вблизи узла обратной решетки для сверхрешетки (СР) со сложным композиционным составом. Вводится понятие сверхрешетки со сложным композиционным составом, дается ее краткое описание, приводятся возможные механизмы, позволяющие накладывать дополнительную модуляцию на сверхрешетку.

Выводится решение когерентно отраженного поля:

$$I_h^c(q_x', 0) = \left(R_c E_0 \sin(q_x L_x / 2) / (q_x L_x / 2) \right)^2; \quad (8)$$

$$R_c = ie \left(K \sum_{p=1}^P A_p^{I, I} + (N-K) \sum_{r=1}^R A_r^{II, II} \right) L_S \left(e^{i(K-1) \sum_{p=1}^P A_p^{I, I}} F_S^I L_S^I + e^{i2K \sum_{p=1}^P A_p^{I, I}} e^{i(N-K-1) \sum_{r=1}^R A_r^{II, II}} F_S^{II} L_S^{II} \right);$$

$$F_S^{I, II} = B_1^{I, II} \frac{\sin(A_1^{I, II} l_1^{I, II})}{A_1^{I, II}} e^{iA_1^{I, II} l_1^{I, II}} + \sum_{p,r=2}^{P,R} B_{p,r}^{I, II} \frac{\sin(A_{p,r}^{I, II} l_{p,r}^{I, II})}{A_{p,r}^{I, II}} e^{i \left(A_{p,r}^{I, II} l_{p,r}^{I, II} + 2 \sum_{\sigma=1}^{p-1} A_{\sigma}^{I, II} l_{\sigma}^{I, II} \right)};$$

$$A_p^{I, II} = \hat{\eta} + 2\pi \Delta d_p^{I, II} / 2D_h D, \quad B_{p,r}^{I, II} = a_{h,p,r}^{I, II} f_{p,r}^{I, II},$$

где F_S^I и F_S^{II} называются структурными амплитудами для политипных сверхрешеток первого и второго типа; функции L_S , L_S^I , L_S^{II} представляют собой интерференционные функции Лауэ и равны:

$$L_S = \frac{\sin \left(M \left(K \sum_{p=1}^P A_p^I l_p^I + (N-K) \sum_{r=1}^R A_r^{II} l_r^{II} \right) \right)}{\sin \left(K \sum_{p=1}^P A_p^I l_p^I + (N-K) \sum_{r=1}^R A_r^{II} l_r^{II} \right)}; \quad (9.1)$$

$$L_S^I = \frac{\sin \left(K \sum_{p=1}^P A_p^I l_p^I \right)}{\sin \left(\sum_{p=1}^P A_p^I l_p^I \right)}; \quad L_S^{II} = \frac{\sin \left((N-K) \sum_{r=1}^R A_r^{II} l_r^{II} \right)}{\sin \left(\sum_{r=1}^R A_r^{II} l_r^{II} \right)}. \quad (9.2)$$

В (8) используется параметр D , определяющий среднее межплоскостное расстояние СР. Если $l_{p,r}^{I,II}$ и $d_{p,r}^{I,II}$ – «парциальные» длины и межплоскостные расстояния кристаллических слоев, формирующих СР, то

$$D = \frac{K \sum_{p=1}^P d_p^I l_p^I + (N-K) \sum_{r=1}^R d_r^{II} l_r^{II}}{Nl}. \quad (10)$$

Показывается, что при соответствующем подборе параметров модулирования, можно осуществить переход от сверхрешетки со сложным композиционным составом к обычной сверхрешетке. Распределение диффузной компоненты интенсивности рассеяния рентгеновского излучения вблизи узла обратной решетки при дифракции на такого рода СР имеет вид:

$$I_h^d(q_x, q_z) = M \cdot I_d(q_x, q_z) \cdot e^{-\frac{(M-1)\mu Nl}{2}}; \quad (11)$$

$$I_d = K \cdot F_d^I \cdot e^{-\frac{(K-1)\mu^I l}{2}} + (N-K) \cdot F_d^{II} \cdot e^{-\frac{(N-K-1)\mu^{II} l}{2}} \cdot e^{-K\mu^I l};$$

$$\mu = \frac{K \sum_{p=1}^P \mu_p^I l_p^I + (N-K) \sum_{r=1}^R \mu_r^{II} l_r^{II}}{Nl}, \quad \mu^I = \frac{\sum_{p=1}^P \mu_p^I l_p^I}{l}, \quad \mu^{II} = \frac{\sum_{r=1}^R \mu_r^{II} l_r^{II}}{l}, \quad (12)$$

где μ_p^I – коэффициенты поглощения в периодах сверхрешетки I; μ_r^{II} – коэффициент поглощения в периодах сверхрешетки II; μ – средний коэффициент поглощения модулированным периодом сверхрешетки; μ^I , μ^{II} – средние коэффициенты поглощения сверхрешетками первого и второго типа соответственно; F_d^I и F_d^{II} – структурные амплитуды диффузного рассеяния:

$$\begin{cases} F_d^I(q_x, q_z) = \sum_{p=1}^P (a_{hp}^I)^2 \left(1 - (f_p^I)^2 \right) I_0^c \tau_p^I(q_x, q_z) L_x^I l_p^I e^{-\sum_{\sigma=1}^{p-1} \mu_{\sigma}^I l_{\sigma}^I}; \\ F_d^{II}(q_x, q_z) = \sum_{r=1}^R (a_{hr}^{II})^2 \left(1 - (f_r^{II})^2 \right) I_0^c \tau_r^{II}(q_x, q_z) L_x^{II} l_r^{II} e^{-\sum_{\sigma=1}^{r-1} \mu_{\sigma}^{II} l_{\sigma}^{II}}. \end{cases} \quad (13)$$

Выражения (8) – (13) используются для анализа особенностей кристаллической структуры сверхрешетки $\text{InSb/In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb/InSb/InAs}$, выращенной на подложке $\text{GaSb}(001)$. Модель сверхрешетки представлена на рис. 13.

Наличие дополнительных пиков в экспериментальном угловом распределении отраженной рентгеновской интенсивности позволяет сделать предположение о наличии модулированного периода. Сравнением данных эксперимента с результатами численного моделирования определяются структурные параметры СР: $M = 12$, $N = 5$, $K = 1$; концентрация галлия в слоях $\text{InGaSb} - x^I = 0,99$, $x^{II} = 0,88$; статфактор $-f^I = 0,97$, $f^{II} = 0,85$; толщина слоя $\text{InSb} - 0,65$ нм, слоя $\text{InGaSb} - 4,3$ нм, слоя $\text{InAs} - 8,9$ нм. Параметры мозаичной структуры в сверхрешетке имеют следующие значения: латеральные размеры мозаичных блоков в СР совпадают с толщинами слоев сверхрешетки; латеральные размеры мозаичных блоков в подложке – 65 нм; горизонтальный размер в сверхрешетке – 80 нм, в подложке – 185 нм; углы разориентации блоков в сверхрешетке – 10 угл. сек, в подложке – 50 угл. сек. Результаты численного моделирования и данные эксперимента и представлены на рис. 14–16.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы

В приложениях выводятся выражения для компонент диффузного поля в градиентном кристалле.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. В рамках статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей получены общие выражения для интенсивности когерентной и диффузной компонент выхода вторичных процессов от градиентной (многослойной) кристаллической структуры с произвольным законом модуляции межплоскостного расстояния и рассеивающей способности, содержащей статистически распределенные дефекты. Представлены результаты численных расчетов кривых дифракционного отражения и выхода вторичных процессов для кристалла InP . Определены структурные параметры кристалла InP , имплантированного ионами Fe^+ .

2. На основании статистического подхода получены выражения для углового распределения когерентной и диффузной компонент интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки для неидеальных гетероструктур. Представлены результаты рентгенодифракционной диагностики напряженной структуры $\text{InP}/\text{InGaAsP}/\text{InP}$ с ультратонким слоем InGaAsP и мозаичных гетероструктур $\text{InGaN}/\text{GaN}/\text{AlN}/\text{Al}_2\text{O}_3$ с наномасштабными активными слоями InGaN .

3. В рамках статистического подхода получены выражения для углового распределения когерентной и диффузной компонент интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки для сверхрешеток со сложным композиционным составом. Сравнением данных эксперимента с результатами численного моделирования определены структурные параметры сверхрешетки $\text{InSb}/\text{InGaSb}/\text{InSb}/\text{InAs}$.

Результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Казаков, Д. В. Статистическая динамическая теория дифракции для исследования ионно-имплантированных слоев кристаллов в условиях стоячих рентгеновских волн / Д. В. Казаков, Э. Х. Мухамеджанов, В. И. Пунегов // Молодежный вестник/ СыктГУ. – 2004. – № 2. – С. 6 – 10.

2. Казаков, Д. В. Численное моделирование рассеяния синхротронного излучения на ультратонких слоях InGaN / Д. В. Казаков, В. И. Пунегов // Нелинейные проблемы механики и физики деформируемого тела/ Спб. – 2004. – №8. – С. 80 – 86.

3. Пунегов, В. И. Рассеяние синхротронного излучения на InGaN наноструктурах: эксперимент и численное моделирование / В. И. Пунегов, Д. В. Казаков,

К. М. Павлов [и др.] // Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования. – 2005. , – №8. – С. 25 – 31.

4. Пунегов, В. И. Когерентное и диффузное рассеяние синхротронного излучения на ультратонких слоях InGaP и InGaAs / В. И. Пунегов, Д. В. Казаков, Д. Н. Семенюк [и др.] // Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия): Материалы второго научного семинара с международным участием, В. Новгород, НовГУ, 26 – 28 мая 2004 г. – В. Новгород, 2004. – С. 105 – 108.

5. Казаков, Д. В. Применение статистической динамической теории дифракции для исследования ионно-имплантированных слоев кристаллов в условиях стоячих рентгеновских волн / Д. В. Казаков, Э. Х. Мухамеджанов, В. И. Пунегов // Тезисы докладов IV Национальной конференции по применению Рентгеновского, Синхротронного излучения, Нейтронов и Электронов для исследования материалов (РСНЭ-2003), Москва, ИК РАН, 17 – 22 ноября 2003. – М.: ИК РАН, 2003. – С. 335.

6. Казаков, Д. В. Теория дифракции на сверхрешетке со сложным периодом / Д. В. Казаков, В. И. Пунегов, Н. Н. Фалеев // Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия): Материалы третьего международного научного семинара, В. Новгород, НовГУ, 22 – 25 мая 2006 г. – В. Новгород, 2006. – С. 161 – 163.

7. Пунегов, В. И. Рассеяние синхротронного излучения на планарных наноструктурах: эксперимент и численное моделирование / В. И. Пунегов, Д. В. Казаков, К. М. Павлов [и др.] // Рентгеновская оптика – 2004: Материалы совещания, Н. Новгород, ИФМ РАН, 2 – 6 мая 2004 г. – ИФМ РАН, 2004. – С. 131 – 135.

8. Пунегов, В. И. Решение обратной задачи дифракции на наноструктурах InGaAsP с использованием карт интенсивностей рассеяния в обратном пространстве / В. И. Пунегов, Д. В. Казаков [и др.] // Тезисы докладов V Национальной конференции по применению Рентгеновского, Синхротронного излучения, Нейтронов и Электронов для исследования материалов (РСНЭ НАНО – 2005), Москва, ИК РАН, 14 – 19 ноября 2005 г. – М.: ИК РАН, 2005. – С. 239.

9. Казаков Д.В. Применение статистической динамической теории дифракции для исследования ионно-имплантированных слоев кристаллов в условиях стоячих рентгеновских волн // Сборник тезисов десятой всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-10), Москва, МГУ, 1 –7 апреля 2004 г. – Красноярск: АСФ России, 2004. – С. 180.

10. Пунегов, В. И. Исследование наноструктур на основе InGaN методом синхротронного рассеяния / В. И. Пунегов, Д. В. Казаков, Д. Н. Семенюк [и др.] // Актуальные вопросы современного естествознания. – Нальчик: КБГУ, 2005. – № 3. С. 6 – 13.

11. Пунегов, В. И. Исследование наноструктур на основе InGaN методом синхротронного рассеяния / В. И. Пунегов, Д. В. Казаков, Д. Н. Семенюк [и др.] // Тезисы докладов конференции «Наноразмерные системы», Киев, 12 – 14 октября 2004. – Киев: Институт металлофизики НАН Украины, 2004, – С. 5 – 68.

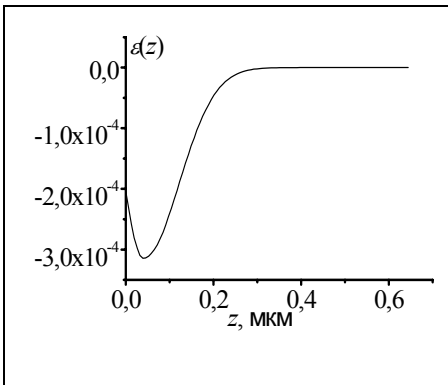


Рис. 1. Профиль деформации

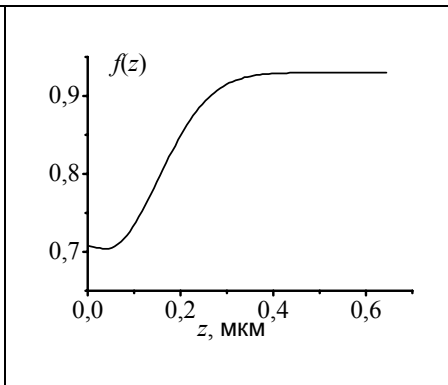


Рис. 2. Профиль статфактора

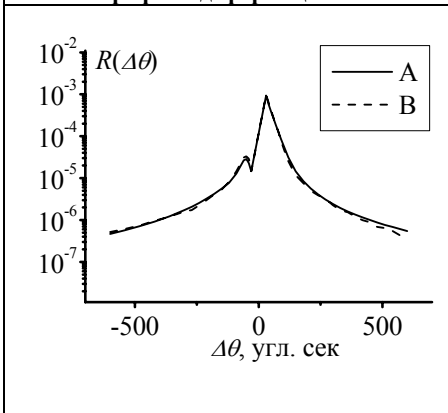


Рис. 3. КДО трехкристальной схемы:
A – данные эксперимента;
B – результат моделирования

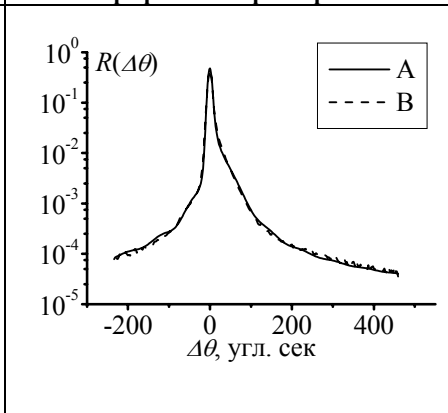


Рис. 4. КДО двухкристальной схемы
A – данные эксперимента;
B – результат моделирования

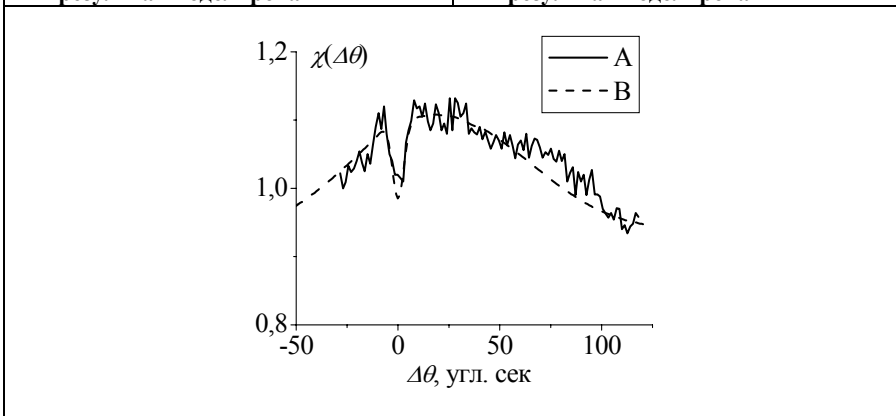


Рис. 5. Выход фотоэлектронов: **A** – данные эксперимента; **B** – результат моделирования

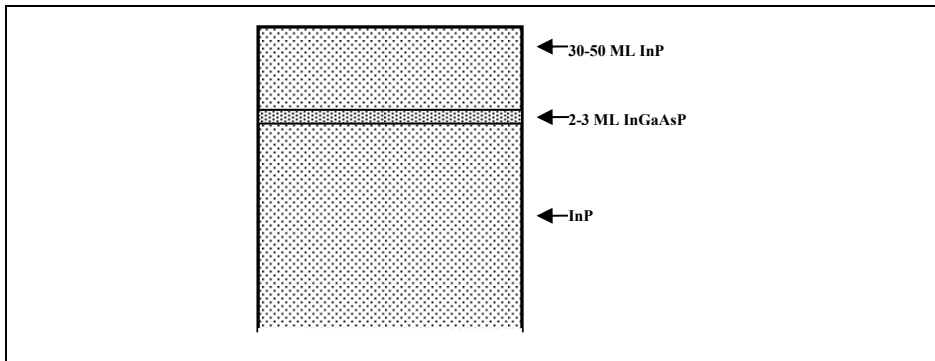


Рис. 6. Модель кристалла InP/InGaAsP/InP с ультратонким слоем InGaAsP

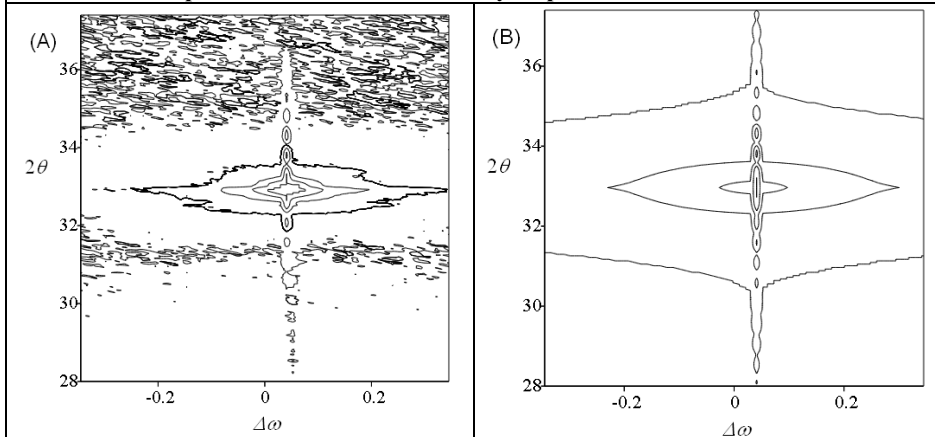


Рис. 7. Угловое распределение интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки InGaAsP(002): (A) – данные эксперимента; (B) – результат моделирования

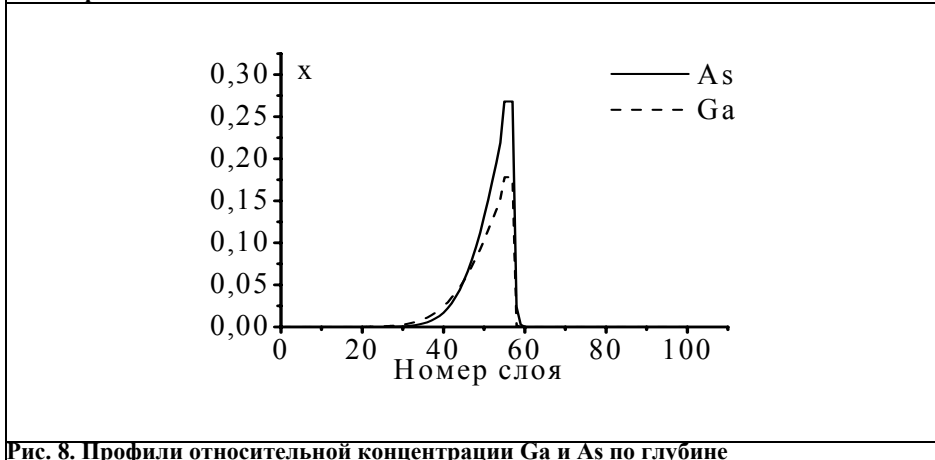


Рис. 8. Профили относительной концентрации Ga и As по глубине

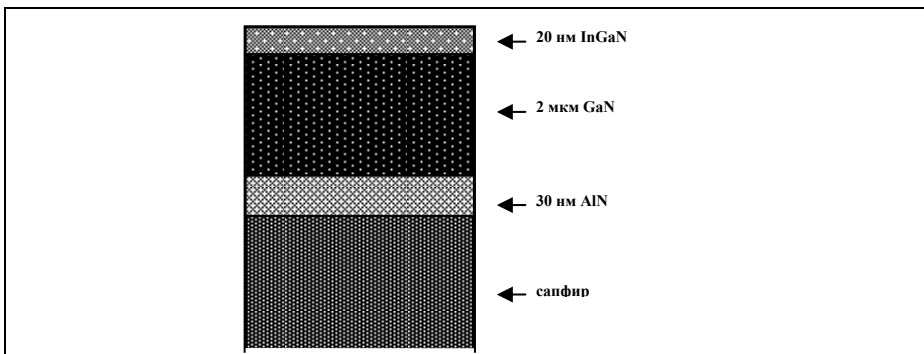


Рис. 9. Модель кристалла InGaN/GaN/AlN/Al₂O₃ с наномасштабным слоем In_{1-x}Ga_xN

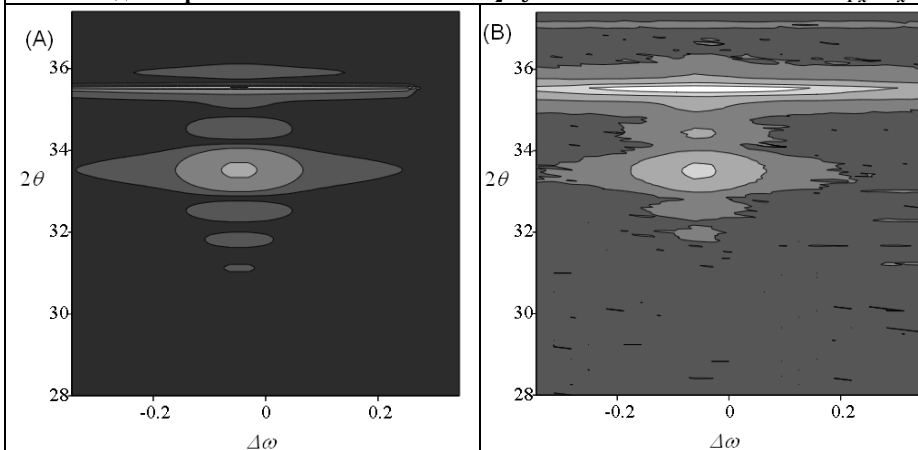


Рис. 10. Угловое распределение интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки InGaN(004): (A) – результаты численного моделирования, (B) – данные эксперимента

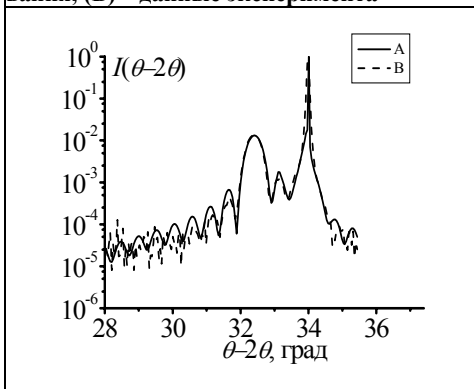


Рис. 11. Данные $\theta-2\theta$ -сканирования: А – результаты численного моделирования, В – данные эксперимента

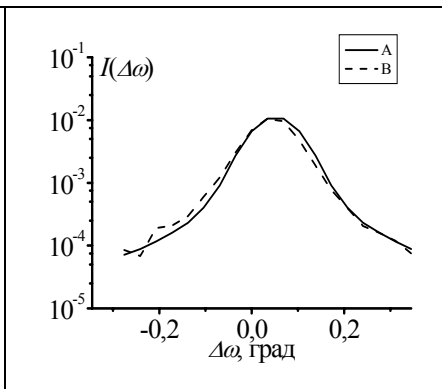


Рис. 12. Данные ω -сканирования: А – результаты численного моделирования, В – данные эксперимента

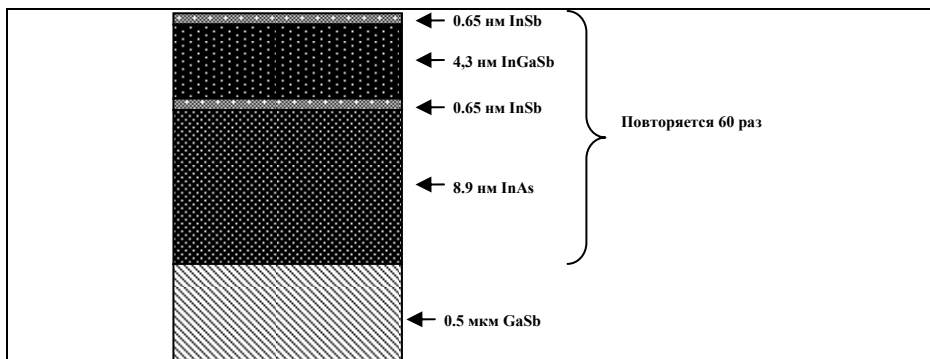


Рис. 13. Модель сверхрешетки InSb/InGaSb/InSb/InAs на GaSb(001) подложке

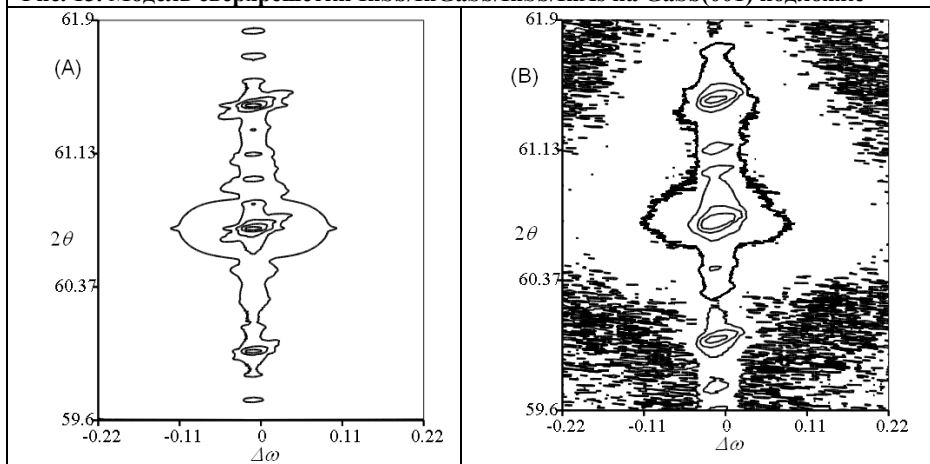


Рис. 14. Угловое распределение интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки GaSb(002): (A) – результаты численного моделирования, (B) – данные эксперимента

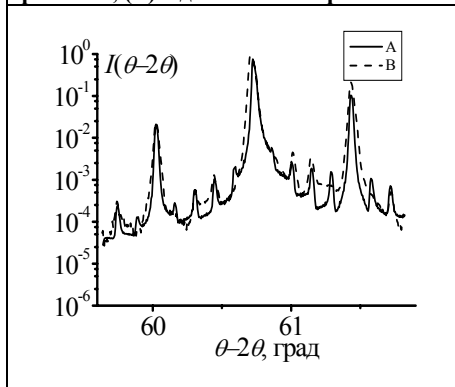


Рис. 15. Данные $\theta-2\theta$ -сканирования: А – моделирование, В – эксперимент

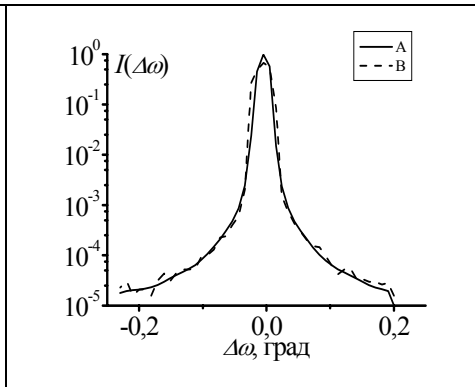


Рис. 16. Данные ω -сканирования: А – моделирование, В – эксперимент

