

Рентгеновская кристаллооптика латерально – квазипериодических систем SiGe

В.И. Пунегов¹, 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

Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия является перспективным неразрушающим методом для анализа полупроводниковых систем с самоорганизованными наноструктурами. Созданные разными методами наноструктуры (квантовые нити и точки (КТ), пористые кристаллы и т.д.), как правило, занимают определенные позиции в латеральной плоскости, тем самым создают тот или иной пространственный порядок. Известно, что высшей степенью пространственного порядка является упаковка атомов в идеальном кристалле. Однако строгая трансляция позиций в решетке практически в природе не встречается. С другой стороны, и идеальный беспорядок в расположении самоорганизованных объектов достигается крайне редко, так как нельзя пренебречь корреляциями между этими объектами, расположенными по соседству друг с другом. Поэтому чаще всего в природе встречается промежуточное состояние между идеальным порядком и идеальным беспорядком.

Для описания корреляций между ближайшими соседями могут быть использованы два подхода, основанные на формализме паракристаллического строения или функции радиального распределения. Паракристаллическая модель или модель возмущенной решетки строится на основе принципа искажений трансляционной симметрии, в то время как модель радиального распределения базируется на введении вероятностной функции нахождения частиц и справедлива только в случае изотропной среды.

Влияние пространственной корреляции КТ и кристаллитов пористой структуры на диффузное рассеяние рентгеновских лучей исследовалось разными авторами как в рамках одномерной паракристаллической решетки [1-2], так и модели радиального распределения [3].

В данной работе на основе концепции идеальной паракристаллической решетки [4] разработана двумерная модель, которая в отличие от одномерной [1-2], позволяет исследовать распределение интенсивности диффузного рассеяния при разных азимутальных угловых положениях образца.

Рассмотрим полупроводниковую систему, состоящую из матрицы (подложка кремния), на которой осажден тонкий слой другого вещества,

например, германия. В результате самосборки на поверхности образца формируются островки SiGe. В условиях дифракции рентгеновских лучей интенсивность отражения от этих островков крайне мала и на лабораторных источниках фактически не регистрируется. Однако имеется заметный выход диффузного рассеяния от поверхностного слоя кремния, искаженного наведенными деформациями от квантовых точек SiGe. Для когерентного рассеяния приповерхностный слой можно смоделировать в виде градиентного слоя SiGe. Численное решение такой задачи хорошо известно. Выражение для интенсивности диффузного рассеяния запишем в виде

$$I_h^d(q_x, q_z) = |a_h^D|^2 (1 - f_D^2) \int_{-\infty}^{+\infty} dq_y L(q_x, q_y) \bar{r}(q) \quad (1)$$

Приведенная латеральная площадь корреляции наноструктур представима как произведение $L(q_x, q_y) = F_{a1}(q_x, q_y) F_{a2}(q_x, q_y)$, где интерференционные корреляционные длины в направлениях базисных векторов паракристаллической решетки a_1 и a_2 имеют вид

$$F_b(q_x, q_y) = 1 + \frac{2}{N_b} \quad (2)$$

$$\times \operatorname{Re} \left(\frac{Z_b(q_x, q_y) (1 - Z_b(q_x, q_y)) N_b - (1 - Z_b(q_x, q_y))^{N_b}}{(1 - Z_b(q_x, q_y))^2} \right)$$

Здесь индекс $b = a_1, a_2$,

$$Z_b(q_x, q_y) = \exp(iq_x T_b) f_b(q_x) f_b(q_y),$$

$$f_b(q_{x,y}) = \langle \exp(iq_{x,y} t^b) \rangle, \quad t^b - \text{компоненты}$$

случайного вектора, при этом если основной осью рассмотрения будет a_1 -направление, то $\langle t^{a_1} \rangle = T_{a_1}$ задает средний период решетки в этом направлении и $\langle t^{a_2} \rangle = 0$, N_b - число наноструктур в направлении базисных векторов паракристаллической решетки.

Остальные обозначения приведены в [5].

На основе статистической теории дифракции, с использованием (1) и (2), проведено численное моделирование углового распределения когерентного и диффузного рассеяния.

Градиентный приповерхностный слой SiGe, моделирующий КТ и смачивающую пленку, имеет толщину 6 nm. Форма КТ взята в виде усеченного конуса с проникающими деформациями в кремневую матрицу.

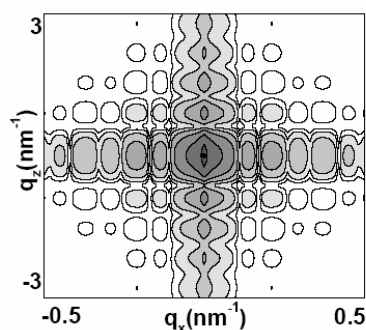


Рис. 1. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с хаотически распределенными островками одного размера.

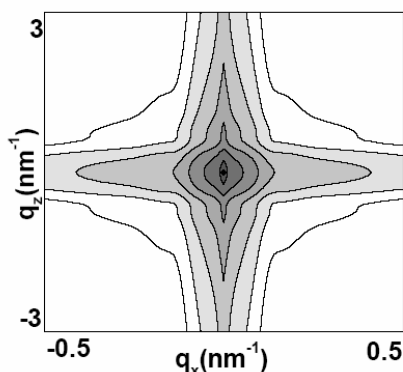


Рис. 2. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с хаотически распределенных островков разного размера. Дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлении 30%.

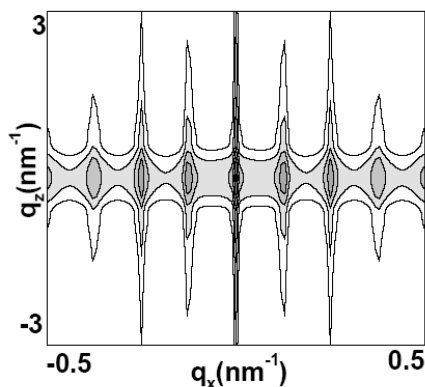


Рис. 3. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с квазипериодическим расположением островков. Дисперсия периода $\sigma_T = 0.05 \times T$.

Для расчетов хуанговского диффузного рассеяния от псевдосферических включений нижнее основание КТ моделировалось

эллиптической поверхностью. Высота островков составляла 10nm, нижний радиус – 20nm, верхний 15 nm. Среднее расстояние между островками 50 nm.

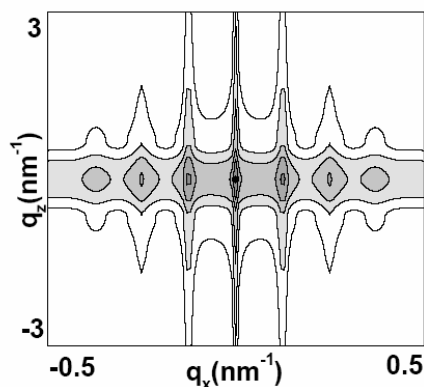


Рис. 4. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с квазипериодическим расположением островков. Дисперсия периода $\sigma_T = 0.1 \times T$.

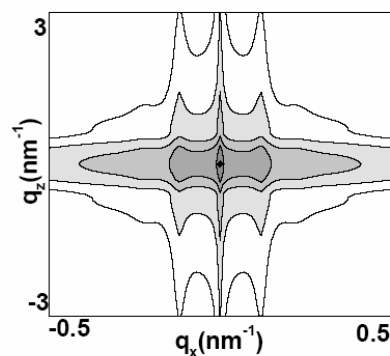


Рис. 5.. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с квазипериодическим расположением островков. Дисперсия периода $\sigma_T = 0.2 \times T$.

Рассмотрено симметричное отражение (004) перпендикулярно поляризованного CuK_α -излучения от системы SiGe/Si (001). Расчеты выполнены для разной степени латерального порядка КТ.

Карта распределения интенсивности рассеяния от хаотически распределенных островков SiGe одного размера показана на рис. 1. Поскольку процесс самоорганизации наноструктур фактически исключает образование совершенно одинаковых по размеру островков, на рис.2 представлены контуры равной интенсивности от системы с КТ разного размера. Дисперсия распределения КТ по размеру составляла 30%. Видно, что характерные размерные осцилляции исчезли.

Следующим шагом численного моделирования служило исследование распределения интенсивности рассеяния в зависимости от степени структурного порядка в расположении островков. Если наноструктуры имеют хороший латеральный порядок (дисперсия периода $\sigma_T = 0.05 \times T$), распределение интенсивности рассеяния выявляет четко обрисованную спутную структуру (рис.3). Увеличение флуктуаций периода в два раза размывает эту структуру, однако ближайшие к брэгговской полосе диффузные максимумы сохраняются (рис.4). При значении $\sigma_T = 0.2 \times T$ остаются только спутники первого порядка (рис.5), а дальнейшее увеличение дисперсии в два раза ($\sigma_T = 0.4 \times T$) приводит к подавлению всей спутной структуры (рис.6). В отличие от полного хаотического распределения КТ, наблюдается удлинение контуров равной интенсивности в латеральном направлении.

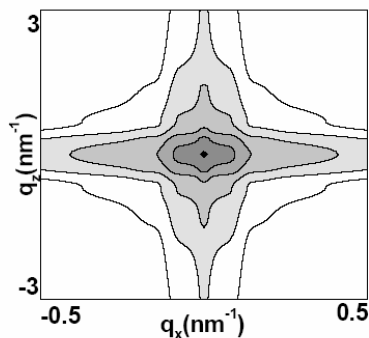


Рис. 6. Карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с квазипериодическим расположением островков.

Дисперсия периода $\sigma_T = 0.4 \times T$.

На рис. 7 показано поведение интерференционных корреляционных длин $F(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y F_b(q_x, q_y)$ в зависимости от величины дисперсии периода.

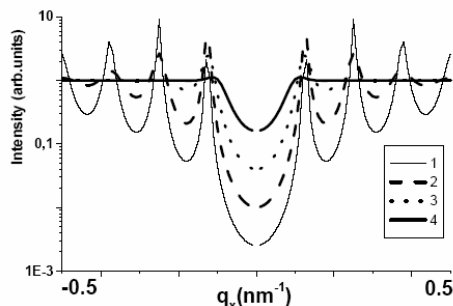


Рис. 7. Угловые зависимости интерференционных корреляционных длин латерального расположения КТ: 1- $\sigma_T = 0.05 \times T$; 2- $\sigma_T = 0.1 \times T$; 3- $\sigma_T = 0.2 \times T$; 4- $\sigma_T = 0.4 \times T$

Профили q_z -сечений когерентного рассеяния от подложки Si (001) и системы SiGe/Si (001), а также полного (когерентного и диффузного) рассеяния вблизи узла обратной решетки (004) показаны на рис. 8.

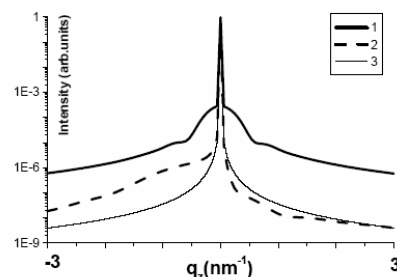


Рис. 8. q_z -сечения рассеяния от системы SiGe/Si (001) вблизи узла обратной решетки (004): 1- полного (когерентного и диффузного) рассеяния; 2- когерентного рассеяния; 3- от подложки Si (001).

В качестве примера на рис. 9 показана экспериментальная карта распределения интенсивности рассеяния от системы КТ SiGe/Si в условиях косой съемки вблизи узла (113).

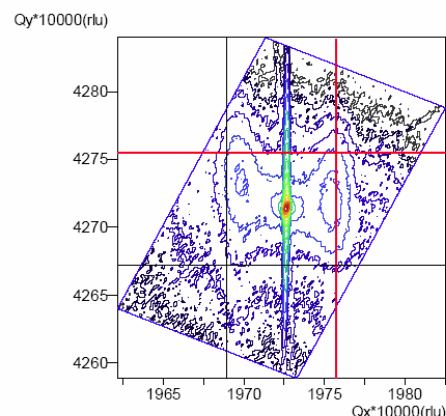


Рис. 9. Экспериментальная карта распределения интенсивности рассеяния от системы SiGe/Si с КТ. Асимметричное отражение (113) CuK_α -излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-00445-а) и Программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН - РЦП-2010 (проект П1)

- [1] Schmidbauer M., Hanke M., Köhler R. Phys. Rev. B. 75, 045343 (2007)
- [2] Пуногов В.И., Ломов А.А. Письма в ЖТФ, 34, N 6, 30 (2008)
- [3] Бушуев В.А. Поверхность. N 9, 29 (2007)
- [4] Eads J.L., Millane R.P. Acta Cryst. A. 57, 507 (2001)
- [5] Пуногов В.И. Письма в ЖТФ, 34, N 20, 8 (2008)