

Влияние деформаций массива квантовых точек на дифракцию рентгеновских лучей

В.И. Пунегов¹, Д.В. Сивков¹, В.П. Кладько²

¹ Коми Научный Центр УрО РАН, Сыктывкар, Россия

² Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, Украина

e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Распределению упругих деформаций вокруг квантовых точек (КТ) в последние годы уделяется пристальное внимание (см. [1] и приведенную в обзоре литературу). Вычисления упругих деформаций в основном проводится численными методами с использованием формализма функции Грина или метода конечных элементов. Данная проблема весьма сложная и, как правило, в редких случаях допускает аналитическое решение. С другой стороны, изучение систем с КТ методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии требует построение моделей с учетом распределения упругих деформаций. Такая проблема является еще более сложной, поскольку требует как вычисления упругих деформаций, так и расчета диффузного рассеяния рентгеновских лучей на искажениях кристаллической решетки, вызванных этими деформациями. По-видимому, из-за сложности таких исследований число работ по этой проблеме незначительно [2-4].

Можно сказать, что теория диффузного рассеяния полностью разработана для модели сферически симметричных КТ, однако такая форма самоорганизованных наноструктур практически не встречается. Как правило, латеральные размер квантовой точки КТ существенно превышает ее вертикальный размер. В [2-4] рассматривалась цилиндрическая форма КТ, учитывалось упругая деформация и релаксация напряжений на свободной поверхности. Для описания диффузного рассеяния требуется вычисление Фурье преобразования поля упругих смещений. Эта задача имеет простое аналитическое решение для точечного дефекта или включения сферически симметричной формы и получила название хуанговского рассеяния. В [2-3] решение для вычисления диффузного рассеяния представлено в виде произведения Фурье-образа поля смещений точечного дефекта и функции формы КТ. Такой подход не совсем корректен, поскольку пространственное изменение деформаций от включений сферической и цилиндрической формы отличается [5]. С другой стороны, это отличие не столь существенно для дефектов в виде эллипсоида вращения.

В недавней работе [6] для вычисления введенных деформаций от КТ использована аналогия между задачами электростатики и теории упругости. Вектор смещений, вызванный включением, может быть записан в виде

$$\delta u(r) = \frac{\varepsilon_0(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \int_V \frac{r-r'}{|r-r'|^3} dr' \quad (1)$$

где $\varepsilon_0 = (a_{inclusion} - a_{matrix})/a_{matrix}$ - рассогласование решеток включения $a_{inclusion}$ и матрицы a_{matrix} , ν - коэффициент Пуассона, V - объем включения. Если ввести понятие потенциала однородного включения

$$\varphi(r) = \int_V \frac{dr'}{|r-r'|}, \quad (2)$$

поле атомных смещений от КТ запишется $\delta u(r) = -A \nabla \varphi(r)$, где $A = \varepsilon_0(1+\nu)/[4\pi(1-\nu)]$.

Потенциал (2) может быть вычислен методом разложения по мультиполям:

$$\frac{1}{|r-r'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2rr' \cos(\gamma) + r'^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r'^n}{r^{n+1}} P_n(\cos(\gamma)) \quad (3)$$

где $P_n(\cos(\gamma))$ - полиномы Лежандра. Таким образом, потенциал (2) и вектор смещений (1) могут быть записаны в виде ряда

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \varphi_1(r) + \varphi_2(r) + \dots, \\ \delta u(r) = \delta u_0(r) + \delta u_1(r) + \delta u_2(r) + \dots$$

где $\varphi_n(r) = \frac{P_n(\cos(\gamma))}{r^{n+1}} \Omega_n$, $\delta u_n(r) = A(n+1) \frac{r P_n(\cos(\gamma))}{r^{n+3}} \Omega_n$, $\Omega_n = \int_V r'^n dr'$.

Как уже отмечалось выше, выражение (1) имеет аналитическое решение для включений сферической формы радиуса R_d :

$$\delta u(r) = \delta u_0(r) = \begin{cases} \text{random}, & |r| \leq R_d \\ A \frac{4\pi R_d^3}{3} \frac{r}{r^3}, & |r| > R_d \end{cases} \quad (4)$$

В случае, если форма КТ отличается от сферической, требуется предварительный численный расчет поля упругих деформаций [1].

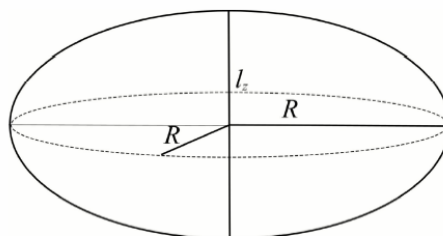


Рис.1. Модель квантовой точки в форме эллипсоида вращения.

Для оценки размеров КТ и учета влияния поля упругих деформаций в настоящей работе рассмотрена модель КТ в форме эллипсоида вращения (рис.1). Здесь l_z - вертикальная эллиптическая ось, R - горизонтальный радиус ($2R$ - латеральная эл-

липтическая ось). В рамках данной модели упругие смещения с точностью до квадрупольного члена разложения по мультиполям имеют вид

$$\delta u(\mathbf{r}) \approx \begin{cases} \text{random, } |z| \leq l_z/2, \sqrt{x^2+y^2} \leq R \\ A \frac{\mathbf{r}}{r^3} + B \frac{\mathbf{r}(3\cos^2(\theta)-1)}{r^5}, |z| > l_z/2, \sqrt{x^2+y^2} > R \end{cases} \quad (5)$$

Здесь $A = \Delta V_{ell}$ - мощность КТ, $B = A \frac{3(R^2 - (l_z/2)^2)}{25}$.

Интенсивность диффузного рассеяния может быть записана

$$I_h^d(\mathbf{q}) = K_D |D(\mathbf{q})|^2 \quad (6)$$

где K_D - постоянный коэффициент [7]. Амплитуда диффузного рассеяния имеет вид

$$D(\mathbf{q}) = D_{sw}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + D_Q(\mathbf{q}). \quad (7)$$

В (7) $D_{sw}(\mathbf{q})$ - амплитуда рассеяния для эллиптических включений без учета деформаций вне КТ (рассеяние Стокса-Вильсона); $D_H(\mathbf{q})$ - амплитуда хуанговского рассеяния, $D_Q(\mathbf{q})$ - поправка к амплитуде за счет учета квадрупольного члена поля деформаций.

Вычисление амплитуды рассеяния Стокса-Вильсона для эллиптического включения выполнено в сферической системе координат. Решение может быть представлено в виде

$$D_{sw}(\mathbf{q}) = 2\pi \int_{-l_z/2}^{l_z/2} \frac{R_z}{q_0} J_1(q_0 R_z) \exp(iq_z z) dz, \quad (8)$$

где $J_1(q_0 R_z)$ - функция Бесселя первого порядка,

$$q_0 = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}, \quad R_z = \sqrt{1 - z^2 / (l_z/2)^2}.$$

Второй член суммы (7) описывает хуанговское рассеяние. Вычисления выполнены в обобщенной сферической системе координат, получено решение

$$D_H(\mathbf{q}) = \frac{2\pi A h q}{q^2} \Phi_1(q, R, l_z), \quad (9)$$

где функция $\Phi_1(q, R, l_z)$, зависящая от параметров R, l_z эллипсоида вращения и переменного радиуса

$$R(x) = R \left(1 + \left[\frac{R^2}{(l_z/2)^2} - 1 \right] x^2 \right)^{-1/2}, \text{ имеет вид}$$

$$\Phi_1(q, R, l_z) = \int_{-1}^1 dx \exp(iqR(x)x).$$

Квадрупольная поправка при $R \leq 8l_z$ существенно меньше двух первых слагаемых в (7) и может быть записана по аналогии с (9)

$$D_Q(\mathbf{q}) = 2\pi A \frac{[R^2 - (l_z/2)^2] h q}{25} \Phi_2(q, R, l_z), \quad (10)$$

где

$$\Phi_2(q, R, l_z) = \int_{-1}^1 dx (3x-1)x^2 \left(\frac{e^{iqR(x)x}}{iqR(x)x} + E_1(-iqR(x)x) \right),$$

$$E_1(iR) = \int_R^\infty dz \frac{\exp(-iz)}{z} - \text{интегральная экспонента.}$$

На основе решений (6)-(10) проведено численное моделирование распределения интенсивности диффузного рассеяния от эпитаксиального слоя с КТ. Высота КТ во всех вычислениях составляла 10 нм. В случае, когда высота КТ l_z составляет половину радиуса R ($l_z = R/2$), эллипс трансформируется в сферу с упругим полем смещений (4). Карта распределения интенсивности рассеяния от сферических КТ показана на рис. 2 (более подробно см. [7]). На этом и всех последующих рисунках с изображениями карт диффузного рассеяния отношение интенсивностей между соседними контурами дается в логарифмическом масштабе и равно 0.237. Результаты вычислений углового распределения интенсивности диффузного рассеяния от слоя с КТ эллиптической формы одного размера представлены на рис. 3 и 4..

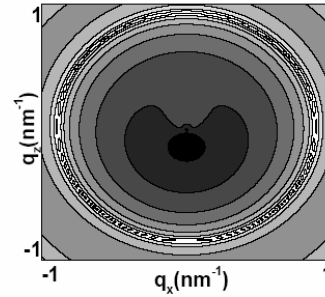


Рис.2. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы со сферически-симметричными КТ одного размера. Высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=5$ нм

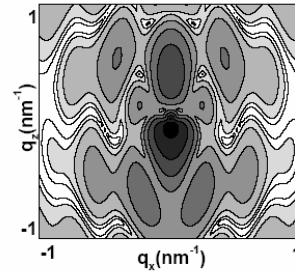


Рис.3. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы с КТ одного размера. Высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=20$ нм

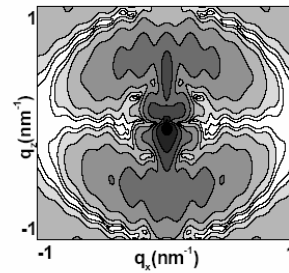


Рис.4. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы с КТ одного размера. Высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=40$ нм

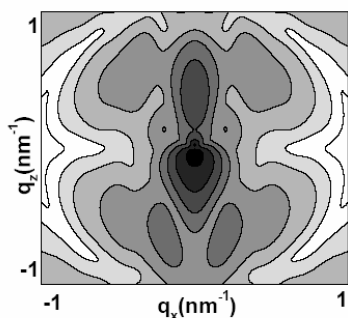


Рис.5. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы с КТ разного размера. Средняя высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=20$ нм, дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлениях 30 %.

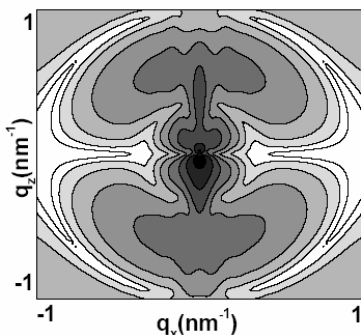


Рис.6. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы с КТ разного размера. Средняя высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=40$ нм, дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлениях 30 %.

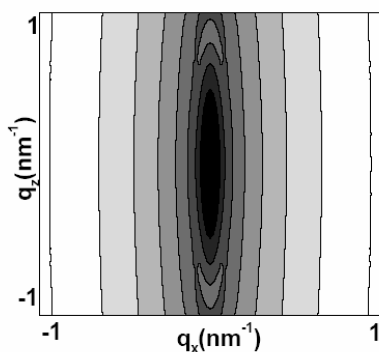


Рис.7. Карта распределения интенсивности рассеяния Стокса-Вильсона от системы с КТ разного размера. Средняя высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=40$ нм, дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлениях 30%.

Поскольку в процессе эпитаксиального роста невозможно создать совершенно одинаковые самоорганизованные КТ, то необходимо провести

процедуру усреднения по размерам включений. Результат такого усреднения показан на рис. 5 и 6. Распределение диффузного рассеяния от включений эллиптической формы без упругих деформаций вне КТ (рассеяние Стокса-Вильсона) изображено на рис. 7. Угловое распределение хуанговского рассеяния показано на рис. 8.

Формирование дифракционной картины (рис. 5 и 6) преимущественно определяется двумя первыми членами суммы (7). Вклад квадрупольного члена разложения упруго поля смещений крайне мал и по угловому распределению имеет сходство с хуанговским рассеянием. В заключение следует отметить, что для расчета упругих полей деформаций эллиптического включения существует аналитическое решение [8], однако вычисление его не менее сложно, чем, например, использование метода конечных элементов.

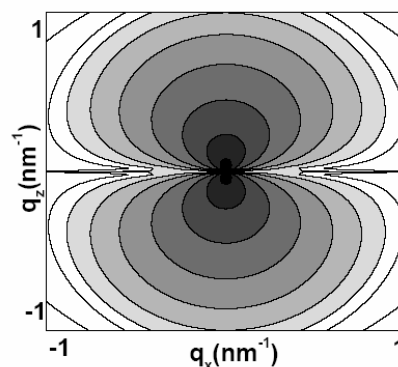


Рис.8. Карта распределения интенсивности хуанговского рассеяния от системы с КТ разного размера. Средняя высота КТ $l_z=10$ нм, латеральный радиус $R=40$ нм, дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлениях 30 %

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-00445-а) и Программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН - РЦП-2010 (проект III)

- [1] Maranganti R., Sharma P. *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*. N.Y.: Amer. Sci. Publishers. 1, P.1-44. (2005)
- [2] Darhuber A.A., Schittenhelm P., Holý V., Stangl J., Bauer G., Abstreiter G. *Phys. Rev. B* 55, 15652 (1997)
- [3] Holy V., Darhuber A.A., Stangl J., Zerlauth S., Schäffler F., Bauer G., Darowski N., Lübbert D., Pietsch U., Vávra I. *Phys. Rev. B* 58, 7934 (1998)
- [4] Bauer G., Darhuber A.A., Holý V. *Cryst. Res. Technol.* 34,197 (1999)
- [5] Yang M. *Phys. Rev. B* 56, 1973 (1997)
- [6] Nenashev A. V., Dvurechenskii A. V. *J. Appl. Phys.* 107, 064322 (2010)
- [7] Пунегов В.И. *Кристаллография*. 54, 415 (2009)
- [8] Eshelby J.D. *Proc. R. Soc. London*. A252, 561 (1959)