НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ

На правах рукопису

КОРЧОВИЙ АНДРІЙ АДАМОВИЧ

УДК: 539.213; 539.23+621.793.79; 539.26

Розсіяння X-променів шаруватими періодичними структурами та діагностика їх параметрів

(01.04.07 - фізика твердого тіла)

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

> Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук Кладько Василь Петрович

КИЇВ - 2007

3MICT

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	4
ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1 ДИФРАКЦІЯ Х-ПРОМЕНІВ В БАГАТОШАРОВИХ	
ЕПІТАКСІЙНИХ СТРУКТУРАХ. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	11
Вступ	11
 Фізичні основи X – променевих дифрактометричних 	
методів	11
1.2. Дослідження надграток	15
1.3. Багатошарові структури з квантовими точками	20
Короткі висновки	22
РОЗДІЛ 2 ДИФРАКТОМЕТРІЯ ПЕРЕОДИЧНИХ СТРУКТУР	23
Вступ	23
2.1. Дослідження структурних властивостей гетерошарів	
методами дифракції X – променів	23
2.2. Методи Х-дифрактометрії	29
2.3. Основи трикристальної диференціальної дифрактометрії	32
2.4. Розділення розорієнтацій і деформацій гратки	43
Короткі висновки	44
РОЗДІЛ З ОСНОВНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОРОТКОПЕРІОДНИХ	
НАДГРАТОК	45
Вступ	45
3.1. Дослідження формування X – променевих спектрів від	
надграток	46
3.2. Структурний фактор надграток. Інтенсивності сателітів	49
3.3. Загальні характеристики надграток	54
3.3.1. Джерело сателітів.	54
3.3.2. Вимірювання періоду.	57
3.3.3. Варіації періоду.	58

3.3.4. Вимірювання індивідуальних товщин шарів НГ.	60
3.4. Поведінка сателітних дифракційних максимумів	
короткоперіодних надграток GaAs-AlAs з різним ступенем	
кристалічної досконалості шарів	64
Короткі висновки	71
РОЗДІЛ 4 КВАЗІЗАБОРОНЕНІ РЕФЛЕКСИ В БАГАТОШАРОВИХ	
ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУРАХ	72
Вступ	72
4.1. Формування кривих відбиття для квазізаборонених	
відбиттів у короткоперіодних надгратках GaAs/AlGaAs	72
4.2. Застосування квазізаборонених Х-променевих рефлексів	
для дослідження багатошарових періодичних структур	81
4.3. Дослідження тонких інтерфейсних областей у	
сполуках III-V наноструктур методом ВРХД	91
4.3.1. Теоретичний аналіз.	92
4.3.2. Методика експерименту й зразки для дослідження.	93
4.3.3. Обговорення результатів.	93
Короткі висновки	97
РОЗДІЛ 5 ДИФРАКЦІЯ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ З	
КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ	99
Вступ	99
5.1. X – променеві дифракційні дослідження 2D - 3D структурних	
переходів у багатошарових періодичних структурах In _x Ga _{1-x} As/GaAs	100
5.2. Дифракція на масиві квантових точок	107
5.3. Дослідження структур з латеральними модуляціями	
складу за допомогою двомірних карт розсіяння	
Х – променів в оберненому просторі	116
Короткі висновки	122
ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ	123
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	126
СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ	138

3

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
- ∆ф горизонтальна кутова розбіжність пучка X-променів
- Ri(x) інтегральний коефіцієнт відбиття Х-променів
- I(x) просторовий розподіл інтенсивності рефлексу
- ф кут відхилення детектора поблизу кута 200
- Δφ відстань між двома гілками дисперсійної поверхні
- Л довжина екстинкції

ВСТУП

В роботі виконано комплекс досліджень в рамках наукової проблеми – розвиток експериментальних методів з використанням квазізаборонених рефлексів (КЗР) для контролю параметрів багатошарових квантово-розмірних структур, а також проведено дослідження деформаційних, композиційних властивостей, з метою оптимізації фізико-технологічних основ отримання багатошарових напружених структур методами дифракції Х-променів.

Актуальність теми.

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

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

Окрім того, що вони є неруйнівними та експресними, вони володіють високою чутливістю до спотворень кристалічної гратки різного типу. Вдосконалені експериментальні методи та чисельне моделювання процесів розсіяння Х-променів реальними кристалами дають унікальну інформацію про розподіл деформацій за товщиною кристалу, ротаційні та дилатаційні складові деформацій кристалічної гратки на глибинах від декілька моношарів до десятків міліметрів.

Отже, аналіз закономірностей розсіяння Х-променів багатошаровими епітаксійними структурами на сьогодні залишається актуальною проблемою і

потребує подальшого вивчення з виходом на кількісні оцінки структурних характеристик.

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

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

<u>Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.</u>

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

"Комплексні структурні та морфологічні дослідження гетероепітаксійних (у тому числі нанорозмірних) систем на основі напівпровідників ІV групи та сполук А³В⁵ і А²В⁶" (№ державної реєстрації 0103U000380), – (виконавець).

2. Науково-технічна програма "Розробка науково-технічних методів, засобів і автоматизованих систем контролю параметрів напівпровідникових матеріалів, структур і приладів". Тема "Сертифікація", проект "Рентгеноспектральна методика і апаратура для контролю хімічного складу в ході технологічного процесу" (№ державної реєстрації 0197U008669), – (виконавець).

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

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

Мета і завдання дослідження.

Mema дисертаційної роботи полягала y подальшому розвитку експериментальних основ дифракції Х-променів на багатошарових квантоворозмірних структурах, а також в дослідженні деформаційних, композиційних властивостей, оптимізації фізико-технологічних основ 3 метою отримання багатошарових напружених структур з квантовими ямами і точками з наперед заданими властивостями.

Для досягнення поставленої мети, вирішувалися наступні наукові завдання:

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

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

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

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

Наукова новизна одержаних результатів.

Серед найбільш важливих наукових результатів, отриманих *вперше* в дисертації, слід відзначити такі:

- за рахунок поширення області досліджень квазізаборонених рефлексів на об'єкти наноструктурних розмірів – надгратки, багатошарові структури з квантовими точками, – встановлена можливість сепарації внеску в розсіювальну здатність таких структур кожного з шарів окремо, високу чутливість КЗР до складу твердих розчинів субшарів, а також вибіркову чутливість сателітів НГ до дефектної структури того або іншого шару.
- обґрунтовано і реалізовано методику контролю параметрів індивідуальних шарів надграток з використанням квазізаборонених рефлексів. Показано, що в структурах, один з шарів якої утворений елементами, які мало відрізняються атомними номерами, внеском цього шару в формування дифракційної картини можна знехтувати. Цей шар буде давати внесок лише в зміну фази розсіяння;
- встановлено двохшаровий розподіл індію з різним його вмістом в квантовій ямі багатошарової структури InGaAs/GaAs та з'ясовано роль форми цього розподілу в шарах на форму КДВ у випадку дифракції Брегга;
- обґрунтована можливість контролю параметрів короткоперіодних надграток AlGaAs/GaAs, а також їх деформаційного стану з високою точністю при використанні кінематичної теорії розсіяння.

Практичне значення одержаних результатів.

Значення одержаних здобувачем результатів полягає в тому, що в дисертації приведені експериментальні методи досліджень з використанням квазізаборонених рефлексів, які можна використовувати для встановлення цілого спектру

характеристик багатошарових надграткових структур, зокрема профілів деформації, композиційних профілів, геометричних параметрів з використанням простих експериментальних установок. Отримані результати дозволяють оптимізувати фізико-технологічні основи процесів росту складних багатошарових систем та тонких плівок для створення приладів на їх основі.

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

Особистий внесок здобувача.

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

Апробація результатів дисертації.

Основні результати досліджень, що викладені у дисертацій роботі, доповідались та обговорювались на наукових конференціях: II Українська наукова конференція з фізики напівпровідників – УНКФН-ІІ (Чернівці, Україна, 20-24.09.2004); IX Міжнародної конференції "Фізика і технологія тонких плівок" (Івано-Франківськ, Україна, 19-24.05.2003); Международный украинско-русский семинар «Нанофизика и наноэлектроника». – (Киев, Украина, 2003); Лашкарьовських читаннях (Київ, Україна, 2003); X International Conference on Physics and Technology of Thin Films – ICPTTF-X (Ivano-Frankivsk, Ukraine, 16-21.05.2005), V Національній конференції по застосуванню рентгенівського, синхротронного випромінювання, нейтронів і електронів для дослідження матеріалів РСНЭ–НАНО–2005 (Росія, Москва 14-19.11.05).

Публікації.

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

Структура та об'єм дисертації.

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

РОЗДІЛ 1

ДИФРАКЦІЯ Х-ПРОМЕНІВ В БАГАТОШАРОВИХ ЕПІТАКСІЙНИХ СТРУКТУРАХ. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

Вступ

Інтенсивне дослідження розмірних ефектів в надтонких напівпровідникових гетероструктурах сприяло появі нових класів напівпровідникових приладів – резонансних тунельних діодів і транзисторів, лазерів на квантових ямах та ін. Більшість цих структур були реалізовані на основі напівпровідників A3B5, оскільки для них добре відома зонна структура, визначені ефективні маси носіїв заряду, вони реалізують перший тип гетероструктур та мають прямі оптичні переходи.

X- променеві дифракційні методи заслужено посідають одне з перших місць серед прямих, експресних і неруйнівних методів контролю параметрів структури напівпровідникових матеріалів і приладних систем.

1.1. Фізичні основи Х – променевих дифрактометричних методів

Фізичною основою X - променевих дифрактометричних методів дослідження внутрішньої структури моно- і полікристалів є кінематична та динамічна теорії дифракції X-променів [4, 5, 6, 7, 8].

При кінематичному наближенні теорії дифракції вважається, що хвильове поле всередині кристалу ідентичне полю падаючої хвилі. Таке припущення означає, що зміною поля всередині кристалу внаслідок поляризації, заломлення, поглинання, розсіяння та перерозсіяння можна знехтувати. Нехтування першими двома механізмами виправдано тим, що поляризовність Х-променів мала. Нехтування рештою механізмів можливе тільки у випадку малого кристалу, коли процеси поглинання та розсіяння слабо впливають на зміну хвильового поля. Максимальний лінійний розмір кристалу, для якого застосовне кінематичне наближення, вздовж вектора дифракції $l \sim 10^{-4}$ см [9]. Більшість природних та штучних кристалів складаються саме з мозаїчних блоків, лінійні розміри яких задовольняють вказану умову, що забезпечує широке практичне застосування кінематичної теорії.

У випадку високо-досконалих монокристалів застосування кінематичного наближення дифракції некоректне. В цьому випадку стають значними явища багатократного розсіяння випромінювання, інтерференція падаючої хвилі з розсіяними. Це веде до формування в кристалі єдиного хвильового поля. Вказані ефекти враховує динамічна теорія дифракції Х-променів.

В останні роки досягнуто суттєвого прогресу в розробленні динамічної теорії розсіювання випромінювань неідеальними кристалами [10, 11]. Статистична динамічна теорія Като [12] отримала подальший розвиток в роботах [13, 14]. В [15] створена загальна теорія розсіяння Х-променів в кристалі з неоднорідним розподілом дефектів по глибині. Динамічна теорія розсіювання випромінювання в кристалах з макроскопічно однорідним розподілом дефектів різного типу розвинута в [16], отримані автором вирази дозволяють описати залежність повної інтегральної інтенсивності рефлексів і її компонент від характеристик спотворень і є зручними для аналізу експериментальних даних [17, 18].

Ступінь структурної досконалості кристалів характеризують інтегральними (усередненими по розсіюючому об'єму) параметрами, які впливають на динамічну інтегральну інтенсивність розсіяння Х-променів і різні для різних типів спотворень структури. В тому випадку, коли характерний масштаб поля деформації D суттєво менший, ніж довжина екстинції Λ діючого рефлексу (локалізовані деформації), такими параметрами виступають статичний фактор Дебая-Валлєра L і коефіцієнт додаткових втрат енергії Х- променів за рахунок дифузного розсіювання на дефектах μ_d . Тоді ефективний структурний фактор реального кристалу виражається як:

$$F_{\rm H}^{\rm e\phi.} = F_{\rm H}^{\rm i.z.} \exp(-L),$$

де $F_{\mathbf{H}}^{i_{\mathbf{A}.}}$ структурний фактор ідеальної гратки; $\exp(-L) = \langle \exp(-\mathbf{H}\mathbf{U}) \rangle$, **H** – вектор дифракції, $H = 2\pi/d$ (d – міжплощинна відстань), U- вектор зміщення атома з положення рівноваги, дужки $\langle \rangle$ означають усереднення по об'єму кристалу. Параметри L і μ_d можна використати для опису динамічної дифракції X-променів на кристалах з статистично однорідним розподілом дислокацій з густиною Nd, яка не перевищує деяких критичних значень [18].

Контроль структурної досконалості монокристалів за наявності в них локалізованих і розподілених деформацій з довільним (неоднорідним) розподілом по об'єму є найбільш складною і в загальному випадку не розв'язаною задачею. Хоча для деяких окремих випадків запропоновані феноменологічні методи контролю структури таких об'єктів [19, 20]. В [21] розроблена теорія, яка дозволяє кількісно описати профілі брегівських піків незалежно від радіусів мікродефектів (які можуть бути порівнянні або й перевищувати довжину екстинкції) для випадку їх хаотичного розподілу.

Додаткову інформацію про рівень структурної досконалості матеріалу дозволяє отримати метод, розвинутий в [22, 23] та модифікований авторами [24, 25, 26], де на основі аналізу інтегральних інтенсивностей брегівських відбиттів, які в кристалах із структурою цинкової обманки є квазізабороненими, вдається встановити в бінарних кристалах не тільки тип переважаючих точкових дефектів, але й їх розподіл по підгратках. Метод квазізаборонених відбитів (КЗВ) є досить ефективним і при дослідженнях інших параметрів кристалів, наприклад зміни станів зовнішніх електронів при ковалентному зв'язку в електричних та магнітних полях [27, 28]. Порівнюючи даний метод з іншими експериментальними методами вивчення дефектів (електричними, оптичними, хімічними, магнітними, а також стандартним методами дифракції Х-променів та електронів), можна сказати, що вони не дають прямих результатів щодо інтерпретації структурних аспектів, таких як місцезнаходження в кристалічній гратці та атомна конфігурація навколо дефекту. Крім того, особливістю КЗВ є їх мала чутливість до розподілених полів деформацій, що надає перевагу даному методу перед іншими дифракційними методами при дослідженнях таких структурно неоднорідних монокристалів, як GaAs.

В загальному випадку інтегральна інтенсивність дифракційного відбивання для мозаїчного кристалу є значно вищою, ніж для структурно досконалого. Однак, для слабких відбивань ці інтенсивності наближаються одна до одної. Відношення Імоз/Ідоск для (200)-відбиття Си Кα випромінювання становить 1,10 тоді як для відбиття (400) воно дорівнює 7,0 [22]. Тому для аналізу інтенсивності можна користуватись кінематичним наближенням теорії дифракції Х-променів. Це означає, що при аналізі стану точкових дефектів монокристалу за вимірюваннями інтенсивностей КЗВ можна не враховувати ефектів, пов'язаних з полями пружних деформацій.

Інтегральний коефіцієнт відбивання Х-променів (по схемі Брегга) в кінематичному наближенні $R_i \sim |F_{\rm H}|^2$, де структурна амплітуда розсіяння

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j} f_{j} \exp\left(2\pi i \,\mathbf{H}\mathbf{r}_{j}\right), \qquad (1.1)$$

тут $f_j = (f_j^0 + f'_j + if''_j) \exp(-M_j)$ – атомний фактор розсіяння j-того атому; Мj – температурний фактор Дебая-Валлера; $Hr_j = hx_j + ky_j + lz_j$, h, k, l – індекси Міллера.

Оскільки між структурними факторами галію і миш'яку існує мала різниця, то за рахунок цього можна спостерігати слабкі hkl відбиття типу h + k + 1 = 4n + 2 (n = 0, 1, 2, ...). Коли положення галію і миш'яку повністю зайняті відповідними атомами, F визначається як:

$$F = 4(f_{Ga} - f_{As}).$$
(1.2)

Але в реальних кристалах вакансії і домішки заміщення з атомними номерами, які є значно менші за номери власних атомів напівпровідника, зменшують відбиваючу здатність атомної площини, в той час як міжвузля і домішки з більшими атомними номерами – збільшують її. Тому рівність (1.2) можна записати як:

$$F = 4(C_{Ga}f_{Ga} - C_{As}f_{As}).$$
 (1.3)

Тут, CGa,As - відношення концентрацій атомів відповідної атомної площини до їх концентрації в ідеальному кристалі (CGa= CAs=1 для ідеального кристалу). Видно, що навіть незначні зміни в CGa-CAs спричинять відчутні девіації у величині структурного фактору F.

1.2. Дослідження надграток

Перехід до наноструктур з лінійними розмірами меншими 100 нм означає подолання фундаментального фізичного бар'єру, за яким стають актуальними квантово-розмірні ефекти і всі властивості твердого тіла різко змінюються. В зв'язку з цим наноструктури мають важливу перевагу над мікроструктурами, яка пов'язана з тим, що змінюючи геометричні розміри та конфігурацію нанооб'єктів, можна керувати властивостями системи. Виникає можливість конструювання важливих параметрів структури і перш за все - енергетичного спектру носіїв заряду та фононів.

Ще однією проблемою є формування контактів метал-напівпровідник, стійких до екстремальних зовнішніх умов (високі температури, радіаційний вплив тощо). Вона є однією з найважливіших задач створення напівпровідникових приладів. Інтерес до проблеми одержання контактів із стійкими до впливу високих температур параметрами, значно зріс при переході до субмікронних розмірів твердотільних приладів.

Основними причинами, що обумовлюють деградацію багатошарових контактів, є фазоутворення і взаємодифузія атомів - компонентів контакту, а також формування неоднорідних полів механічних деформацій на границі розділу та тонкому приконтактному шарі. Наприклад, для арсенідгалієвих приладів, які переважають в надвисокочастотній та оптоелектроніці завдяки вищій швидкодії порівняно з кремнієвими, продовжується пошук оптимальних комбінацій контактів. Проблема полягає в тому, що присутність у сполуці летючого миш'яку не дозволяє застосовувати традиційні для кремнієвих структур режими одержання приладних систем з різкими границями розділу метал-напівпровідник в зв'язку з взаємодифузією атомів контакту та вищою хімічною активністю Ga та As.

Зазначені явища в контактах можна усунути в деяких температурних інтервалах, вводячи до складу металізації в якості антидифузійних шарів "чистих" металів або металевих сполук, які характеризуються високою термостійкістю й хімічною інертністю, відсунувши таким чином термічний поріг деградації контактів.

Добре відомо, що фізичні властивості напівпровідникових матеріалів в першу чергу визначаються концентрацією, типом точкових дефектів, до яких відносяться не лише атоми різних домішок, а також вакансії та міжвузлові атоми. Дуже суттєво впливають на фізичні параметри гетероструктур деформаційні поля, викликані різними причинами.

Великі можливості різноманітності та контролю одержання наноструктур дає молекулярно-променева епітаксія. Фізичні властивості матеріалів можуть бути змінені при створенні додаткової структурної періодичності шляхом осадження додаткових тонких плівок. Довжина хвилі періодичності повинна бути такою, щоб фізичні параметри впливали на цю періодичність, і це відрізняє надгратку від багатошарової структури. На жаль це твердження не настільки просте, тому що фізичні параметри (електронне обмеження, наприклад) можуть відчувати періодичну структуру як ряд індивідуальних плівок (індивідуальні потенційні ями, наприклад), в той час як деякі інші фізичні параметри відчувають це як надгратку. Надгратку будемо визначати в термінах "Х - променевої дифракційної надгратки" (залежність природи дифракційної картини від структури). Тому вона може бути визначена як структура, що усереднює розсіяння для періодичних елементів і не складається з індивідуальних піків, пов'язаних з індивідуальними елементами, а з'являється як усереднений пік збурення в термінах сателітних відбиттів. Межі терміну "надгратка" також вимагають уточнення: скільки періодів утворюють надгратку і наскільки товстими мають бути окремі шари, щоб прості явища усереднення були недійсними.

Товщина шару – фундаментальний параметр для тонких шарів, так як ця властивість є фізичним параметром самостійно чи в комбінації з іншими шарами й підкладкою. Перший очевидний ефект на дифракційній картині - зміна у величині інтенсивності з товщиною шару; чим більш тонкий шар – тим менший розсіюючий об'єм. Цей ефект успішно використовувався на цілому ряді матеріалів, а більшість відповідних методів залежить від матеріалу і виходячи із цього визначає простоту або складність дифракційної моделі, яка застосовується. Прийнятною величиною для вимірювання інтенсивності є інтегральна інтенсивність, а не пікова. Це пояснюється тим, що ця величина менше залежить від структури матеріалу. Якщо в матеріалі присутні дефекти, наприклад дислокації невідповідності, то пік шару буде розширюватись і зменшуватись по величині, а інтегральна інтенсивність в кінематичному наближенні буде незмінною.

Інша особливість розсіювання від тонких шарів – те, що на схилах кривих гойдання спостерігаються інтерференційні смуги, період котрих пов'язаний з товщинами шарів. Це так звані товщинні осциляції. Для "ідеальної" епітаксії дифракційний профіль може бути розширеним при зменшенні товщин шарів і ці інтерференційні смуги можуть бути непомітні. Отже, лише математичним моделюванням інтенсивності розсіяння, яке враховує розширення і наявність інтерференційних смуг можна досягнути точного вимірювання товщин.

Можливість X- променевих досліджень кристалічної будови квантоворозмірних структур дискутувалась в багатьох теоретичних та експериментальних роботах, що було узагальнено в монографіях Таннера [29], Голого [30], Молодкіна та ін., [31]. Високороздільна Х-дифрактометрія (ВРХД) завжди використовується для дослідження епітаксійних напівпровідникових багатошарових структур, забезпечуючи при цьому точну інформацію про кристалічну якість, деформації, нахили площин і товщини шарів в неруйнуючий і відносно простий спосіб. Інтерпретація дифракційних профілів є доволі складна задача, так як напівпровідникові прилади стають більш комплексними. В більшості випадків необхідно використовувати комп'ютерне моделювання щоб отримати дифракційний профіль і порівняти його з експериментом.

Точкові дефекти, як було підкреслено вище, відіграють особливу роль в бінарних, потрійних та інших сполуках. В першу чергу до них відносяться відхилення від стехіометричного складу кристалу та дефекти, пов'язані з заміщенням атомів однієї підгратки атомами інших (антиструктурні дефекти). Все вищесказане висуває необхідність створення незалежних методів контролю ступеня відхилення хімічного стану бінарного кристалу від стехіометричного. До таких методів можна віднести Х- променеві дифракційні дослідження відбивної здатності (ВЗ) для так званих квазізаборонених рефлексів (КЗР). Квазізаборонені рефлекси виявились надзвичайно чутливими до дуже незначних відхилень складу бінарних кристалів від стехіометричного. В докторській дисертації В.П. Кладька, виконаній до 2000 року, було вивчене динамічне розсіяння Х-променів в реальних кристалах, що містять не лише дефекти структури, але і порушення складу (нестехіометрія). Ці дослідження дали змогу сформулювати оригінальні методи визначення структурної досконалості надграток та інших багатошарових структур.

Дифузне розсіювання Х-променів несе найбільш повну і пряму інформацію про структурну досконалість. Тому, крім методик аналізу кривих дифракційного відбиття був використаний метод реєстрації двовимірних мап дифузного розсіяння поблизу вузлів оберненої гратки для структурного і квазізабороненого рефлексів. Були визначені параметри структури, як геометричні, так і деформаційні, які добре узгоджуються з даними різних методик.

Значна увага приділяється вивчення властивостей квантово-розмірних надграток (НГ) GaAs/AlAs, що пов'язане з перспективою їхнього практичного використання, зокрема, у приладах оптоелектроніки. У цьому плані надзвичайно важливою є інформація про структуру цих об'єктів, зокрема, планарність границь між шарами, однорідність товщин шарів, дифузійні процеси на границях розділу, про домішки і мікродефекти в періодичних структурах. Всі недосконалості структури в значній мірі впливають на електрофізичні й оптичні характеристики НГ.

Найбільш чутливими та інформативними методами неруйнівного контролю реальної структури НГ є високороздільна Х-дифрактометрія (ВРХД) [32, 33, 34]. У такому підході дифракція Х- променів на структурах, у яких постійна гратки, або інтенсивність розсіювання модульовані уздовж однієї з координат, характеризується наявністю сателітів біля бреггівського піка усередненої гратки [30, 35]. Інтенсивність розсіяння Х-променів сателітними піками пропорційна фур'єкомпонентам координатної залежності модуляції складу системи [30]. Тому, наприклад, взаємодифузію в НГ GaAs й AlAs можна вивчати, вимірюючи інтенсивність сателітів залежно від часу відпалу при постійній температурі [35]. Крім цього, зміна ширини сателітних піків в оберненому просторі несе інформацію про досконалість плівок, зокрема, про когерентність шарів НГ.

Досліджень геометричних параметрів і пружного стану шарів короткоперіодних НГ GaAs/AlAs методами ВРХД проводиться за допомогою порівняння експериментально отриманих кривих дифракційного відбиття (КДВ) з теоретично розрахованими (використовуючи так називане напівкінематичне наближення теорії розсіяння Х-променів [34], коли товщини окремих шарів НГ є малими стосовно екстинкційної довжини).

При розрахунках картини дифракції Х-променів за допомогою першої ітерації рівняння Топена, запропонованої в [30]. Характеристики дифракції та епітаксійного шару можуть бути визначені за формулами [34].

При розгляді відбиваючої здатності реальної НГ для заданого X випромінювання необхідно враховувати механічні напруги (деформації) в епітаксійній плівці, які можуть бути безпосередньо визначені з форми КДВ.

Довільний розподіл напруг є і структурного фактора F епітаксійної плівки по глибині можна представити дискретною структурою, що складається з N суб-

шарів. Нормалізована амплітуда дифракції цієї структури може бути записана за допомогою формул [32, 34].

У ряді робіт, була показана перспективність застосування КЗР для дослідження спектрів кривих дифракційного відбиття [2, 36]. Оскільки ці рефлекси є дуже чутливими до хімічного складу сполуки, то становить інтерес визначення впливу складу квантової ями на спектри дифракції Х-променів для КЗР.

Ці роботи були виконані для шарів з товщинами декілька десятків ангстрем. Проблема стає складнішою, якщо КЯ має товщини порядку декількох моношарів. У НГ із одним підшаром, що є значно тоншим, ніж інший, тонкі вставки не вносять безпосередньо внеску в розсіюючу здатність і дифракційні криві формуються згорткою напруги і товщини цих тонких шарів [37].

1.3. Багатошарові структури з квантовими точками

Багатошарові структури з напруженими шарами InGaAs/GaAs дозволяють підвищити ефективність розмірного квантування. Ансамблі наноострівців, сформовані в матриці широкозонного матеріалу, викликають значний практичний інтерес [38, 39]. Тому їх застосування вимагає проведення широкомасштабних досліджень властивостей цих структур з метою оптимізації технологічних режимів формування шарів і границь розділу. Слід також зазначити, що спонтанна поперечна модуляція складу в плівках напівпровідникових сполук III-V приводить до сильних змін оптоелектричних властивостей напівпровідникових матеріалів, які становлять технічний інтерес для виробництва квантово-розмірних лазерів і фотодетекторів [40, 41].

Багатошарову систему, якою є структура з декількома квантовими ямами, можна представити як систему однорідних субшарів [30]. Розрахунок кривої дифракційного відбиття (КДВ) проводився за формулами динамічної теорії розсіяння X- променів, що зводяться до рекурентних співвідношень між амплітудою відбиття від N шарів $R_{h,N}$, амплітудами відбиття $R_{h,1}$ і проходження $R_{0,1}$ від верхнього шару та амплітудами (N-1) наступних шарів:

$$R_{h,N} = \left[R_{h,1} + R_{h,N-1} (R_{0,1} R_{0,1} - R_{h,1} R_{h,1}) \right] (1 - R_{h,N-1} R_{h,1})^{-1}.$$
 (1.4)

Кожен із шарів характеризується: товщиною tj, параметром кристалічної гратки аj і ступінню аморфизации fj, що зв'язана зі зсувами атомів з регулярної позиції.

Для проведення чисельного аналізу і зіставлення його з експериментом зручно використати модель дефектів кулонівського типу з виразом для статичного фактора Дебая-Валлера згідно [42].

Система самоорганізованих КТ із упорядкованою структурою у вертикальному і латеральному напрямках дуже мало вивчена, оскільки її одержання є дуже складним технологічним завданням. Тому вивчення таких систем важливо як з погляду визначення параметрів таких об'єктів, так і впливу впорядкування системи квантових точок на характер розсіювання Х-променів.

Основним методом дослідження багатошарових квантових структур є високороздільна Х-дифрактометрія [30, 43, 44]. Цим методом можна визначати як технологічні параметри (товщина шарів, склад квантової ями (точки)), так і структурні - рівень деформації в шарах, ступінь їхнього структурного впорядкування і досконалості[45, 46, 47]. Однак, в останніх роботах [48, 49, 50], незважаючи на наявність на експериментальних спектрах піків від квантових точок, відсутнє пояснення механізму формування цих спектрів, а також їхнє математичне моделювання. Крім цього, відсутня інтерпретація спостережуваного на експериментальних спектрах розщеплення сателітних піків основної НГ [43]. Деякі особливості впливу утворення КТ на розмиття сателітної структури спектрів відзначене в [48], а також висунуте припущення про зменшення параметра дальнього порядку.

В [51, 52, 53] розвинена теорія розсіяння Х-променів такими об'єктами, що включає розгляд як когерентної, так і дифузної (викликаною наявністю дефектів у шарах) складових інтенсивності. Для розрахунку дифузної частини розсіяння використовувалась модель, запропонована в [54]. Відправною точкою в розрахунках дифузійного компонента розсіювання Х-променів служить функція форми, що дорівнює 1 усередині КТ і нулю зовні. Деформаційне поле залежить не тільки від взаємного положення точки спостереження відносно точкового центра, але також і від глибини Z центра точки нижче вільної поверхні (стосовно пружної релаксації в поверхні) [53].

Короткі висновки

Таким чином, з аналізу результатів опублікованих робіт випливає, що дослідженням квантово-розмірних структур з використанням КЗР приділено досить незначну увагу. Зокрема, не встановлені фізичні причини формування сателітної структури КДВ, а також вплив співвідношення між товщинами субшарів, структурними факторами й рівнем напруг у цих структурах на інтенсивності сателітів при використанні КЗР. Відкритим у загальному випадку є й питання про причини погасання або посилення сателітів різних порядків при використанні КЗР.

РОЗДІЛ 2

ДИФРАКТОМЕТРІЯ ПЕРЕОДИЧНИХ СТРУКТУР

Вступ

Високороздільна Х-дифрактометрія (BPXД) використовується для дослідження епітаксійних напівпровідникових багатошарових структур, забезпечуючи при цьому точну інформацію про кристалічну якість, деформації, нахили площин і товщини шарів в неруйнуючий і відносно простий спосіб [56, 57]. Інтерпретація дифракційних профілів є доволі складна задача. так як напівпровідникові прилади стають більш комплексними. В більшості випадків необхідно використовувати комп'ютерне моделювання для того, щоб отримати дифракційний профіль і порівняти його з експериментом. Крім того в даному розділі буде розглянуто різні методики аналізу квантових структур, в тому числі шарів квантових точок.

2.1. Дослідження структурних властивостей гетерошарів методами дифракції X - променів

Структурні властивості можуть були розділені на макроскопічні й мікроскопічні. Макроскопічні властивості пов'язані із зразком в цілому, наприклад зовнішні розміри й товщина шару, тоді як мікроскопічні властивості визначаються розмірами кристалічних блоків, дефектами, і т.д.

Товщина шару - фундаментальний параметр для тонких шарів, оскільки ця властивість є фізичним параметром самостійно чи в комбінації з іншими шарами й підкладкою. Перший очевидний ефект на дифракційній картині - зміна у величині інтенсивності з товщиною шару; чим більш тонкий шар – тим менший розсіюючий об'єм. Це - єдине загальне формулювання для всіх типів матеріалу. Товщина шару визначає відносні інтенсивності піків шару і підкладки [58].

Прийнятною величиною для вимірювання інтенсивності є інтегральна

інтенсивність, а не пікова. Це пояснюється тим, що ця величина менше залежить від структури матеріалу. Якщо в матеріалі присутні дефекти, наприклад дислокації невідповідності, то пік шару буде розширюватись і зменшуватись по величині, а інтегральна інтенсивність в кінематичному наближенні буде незмінною [10].

Інша особливість розсіювання від тонких шарів - те, що криві гойдання покажуть на схилах інтерференційні смуги, період котрих пов'язаний з товщинами шарів. Це так звані товщинні осциляції. Для "ідеальної" епітаксії й розумної якості епітаксійного матеріалу з певною будовою дифракційний профіль може бути розширеним зі зменшенням товщин шарів і ці інтерференційні смуги можуть бути не помічені. Отже лише математичним моделюванням інтенсивності розсіяння, яке враховує розширення і наявність інтерференційних смуг можна досягнути точного вимірювання товщин.

Фундаментальне рівняння, яке застосовується для цього методу пов'язує лінійний коефіцієнт поглинання μ_i для матеріалу товщиною t_i і відношення інтенсивностей I_i/I_o заломленої хвилі I_i від матеріалу, до такої ж від нескінченно товстого зразка з того ж самого матеріалу I_o :

$$\frac{I_i}{I_0} = 1 - \exp\left(-\mu_i t_i \left[\frac{1}{\sin\omega} + \frac{1}{\sin(2\vartheta - \omega)}\right]\right),\tag{2.1}$$

де 2 θ - подвійний кут розсіяння ω – кут падіння пучка на зразок. Це рівняння дійсне для полікристалічної, аморфної й молекулярної структури, за умови, що далекий порядок або точні кристалічні області в межах цих матеріалів - менші ніж екстинкційна глибина. Екстинкційна глибина - динамічний дифракційний параметр, який визначає глибину, в якій потік енергії передається від заломленого до дифрагованого променів і являє собою когерентну глибину дифракції:

$$\xi = \frac{\pi V}{r_e C \lambda |F_H|} \left[\sin \omega | \sin(2\vartheta - \omega) \right]^{1/2}, \qquad (2.2)$$

де F_H - структурний фактор (коефіцієнт), і C - поляризаційний множник (1 або 2 θ для двох можливих поляризаційних станів, V - об'єм елементарної комірки, r_e електронний радіус і λ – довжина хвилі X - проміневого випромінювання. Для шарів, більш товстих ніж їхня екстинкційна довжина, не можна використати це просте відношення інтенсивностей, тому що падаючий пучок був зменшений, і дифрагована інтенсивність більше не може значно збільшуватися із зростанням товщини. У найпростішому випадку, коли матеріал аморфний, екстинкційна довжина є нескінченною, але розсіяння слабке; так що експеримент повинен бути досить тривалим для отримання достовірних даних. Для полікристалічної речовини важливий параметр - розмір кристалічних блоків, і вони повинні бути менше ніж екстинкційна довжина, якщо кристалічні блоки не містять значної кількості дефектів. Ще один момент, важливий при визначенні інтенсивності розсіювання – вторинна екстинкція; це є результатом екранування кристалічних блоків, падаючий пучок, у такий спосіб вибирає однаково орієнтовані кристалічні блоки в глибині зразка. Товщина може бути визначена декількома методами, заснованими винятково на інтенсивності розсіяння.

Метод вимірювання товщини, що базується на інтерференційних коливаннях інтенсивності корисний тим, що рівняння які описують цей процес не містять ніяких параметрів, які характеризують матеріал, що відкидає помилки в вимірюванні розсіяної інтенсивності від одного з вузлів, а використовує інтерференцію дифрагованого променя. Цей метод може використовуватись в будь-якому матеріалі, кристалічному або аморфному, але вимагає плоского зразка по області дослідження. Є два загальних підходи до цього типу аналізу; рефлектометрія і висококутова дифракція. В основному рефлектометрія визначається дифракцією біля 000 максимумів (тобто в напрямку падаючого пучка), тоді як високо-кутова дифракція визначається відбиттями від вузлів близьких до всіх доступних *hkl* площин. Існування *hkl* відбиттів залежить від регулярної гратчастої періодичності тоді як 000 максимум завжди присутній, отже дифракційні особливості біля останнього вузла не залежать від кристалічної форми. Сильна інтерференція на границях з різними показниками заломлення викликає биття, рис.2.1, з яких

товщина може бути оцінена, використовуючи:

$$t = \frac{(i-j)\lambda}{2\sin(\omega_i - \omega_j)},$$
(2.3)

де *i* і *j* - порядки інтерференційних смуг і *ω* - половина кута розсіювання. Це просте співвідношення, отримане із закону Брегга спочатку використовувалось для визначення товщини з рефлектометрії [59], і в більш відповідній формі для малих кутів розсіювання і [60] для високо-кутових дифракційних досліджень.

Звичним застосуванням кривих гойдання є визначення складу шарів, напруг і невідповідності параметрів ґраток з кутової віддалі між піками підкладки та шару. Якість шару визначається з розширення кривих відбиття і для зразків з одним епітаксійним шаром товщина його може бути визначена з маятникових осциляцій інтенсивності. Це може бути застосованим до шарів, які мають свої видимі бреггівські піки. Для НГ і БКЯ товщина періоду може бути визначеною з відстані між маятниковими полосами, які ми опишемо вище.



Рис.2.1. Піки КДВ від підкладки і плівки, а також можлива розорієнтація епішару.

В цьому параграфі ми обговоримо можливості визначення складу, напруг, невідповідності і розорієнтації шарів. Згідно рис.2.1 кутова віддаль між брегівськими піками $\Delta 9$ визначається трьома вкладами: різницею міжплощинних

віддалей $\Delta \mathcal{G}_{\mathcal{B}}$, різницею напрямків орієнтації $\Delta \phi$, і розорієнтації поверхні Ω . Відмітимо, що $\Delta \phi = 0$, коли епішар є повністю релаксований, чи площини гратки паралельні до поверхні зразка $\phi = 0$. Кут Ω відповідає тому факту, що при упорядкуванні атомів на поверхні при рості мінімум вільної енергії може привести до розорієнтації між поверхнями підкладки і шару. Його знак буде змінюватись коли напрямки падаючого і дифрагованого хвильових векторів будуть комутувати, чи при обертанні зразка на 180⁰ навколо нормалі до поверхні. Перпендикулярна невідповідність ε_{\perp} може при цьому бути визначена з $\Delta \mathcal{G}$ усередненого для двох симетричних рефлексів ($\phi=0$):

$$\varepsilon_{\perp} = -\overline{\Delta}\,\overline{\mathcal{G}}\,\cot\,\mathcal{G}_B\,,\tag{2.4}$$

де $\overline{\Delta \mathcal{G}} = 0.5(\Delta \mathcal{G}_0 + \Delta \mathcal{G}_{180})$. Усереднене положення піка для двох асиметричних рефлексів таких, як наприклад, 115, 224 дає невідповідність в площині ε_{\parallel} . Два асиметричних рефлекси вздовж інших двох напрямків 90 і 270⁰ дають значення ε_{\parallel} для цього напрямку. Тому що експериментальні значення ε_{\parallel} будуть розщеплені для площин {110} в напрямку [110], а не [100]. При цьому пружні деформації зсуву ε_{xy} дорівнюють $\varepsilon_{\parallel 110|}$ - $\varepsilon_{\parallel 110|}$ і стиску чи розтягу рівні 0.5($\varepsilon_{\parallel 110|}$ - $\varepsilon_{\parallel 110|}$)- ε_{f} .

Відповідно до лінійної теорії пружності, перпендикулярна невідповідність ε_{\perp} і дві невідповідності в площині ε_{\parallel} будуть пов'язані невідповідністю $\varepsilon_f = (a - a_S)/a_S$ між кубічною коміркою кристала:

$$\varepsilon_f = \left[\nu \varepsilon_{par[110]} + \nu \varepsilon_{par[\bar{1}10]} + (1 - \nu) \varepsilon_{\perp} \right] / (1 + \nu), \qquad (2.5)$$

де v – відношення Пуассона, яке для поверхні (001) рівне $c_{12}/(c_{11} + c_{12})$, де c_{ij} пружні константи.

Для узгоджених по параметру гратки шарів і псевдоморфних напружених шарів, для яких $\varepsilon_{/\!/} = 0$, рівняння (2.5) виконується точно. Про те, що формула (2.5)

має суттєву помилку в випадку частково релаксованих шарів $\varepsilon_{\parallel} \neq 0$, як можна бачити з наступних тестів. Відношення Пуассона було оцінено з (2.5) використовуючи X – проміневі вимірювання ε_{\parallel} і ε_{\perp} і відому композицію плівок. Збільшення відхилення від значення $c_{12}/(c_{11} + c_{12})=1/3$ при рості ε_{\parallel} ясно показує, що (2.5) не виконується для релаксованих шарів. Для псевдоморфних шарів $\varepsilon_{\parallel}=0$:

$$\varepsilon_{f} = \varepsilon_{\perp} c_{11} / (c_{11} + 2c_{12}) \text{ для } \{100\}$$

$$\varepsilon_{f} = \varepsilon_{\perp} (c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}) / 3(c_{11} + 2c_{12}) \text{ для } \{111\}$$

$$\varepsilon_{f} = \varepsilon_{\perp} (c_{11} + c_{12} + 2c_{44}) / 2(c_{11} + 2c_{12}) \text{ для } \{110\}.$$
(2.6)

Використання для запису кривих гойдання двокристального дифрактометра дозволяє вимірювати відносні деформації шарів з дуже малим значенням невідповідності параметрів граток (НПГ), порядку $\beta_0 \cong 10^{-4}$ і з точністю не гірше 2·10⁻⁵ при використанні стандартного гоніометра. При реалізації методу на більш досконалих гоніометрах, наприклад, на трикристальному X спектрометрі, точність визначення компонент тензора деформації досягає величини 10⁻⁶.

Запропоновану в [61, 62] методику, що дозволяє підвищити точність вимірювання деформацій, доцільно використовувати для гетероструктур з ультратонкими чи шарами з високим рівнем дефектності, оскільки обидва ці фактори приводять до значного розширення дифракційних максимумів плівки, внаслідок чого визначення їх точного кутового положення стає неможливим.

На закінчення відзначимо, що формули даного параграфа справедливі, строго кажучи, лише для гетероструктур з різко розмежованими епітаксійними шарами постійного складу. Для гетероструктур з розмитими гетерограницями між шарами, також як і для плівок з неоднорідним складом, кутова відстань між шаром і підкладкою може не відповідати середнім значенням деформації, крім того сама форма Х-дифракційного (ХД) максимуму від шару з неоднорідним складом може бути дуже складною. Тому, для таких об'єктів, при визначенні деформацій, потрібно

вирішення відповідних прямих задач теорії X - проміневої дифракції з конкретним законом зміни деформації.

2.2. Методи Х-дифрактометрії

Двокристальна Х-дифрактометрія дозволяє проводити різні записи кривої дифракційного відбиття (КДВ) в залежності від спільного чи окремого обертання зразка чи детектора. В зв'язку з цим можна виділити три основних способи запису КДВ.

Метод кривих гойдання — так зване ω-сканування. Запис КДВ здійснюється обертанням зразка при нерухомому детекторі, який розташований відносно падаючого X – проміневого пучка під кутом 20.

Метод ω–20-сканування. Запис КДВ здійснюється при одночасному обертанні зразка і детектора. Обертання детектора відбувається з подвоєною по відношенню до зразка швидкістю. Метод 20-сканування. Запис здійснюється при обертанні детектора і нерухомому зразку.

В кожному з цих методів, в залежності від завдання, може бути використана колімація дифрагованого пучка безпосереднім встановленням перед детектором вузької щілини. Порівняння напівширин максимумів, записаних з щілиною і без неї при різних методах запису КДВ, дозволяє судити як про зміну деформації в шарах, так і про ступінь мозаїчності епітаксійних шарів. Це питання детально досліджувалось в [60], де показано, що із порівняння напівширин X - проміневих максимумів КДВ ω–2θ- і 2θ-сканування отримується інформація про ступінь мозаїчності плівки, а порівняння напівширин кривих гойдання, записаних з щілиною і без щілини, дає інформацію про степінь неоднорідності деформації по глибині кристала.

Введення додаткової розорієнтації (відносно точного кута Брегга θ_0) між зразком і детектором в методі ω –2 θ - сканування при запису КДВ асиметричного відбиття дозволяє провести розгортку КДВ вздовж вектора оберненої гратки [63]. Таким чином, цим прийомом можна визначити пружну деформацію шарів один відносно одного навіть в тому випадку, коли вихідні параметри ґраток шарів невідомі. Це особливо важливо в випадку багатошарових гетероструктур, шари котрих складаються із трьох - або чотирикомпонентних твердих розчинів.

Зупинимось більш детально на вимірюваннях деформації методом кривих гойдання, котрі зазвичай використовуються для вивчення багатошарових гетероструктур і надграток (НГ).

В ТКД дифрагована інтенсивність вимірюється як функція двох кутів: кута падіння на поверхню зразка $\Delta \mathcal{G}=\mathcal{G}-\mathcal{G}_B$ і кута розсіяння $\Delta \omega = \omega - 2\mathcal{G}_B$. Перетворення цього кута в змінних q – координат які всі лежать в площині дифракції запишеться наступним чином:

$$(q_1, q_2) = K(\Delta \omega \cos \vartheta_B, (2\Delta \vartheta - \Delta \omega) \sin \vartheta_B),$$

$$(q_E, q_0) = K(\Delta \omega, \Delta \vartheta \sin 2\vartheta_B),$$

$$(q_z, q_x) = (q_1 \cos \phi + q_2 \sin \phi, -q_1 \sin \phi + q_2 \cos \phi).$$
(2.7)

де лише одна вісь з кожної пари чітко визначена: q_1 паралельний вектору оберненої гратки h, q_E – паралельний до сфери Евальда і q_z паралельний до нормалі до вихідної



Рис.2.2. Радіальний розподіл розсіяної інтенсивності вздовж вектора q, який отримується комбінацією поворотів аналізатора та зразка.

поверхні зразка. Координати (q_1, q_2) використовуються для побудови контурів рівної інтенсивності на двовимірних картах, про що скажемо нижче.

На рис.2.2 показано, що радіальний розподіл інтенсивності вздовж напрямку q в площині дифракції, який утворює кут ψ з віссю q_2 може бути отриманий в ТКД комбінацією сканів аналізатора і зразка:

$$\Delta \omega = 2\Delta \vartheta / (1 + \cot \vartheta_B \cot \psi). \tag{2.8}$$

Рис.2.3 демонструє переріз сфери Евальда дифракційною площиною. На цьому рисунку кут падіння перевищує бреггівський. При $\mathcal{G}=\mathcal{G}_B$ сфера Евальда проходить через точку оберненого простору H а при $\omega=2\mathcal{G}_B$ дифракційний вектор розсіяної хвилі K закінчується в точці H.

Нарешті на рис.2.4 проілюстровані всі координатні системи, приведені в виразі (2.7) і на сфері Евальда при даному куті падіння і в реальному просторі на поверхні зразка. Тут q_y і y осі перпендикулярні до площини дифракції. Відмітимо, що при даному куті падіння хвильовий вектор розсіяної хвилі **К** при куті $\omega=2g_B$ закінчується на пересіченні між сферою Евальда і q_2 віссю на віддалі $2K \sin g_B \Delta g$ від точки оберненої гратки *H*. Це видно з рис.2.3.

Різні сфери Евальда можуть бути реалізовані в *q* просторі з роздільною здатністю 10⁻⁵Å⁻¹, що відповідає кутовому інтервалу 3 кут. секунди.



Рис.2.3. Сфера Евальда для опису інтенсивності розсіяння.

Рис.2.4. Система координат в q-просторі. Координати (q_1 , q_2)відносяться до вектора h, (q_z , q_x) до поверхні зразка і (q_E , q_0) до сфери Евальда.

Для прикладу приведемо дослідження від зразка AlGaAs/GaAs(100) біля вузла 004 для CuK_{α} - випромінювання. На рис.2.5 зображені частини сфери Евальда, що відповідають різним кутам падіння. Рис.2.6 показує відповідність між ТКД розподілом інтенсивності в q просторі біля вузла 224 і 224 кривою гойдання для цього ж зразка. Цей рисунок показує що маятникові піки від шару вилаштувані





Рис.2.5. Вектор роздільної здатності q, Рис.2.6. Співвідношення між показаний для 004 рефлексу в двокристальною КДВ і трикристальною АlGaAs/GaAs(001). КОП, показане для 224 відбиття.

вздовж нормалі до поверхні в *q* просторі і відображені як вторинні піки на ДКД кривих.

2.3. Основи трикристальної диференціальної дифрактометрії

Широке застосування трикристальних схем почалося з роботи Іїди і Коори [64], де були розглянуті особливості одержуваної дифракційної картини, можливість поділу дифузного і когерентного розсіювання, введене поняття псевдопіків, показаний вплив деяких поверхневих порушень на трикристальні криві відбиття.

Ha рис.2.7 показана схема експериментальної установки, котра використовувалась вимірювань. Для будемо ДЛЯ простоти розглядати бездисперсійний варіант (n, -n, n), що забезпечує найкращу роздільну здатність. Вплив спектральної розбіжності при використанні дисперсійних схем залишено за рамками даного викладу.

Двовимірні карти розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої гратки будуються як функції α (кут відхилення зразка від точного положення Брегга) і η (кут відхилення аналізатора) або $\Delta 2 \vartheta$ (кут відхилення зразка від точного положення при зв'язаному обертанні аналізатор-детектор). Розташування перерізів



Рис. 2.7. Схема трикристального дифрактометра в бездисперсійній геометрії. М — монохроматор, S — зразок, A — аналізатор, D — детектор.

інтенсивності в оберненому просторі для α і $\Delta 2.9$, а також варіації компонент розсіяння приведені на рис.2.8 В випадку динамічного розсіяння X - променів досконалим кристалом когерентний пік витягнутий паралельно нормалі дойого поверхні, а для симетричної Брегг - дифракції буде паралельним вектору дифракції *Н*. Мозаїчна складова дифрагованої інтенсивності зразка (дифузна компонента) витягнута вздовж нормалі до вектора дифракції в площині розсіяння [65].

У трикристальній диференціальній схемі X - промінь, що йде від фокуса рентгенівської трубки, здійснює послідовно дифракційне відбиття від: М — кристала-монохроматора, S — кристала-зразка і A — аналізатора і фіксується лічильником із широким вікном. Нульовим положенням усіх трьох кристалів будемо вважати таке, при якому вони знаходяться в центрі інтерференційної області обраного відбиття (у бреггівському положенні). На практиці у використовуваних схемах монохроматор зафіксований в максимумі відбиття для падаючого на нього променя. Зразок і аналізатор можуть обертатися біля бреггівського положення з відповідними кутами відхилення α і η . Диференціальна відбивна здатність кристала є, взагалі кажучи, функцією двох кутових параметрів: кута падіння θ_0 і відбиття θ_H ,



Рис.2.8. Розміщення осей і варіації компонент розсіяння в оберненому (а) і прямому (кутовому) (б) просторі: 1- мозаїчна компонента розсіяння, 2-дифузний пік для *29*-сканування, 3-відбиття монохроматора, 4-когерентна частина розсіяння, 5-відбиття аналізатора, 6-нерівності поверхні.

Для пояснення принципу одержання з використанням ТКС розподілу інтенсивності дифракції в оберненому просторі, розглянемо симетричний випадок Брегга (рис.2.7) [65]. При повороті зразка на малий кут α вектор H повертається навколо нульового вузла, виводячи його із сфери Евальда, і переміщує кінець вектора K вздовж осі q_{η} , котра перпендикулярна до $H(q_{\eta} \perp H)$, на віддаль $q = H\alpha = 2\alpha Ksin \mathcal{G}$ при умові, що $|\alpha| \ll \mathcal{G}_B$. Повертаючи ж аналізатор на малий кут η , послідовно вводимо в точне положення відбиття промені, що йдуть від зразка в різних напрямках поблизу K. Іншими словами робоча точка зміщується вздовж осі q_{η} , перпендикулярно до $K_H(q_{\eta} \perp K_H)$ на віддаль $K\eta$ при умові, що $|\eta| \ll \mathcal{G}_B$. Таким чином, маємо справу з косокутною системою координат, де кут між осями, які пов'язані з відбиваючими площинами кристалів, рівний $\pi/2 + \mathcal{G}_B$. Визначаючи координати аналізатора η для заданого рівня інтенсивності дифузного піка в профілі ТКС, і знаючи кут повороту зразка α , можна встановити положення точки в означеній системі координат (η, α). Відзначаючи такі координати дифузних піків паралельно з реєстрацією еквівалентної інтенсивності для інших точок, можна побудувати контури рівної інтенсивності (ізодифузні лінії), що дають змогу визначати симетрію деформаційних полів дефектів [66, 67].

Диференційна інтенсивність розсіювання плоскої монохроматичної хвилі недосконалим кристалом, що містить однорідно розподілені обмежені дефекти, є сумою когерентної $R_B(q)$ і дифузної $R_D(q)$ компонент для кожного положення зразка, що характеризується вектором q:

$$R_{S}(\vec{q}) = R_{B}(\vec{q}) + R_{D}(\vec{q}), \qquad (2.9)$$

де q = K'-K-H.

Використовуючи вирази для $R_B(q)$ і $R_D(q)$ отримані [68, 69], та інтегруючи їх по кутах виходу променя з кристала, отримаємо інтенсивність, що реєструється детектором ТКС і залежить від кутових змінних (η , α):

$$I_{S}(\alpha,\eta) = I_{B}(\alpha,\eta) + I_{D}(\alpha,\eta). \qquad (2.10)$$

У випадку використання бездисперсійної схеми ТКС (*n*, *-n*, *n*) когерентну *I*_B і дифузну *I*_D складові для кожної точки карти ізодифузних ліній ДР можна представити у вигляді:

$$I_{B}(\alpha,\eta) = I_{0} \int dx R_{M} \left\{ b_{M}^{-1} \left[b_{S}^{-1}(x-\alpha) - \alpha \right] \right\} R_{coh} \left[b_{S}^{-1}(x-\alpha) \right] R_{A}(x-\eta), \quad (2.11)$$

$$I_{D}(\alpha,\eta) = I_{0} \int dx R_{M}(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{diff}(k_{x},k_{z}) R_{A}(x'-\eta).$$
(2.12)

Тут *x* - кутова координата відхилення заломленого променя від точного положення Брега в площині дифракції, $R_M(q)$ і $R_A(q)$ - коефіцієнти відбиття від монохроматора і аналізатора, b_M і b_S - відомі геометричні параметри асиметрії монохроматора і зразка. Функція $r_{diff}(q_x, q_z)$ являє собою проінтегровану по вертикальній розбіжності $\varphi = k_y/K$, де $K = 2\pi/\lambda$, диференційну компоненту коефіцієнта відбиття:

$$r_{diff}(q_x, q_z) = \frac{1}{K} \int dq_y R_D(q)$$
(2.13)

36

Компоненти q_x , q_z лежать в площині когерентного розсіювання (*К*,*H*), причому q_z направлена перпендикулярно поверхні кристала, а q_x лежить в площині кристалу.

$$q_{x} = K(2\alpha - \eta)\sin\theta_{B},$$

$$q_{z} = -K\cos\theta_{B}\eta.$$
(2.14)

З допомогою ТКС можуть бути побудовані і профілі інтенсивності ДР при фіксованому положенні зразка *α*, як функції кута відвороту *η* кристала - аналізатора (*9 - 29 -* сканування). В такому випадку ТКС дозволяє отримати відому криву гойдання, що записується звичайно на ДКС.



Рис. 2.9. Сфера Евальда і схема напрямку променів в оберненому просторі для трикристального дифрактометра (а) і система осей з центром у вузлі оберненої ґратки (б). P_0O і P_0H — хвильові вектори падаючої і відбитої хвиль у бреггівському положенні зразка, P_1O і P_1S — після повороту зразка на кут α .

Результати вимірів на трикристальному дифрактометрі зручно розглядати, використовуючи конструкцію Евальда в оберненому просторі (рис.4.3), як це
зроблено в [30]. Нехай поверхня рисунка є перетином оберненого простору площиною розсіювання, в якій лежать напрямки падаючого на зразок пучка k_0 , відбитого k і нормаль до відбиваючих площин. Тут і надалі мова йде про компланарну геометрію дифракції, при якій нормаль до поверхні кристала також лежить у площині розсіювання. Позитивною стороною площини будемо вважати ту, в яку спрямований вектор [$\mathbf{k} \times \mathbf{k}_0$].

Відповідно до кінематичної теорії дифракції бреггівське відбиття має місце, коли вектор дифракції

$$S = k - k_0 \tag{2.15}$$

збігається з вектором оберненої ґратки обраного відбиття H (|H|=1/d, де d — міжплощинна відстань), та коли кінець вектора H (вузол H) знаходиться на сфері Евальда (рис.2.9а). Будемо вважати це положення нульовим положенням зразка (α =0). Центральний напрямок падаючого на зразок пучка \mathbf{k}_0 закріплений, оскільки монохроматор нерухомий. Що стосується аналізатора, то його нульове положення (η =0) визначається тим, що промінь $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + H$ падає на нього під брегівським кутом. Введемо нову систему координат з центром у вузлі H і з двома осями: рівнобіжної (\mathbf{q} || \mathbf{H}) і перпендикулярної ($\mathbf{q}_{\alpha} \perp \mathbf{H}$) вектору оберненої ґратки (рис. 2.9б).

Кінець вектора дифракції **S** визначає точку спостереження в оберненому просторі, що при використанні монохроматичного випромінювання завжди знаходиться на сфері Евальда. При нульовому положенні всіх трьох кристалів ця точка знаходиться у вузлі оберненої ґратки *H*. При довільних напрямках k_0 і k (поблизу брегтівських напрямків) її положення в площині розсіювання можна задавати вектором q з координатами q і q_{α} :

$$q = S - H.$$
 (2.16)

Для монокристала довільної форми і досконалості інтенсивність дифракції не локалізована у вузлі H, а деяким чином розподілена біля нього, тобто є функцією радіуса-вектора q. Зсув точки спостереження шляхом зміни кутів відхилення зразка й аналізатора дозволяє вимірювати залежність $i(\mathbf{q})$ і вивчати цей розподіл.

При повороті аналізатора ми вводимо у відбиття хвилі з різними напрямками k, і точка спостереження зміщається по сфері Евальда, що у межах малих кутів можна замінити дотичний, складовий кут $\theta_{\rm B}$ з віссю q. При повороті на кут η точка S зміститься на

$$q_{\eta} = k \cdot \eta.$$

При повороті зразка ми виводимо вузол оберненої гратки зі сфери Евальда чи, оскільки система координат закріплюється в цьому вузлі, повертаємо сферу навколо вузла 0 (рис.2.9а, пунктир). У цьому випадку точка спостереження зміщується по нормалі до вектора H, тобто по осі q_{α} . При цьому відрізок, на який вона зміщується, дорівнює

$$q_{\alpha} = H\alpha = 2k\alpha \sin\theta_{\rm B} \,. \tag{2.17}$$

Вісь *q*_α є геометричне місце точок, для яких напрямок відбитої хвилі фіксований, тобто залишається постійним кут розсіювання 2*θ*.

Із рис.2.10 випливає декілька міркувань. Основне динамічне розсіяння від зразка витягнуте вздовж вертикального напрямку q_z і в кристалі хорошої якості воно має дуже малу ширину в напрямку q_y . Це розсіяння зміщене від вузла оберненої гратки на величину поправки на коефіцієнт заломлення. Однак дифузне розсіяння не зміщене, і воно з'являється як слабка, але широка область розсіяння приблизно сферичної форми з центром в вузлі оберненої гратки.

При кутах $\pm \mathscr{G}_{\rm b}$ на вертикальній осі з'являються витягнуті області, обумовлені обмеженою кутовою роздільною здатністю кристалів коліматора і аналізатора. Ці області були б відсутні, якщо б на кривих гойдання від цих кристалів не було



Рис. 2.10. Схематична карта розсіяння в оберненому просторі. Показані контури рівної інтенсивності. Динамічна дифракція від зразка злегка зміщена від ТОГ і центра дифузного розсіяння за рахунок впливу заломлення.

хвостів. Вони виникають тому, що при цих положеннях аналізатора і зразка поряд з істинним сигналом від "робочої області" оберненого простору проходить невелика кількість інтенсивних сигналів від головного піку крізь хвости функції аналізатора. Тому напрямки витягнутості цих областей вказують на головний пік, і напрямки знаходять шляхом представлення слабкої зміни векторів k_o навколо початку координат і k_h навколо центра сфери Евальда. В системі з високою роздільною здатністю і дуже широким динамічним діапазоном схожі області при дуже низьких рівнях інтенсивності можна інколи спостерігати із-за розсіяння на повітрі в цій системі, що також викликає погіршення кутової точності [70].

Нарешті відмітимо, що стандартна двокристальна чи високороздільна крива гойдання, на котрій ми не маємо контролю над $\Delta \varphi$, є по суті горизонтальним скануванням крізь обернений простір, що інтегрує всі інтенсивності вздовж сфери

Евальда. Тому легко бачити, яким тривісна схема може дати нам набагато більше інформації [71].

Як було відмічено вище, інтенсивність, яка фіксується в точці q в площині розсіювання, являє собою інтеграл по деякій області оберненого простору, і обумовлена кінцевою роздільною здатністю монохроматора і аналізатора, тобто шириною їх інтерференційних областей (у кутах відбиття для першого і кутах падіння для іншого).

Крім того, при роботі зі стандартними джерелами X - випромінювання в точці спостереження виміряється інтенсивність, проінтегрована по нормалі до площини розсіювання, оскільки вертикальна розбіжність як падаючого, так і відбитого пучків набагато більша кутової роздільної здатності в екваторіальній площині.

Максимуми інтенсивності на ТРД – кривих, викликані "хвостами" відбивної здатності монохроматора й аналізатора, називають звичайно "псевдопіками", маючи на увазі їхнє інструментальне походження (рис.2.10). У площині розсіювання їх інтенсивність локалізована вздовж прямих, що проходять через вузол H під кутами θ_B до вектора оберненої гратки. Максимуми, що відповідають хвостам аналізатора, розташовані вздовж $\mathbf{x} \perp \mathbf{k}$, а псевдопіки, які виникають від хвостів відбиття монохроматора, вздовж $\mathbf{x}_0 \perp \mathbf{k}_0$. Якщо в розподілі інтенсивності розсіювання зразка є декілька максимумів (наприклад, для великоблочних чи кристалів епітаксійних систем), то відповідно збільшується і число псевдопіків. Їхня інтенсивність буде локалізована уздовж ліній, рівнобіжних \mathbf{x}_0 і \mathbf{x} і проходити через додаткові вузли оберненої гратки зразка. Криві дифракції можуть стати дуже складними і розшифровувати їх важко, тому на практиці псевдопіки намагаються пригасити. Кращий спосіб для цього — використання монохроматора й аналізатора з багатократним відбиттям.

Відповідно до динамічної теорії дифракції Х - променів максимум дифракційного відбиття від товстої кристалічної пластини займає деяку область кутів падіння біля бреггівського (названу інтерференційною), ширина якої назад пропорційна глибині екстинкції.

41

Іншими словами, для динамічної дифракції, кожному напрямку падаючої хвилі k_0 буде відповідати такий напрямок відбитої k, що кінець вектора дифракції S завжди буде знаходитися на нормалі n, яка проходить через вузол оберненої ґратки.

Отже, на ТРД – кривих динамічний чи когерентний максимум фіксується тоді, коли точка спостереження знаходиться на цій нормалі. Записуючи умову

$$\mathbf{q} = q_{\mathrm{n}} \,\mathbf{n} \tag{2.18}$$

в координатах q_H і q_{α} , з (2.16) одержуємо наступний зв'язок між кутами відхилення аналізатора і зразка:

$$\eta = -\alpha(1 - \gamma_0 / \gamma_H), \qquad (2.19)$$

де γ_0 і γ_H — направляючі косинуси кутів падіння і відбиття.

При вимірі кривих 2*w*-сканування когерентний максимум з'являється при куті аналізатора

$$\eta_{\text{KOF}} = -\alpha_0 (1 - \gamma_0 / \gamma_H). \tag{2.20}$$

В симетричній бреггівській геометрії $\gamma_H = -\gamma_0$ і при зміні кута відхилення зразка його положення на 2 ω -кривих міняється за законом

$$\eta_{\text{KOT}} = -2\alpha_0, \qquad (2.21)$$

а його форма повторює згортку кривих відбиття монохроматора й аналізатора.

У дійсності лінії рівної інтенсивності когерентного розсіювання являють собою смуги, витягнуті уздовж *n*, ширина яких обумовлена вихідною розбіжністю відбиття монохроматора і вхідної — аналізатора. В залежності від геометрії вимірів траєкторія зсуву точки спостереження при скануванні аналізатора перетинає ці



Рис. 2.11. Розподіл когерентної інтенсивності в оберненому просторі для симетричної геометрії Брегга (а) і асиметричної при $\gamma_0 < |\gamma_H|$ (б) і $\gamma_0 > |\gamma_H|$ (в).

смуги під різними кутами: більш прямим при $|\gamma_H| > \gamma_0$ і більш ковзним при $|\gamma_H| < \gamma_0$ (рис.2.11), що приводить до різної кутової напівширини динамічного піка (звуженню в першому і розширенню в другому випадку в порівнянні із симетричною геометрією).

Побудова в оберненому просторі дозволяє одержати форму кривих ТРД кристала для будь-якої геометрії дифракції. При кутовому скануванні кінець вектора дифракції (чи точка спостереження) переміщується вздовж визначеної траєкторії. При перетині останньої з нормаллю до поверхні **n** на кривих з'являється динамічний максимум, при перетині з напрямками \mathbf{x}_0 і \mathbf{x} — псевдопіки.

Для епітаксійної системи за відсутності структурних дефектів ТРД не дає якоїнебудь нової інформації з порівняння з двокристальною дифрактометрією. Однак ситуація різко міняється при переході до вивчення релаксованих гетероструктур. Аналіз двомірного розподілу інтенсивності в площині розсіювання дозволяє не тільки виявити взаємне розташування центрів відбиття підкладки й окремих шарів і, тим самим, визначити компоненти середнього тензора дисторсії, але й одержувати більш повну інформацію про структурні порушення, що виникають у результаті релаксації.

2.4. Розділення розорієнтацій і деформацій гратки

Тривісне розсіяння можливість провести відмінність між дає розорієнтаціями і дилатаціями. В цьому можна впевнитись, розглянувши зразок, показаний на рис.2.12, котрий містить області, розорієнтовані по відношенню одна до одної, тобто субзерна, і області, деформовані або разузгоджені, наприклад потрійні шари. Згідно закону Брегга кут розсіяння визначає міжплощинні віддалі d, котрі ми досліджуємо. При обертанні зразка, області з різною розорієнтацією будуть послідовно задовольняти дифракційним умовам і розсіяна інтенсивність дасть нам критерій розподілу розорієнтацій. Області кристала, для котрих міжплощинні віддалі відрізняються, ніколи не викличуть появи сильного розсіяння в випадку, якщо повертається тільки один зразок.

Уявимо тепер дифракційний експеримент, в котрому зразок і аналізатор



Рис.2.12. Тривісні вимірювання; представлення в реальному і оберненому просторі: 1-апертура двовісного сканування; 2 апертура тривісного.

скануються синхронно. Зокрема, аналізатор сканується зі швидкістю, вдвоє більшою, ніж зразок (9-29 сканування), і обидва починають рухатися від нульового положення. Припустимо, що область зразка з параметром гратки *d* встановлена в відбиваюче положення; тоді, так як аналізатор виставлений під подвійним значенням кута відбиття, зафіксує детектор інтенсивність відбиття. Тепер, якщо ми здійснимо зв'язане 9-29сканування, то жодна з областей зразка, котра також має параметр

гратки *d*, але розорієнтована відносно початкової області, ніколи не дасть відбиття. котре попадає в детектор; положення аналізатора ніколи не буде точним (на відміну від попереднього прикладу). Однак інша область зразка з параметром гратки d' може попасти в положення, де задовольняються умови Брегга. Тепер аналізатор знаходиться під подвійним значенням цього кута і інтенсивність попадає в детектор. В цьому варіанті реєструється інтенсивність лише від певних частин кристала, але для сильно порушених матеріалів, таких як арсенід галію на кремнії або вузькозонні сполуки A^2B^6 , це дає можливість отримати потрібний критерій для оцінки області параметрів гратки, котрі присутні в зразку. В випадку потрійних сполук, таких як кадмій-ртуть-телур, це дозволяє отримати критерій для оцінки області змін складу незалежно від області розорієнтацій.

Короткі висновки

Вищезгадані Х-променеві експериментальні методи дозволяють нам зібрати структурну інформацію про вирощені методом МПЕ нанорозмірні структури на кристалічних підкладках. Методи дослідження за допомогою Х-променів, виявляється, дуже потужним для дослідження цих тонких плівок.

РОЗДІЛ З

ОСНОВНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОРОТКОПЕРІОДНИХ НАДГРАТОК

Вступ

Фізичні властивості матеріалів можуть бути змінені при створенні додаткової структурної періодичності шляхом осадження додаткових тонких плівок. Довжина хвилі періодичності повинна бути такою, щоб фізичні параметри впливали на цю періодичність, і це відрізняє надгратку від багатошарової структури. На жаль це твердження не настільки просте, тому що фізичні параметри (електронне обмеження, наприклад) можуть відчувати періодичну структуру як ряд індивідуальних плівок (індивідуальні потенційні ями, наприклад), в той час як деякі інші фізичні параметри відчувають це як надгратку.

Межі терміну "надгратка" також вимагають уточнення: скільки періодів утворюють надгратку і наскільки товстими мають бути окремі шари, щоб прості явища усереднення були недійсними. Аналіз структур надгратки з використанням кінематичної і динамічної дифракційних теорій буде обговорений, включаючи межі їхньої обґрунтованості. Будуть розглянуті важливі параметри - період надгратки, індивідуальні товщини шарів і гранична шорсткість.

Використання високо-роздільних методів відкриває великі можливості в аналізі дифракційних картин, і це буде обговорено в даному розділі.

В останні роки значна увага приділяється вивчення властивостей квантоворозмірних надграток (НГ), що пов'язано з перспективою їхнього практичного використання, зокрема, в приладах оптоелектроніки. У цьому плані надзвичайно важливою є інформація про структуру цих об'єктів, відносно планарності границь між шарами, однорідності товщин шарів, дифузійних процесах на границях, про домішки й мікродефекти в періодичних структурах. Всі ці недосконалості кристалічної будови в значній мірі впливають на електрофізичні й оптичні характеристики НГ. Цей розділ присвячений висвітленню деяких питань, пов'язаних з дослідженнями методами високороздільної X - проміневої дифрактометрії надграткових структур із квантовими ямами, отриманих молекулярно-променевою епітаксією. В декількох параграфах обговорюються особливості формування спектрів кривих дифракційного відбиття в короткоперіодних надгратках.

3.1. Дослідження формування Х - поменевих спектрів від надграток

Розглянемо рис.3.1, на якому приведена серія симульованих дифракційних профілів з використанням динамічної теорії, для шарів AlAs і GaAs осаджених на



Рис.3.1. Еволюція спектрів дифракції для двошарової структури AlAs(10нм)-GaAs(20нм) при зростанні числа подвійних шарів: a) n=1; б) n=4; в) n=10; г) n=20. Відбиття 002, CuK_α -випромінювання.

підкладці арсеніду галію. На рис.3.1(а) показана крива від одного подвійного шару, де видно чіткі осциляції викликані усередненою граткою. Широкий усереднений пік від подвійного шару віддалений від піка підкладки в бік менших кутів через більшу постійну гратки усередненого піка за рахунок більшого параметра шару AlAs. Для чотирьох подвійних шарів (рис.1б), сателіти першого порядку з'являються як плечі усередненого піка. Оскільки число подвійних шарів збільшується, сателіти стають більше чіткими, хоча картина стає більш складною з швидкими осциляціями, що зустрічаються всюди на спектрах (рис.3.1(в,г)).

Розглянемо ситуацію, коли шари, які складають надгратку стають більш товстими, (рис.3.2), тоді сателіти розташовуються близько один від одного.



Рис.3.2. Еволюція спектрів дифракції для двошарової структури AlAs-GaAs (20 подвійних шарів) при зростанні товщин шарів: а) 5-10 нм; б) 10-20 нм; в) 20-40 нм; г) 40-80 нм. Відбиття 004, СиК_α -випромінювання.

Пік підкладки може використовуватись як маркер в наступних обговореннях позначений на рис.3.2 як S.

Пік зліва (менші кути) від гострого піка підкладки на рис.3.2(а) є найбільш сильним і фактично, його можна розглядати як усереднений пік НГ, а опуклі піки (сателіти), які є приблизно рівновіддаленими від нього, змінюють своє положення при збільшенні товщини подвійного шару. При подальшому збільшенні періоду, картина змінюється, стає більшим усереднений пік і більш слабкі стають сателіти. З дифракційних спектрів для структур рис.3.2(а) і рис.3.2(б) видно, що від"ємні сателіти непарного порядку є слабкими все-таки не тому, що збільшується товщина. На рис.3.2(д) сателіти на великокутовій стороні усередненого піка стають найбільш сильним, тоді як сателіти на малокутовій стороні значно нижчі по інтенсивності. Поняття усередненого піка тепер стає досить сумнівним, хоча дифракцію не можна розглядати в простих термінах незалежних розсіювань, але видно, що така взаємодія це все ще надгратка "дифракції X випромінювання", [72].

Кінематична дифракція відчуває цю модуляцію як збурення, [73], і не може застосуватися до цих надзвичайних випадків, а тому необхідне динамічне моделювання профілю розподілу інтенсивності. Отже є три явних області на цій стадії:

1) дуже мало періодів, один або два, котрі можуть інтерпретуватися лише в термінах дифракційного профілю;

2) проміжна область, коли профіль виникає як усереднення, і сателітні інтенсивності можуть використовуватись, для отримання інформації;

3) область, коли індивідуальні шари настільки товсті, що відбувається істотний ступінь інтеграції на дифракційній картині, і моделювання профілю можливе лише за динамічною теорією.

В значній мірі області 1 і 3 не дають ніяких реальних покращень, хоча можливо в останньому кінематична апроксимація теорії була б достатня, але в загальній динамічній дифракційній теорії повинен застосуватися ітераційний процес змінних параметрів. Тому сконцентруємо свою увагу на проміжній області.

3.2. Структурний фактор надграток. Інтенсивності сателітів

Криві гойдання від таких одномірних "штучних кристалів", якими є НГ, як ми вже побачили, виглядають досить незвично. На цих спектрах спостерігається послідовність розділених рівними проміжками піків-сателітів. Можна зрозуміти



Рис.3.3. Схема НГ в прямому і розташування її вузлів з сателітами в оберненому просторі.

зародження сателітів надгратки (НГ), відмітивши, що періодична структура має відповідну систему вузлів в оберненому просторі.

Період в реальному просторі великий і тому віддаль між вузлами в оберненому просторі дуже мала. Окрім цього вузли розташовані лише в одному вимірі, і тому існує лише лінія вузлів оберненої гратки, як показано на рис.3.3. Важливо відмітити, що всі вузли

оберненої гратки основного кристала, включно з нульовим, модульовані надграткою. Походження сателітів тоді стає зрозумілим, а структура оберненого простору особливо добре спостерігається на двовимірних картах оберненого простору. Про це ми будемо говорити в наступному розділі.

Дифракція ХП на структурах, в яких постійна гратки, або інтенсивність розсіяння модульовані вздовж однієї з координат, характеризуються наявністю сателітів біля бреггівського піка усередненої гратки [34, 37]. Інтенсивність розсіювання ХП сателітними піками пропорційна фур'є-компонентам координатної залежності модуляції складу системи [30]. Крім цього, зміна ширини сателітних піків в оберненому просторі несе інформацію про досконалість плівок і зокрема, про когерентність шарів НГ.

В даному параграфі використовуючи так зване напівкінематичне наближення теорії розсіювання ХП [33], коли товщини окремих шарів НГ є малими стосовно

екстинкційної довжини ми розглянемо основні властивості дифракційних спектрів від НГ.

При розрахунках картини дифракції ХП за допомогою першої ітерації рівняння Топена, запропонованої в [33], однорідний епітаксійний шар описується такими параметрами: товщина t, коефіцієнтами Фур'є поляризованості кристала χ , напругами ε й коефіцієнтом поглинання μ . Характеристиками дифракції й епітаксійного шару з товщиною t будуть величини A, яка обернено пропорційна екстинкційній довжині, та Y, які визначаються такими формулами [34]:

$$A = \frac{\pi \chi_h t}{\lambda_{\sqrt{|\gamma_0 \gamma_h|}}} , \qquad (3.1)$$

$$Y = -\sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \cdot \frac{\sin(2\vartheta_B)}{|\chi_h|} \cdot \Delta\omega .$$
(3.2)

В цих формулах λ – довжина хвилі ХП, \mathcal{G}_B – бреггівський кут для підкладки, γ_0 , γ_h – напрямляючі косинуси первинного і дифрагованого променів щодо внутрішньої нормалі до поверхні, $\Delta \omega$ – величина відхилення кристала від бреггівського положення.

При розгляді відбивної здатності реальної НГ для заданого X випромінювання необхідно брати до уваги механічні напруги (деформації) в епітаксійній плівці, оскільки вони можуть бути безпосередньо визначені з аналізу форми КДВ. Позначимо характеристики плівки й підкладки індексами f і s відповідно. Різниця міжплощинних відстаней залежить від конкретної деформації й орієнтації атомних площин $\Delta d = d_f - d_s$. Зазначені напруги (деформації), (як перпендикулярні ε_{\perp} , так і паралельні $\varepsilon_{//}$ поверхні кристала), визначається в теорії пружності відносною зміною міжплощинних відстаней у підкладці й плівці:

$$\Delta d / d_s = \varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \Psi, \qquad (3.3)$$

де *Ψ* – кут між площинами й поверхнею кристала. Диференціальний кут *Δω* дорівнює:

$$\Delta \omega = \mathcal{G} - \mathcal{G}_B + (\varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{//} \sin^2 \Psi) tg \mathcal{G}_B \pm (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{//}) \sin \Psi \cos \Psi, \qquad (3.4)$$

де 9-кут ковзного падіння ХП.

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

$$E_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_{j=1}^{N} a_j \exp[-i(A_j Y_j + \Phi_j)] \frac{\sin(A_j Y_j)}{Y_j} , \qquad (3.5)$$

де
$$a_j = \exp\left[-\mu(\frac{\gamma_0 + |\gamma_h|}{2|\gamma_0\gamma_h|})\sum_{i=j+1}^N t_i\right] -$$
абсорбційний множник, $a_N = 1$, $\Phi_j = 2\sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i$, – фазовий фактор, причому $\Phi_1 = 0$.

Надгратка являє собою випадок довільної шаруватої епітаксійної структури. У найпростішому випадку її період складається із двох шарів (a і δ), кожний з яких характеризується своєю товщиною, напругами, структурним фактором і параметрами A та Y. Амплітуда дифракції для M – періодної двошарової НГ має вигляд [34, 30]:

$$E_M = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \exp(-i\beta) F_S \frac{\sin[M(A_a Y_a + A_b Y_b)]}{\sin(A_a Y_a + A_b Y_b)} , \qquad (3.6)$$

де $\beta = (M-1)(A_a Y_a + A_b Y_b) + A_a Y_a$, a $F_S = \frac{\sin(A_a Y_a)}{Y_a} + \exp[-i(A_a Y_a + A_b Y_b)] \frac{\sin(A_b Y_b)}{Y_b}$

можна розглядати як структурний фактор для одного періоду НГ. Синус в

чисельнику (3.6) перетворюється в нуль із періодом Δg_M , який визначається з умови $M(A_aY_a + A_bY_b) = \pi$. Цей множник описує так звані "швидкі" маятникові осциляції інтенсивності на КДВ. Приймаючи до уваги (3.1) і (3.2), знайдемо

$$\Delta \mathcal{G}_{M} = \frac{\lambda |\gamma_{h}|}{M(t_{a} + t_{b}) \sin(2\mathcal{G}_{B})} , \qquad (3.7)$$

звідки можна визначити повну товщину НГ $T=M(t_a+t_b)$.

Синусоїдальний знаменник в (3.6) обумовлює інші (більш повільні) коливання амплітуд розсіювання при реєстрації КДВ. Нульові положення коливань визначаються з умови:

$$A_a Y_a + A_b Y_b = n\pi \quad , \tag{3.8}$$

які позначаються, як n=0, ±1, ±2... З кутової відстані між цими піками $\Delta \mathcal{G}_p$ можна визначити період p НГ:

$$p = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_h|}{\Delta \vartheta_p \sin(2\vartheta_B)}.$$
(3.9)

Надгратковий пік сателіта нульового порядку розташований від піка підкладки на кутовій відстані $\Delta \mathcal{G}_0$:

$$-\Delta \mathcal{G}_0 = k_1 \langle \mathcal{E}_\perp \rangle + k_2 \langle \mathcal{E}_\perp \rangle, \qquad (3.10)$$

де $k_1 = \cos^2 \Psi t g \vartheta_B \pm \sin \Psi \cos \Psi$, $k_2 = \sin^2 \Psi t g \vartheta_B \pm \sin \Psi \cos \Psi$. Дужки для величини деформації означають усереднення по періоду НГ.

Амплітуда сателітів *n*-го порядку пропорційна величині структурного фактора НГ за умови (3.8):

$$F_{Sn} = \frac{\sin(A_a Y_{an})}{A_a Y_{an}} (A_a + \frac{A_b}{1 - \frac{n\pi}{A_a Y_{an}}}) .$$
(3.11)

Оскільки кутовий параметр сателіта Y_{an} пов'язаний з Y_{a0} формулою (3.9) і (3.2), те він залежить тільки від A_a , A_b і Y_{a0} . При n=0 (3.11) приймає простий вигляд:

$$F_{S0} = \frac{\sin(A_a Y_{an})}{A_a Y_{an}} (A_a + A_b) \cong A_a + A_b.$$
(3.12)

Вимірюючи відношення амплітуд розсіювання сателітів *n*-го й нульового порядків, можна розрахувати значення товщини одного із шарів НГ, а також середні напруги в ньому. Однак, як показує аналіз формул (3.11)-(3.12), найбільш придатним для цієї мети є так звані квазізаборонені рефлекси (КЗР) типу 200. Це ми розглянемо нижче.

Методика аналізу таких структур полягає в тому, щоб розрахувати структурні фактори всіх спостережених сателітів елемента НГ, використовуючи звичайну формулу для сумування по атомах в елементарній комірці, а потім порівняти їх з інтегральними інтенсивностями, дійсно виміряними і скоректованими на всякі інструментальні спотворення. Розрахунок повторюється до тих пір, поки різниця між розрахованими і виміряними інтенсивностями не мінімізується як функція відношення ями до бар'єру. Різниця виразиться як звичайний *R*-фактор:

$$R = \sum \left(|F_0| - |F_{\exp}| \right) / |F_0|, \qquad (3.13)$$

де *F*_Q и *F*_c — експериментальні (інтегральні інтенсивності) і розраховані структурні фактори.

3.3. Загальні характеристики надграток

3.3.1. Джерело сателітів.

Подвійний шар можна розглядати як велику елементарну комірку, і це справедливо в межах кінематичного наближення теорії та за умови, що структури співмірні. Як ми вже відмічали, періодичність подвійного шару можна розглядати як модуляцію постійної кристалічної гратки, або структурного фактора, і це дійсно, дає підстави вважати, що збурення на усередненій структурі правильне. Інший шлях полягає в тому, щоб обгрунтовано вставити структурні параметри в динамічну дифракційну симуляцію і поглянути, що виходить; на жаль це останнє наближення не зовсім очевидне в розумінні його причин.

Насамперед розглянемо велику елементарну комірку, яка складається з декількох елементарних комірок кожного елемента. Із неї структурний фактор (коефіцієнт) для будь-якого відбиття *H* може бути розрахований:

$$F_H = \sum_{j}^{N} f_j \exp(-2\pi H \cdot r_j), \qquad (3.14)$$

де N – число атомів в цій великій елементарній комірці, і j – позиції j-го, атома у цій комірці і f_j - його коефіцієнт розсіювання. В кінематичній апроксимації теорії це може відповідати розсіяній інтенсивності, яка є квадратом виразу цього виразу:

$$I_H = \left| F_H \cdot F_H^* \right|, \tag{3.15}$$

і кут розсіяння для цього рефлексу:

$$2\vartheta_H = 2\sin^{-1}(\lambda/2d_H), \qquad (3.16)$$

де d_H – міжплощинна віддаль, а λ – довжина хвилі. У вищезгаданому рівнянні для структурного фактора ми маємо дві модуляції, одна пов'язана з різницею в розсіюванні, а друга з різницею в постійних кристалічної гратки на підставі різного

розміщення атомів у межах двох областей елементарної комірки. Обчислюючи інтенсивність і положення сателітів, можна отримати хороше узгодження з експериментом [74].

Вищезгаданий аналіз стає дуже зрозумілим, адже контроль за вирощуванням плівок часто недостатній, для створення подвійних та індивідуальних шарів в межах періоду НГ, які б мали ціле число атомних площин. Тому отримуємо неспівмірну структуру, [75]. Завжди буде кінцева шорсткість поверхні, якщо число осаджених атомів буде неточним, або атоми дифундують вздовж поверхні. Ефективна товщина шару взагалі буде складатись з нецілого числа атомних площин і тому виникають нерівності на атомному рівні. Дифракційний зонд усереднить структуру в межах латеральної довжини когерентності, і тому, дифракційну ситуацію буде можливо розглядати як міжшарові включення. На дифракційному профілі неспівмірної НГ сателітні піки викликають періодичність, що ϵ близькою до цілого числа атомних шарів і інтенсивностей, які не узгоджують з заданим числом шарів (GaAs)-(AlAs) і може описуватись лише їх комбінаціями (табл.3.1).

Таблиця.3.1

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

Параметри шарів НГ

Однак розсіяння на границях буде мати області кінцевої довжини кореляції, (віддаль між областями шорсткості), і якщо вона менша ніж довжина когерентності, то це викликатиме дифракційне розширення профілю. Ця неспівмірність може бути врахована в аналізі, особливо в короткоперіодних надгратках, включенням ряду більших елементарних комірок, які включають в себе усереднену неспівмірну структуру, [75].

Інший підхід полягає в тому, щоб розглянути розсіяння і модуляцію постійної кристалічної решітки, як збурення усередненої структури, [73]. В цьому випадку коефіцієнт розсіяння змінюється від $f(1-\eta)$ до $f(1+\eta)$ і міжплощинна віддаль від $d(1-\varepsilon)$ до $d(1+\varepsilon)$. Виходячи з цього твердження, отримаємо співвідношення інтенсивностей:

$$\frac{I_{H\pm m}}{I_{H}} = \left(\frac{a_{m}}{2}\left[\left(\frac{H}{d}\pm\frac{m}{\Lambda}\right)\Lambda\varepsilon\mp\eta\right]\right)^{2},$$
(3.17)

де H і m - дифракційні порядки для середньої періодичності кристалічної гратки і періодичності НГ з довжиною хвилі Λ , a_m , – коефіцієнт Фур'є для сателіта порядку m. Сателіти з'являються на відстанях m/Λ від усередненого дифракційного піка, або на H/d в оберненому просторі. Ці рівняння дуже корисні для візуалізації сателітних інтенсивностей; так як припускають, що модуляція деформації незначна, $\varepsilon \sim 0$, або альтернативно модуляція коефіцієнта розсіювання незначна, $\eta \sim 0$ тоді сателітні інтенсивності з будь-якого боку усередненого піка повинні бути рівні. Будемо розглядати амплітуду сателітних відбиттів як коефіцієнти Фур'є, і тоді це рівняння дає дуже простий технологічний процес для переходу від оберненого до реального простору за умови необхідності оцінки фаз коефіцієнтів Фур'є.

Обидва методи дуже зручні, тому що вони потребують лише інтегральних інтенсивностей для порівняння або Фур'є-перетворень. Метод підгонки профілів, наприклад з допомогою динамічної теорії, вимагає дуже гарної якості даних для порівняння, однак цей метод є більш повільний. Параметр девіації $\alpha_{\rm H}(\omega)$ також

використовується в дуже наближеній формі в багатьох моделях і в дуже точній формі був використаний, [76]:

$$\alpha_H(\omega) = \left(1 + 4\sin\frac{\omega - \omega_0}{2} \left[\sin\frac{\omega - \omega_0}{2} + \sin\left(2\vartheta - \frac{\omega - \omega_0}{2}\right)\right]\right)^{1/2} - 1, \quad (3.18)$$

де \mathcal{G} - бреггівський кут для симульованого відбиття, ω - кут падіння, і ω_0 - кут падіння в бреггівському положенні. Це вираз для точного параметра відхилення і він може бути далі спрощений відповідно до припущень до більш знайомих форм:

$$\alpha_H(\omega) = -2\sin\frac{\omega - \omega_0}{2}\sin 2\vartheta = -(\omega - \omega_0)\sin 2\vartheta, \qquad (3.19)$$

для малих девіацій, оскільки $\omega - \omega_0$ мала величина.

3.3.2. Вимірювання періоду.

Цей параграф може здатись досить тривіальним, тому що положення сателітів, які є результатом модуляції, можуть бути прямо проаналізовані, використовуючи закон Брегга з допомогою виразу:

$$\Lambda = \frac{(i-j)\lambda}{2(\sin \theta_i - \sin \theta_j)},\tag{3.20}$$

де *i* і *j* – порядки сателітів з бреггівськими кутами \mathcal{G}_i , і \mathcal{G}_j . Це справедливо в кінематичному наближенні теорії і дає дуже гарну оцінку періоду в межах приблизно 1%. Величина періоду може бути визначена з високою точністю, до ангстрема для періодів близьких до 100Å, тоді як при зниженні величини періоду, точність поліпшується далі, тому, що це приводить до збільшення віддалі між сателітами. Однак, проста кутова періодичність може бути джерелом помилки на кілька відсотків для комплексних дифракційних ефектів [72]. Ускладнення виникає з

динамічними дифракційними явищами, які обумовлюють дифракційні процеси в цілому, і це може привести до несподіваних взаємодій. Вищезгаданий вираз може використовуватись успішно для швидкого аналізу НГ, [76], включаючи всі виміряні сателіти і визначаючи різні комбінації. В цьому випадку динамічні дифракційні явища практично осереднені.

По-перше розглянемо динамічні дифракційні явища з посиланням на рис.3.1. Вищезгадане рівняння базується на кінематичній теорії, і є можливість порівняти обґрунтованість цього виразу, для різних пар сателітів, а також різного числа періодів. Період НГ на рис.3.1 рівний 300Å в усіх випадках, і все-таки віддаль між піками сателітів на низькокутовій стороні "усередненого" піка є більшою ніж очікувалось. Наприклад, від -8 до -7 порядків сателітів модуляційна довжина хвилі ~298Å. З іншого боку від +7 до +8 віддалі між піками сателітів дають модуляційну довжину хвилі – 300.9Å. Беручи до уваги, що віддаль між -1 до +1 сателітами дають періоди 301.89Å, 300.53Å і 299.25Å для структур з 4, 10 і 20 періодів, відповідно. Це може здаватися досить дивним, але з аналізу відомо, що дифракційний профіль є зовсім не симетричним до "усередненого" піка, особливо в області сателітів слабких непарних відбиттів, і тому "очевидна" модуляційна асиметрія довжини хвилі періоду не настільки дивна. Перший порядок піка сателіта можливо більш очевидний, і відомо, що для дифракційного максимуму ефект "затягування" може виникнути в тонкошарових структурах, тому що хвильові поля, які мають недостатню періодичність, блокуються і дифрагують незалежно, [76]. Тому в цьому особливому випадку період може бути визначений в межах декількох Ангстрем з вищезгаданого рівняння, використовуючи єдиний вимір. Усереднення декількох сателітів вище й нижче "усередненого" піка поліпшує точність визначення періоду.

3.3.3. Варіації періоду.

Варіації періоду можуть інтерпретуватися як гранична шорсткість, [77], за умови, що вони, як відомо, є нескорельованими, тобто коливання безладно розподілені по структурі. Найпростіший спосіб візуалізувати вплив цих варіацій на

дифракційному профілі полягає в тому, щоб розглянути структуру, яка має сателіти з періодами Λ , Λ_2 , Λ_3 Λ , тоді дифракційна картина буде складатись з сателітів в різних положеннях, [78]. Ширина індивідуального сателіта $\Delta \omega$ в цьому випадку може бути пов'язана з варіаціями періоду, [78]. Якщо профілі апроксимувати гауссовою формою, і використовувати інтегральне розширення, тоді може бути визначений параметр гауссового розподілу періодів:

$$\Delta \omega_{\Lambda} = \frac{(i-j)\overline{\beta}_{S}}{\omega_{ii}^{2}\cos\theta},$$
(3.21)

де *β*_S - інтегральна ширина, статистично усереднена для всіх виміряних сателітів, *ω*_{ij} - кут між двома сателітними піками. Перевага наближення профілю до гауссіану - досить тривіальний метод для деконволюції ширини профілю для НГ.



Рис.3.4. Вплив варіації товщин шарів на спектри дифракції для двошарової структури AlAs-GaAs: a) випадкові зміни ±5%; б) систематичні – 7%. Відбиття 004, CuK_α -випромінювання.

Структура з 5%-ими випадковими варіаціями в періоді моделювалася і показана на рис.3.4(а). На цих спектрах можна побачити розширення сателітів, яке прогресує з порядком, хоча ступінь інтеграції пікових форм складна. При цьому хаотичність повинна бути "усереднена", щоб досягти практичної ситуації. Однак,

важливо знати різницю між випадковими флуктуаціями і варіаціями періоду, які виникають, якщо коефіцієнти вирощування змінюються систематичним способом протягом осадження. Профіль таких варіацій зображений на рис.3.4(б). Автори [33] використовуючи напівкінематичну теорію, пояснили вплив різних способів варіації товщини періоду на форму профілю.

3.3.4. Вимірювання індивідуальних товщин шарів НГ.

До вимірювання товщини в мультишарах можна наблизитися в дуже різні способи, починаючи з того, що багатошаровість вносить додаткову періодичність у структурі. Підходи, описані вище використовують поняття великої елементарної комірки, а підхід щодо збурень і метод імітації профілів, використовує динамічну теорію. Самі швидкодіючі методи використовують два попередні підходи, тому що товщини можуть бути отримані з інтегральної інтенсивності, тоді як останній вимагає точної форми профілю. Останній дуже спрощує інструментальні вимоги.

В рівнянні (3.31) був отриманий вираз для деформації, ε , і модуляції розсіяння, η , в термах відношення інтенсивностей, [79]. Звичайно добра оцінка товщин вимагає починати з визначення параметра a_m тому, що ця величина включає в себе фази компонент, тобто відносні положення синусоїд модуляції. Важливо також знати про небезпеку фур'є-перетворень, яка сильно залежить від числа спостережуваних сателітів. Якщо наявні вимірювання тільки сателітів першого порядку, тоді модуляцією, буде проста синусоїда, і ці дві товщини будуть еквівалентні. Лише, коли розумне число сателітів буде включене в цей розгляд, можна буде отримати достовірний результат. Звичайно форму хвилі періоду можна розглядати як прямокутну хвилю з точною симетрією поверхонь розділу, тоді функція косинуса буде включена із простими фазами 0 або π .

Наближення великої елементарної комірки дає менше припущень відносно числа сателітів. В цьому випадку необхідно обчислити структурний фактор для великих елементарних комірок, які коливаються між певними значеннями періоду і сумувати структурні фактори перед перетворенням їх в інтенсивності для порівняння з виміряними інтегральними інтенсивностями. Інтенсивності низьких порядків менш чутливі до інтерфейсних дефектів, (низькі порядки коефіцієнтів Фур'є), і тому підгонка до них повинна бути досить хорошою, щоб бути впевненим щодо результату. Одержані індивідуальні товщини, залежать також від того, чи відома композиція плівок у межах НГ. Якщо усереднена композиція, x_{ave} НГ відома, тоді, маємо два основні рівняння для структури з двома шарами:

$$\Lambda = t_1 + t_2$$

$$t_2 x_2 + t_1 x_1 = x_{ave} \Lambda$$
(3.22)

для простої структури з двома плівками виду $A_x B_{1-x} C$, x_1 і x_2 , є комопозиціями в цих плівках 1 і 2. Об'єднуючи ці рівняння отримаємо:

$$t_2 = \frac{(x_{ave} - x_1)\Lambda}{(x_2 - x_1)}.$$
(3.23)

Отже, якщо ми знаємо індивідуальні композиції і "середню" композицію, x_{ave} то можемо дуже легко визначити товщини t_2 і t_1 . Тепер коли для багатошарової сполуки товщини t_1 і t_2 нижче 400Å, можна розглядати дифракцію багатошаровою структурою із середньою композицією x_{ave} і збуренням, що викликає сателітні піки. Для товщин значно вищих цих значень поняття середнього піка більше не існує, [78, 80]. Зрозуміло, якщо композиції невідомі, тоді маємо занадто багато змінних, і необхідно підключити додаткову інформацію, отриману з інших джерел. Додаткова інформація міститься в інтенсивностях сателітів.

Для обох цих методів існує вимога "усередненого" розсіяння (метод збурення) і "усередненої" композиції. Для одержання інформації про структуру, в центральному регіоні дифракційного профілю необхідно використовувати динамічну теорію, [70] а не покладатись на розділення піків. Також дуже важливо моделювати цілу структуру детально, а не лише усередненою еквівалентною структурою.

Ця методика детально описана в роботі [30], котра стверджує, що вона точна

до ~5% моношару і що нею можна користуватись для визначення неспівмірної ширини квантових ям (тобто такої ширини, котра не рівна цілому числу атомних площин, а містить долі моношару). Отримані шляхом припасування структурні характеристики шарів і значення параметрів граток приведені в табл.3.1. Аналіз дані таблиці вказує на визначену невідповідність між експериментальними й технологічно заданими значеннями товщин шарів НГ.

Спектр НГ можна представити як позитивну інтерференцію між товщинними осциляціями від послідовних елементів НГ, що добре видно при комп'ютерному моделюванні серії НГ зі зростаючим числом повторюваних елементів. Таке моделювання показує, що ширина окремого відображення майже змінюється i3 введенням дисперсії періоду. відносні не але інтенсивності різних максимумів в товщинних осциляціях дуже чутливі до нерегулярностей періоду. Часто невелика дисперсія періоду переносить до інтенсивність від піка ΗГ товщинних осциляцій, розташованих y безпосередній близькості від нього, що робить враження збільшення ширини



Рис.3.5. Фрагменти кривих дифракційного відбиття в області додатніх (а) і негативних (б) сателітів залежно від величини статфактора верхнього E₁ і нижнього E₂ субшарів.

піка, якщо роздільна здатність недостатньо гарна. Тому саме шляхом вивчення і моделювання інтенсивностей цих осциляцій, розташованих між положеннями сателітів, ми можемо визначити дисперсію періоду.

Нарешті кілька слів можна сказати щодо форми експериментальних сателітів. Як показує аналіз КДВ (рис.3.5), вони є асиметричними щодо значення пікової інтенсивності. Це, напевно, можна трактувати, як порушення симетрії в розподілі напруг усередині шарів.

Ці результати показують можливість одержання кількісної інформації про структурні параметри НГ (період, ступінь деформації в шарах). Показано певну відмінність у величині експериментального періоду НГ, стосовно технологічно заданих параметрів (табл.3.1).

Шорсткість і градієнт складу поблизу інтерфейсу неможливо розрізнити при аналізі двохосьової кривої гойдання. Введення шорсткості на рівні субмоношару дає можливість ввести неспівмірну ширину ями. Шорсткість вводять шляхом когерентного додавання структурних факторів двох співмірних періодів, при значеннях ширини ями по обидві сторони від середнього значення. Потім періоди приводять до одного масштабу з раніше визначеної гаусової дисперсією періодів і загальний структурний шоб одержати фактор для сателіта. складають, Структурний фактор кожного сателіта розраховують на комп'ютері і порівнюють з експериментальними інтенсивностями, і в цьому випадку теж при використанні *R*факторів, причому перемінною є градієнт складу за межами інтерфейсу, що змінюють на один шар за один раз. Очевидно, що цей градієнт складу може бути як завгодно складним за умови необмеженого комп'ютерного часу, але лінійного градієнта протягом декількох шарів звичайно цілком достатньо. Такий градієнт складу може мати дуже значний вплив на відносні висоти послідовних сателітів. до дуже істотної асиметрії в пікових Він може, наприклад, привести інтенсивностях додатніх і від'ємних сателітів. Ця відмінність виходить за рамки помилки визначения зазначених параметрів. Як свідчать результати виконаних досліджень, вивчені НГ поряд з більшими значеннями деформацій, мають дуже високу структурну досконалість, із чіткими границями розділу, про що свідчать малі значення напівширини сателітів, а також наявність тонкої структури спектра (швидкі осциляції). Безсумнівно, що така зміна в профілі параметра ґратки

необхідна для того, щоб одержати гарну відповідність між розрахунковими і експериментальними даними.

3.4. Поведінка сателітних дифракційних максимумів короткоперіодних надграток GaAs-AlAs з різним ступенем кристалічної досконалості шарів

Як показано в роботах [42, 81, 82, 83], присутність дефектів у НГ викликає некогерентне (дифузне) розсіяння і міняє профіль КДВ для когерентно розсіяних хвиль. Задача поведінки спектрів КДВ в довгоперіодних НГ залежно від ступеня дефектності шарів була розв''язана в [42].

У даному параграфі розглянемо особливості поведінки КДВ в короткоперіодних НГ GaAs-AlAs, які містять різні концентрації точкових дефектів, а також впливу цих дефектів на поведінку сателітних піків за допомогою напівкінематичного наближення теорії розсіювання ХП.

Для НГ, яка складається із двох шарів з різною міжплощинною віддаллю, розсіювальною здатністю σ і величиною фактора аморфізації f_j , вираз для амплітудного коефіцієнта розсіяння (АКР) R з врахуванням статистичного усереднення можна записати у вигляді [42]:

$$R = \langle R \rangle = i \sum_{n=1}^{N} \left\{ \int_{(n-1)T}^{(n-1)T+t_1} \sigma_1^n E_1^n \exp\left[i(\eta z - g \langle u_1^n(z) \rangle\right] dz + \int_{(n-1)T+t_1}^{nT} \sigma_2^n E_2^n \exp\left[i(\eta z - g \langle u_2^n(z) \rangle\right] dz \right\}, (3.24)$$

де $E_{1,2}^n$ – статичні фактори Дебая-Валлера для шарів 1 і 2, $u_{1,2}^n(z)$ – вектори атомних зміщень в шарах НГ, $t_{1,2}$ – товщини шарів, $T=t_1+t_2$, $\eta = (2\pi/\lambda \sin \theta)(\chi_0 + \sin 2\theta\Delta\theta)$ – кутова змінна, що характеризує положення кристала відносно напрямку падаючої хвилі, $\Delta \theta = \theta - \theta_0$, **g** – вектор дифракції, $\sigma_h = \pi \chi_h C/(\lambda \sin \theta)$ – параметр розсіяння, 3 – фактор поляризації, χ_h – коефіцієнт поляризованості, N - число періодів НГ.

Вектори атомних зміщень виражаються через міжплощинні відстані $d_{1,2}$ шарів, які утворюють НГ. Середня міжплощинна відстань періоду НГ визначається як

 $d = (d_1t_1 + d_2t_2)/T$. Величини неузгодженості міжплощинних відстаней шарів щодо середнього можна записати як, $\Delta d_{1,2}/d$, де $\Delta d_{1,2} = d_{1,2} - d$.

Для випадку симетричної дифракції, з огляду на однорідний розподіл дефектів у періодично повторюваних шарах, запишемо вираз для АКР когерентно розсіяних хвиль НГ:

$$R^{C} = iF^{C} \exp(i\Psi) \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}, \qquad (3.25)$$

де $y = A_1 t_1 + A_2 t_2$, $A_{1,2} = (\eta + 2\pi \Delta d_{1,2} / d^2) / 2$, $\Psi = (N-1)y + A_1 t_1$.

Структурна амплітуда періоду НГ має вигляд:

$$F^{C} = \sigma_{1} E_{1} \frac{\sin(A_{1}t_{1})}{A_{1}} + \exp(iy)\sigma_{2} E_{2} \frac{\sin(A_{2}t_{2})}{A_{2}}.$$
 (3.26)

Кутовий розподіл когерентно розсіяної інтенсивності можна характеризувати за допомогою інтерференційної функції Лауе:

$$I^{C}(\Delta \mathcal{G}) = \left|F^{C}\right|^{2} \exp(-2\operatorname{Im}\Psi) \left|\frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}\right|^{2}.$$
(3.27)

У кінематичному наближенні кутовий розподіл дифузно розсіяних хвиль, для шарів з параметром гратки, що змінюється по глибині, досліджено в роботах [83]. Для проведення чисельного аналізу й співставлення його з експериментом зручно використати модель дефектів кулонівського типу. Тоді вираз для статичного фактора Дебая-Валлєра, згідно [84], можна представити як:

$$E_{1,2} = \exp(-4\pi r_{1,2}^3 c_{1,2} / 3), \qquad (3.28)$$

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

$$I_1^d = 2\left\{\sigma_1^2(1-E_1^2)\int_0^{t_1} \tau_1(\eta,z)dz + \exp(-\mu_1 t_1)\sigma_2^2(1-E_2^2)\int_0^{t_2} \tau_2(\eta,z)dz\right\}, (3.29)$$

де $\tau_{1,2}$ – довжини параметра кореляції Като, що описують ступінь близького порядку, для відповідних шарів періоду НГ. Параметри $\tau_{1,2}$ для шарів короткоперіодної НГ не залежать ні від *z*, ні від періоду НГ. Кутова залежність кореляційної довжини з врахуванням (3.18) в явному виді запишеться:

$$\tau_i(\eta) = (6r_i / X_i^4) [(X_i^2 / 2) + 1 - \cos(X_i) - X_i \sin(X_i)], \qquad (3.30)$$

де $X_i = 2r_i \gamma_0 A_i$. Тоді (3.29) запишеться у вигляді:

$$I_1^d = 2 \Big\{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \tau_1 t_1 + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \tau_2 t_2 \Big\}.$$
(3.31)

Введемо середній коефіцієнт поглинання на одному періоді НГ $\mu = (\mu_1 t_1 + \mu_2 t_2)/T$. Кутовий розподіл дифузного фону в околі бреггівського рефлексу можна характеризувати за допомогою наступного виразу:

$$I^{d}(\Delta \mathcal{G}) = \sum_{n=1}^{N} I_{1}^{d} \exp(-\mu T(N-1)/2).$$
 (3.32)

Якщо інтенсивності дифузно розсіяних хвиль однакові для всіх періодів НГ, то (3.22) має вигляд:

$$I^{d}(\Delta \theta) = NI_{1}^{d} \exp(-\mu T(N-1)/2).$$
(3.33)

Інтерференційна функція Лауе НГ, яка присутня у виразі (3.27), приймає максимальне значення при $y = \pi m$, де $m = 0, \pm 1,...$ Тоді для m-го кутового положення кристала η одержуємо $\eta_m = 2\pi m/T$. Це вираз описує кутові положення сателіта нульового порядку при $\eta_m = 0$ і сателітів вищих порядків. Звідси вираз для інтенсивності сателітів приймає вид:

$$I_m = N^2 \left| F_m^S \right|^2$$

а структурний фактор описується виразом:

$$\left|F_{m}^{S}\right|^{2} = \left(\sigma_{1}E_{1}\frac{\sin(A_{1}t_{1})}{A_{1}} + (-1)^{m}\sigma_{2}E_{2}\frac{\sin(A_{2}t_{2})}{A_{2}}\right)^{2}.$$
(3.34)

Для короткоперіодних НГ структурний фактор нульового максимуму можна представити у вигляді $|F_m^0|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2$. У випадку, коли один із шарів в періоді НГ має сильно виражену аморфізовану структуру ($E_i=0$), інтенсивність основного сателіта буде визначатися лише більш досконалим кристалічним шаром. З аналізу виразу (3.24) слідує ще один цікавий висновок. Він стосується використання квазізаборонених рефлексів (КЗР). Для таких відбиттів, внаслідок малості розсіювальної здатності одного із шарів, який складається з атомів із близькими порядковими номерами, інтенсивність сателітів буде визначатися лише розсіювальною здатністю іншого шару з більш відмінними атомними номерами складових його компонентів [85]. Звідси випливає, що використання КЗР, дозволяє сепарувати вплив одного із шарів на величину інтенсивності розсіювання. При вивченні НГ GaAs-AlAs/GaAs(001) за допомогою рефлексів 200 або 600 такими шарами, які впливають на загальну картину розсіяння, є субшари GaAs. Чисельні розрахунки картини розсіювання Сu_α – випромінювання виконувалися для симетричних рефлексів 400 й 200.



Рис.3.6. Експериментальна крива дифракційного відбиття для рефлексу 400 в області сателітів першого порядку. На вставках наведені фрагменти КДВ в області сателітів першого порядку: суцільні криві - розрахунок; точки - експеримент.

На рис.3.6 наведені розрахункові спектри КДВ (фрагменти в області сателітів першого порядку) для рефлексу 400 від гратки з товщиною шарів t_1 =2.24 нм й t_2 =1.1 нм при різних значеннях статичного фактора E=exp(-L).

Як видно з аналізу цього рисунка, поведінка інтенсивності сателітів залежно від ступеня структурної досконалості верхнього або нижнього шарів НГ відповідає результатам, отриманим у роботах [42, 81], в яких відзначається той факт, що недосконалість верхнього шару НГ зменшує інтенсивність додатніх сателітів, а порушення ж структури нижнього шару приводять до загасання від'ємних сателітів. Тут слід зазначити, що на відміну від [34] при розрахунках КДВ [86, 87] враховувалася як когерентна, так і дифузна складові відбиття. Порівнюючи поведінку сателітів на розрахункових і експериментальних КДВ (рис.3.6), можна зробити висновок, що в досліджуваних НГ більш спотвореним є нижній шар – AlAs. При цьому співвідношення інтенсивностей експериментальних сателітів першого порядку $I_+/I_=$ 0,56 при величині статфактора 0,68 для шару GaAs, задовільно корелює з даними результатів підгонки КДВ. Залежність зазначеного відношення I_+/I від величини статфактора одного із шарів L_i при фіксованому рівні спотворень структури іншого шару L_j =const на відміну від [42] носить чітко виражений нелінійний характер (рис.3.7) як при однаковій товщині шарів ($t_1=t_2$), так й у випадку, коли товщина одного із шарів більша ніж іншого ($t_1=2t$).



Рис.3.7. Залежність відношення інтенсивностей сателітів першого порядку для 400 відбиття від величини статфактора одного із субшарів при фіксованому рівні структурної досконалості іншого шару. Для кривих 1 й 3 досконалим є перший (верхній) шар $E_1=1$ при $t_1=2t_2$ (1) і $t_1=t_2$ (3). У кривих (2) і (4) досконалу структуру має нижній шар $E_2=1$ при $t_1=2t_2$ (2) і $t_1=t_2$ (4), $E_1=E_2\neq l$ (5).

Причому, як видно з рисунка, зміна досконалості нижнього шару, AlAs, впливає практично монотонно на співвідношення інтенсивностей сателітів. Недосконалість же верхнього шару, GaAs, змінює відношення інтенсивностей додатніх і від'ємних сателітів немонотонним чином. Особливо чутливий цей параметр до розміру мікродефектів. В останньому випадку спостерігаються як максимум, так і мінімум на кривій залежності відношення інтенсивностей сателітів від величини статфактора. Для рефлексу 400 така картина поведінка інтенсивності сателітів якісно не залежить від співвідношення толщин шарів НГ.

Для квазізабороненого відбиття 200 спостерігається монотонний спад інтенсивності сателітів з ростом статфактора для недосконалого верхнього шару й ріст - при збільшенні ступеня недосконалості нижнього шару. Однак, ефект зміни відношення інтенсивностей сателітів для КЗР значно менше, ніж для структурного відбиття 400, що узгоджується з нашими результатами, отриманими раніше [85].

Слід зазначити, що рівень механічних напруг у шарах НГ, значно менше впливає на співвідношення інтенсивностей сателітів, ніж величина статичного фактора Дебая-Валлера.



Рис.3.8. Характер зміни залежності відношення інтенсивностей сателітів першого порядку для відбиттів 200(а) і 400(б) від значень кореляційного параметра Като. Номери кривих відповідають: 1 – верхньому шару GaAs, 2 – нижньому – AlAs.

Досить цікавим моментом, на наш погляд, є поведінка такого параметра як довжина кореляції Като залежно від дефектності того, або іншого субшару. Як показують розрахунки за формулами (3.34), (3.21), параметр $\tau_{1,2}$ досить чутливий до дефектів кулонівського типу, як для структурних, так і КЗР рефлексів. Залежності відношень інтенсивностей сателітів від величини параметра кореляції для двох субшарів НГ (1 – верхній шар GaAs; 2 – нижній шар AlAs) приведені на рис.3.8. Легко бачити, що збільшення параметра τ , який описує ступінь кореляції випадкових фазових співвідношень для верхнього шару НГ при використанні структурних відбиттів приведе зростання i зменшення відношення ЛО інтенсивностей сателітів, відповідно для верхнього й нижнього шарів (рис.3.8 б). У випадку ж використання КЗР чутливість до параметра кореляції зберігається в значній мірі лише для шару AlAs. Залежність відношення інтенсивностей сателітів від т для нижнього шару має яскраво виражений мінімум (рис.3.8 а). Дослідження

залежностей інтенсивності сателітів від $\tau_{1,2}$ може бути цікавим й у плані можливої чутливості цієї величини до рівня нестехіометрії шарів, оскільки вона якоюсь мірою характеризує ближній порядок у гратці [82].

Короткі висновки

Наведені в цьому розділі експериментальні результати й чисельні розрахунки КДВ із застосуванням напівкінематичного наближення теорії розсіяння Х-променів, дали можливість зробити висновок про те, що в короткоперіодних НГ зміна співвідношення інтенсивностей сателітів, розташованих з боку менших і більших кутів від головного (нульового) сателіта, залежать як від ступеня структурної досконалості (фактора Дебая-Валлера, параметра ближнього порядку Като), так і від рівня пружної деформації окремих шарів. Показано, що для верхнього шару, яким є GaAs, це відношення інтенсивностей має немонотонний характер. Зазначений факт може бути викликаний, найімовірніше, нерівнозначними фазовими змінами в структурному множнику кожного з реальних шарів. Для порівняно високого рівня структури, (E~0,8), співвідношення I_+/I_- може В спотворень кілька разів перевищувати значення, характерне для ідеального шару. Варіації характеристики *I*₊/*I*₋ у випадку КЗР мають значно меншу амплітуду в порівнянні зі структурними відбиттями. Це обставина якісно узгоджується з малою чутливістю КЗР до спотворень структури, виявленою нами раніше. Виконані в [88] розрахунки показують можливість проведення якісних оцінок ступеня структурної досконалості вирощених шарів НГ навіть по зовнішньому вигляді КДВ (співвідношенню між інтенсивностями сателітів).

РОЗДІЛ 4

КВАЗІЗАБОРОНЕНІ РЕФЛЕКСИ В БАГАТОШАРОВИХ ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУРАХ

Вступ

В останні роки значна увага приділяється вивченню дифракції Х-променів у періодичних надгратках (НГ) у зв'язку з їх унікальними властивостями. Однак, для короткоперіодних надграток, товщина окремих складових періоду яких становить трохи більше одного моношару, багато ефектів розсіяння Х-променів не з'ясовані дотепер. Відкритим у загальному випадку є і питання причини погасання або посилення сателітів різних порядків при використанні структурних і квазізаборонених рефлексів.

В даному розділі викладено аналіз результатів дослідження впливу фазових змін у структурному факторі, викликаних товщинами шарів, напругами між ними, структурною досконалістю шарів, на особливості утворення системи сателітів у спектрах КЗР відбиттів НГ, а також інтерпретація експериментальних спектрів КДВ на основі проведених розрахункових досліджень.

4.1. Формування кривих відбиття для квазізаборонених відбиттів у короткоперіодних надгратках GaAs/AlGaAs

При розрахунках картини дифракції Х-променів однорідним епітаксійним шаром використовуються такі параметри: товщина t, коефіцієнт поляризованості χ , який пропорційний структурному фактору F_h і напруга (або деформація) ε . Повна амплітуда розсіювання ХП складною багатошаровою системою описується за допомогою структурного фактора, що має вигляд:
$$F(\vec{h}) = F_{Cap}(\vec{h}) + F_{ML}(\vec{h}) \cdot \exp(-i\vec{h} \cdot t_{Cap}) + F_{B}(\vec{h}) \cdot \exp(-i\vec{h} \cdot (t_{Cap} + t_{ML})) + F_{Sub}(\vec{h}) \exp(-i\vec{h}(t_{Cap} + t_{ML} + t_{Buf}))$$
(4.1)

де t_{Cap} , t_{ML} , t – відповідно, товщини верхнього, надграткового і буферного шарів, h – вектор дифракції. Експонентні множники в (4.1) враховують зміну фази амплітуди розсіювання при проходженні Х-променів через субшари структури. Ефект впливу товщинних флуктуацій шарів був врахований у розрахунках через зміну фазового фактора

$$\varphi_i = \exp(-h^2 \cdot (\Delta t_i)^2). \tag{4.2}$$

При однорідному розподілі дефектів у періодично повторюваних шарах двох типів, кожний з яких характеризується своєю міжплощинною відстанню d, що розсіює із здатністю σ і величиною статичного фактора Дебая-Валлера E, вираз для амплітудного коефіцієнта розсіювання (АКР) когерентно розсіяних хвиль НГ у випадку симетричної дифракції може бути записане у вигляді

$$R = \langle R \rangle = i \sum_{n=1}^{N} \left\{ \int_{(n-1)T}^{(n-1)T+t_1} \sigma_1^n E_1^n \exp\left[i(\eta z - g\langle u_1^n(z) \rangle\right] dz + \int_{(n-1)T+t_1}^{nT} \sigma_2^n E_2^n \exp\left[i(\eta z - g\langle u_2^n(z) \rangle\right] dz \right\}.$$

Цей вираз буде мати максимуми при наступних значеннях синусоїдального знаменника

$$A_a t_a + A_b t_b = n\pi \quad , \tag{4.3}$$

які позначимо як сателіти *n*-го порядку ($n = 0, \pm 1, \pm 2...$). Період НГ може бути визначений з кутової відстані $\Delta \mathcal{G}_p$ між цими піками:

$$T = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_h|}{\Delta \mathcal{P}_p \sin(2\mathcal{P}_B)}.$$
(4.4)

Кутовий розподіл когерентно розсіяної інтенсивності можна охарактеризувати за допомогою інтерференційної функції Лауе

$$I^{C}(\Delta \mathcal{G}) = \left| F^{C} \right|^{2} \exp(-2 \operatorname{Im} \Psi) \left| \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)} \right|^{2}.$$

У загальному випадку для проведення чисельного аналізу і зіставлення його з експериментом необхідно враховувати не тільки вплив дефектів на когерентну складову інтенсивності, але й внесок дифузійного компонента, що виникає на структурних дефектах в одному шарі. Врахування розсіювання в буферних, захисному шарах і підкладці незначно ускладнює завдання, приводячи до необхідності врахування їх товщин і фазових співвідношень у виразах для АКР. Сателіт нульового порядку НГ відстоїть від піка підкладки на відстані $\Delta \mathcal{G}_0$,

$$-\Delta \mathcal{G}_0 = \tan \mathcal{G}_B \langle \mathcal{E}_\perp \rangle, \tag{4.5}$$

де $\langle \varepsilon_{\perp} = \Delta a / a \rangle$ - відносна зміна параметру гратки уздовж напрямку росту, і $\langle ... \rangle$ позначають усереднення по періоду НГ [53]. Структурний фактор для 200 КЗР (який, як відомо, пропорційний різниці між Ga й As атомними факторами розсіювання) є дуже малим у випадку GaAs двошарової системи.

У випадку нехтування поглинанням і внеском від підкладки, а також дифузійним розсіюванням $I^d(\Delta \vartheta)$, вираз для нормалізованої інтенсивності в центросиметричному випадку запишеться [86]:

$$R = |F_{ML}|^{2} = (\sigma_{a}E_{a}\frac{\sin(A_{a}t_{a})}{A_{a}} + \cos(y)\sigma_{b}E_{b}\frac{\sin(A_{b}t_{b})}{A_{b}})^{2}.$$
 (4.6)

З огляду на малий внесок у відбивну здатність від шару GaAs після деяких перетворень одержимо:

$$R \cong \left|F_{ML}\right|^2 = \cos^2(y) \left(\sigma_b E_b t_b \frac{\sin(A_b t_b)}{A_b}\right)^2.$$
(4.7)

Розглянемо спочатку поведінку розрахованих згідно (4.6) кривих дифракційного відбиття (КДВ) (крива 1) для надграткової структури з однаковими товщинами субшарів (рис. 4.1).



Рис. 4.1. Розрахункові КДВ для рефлексу 200 (крива 1) для НГ GaAs/AlAs, синусоїдальний (2,3), косинусоїдальний (4) фактори в співвідношенні (4.6).

З рисунку 4.1 видно, що можна виділити області з різними періодами маятникових осциляцій інтенсивності. Косинусоїдальний член у формулах (4.6)-(4.7) описує період НГ (крива 4), а синусоїдальні - товщину шару і внесок у відбивну здатність як AlAs (крива 2), так й GaAs (крива 3). Легко бачити, що внесок в AKB шару арсеніду галію на два порядки менше, ніж шару AlAs, оскільки його структурний фактор при використанні K3P 200, як ми вже відзначали, є дуже малим. Тому в цьому випадку існує можливість із простого кутового аналізу форми КДВ визначити як товщину всієї структури, так і кожного із шарів зокрема.

Експериментальні і розрахункові КДВ для НГ із застосуванням КЗР 200 наведені на рис. 4.2 (ω - скани) і рис. 4.3 (ω - 2 θ - скани). Видно, що на КДВ спостерігається не тільки сателітна структура, відповідальна за період НГ, але й тонка інтерференційна структура спектра. При цьому спостерігається хороше узгодження в тонких деталях експериментальних і теоретичних спектрів КДВ. Це відноситься як до значень інтенсивностей біля піка нульового порядку, так і до його кутового положення. Описаний результат також свідчить про те, що внесок дифузійного компонента є незначним для КЗР 200.



Рис. 4.2. Експериментальна (точки) і симульовані (суцільна лінія) КДВ для КЗР 200 (*ω* - режим сканування).



Рис. 4.3. КДВ для КЗР 200 (ω - 29 – скани) від НГ: експеримент (точки), симульована (суцільна лінія).

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

Проведені розрахунки показують, що на кутове положення сателітів, а також на їх інтенсивність впливає варіація товщини періоду. На рис. 4.4 показане погасання сателітів 3-го порядку при співвідношенні товщин $t_b/t_a = 2$. Крім того, максимуми сателітів різних порядків можуть, як збільшуватися, так і зменшуватись навіть у досконалих структурах. Для з'ясування основних причин цього явища розглянемо поведінку дійсної (Re) і умовної (Im) частин структурного фактора НГ $F^C = \sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + \exp(iy) \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2}$. На рис. 4.4 для зіставлення форми КДВ з характером варіацій Re i Im наведені розрахункові спектри КДВ НГ для відбиттів 400 і 200. Виявилося, що саме співвідношення між цими двома частинами структурного фактора визначає наявність або загасання сателітів тих або інших порядків. Дифракційні піки спостерігаються в тих місцях, де ($\text{Re}F_{ML}$) досягає максимума.



Рис. 4.4. КДВ 400 (а) і КЗР 200 (б) (крива 1), розраховані для AlGaAs і GaAs шарів при співвідношенні товщин 2:1 та $\text{Re}F_{ML}$ (2) і $\text{Im}F_{ML}$ (3).

На відміну від результатів, показаних на рис.4.4, для рівно товщинних шарів має місце погасання сателітів других порядків (особливо для КЗР). Ці результати дозволяють сформулювати кількісний критерій погасання сателітів залежно від співвідношення товщин шарів, що утворюють НГ. Його можна записати у вигляді емпіричної формули:

$$m = p(\frac{t_a}{t_b} + 1), \tag{4.8}$$

де p = 1, 2, ...; m – порядок погасаючого сателіта.

Як приклад розглянемо поведінку системи сателітів на експериментальних спектрах (рис. 4.5) для рефлексів 400 (1) і 200 (2), для НГ другого типу із співвідношенням товщин шарів 2:1. Для 400 відбиття чітко проглядаються тільки сателіти нульового, а також першого, другого і третього порядків (додатні), дозволені структурним фактором для НГ. Більш багата сателітна структура проявляється у випадку 200 відбиття, де спостерігаються як від'ємні, так і додатні сателіти дозволених порядків.



Рис. 4.5. Експериментальні КДВ 400 (1) і КЗР 200 (2) для НГ AlGaAs/GaAs зі співвідношенням товщин шарів 2:1.

Іншою важливою причиною можливості формування системи сателітів є структурна досконалість окремих шарів НГ. Як було показано раніше [42, 85], навіть при високій інструментальній роздільній здатності картина спостережуваної сателітної структури для структурних рефлексів сильно залежить від наявності дефектів у тому або іншому шарі НГ. Ці ефекти проявляються як для структурних, так і для квазізаборонених рефлексів [86,87]. Результати наших розрахунків показують, однак, що наявність дефектів у шарі арсеніду галію не робить практично ніякого впливу на інтенсивності сателітів. Цей висновок корелює з отриманими раніше даними про слабкий вплив дефектів на інтенсивності КЗР у масивних монокристалах [2]. Так, вплив досконалого шару (E = 1) GaAs у випадку КЗР не відрізняється від такого ж шару з повністю аморфізованою структурою (E = 0) за зазначеними вище причинами. Шар GaAs, однак, як фазовий об'єкт певної товщини

відіграє важливу роль у формуванні осцилюючої структури спектра НГ.

Для шару AlAs вплив структурних дефектів на інтенсивність сателітів виявляється помітним, що було показано в розрахунках, шляхом варіювання величини статичного фактора *E* в межах $0 \le E \le 1$. Таким чином, використання K3P дозволяє окремо вивчати структурну досконалість одного із субшарів (AlAs) HГ, що є істотною перевагою даного підходу в порівнянні із застосуванням тільки структурних рефлексів 400.

Процедура фітування (підгонки розрахункових спектрів до експериментального) показала, що нерівності поверхні шарів на міжфазних границях у значній мірі впливають на змазування дифракційної картини, особливо в області сателітів високих порядків (рис. 4.6).



Рис. 4.6. Розрахункові КДВ для КЗР 200 у випадку ідеальних шарів (1) і шарів з нерівностями 0.3-0.4 нм (2).

Цей результат розрахунків добре узгоджується з експериментальними КДВ (рис.4.6), на яких спостерігається зменшення інтенсивності сателітів другого порядку. Сателіти першого порядку і нульовий проявляють більше слабку чутливість до цього параметру структурної недосконалості. Величина статистично розподілених неоднорідностей поверхні розділу між шарами НГ становить близько 0.3-0.4 нм. Слід також зазначити, що асиметрія в інтенсивностях максимумів сателітів (ліворуч і праворуч від нульового максимуму) спостерігається тільки при наявності обох типів порушень (зміна міжплощинної відстані та розсіюючої здатності).

Підсумовуючи отримані результати, можна відзначити відносно хороше узгодження між експериментальними і розрахунковими дифракційними спектрами для K3P. Застосування цих рефлексів для контролю структурних параметрів НГ має ряд переваг перед звичайними (структурними) рефлексами. По-перше, можуть бути використані простіші математичні вирази, що зв'язують такі важливі параметри як товщини шарів і напруги в них. По-друге, незначний внесок шарів з малим значенням структурної амплітуди (GaAs) у розсіювання дає можливість сепарувати вплив кожного із шарів у процес розсіювання і одержати інформацію про структуру окремих шарів НГ, наприклад, шару AlAs.

4.2. Застосування квазізаборонених Х-променевих рефлексів для дослідження багатошарових періодичних структур

Широке застосування напружених шарів InGaAs/GaAs, AlGaAs/GaAs вимагає широкомасштабних досліджень властивостей цих структур з метою оптимізації технологічних режимів формування шарів і границь розділу. Зокрема, при відпрацьовуванні технології одержання квантових шарів InGaAs/GaAs необхідно знати основні параметри шарів, такі як молярна частка індію і товщина шару, а також рівень механічних напруг. Крім того, можливо, що морфологія гетерограниці відіграє активну роль у формуванні фізичних властивостей такої багатошарової структури.

У ряді робіт, була показана перспективність застосування квазізаборонених рефлексів (КЗР) для дослідження спектрів кривих дифракційного відбиття (КДВ) [86,87,88]. Оскільки ці рефлекси є дуже чутливими до хімічного складу сполуки, то становить інтерес визначення впливу складу квантової ями на спектри дифракції Х променів (ХП) для КЗР.

Ці роботи були виконані для шарів з товщинами декілька десятків ангстрем.

Проблема стає складнішою, якщо КЯ має товщини порядку декількох моношарів. У НГ із одним підшаром, що є значно тоншим, ніж інший, тонкі вставки не вносять безпосередньо внеску в розсіюючу здатність і дифракційні криві формуються згорткою напруги і товщини цих тонких шарів [79].

Крім цього, не встановлені фізичні причини формування сателітної структури КДВ, а також вплив співвідношення між товщинами субшарів, структурними факторами й рівнем напруг у цих структурах на інтенсивності сателітів при використанні КЗР. Відкритим у загальному випадку є й питання про причини погасання або посилення сателітів різних порядків при використанні КЗР.

Тому метою досліджень, результати яких викладені в параграфі, була характеризація впливу зміни складу і товщини квантових ям, а також структурних і фазових змін, викликаних вказаними вище параметрами, на еволюцію спектрів відбиття НГ для КЗР та інтерпретація експериментальних спектрів КДВ на основі проведених розрахунків. Показана також можливість контролю переходу від двомірного до тривимірного механізму ростів квантових точок.

Інтерференційна функція Лауе НГ, що присутня у виразі $I^{C}(\Delta \mathcal{G}) = \left|F^{C}\right|^{2} \exp(-2 \operatorname{Im} \Psi) \left|\frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}\right|^{2}$, приймає максимальне значення при $y = \pi m$, де $m = 0, \pm 1, \dots$ Тоді для *m*-го кутового положення кристала η одержуємо $\eta_{m} = 2\pi m/T$. Цей вираз описує кутові положення сателіта нульового порядку при $\eta_{m} = 0$ і сателітів вищих порядків. Звідси вираз для інтенсивності сателітів приймає вигляд:

$$I_m = N^2 \left| F_m^S \right|^2,$$

а структурний фактор описується виразом:

$$\left|F_{m}^{S}\right|^{2} = \left(\sigma_{1}E_{1}\frac{\sin(A_{1}t_{1})}{A_{1}} + (-1)^{m}\sigma_{2}E_{2}\frac{\sin(A_{2}t_{2})}{A_{2}}\right)^{2}.$$
(4.9)

Для короткоперіодних НГ структурний фактор нульового максимуму можна представити у вигляді $|F_m^0|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2$. У цьому випадку повинні виконуватися умови, $\varepsilon_i t_i \leq 1$ і $\frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1 t_1}$ тобто невеликі модуляції напруги в шарах. Відношен-

ня інтенсивностей сателітів високих порядків до інтенсивності нульового можна записати у вигляді простого виразу, що показує чутливість до різних параметрів НГ [33].

$$I_{m}/I_{0} = \left(\frac{\sin(n\pi t_{2}/T)}{n\pi t_{2}/T}\right)^{2} \left(\frac{t_{2}\left(1-k \cdot \frac{(\varepsilon_{2}+m/T)}{(\varepsilon_{1}+m/T)}\right)}{t_{1}+t_{2}k}\right)^{2},$$
(4.10)

тут $k=F_2/F_1$, $\varepsilon_i = \Delta d_i/d^2$. Звідси видно, що для шарів із близькими значеннями структурних факторів поява сателітів високих порядків неможлива. Ще один висновок, який випливає із цьогоу виразу, – залежність відношення інтенсивностей від знака сателіта (додатний або від'ємний), а також від деформаційного параметра $\varepsilon_i t_i$. З аналізу виразу (4.10) видно, що інтенсивність сателітів на КДВ стає чутливою до наявності тонкого шару, якщо відношення товщини між тонкими і товстими підшарами - приблизно 0.1 і вище. У цьому випадку сигнал від тонких шарів може бути виявлений при припущенні, що їх середній склад залишається постійним. Якщо один із шарів у періоді НГ має сильно виражену аморфізовану структуру ($E_i = 0$), інтенсивність основного сателіта визначається тільки другим субшаром [87, 88].

Всі зразки були вирощені на напівізолюючому арсеніді галію (100) на установці МВЕ. Для вирощування шарів 8x(14ML (In, Ga)As / 40ML арсенід галію) температура підкладки зменшувалася до 500 ⁰C. Зразки були вирощені, із вмістом індію відповідно 0.28, 0.3 й 0.35. Поверхнева структура в процесі вирощування контролювалася методом RHEED.

Експериментальні КДВ для симетричного відбиття 200 від зразків 1-4 (див.далі табл.1) з різним вмістом індію у твердому розчині (ТР) представлені на рис. 4.7. Спостережувані на них особливості можна якісно пояснити наступним чином. Нульовий максимум, утворений довгоперіодними осциляціями, свідчить про формування в приповерхній області зразків періодичної структури монокристалічних шарів, що відрізняються від підкладки на величину середнього параметра гратки.



Рис. 4.7. – Експериментальні КДВ для 200 рефлексу для структури InGaAs з різним вмістом індію. ''0'' і ''+1'' відповідно сателіти нульового й першого порядків, цифри відповідають номерам зразків, наведеним у табл. 1

Видно, що крім піка підкладки і основного максимуму, викликаного середньою граткою структури (нульового сателіта "0"), на хвостах КДВ спостерігається інтерференційна структура, що представляє собою взаємодію хвиль із однаковими періодами коливань. Це виражається в прояві ще одного сателіта (додатний першого порядку "+1"). Причому інтенсивність його перевищує пік основного (нульового) сателіта. Це є несподіваним результатом, оскільки всі розрахунки для товщин і сполук ТР, заданих технологічно або близьких до них дають дещо інші співвідношення між інтенсивностями сателітів (див. рис. 4.8).

Крім цього, врахування структурної досконалості шарів також не може вплинути в такій степені на асиметрію розподілу інтенсивностей сателітів. Під відсутністюь від'ємних сателітів на експериментальних спектрах розуміємо те, що їх інтенсивність на кілька порядків нижче, ніж додатних і при даному співвідношенні сигнал-шум не проявляються.



Рис. 4.8. – Розрахункові КДВ для 200-рефлексу для структури InGaAs: 1 – для складу, заданого технологічно; 2 – визначені із співвідношення (4.10).

Для з'ясування причин такої поведінки сателітів високих порядків на спектрах КДВ для 200-відбиттів були проведені чисельні розрахунки відповідно до (4.10). На рис. 4.9 наведені залежності відношення інтенсивностей сателітів перших порядків до нульового від складу твердого розчину в шарах InGaAs для рефлексів 200 і 400. З аналізу результатів видно, що відношення інтенсивностей сателітів першого порядку до інтенсивності нульового для рефлексу 200 дуже чутливі до складу ТР.

При певних значеннях вмісту індію це відношення для додатних сателітів може значно перевищувати 1. Однак асиметрія у відношенні інтенсивностей сателітів проявляється тільки за умови врахування напруг, як у першому, так і в другому підшарах. Тобто тільки за умови, що обидва шари є напруженими, тому що неврахування цієї обставини приводити до однакових значень інтенсивностей додатних і від'ємних сателітів. Для рефлексу 400 цей ефект виражений не так сильно (криві 3,4). Тому КЗР дозволяють дуже ефективно контролювати складд ТР субшарів НГ. Наведені на рис. 4.9 результати відповідають випадку, коли при зміні складу ТР зміна параметрів решіток і структурних факторів шарів відбувається в одному напрямку ($a_2 > a_1$ і $F_2 > F_1$).



Рис. 4.9. – Залежності відношення інтенсивності сателітів першого порядку до нульового від вмісту індію (випадок $a_2 > a_1$ і $F_2 > F_1$): 1, 2 – рефлекс 200; 3, 4 – рефлекс 400 (1, 3 – I(+)/I(0); 2, 4 – I(-)/I(0)).

У випадку, коли зміна цих параметрів відбувається в протифазі ($a_2 > a_1$ і $F_2 < F_1$), залежність відносини інтенсивностей сателітів для 200-відбиттів виходить протилежна (див. рис. 4.10). Однак, для НГ Al_xGa_{1-x}As/GaAs при певному співвідношенні товщин шарів виходить така ж ситуація з відношенням сателітів, хоча виконується перша умова (синфазність параметру гратки і структурного фактора). Для цих НГ товщина КЯ (GaAs) менша, ніж бар'єра (AlGaAs), і тому співвідношення знаків між параметрами невідповідності решіток змінює співвідношення між сателітами. Це підкреслює важливість ще одного параметра - середнього рівня напруг у шарах.

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



Рис. 4.10. – Залежності відношення інтенсивностей сателітів першого порядку до нульового від вмісту індію (випадок $a_2 > a_1$ і $F_2 < F_1$): 1, 2 – рефлекс 200; 3, 4 – рефлекс 400 (1, 3 – I(+)/I(0); 2, 4 – I(-)/I(0))

Хімічний склад ТР, обчислений з експериментальних спектрів для 200 рефлексу для всіх зразків значно відрізняється від заданого технологічно (табл.4.1). Структура квантових ям така, що верхні і нижні її шари виявляються розмитими та з меншим вмістом індію, чим більш глибокі відносно інтерфейсу частини квантової ями (размиття КЯ). Зміни складу відбуваються при внутрішній дифузії деякої кількості індію із двох граничних шарів в об'єм КЯ. Це приводить до формування областей з підвищеним вмістом індію – квантових точок.

Таким чином, можна вважати, що формування точок пов'язане зі зменшенням ефективного вмісту індію в змочувальному шарі. Оскільки перенапилення Іп повинне бути виключене при наших температурах росту порядку 500°С, то, отже, індій міг бути накопичений у більших областях тільки за рахунок перерозподілу. Перехід до формування точок активно відбувається при заданих значеннях складу квантових

Номер зраз-	Значення х, атомн.частка		Товшини	Відношення	
ка і форму-	технолог.	із ВРХД	яма/бар'єр, нм	I(+)/I(0)/	
ла				1(-)/1(0)	
1	0.2	0.22	15/150	0.00	
InGaAs	0.2	0.23	4.3/13.9	0.09	
2	0.28	0.63	5 0/17 21	2	
InGaAs	0.28	0.05	5.0/17.51	2	
3	0.2	0.50	0.7	1 57	
InGaAs	0.5	0.39	4.0/16.94	1.57	
4	0.25	0.673	0.7	2.2	
InGaAs	0.55	0.075	4.4/17.88	2.2	
5	0.28	0.2	7 6/15	0.93	
AlGaAs	0.28	0.5	/.0/13	0.97	

Експериментальні і технологічні параметри і склад досліджуваних структур In_xGa_{1-x}As

ям x = 0.28. Про це чітко свідчить поводження кривих на рис. 4.11, де представлені залежності виміряних значень складу ТР у структурах як функції технологічно заданого x. Різке відхилення цієї залежності від заданих значень свідчить про проходження цих процесів

Модуляція таких структур підтримується граткою змочувальних шарів, а висота острівців може флуктуювати. Острівці можуть бути невпорядкованими в площині, що, однак, не позначиться на профілі симетричного відбиття [89, 90]. В ідеальній гратці модульовані і дифракційні піки від острівця, і від усередненої гратки шарів. Розкид висоти острівців не гасить модуляцію. Невеликі відхилення надперіоду гасять модуляцію піка острівця, але не гратки шарів, тому що шари в цій моделі становлять кристалічну гратку, а для острівців прошарок ближче до аморфного..



Рис. 4.11. – Експериментальні значення вмісту індію у структурах In_xGa_{1-x}As залежно від технологічно заданого: точки – експериментальні дані; суцільна лінія – сполука КЯ без точок.

Як стартові умови для підгонки теоретичних КДВ до експериментальних значень, використовувалися параметри структур, отримані з аналізу спектрів для 400відбиття. В результаті цієї процедури були отримані спектри, які дуже добре описують поведінку експериментальних КДВ НГ із квантовими точками (рис. 4.12).

Як було показано раніше [91], навіть при хорошій інструментальній роздільній здатності картина сателітної структури для структурних рефлексів сильно залежить від наявності дефектів у тому або іншому шарі НГ. Це справедливо також і для квазізаборонених рефлексів [24]. Як показують результати розрахунків, наявність дефектів у шарі арсеніду галію не робить практично ніякого впливу на інтенсивності сателітів. Хоча навіть досконалий шар GaAs у випадку КЗР поводиться, як аморфна структура. Надгратки AlGaAs/GaAs, таким чином, можна розглядати як складені тільки з AlGaAs плівок (вставок), які відділені недифрагуючим матеріалом (у цьому випадку GaAs). Цей шар, однак, як фазовий об'єкт, що має товщину, вносить вклад у формування осцилюючої структури спектру НГ [86].



Рис. 4.12. – Експериментальна (точки) і розрахункова (суцільна лінія) КДВ для 200-рефлексу в структурі In_xGa_{1-x}As для складу х = 0.25.

Таким чином, застосування КЗР для дослідження квантово-розмірних НГ показало, що ці відбиття є дуже чутливими до складу ТР КЯ. Причому залежно від співвідношення величин параметрів a_2/a_1 й F_2/F_1 змінюється поведінка сателітної структури. Аналіз відношення інтенсивностей сателітів вищих порядків до інтенсивності нульового дозволяє визначити як склад ТР, так і наявність напруг у субшарах (асиметрія інтенсивностей сателітів вищих порядків). Задовільна кореляція між експериментальними і теоретично розрахованими КДВ для 200 рефлексу свідчить про те, що теоретичні передумови, використовувані в роботі, є правочинними.

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

Нарешті, дифракція ХП із високою роздільною здатністю дає можливість аналізу прихованих квантово-точкових структур. При порівнянні X спектрів InGaAs шарів з точками і без них в зразках із точками знайдено зменшення ефективного вмісту індію в змочувальних шарах.

4.3. Дослідження тонких інтерфейсних областей у сполуках III-V наноструктур методом ВРХД

Властивості епітаксійних структур, таких як квантові ями, модульовано - леговані структури та надгратки залежати від якості інтерфейсних шарів. Крім того, морфологія гетерограниць відіграє активну роль у формуванні фізичних властивостей багатошарових структур, а саме, явища електроперенесеня [2, 30, 92]. Широке застосування квантово-розмірних напружених шарів сполук (In-Al-Ga-Sb-As) потребує широкомасштабних досліджень властивостей цих структур з метою оптимізації технологічних режимів формування шарів та границь розділу. А саме, при відпрацюванні технології отримання квантоворозмірних шарів необхідно знаті їх основні параметри, такі як молярна частка компонентів твердого розчину, товщини, а також рівень механічних напруг. Крім того, у таких структурах можливе виникнення хімічних зв'язків, відмінних від зв'язків бар'єра та ями. Їх товщини можуть складати від одного до кількох моношарів.

Основним методом дослідження цих об'єктів є високороздільна Х-проминева дифрактометрія [30, 53, 93, 94]. Однак методи ВРХД мають обмежену чутливість до дуже тонких перехідних шарів на інтерфейсі.

Першими роботами, що показали чутливість КДВ у геометрії Брегга до наявності тонкого шару, вставленого на границі між двома товстими шарами, є роботи [37, 53, 93]. Ці результати є аналогом X інтерферометрії в геометрії на відбиття. Роботи [85, 87] присвячені вивченню особливостей спектрів дифракції в системах з тонкими шарами у надгратковий структурі з використанням квазізборонених рефлексів (КЗР). Зокрема, у роботі [85] вивчена будова перехідного шару в періодичній структурі при різних умовах напилювання з використанням КЗР 200. Оскільки ці рефлекси є дуже чутливими до хімічного складу сполук [86], то було б цікаво визначити вплив змін сполуки перехідної області між шарами на спектри дифракції X променів (ХП) у структурах з одиночними квантовими ямами, а також можливості контролю тонкої структури інтерфейсу.

4.3.1. Теоретичний аналіз.

Нормалізована амплітуда дифракції дискретною структурою з *N* шарів може бути записана в наступному виді:

$$F_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_{j}^{N} a_j \exp[-i(\varphi_j)] \frac{\sin(A_j Y_j)}{Y_j} , \qquad (4.11)$$

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

 $\varphi_j = A_j Y_j + 2 \sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i$, – фазовий фактор, причому $\varphi_1 = A_1 Y_1$.

Тут параметри $A = \pi \chi_h t (\lambda |\gamma_0 \gamma_h|^{1/2})^{-1}$ й $Y = -(|\gamma_0 \gamma_h|)^{1/2} \sin(2\theta)(\omega + s)/\chi_h$, де всі позначення відповідають [37].

Розглянемо ситуацію на границі квантової ями й бар'єрного шару з одним із проміжних шарів. Представимо цю структуру у вигляді тришарової моделі. Відповідно до кінематичної теорії розсіювання випромінювань відбивна здатність складної гетероструктури (тришарової системи) описується виразом

$$R_3 = F_1^2 + F_2^2 + F_3^2 + 2[F_1F_2\cos(\varphi_2 - \varphi_1) + F_1F_3\cos(\varphi_3 - \varphi_1) + F_3F_2\cos(\varphi_3 - \varphi_2)], \quad (4.12)$$

де індекси 1, 2, 3 позначають, відповідно, InAs квантову яму, багатошарову вставку InSb або AlAs на границі інтерфейсу, AlSb шар, F_j – амплітуда відбиття *j-го* шару, а φ_j містить фазове співвідношення хвильових полів відповідно до виразу (4.11). В (4.11) $A_j Y_j = \pi \sin(2\theta_B) t_j (\omega + s)/(\gamma_H \lambda)$, t_j – товщина *j-го* шару, λ – довжина X - променя, θ_B – кут Брегга, ω - кутове відхилення від кута Брегга, *s-параметр*, пов'язаний з невідповідністю решіток, сполучених шарів. Фазове зрушення між шарами, викликаний цією невідповідністю, визначається добутком товщини шаруючи t_j на величину деформації ε_j . Проаналізуємо вираз (4.12) для випадків InSb й AlAs вставок між шарами. Для рефлексу 200 у випадку багатошарової вставки InSb значення структурного фактора дуже мале й вираз (4.12) можна представити як:

$$R_3(InSb) \cong F_1^2 + F_3^2 + 2[F_1F_3\cos(\varphi_3 - \varphi_1)], \qquad (4.13)$$

Для AlAs вставки інтенсивність відбиття для 200-рефлексу, через велику різницю між компонентами, описується виразом (4.12). Розходження між дифракційними картинами, описуваними виразами (4.13) і (4.12), обумовлено тонким деформованим шаром (вставкою на інтерфейсі квантова яма-бар'єр). Різниця відбивних здатностей для систем з різними вставками може бути представлена як

$$\Delta R = R_3(InSb) - R_3(AlAs) = F_2^2 + 2F_2[F_1\cos(\varphi_2 - \varphi_1) + F_3\cos(\varphi_3 - \varphi_2)]. \quad (4.14)$$

Таким чином, з аналізу цих формул можна бачити, що у формуванні фазового зрушення між шарами для КЗР крім добутку $t \cdot \varepsilon$, що розрізняється для двох інтерфейсів, велике значення робить і величина структурного фактора проміжного шару (вставки), особливо коли атомні формфактори компонентів вставки сильно відрізняються.

У випадку, коли бар'єрний шар й яма складаються з одного матеріалу, вирази (4.12) і (4.13) легко перетворюються у вирази, описані в [53].

4.3.2. Методика експерименту й зразки для дослідження.

Досліджувалися зразки багатошарових лазерних структур. Всі зразки були вирощені на напівізолюючому арсеніді галію (100), буферний шар антимоніду галію товщиною 1 мкм був вирощений на підкладці. Вимір КДВ для симетричних 400 й квазізаборонених 200 рефлексів проводилися на ВРХД "Х'Pert PRO MRD". Зразок сканувався поблизу точного положення Брегга в діапазоні близько 20 у так званому ω/29 - режимі. Для аналізу експериментальних даних проводилося зіставлення експериментальних і розрахункових КДВ шляхом фітуваня [53].

4.3.3. Обговорення результатів.

На Рис. 4.13 наведена структура, а також схема утворення додаткових зв'язків

в інтерфейсі для двох можливих випадків на границі канал-бар'єр: In-Sb (1) і Al-As (2). Співвідношення між лініями на схемі відповідає реальному співвідношенню постійних решіток сполук структури.



Рис. 4.13. Схематична будова атомних площин (співвідношення міжплощинних відстаней між шарами на схемі відповідає реальним) в інтерфейсах структури і співвідношення між структурними факторами шарів.

На Рис. 4.14 (б) наведені розрахункові спектри 200-відбиттів для вихідних структур і з різними вставками (AlAs або InSb) між каналом і бар'єром в області піка підкладки, а також в області піка від середньої решітки. Порівняння розрахункових кривих дифракційного відбиття (КДВ) при використанні різних сполук вставки (AlAs або InSb) між каналом і бар'єром показує, що кутові положення інтерференційних максимумів на цих кривих зміщаються, як поблизу піка підкладки, так і поблизу кутового положення багатошарової структури. Ці зсуви викликані розходженням параметрів решіток нових зв'язків в області інтерфейсу з вихідними компонентами НЕМТ-структури.

Оскільки вставка, InSb, структурує перший інтерфейс, має більше довгі зв'язки (In - Sb), чим другий (Al - As) то це приводить до зміни фази, викликаною вставкою за рахунок деформацій, тому що для параметрів решітки даних сполук виконуються співвідношення:

Сумарна середня напруга на інтерфейсі змінюється. Тому в цьому випадку положення середнього піка від решітки змінюється, що й випливає з розрахункових спектрів.

Для рефлексу 400 поблизу піки підкладки не спостерігається істотних відмінностей у спектрах, а в області піка від середньої решітки структури ці відмінності добре описуються моделлю [96]. Змінюється також і середній структурний фактор в області інтерфейсу:

$$F_{200}$$
 (InAs) + F_{200} (InSb) + F_{200} (AlSb) < F_{200} (InAs) + F_{200} (AlAs) + F_{200} (AlSb)

При такому співвідношенні параметрів решітки й структурних факторів, як показано в [93], змінюється співвідношення між інтенсивностями осциляцій. Таким чином, у нашому випадку відбувається зміна фази, як за рахунок структурного фактора, так і параметра решітки (деформації).

Середнє значення структурного фактора тонкої вставки може бути більше або менше, ніж такий InAs+AlSb і зміна фази, викликана цією причиною, може бути й позитивним або негативним, залежно від відношення між змістом InSb(AlAs) і InAs+AlSb. Звернемо увагу, що *F-фактор* InSb має протилежний знак щодо інших шарів (Рис. 4.13). Хоча зміна структурних факторів по кутовому діапазоні вимірів включає, у загальному випадку, і мниму частину, і середній структурний фактор F_{200} для тонкого шару AlAs – завжди більше такого для InSb. У випадку InSb-основи вставки (на відміну від AlAs), з 200 відбиттями комбінують й високий контраст інтерференційних максимумів, і їхньої інтенсивності.

Сказане вище підтверджують експериментальні спектри для досліджених структур (Рис. 4.14 (а)). Результати розрахунків, як видно із цього рисунка, добре корелюють із експериментом.

Якщо навіть зміна фази за рахунок параметрів решіток контактуючих шарів у структурі дорівнює 0, КДВ для 200 відбиттів усе ще будуть відрізнятися через розходження в структурних факторах. Для визначення впливу структурного фактора на



Рис. 4.14. Експериментальні (а) та розрахункові (б) спектри для двох можливих випадків зв'язків в інтерфейсі на границі канал-бар'єр: In-Sb(A) і Al-As(B).

форму спектрів КДВ в чистому виді в розрахунках були використані деформації в тонких шарах однакові для обох типів вставок. Рисунок демонструє відмінності в спектрах, викликані тільки відмінністю структурного фактора вставки. Причому для вставки InSb ефект виходить більше істотним. Це можна пояснити тим, що структурний фактор AlAs вставки дуже мало відрізняється від матриці.

Тільки через домінуючий внесок структурних факторів інтенсивність інтерференційних коливань виявляється чутливої до сполуки тонких шарів. При зміні товщини шарів так, щоб середнє значення $\langle d \rangle$ залишалося постійним, інтенсивність осциляції й їхнє положення може значно змінюватися. Це викликано тим, що розходження між структурним фактором вставки й середніх *F-значень* навколишніх тонких шарів завжди або збільшується або зменшується. Однак шари з більшою відмінністю параметрів решітки від бар'єра, роблять більше сильний вплив на КДВ.

Тут же слід зазначити той факт, що у випадку змішаних інтерфейсних вставок також існує можливість експериментально визначити не тільки тип, але й розташування вставок. Відзначимо, що цього не відбувається для 004 відбиттів, тому що параметр решітки й структурний фактор змінюються в одному напрямку при переміщенні від сполук з легкими компонентами до сполук більше важким. Підтвердженням сказаному є поводження експериментальних спектрів для цього рефлексу. Однак, присутність тонкого шару, як показано в [87], крива відбиття для 004-рефлексу відчуває, незалежно від його складу.

Короткі висновки

1. Застосування КЗР для контролю структурних параметрів НГ має ряд переваг перед звичайними (структурними) рефлексами.

 по-перше, можуть бути використані більш прості математичні вирази, що зв'язують такі важливі параметри як товщини шарів і напруги в них;

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

2. КЗР є дуже чутливими до складу ТР КЯ. Причому залежно від співвідношення величин параметрів a_2/a_1 й F_2/F_1 змінюється поводження сателітної структури. Аналіз відношення інтенсивностей сателітів вищих порядків до інтенсивності нульового дозволяє визначити як склад ТР, так і наявність напруг у субшарах (асиметрія інтенсивностей сателітів вищих порядків). Задовільне узгодження між експериментальними й теоретично розрахованими КДВ для 200 рефлексу свідчить про те, що теоретичні передумови, використані в цих роботах, є правочинними.

3. Проведені дослідження ясно свідчать про те, що дифракційні характеристики 002 відбиттів є дуже чутливими для виявлення неоднорідностей границь розділу багатошарових структур.

4. Дифракція ХП із високою роздільною здатністю є підходящою для аналізу прихованих квантових точкових структур. При порівнянні Х спектрів InGaAs шарів з точками і без них, зменшення ефективного вмісту індію в змочувальних шарах знайдено в зразках із точками.

5. Застосування КЗР для дослідження квантово-розмірних структур показало, що ці відбиття є дуже чутливими до складу й будови тонкого перехідного шару між бар'єром і каналом. Аналіз зміни форми спектрів дозволяє визначити наявність нових зв'язків у межслойных границях, а також наявність напруг у субшарах. Вивчено особливості формування спектрів дифракційних кривих для квазизапрещенных відбиттів у багатошарових структурах (InAs-AlSb-GaSb)/GaAs з утвореними новими зв'язками в інтерфейсі. Установлено сильний вплив тонких шарів з новими зв'язками в інтерфейсі на розподіл осцилляций інтенсивності в спектрах відбиття, за рахунок варіацій середнього рівня деформацій і структурного фактора. Обговорюються можливості контролю якості інтерфейсу, і його атомної будови по експериментальних спектрах КДВ.

РОЗДІЛ 5

ДИФРАКЦІЯ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

Вступ

Самоорганізований ріст наноострівців віднедавна став досить великим полем для досліджень, головним чином, із-за їх використання в якості можливих пристроїв для оптоелектроніки [31]. Ці острівці отримуються гетероепітаксійним вирощуванням, з малою різницею в постійних кристалічної гратки між підкладкою і осадженим матеріалом. Результуюча деформація в межі розділу підкладка/плівка в кінцевому рахунку приводить до утворення самоорганізованих острівців, при відомому Странскі-Крастанова режимі росту [97]. Характеристика морфології цих острівців проводиться звичайно з використанням скануючих методів мікроскопії чи розсіяння Х випромінення. Останній має переваги, оскільки, може використовуватись навіть для прикритих острівців, і вся поверхня зразків може бути проаналізована із значно кращою статистикою для усереднених значень. Розсіяння Х-променів використовується для визначення обох параметрів: розмір і форма острівців при використанні ковзаючої геометрії Х променів при малих кутах падіння [98, 99]. Крім цього, Х промені можуть проаналізувати внутрішню кристалічну структуру острівців, їх орієнтацію і стан деформацій, коли використовуються в дифракції ковзаючого падіння [30] чи кристалічних стержнів перерізу Х-випромінювання СТК [46, 100]. Аморфне окисне покриття плівок острівців, наприклад, може також бути відділене від кристалічної структури їх центральної частини. При аналізі СТР, кути між гранями острівців можуть бути визначені з більш високою точністю, ніж в скануючій зондовій мікроскопії. Однак, інтерпретація даних розсіяння є менш прозорою, ніж це існує в реальних просторових зображеннях і потребує відповідної теорії.

Система самоорганізованих КТ із впорядкованою структурою у вертикальному й латеральному напрямках дуже мало вивчена, оскільки її одержання є дуже складним технологічним завданням. Тому вивчення таких систем важливо як з погляду визначення параметрів таких об'єктів, так і впливу впорядкування системи квантових точок на характер розсіювання Х-променів.

5.1. X – променеві дифракційні дослідження 2D - 3D структурних переходів у багатошарових періодичних структурах In_xGa_{1-x}As/GaAs

Багатошарові структури з напруженими шарами InGaAs/GaAs дозволяють підвищити ефективність розмірного квантування. Ансамблі наноостровков сформовані в матриці широкозонного матеріалу мають великий практичний інтерес [101, 102]. Тому їхнє застосування вимагає проведення широкомасштабних досліджень властивостей цих структур з метою оптимізації технологічних режимів формування шарів і границь роздягнула. Зокрема, при відпрацьовуванні технології одержання квантових шарів InGaAs/GaAs необхідно знати основні параметри шарів, такі як молярна частка індію й товщина шаруючи, а також рівень механічних напруг. Слід також зазначити, що спонтанна поперечна модуляція сполуки в плівках напівпровідникових сплавів III-V приводить до сильних змін оптоэлектрических властивостей напівпровідникових матеріалів, які становлять технічний інтерес для виробництва квантоворозмірних лазерів і фотодетекторів [1, 103].

Метою даного параграфа було показати можливості визначення основних параметрів багатошарових напружених квантових ям InGaAs/GaAs з різним складом TP, а також вплив складу квантових ям (КЯ) на перехід від двомірного до тривимірного росту квантових шарів з острівцями (квантовими точками).

Багатошарову систему, який є структура з декількома квантовими ямами, можна представити як систему однорідних субшарів [104]. Розрахунок кривої дифракційного відбиття (КДВ) будемо проводити по формулах динамічної теорії розсіяння Х-променів, що зводиться до рекурентних співвідношень, що зв'язують амплітуду відбиття від N шарів $R_{h,N}$ з амплітудами відбиття $R_{h,1}$ й проходження $R_{0,1}$ від верхнього шару з амплітудами (N-1) наступних шарів:

$$R_{h,N} = \left[R_{h,1} + R_{h,N-1} \left(R_{0,1} R_{0,1} - R_{h,1} R_{h,1} \right) \right] \left(1 - R_{h,N-1} R_{h,1} \right)^{-1}.$$
 (5.1)

101

Кожний із шарів характеризується: товщиною *t_j*, параметром кристалічної гратки *a_i* і ступенями аморфізації *f_i*, що зв'язана зі зсувами атомів з регулярної позиції.

Для проведення чисельного аналізу й зіставлення його з експериментом зручно використати модель дефектів кулонівського типу з виразм для статичного фактора Дебая-Валлера, згідно [33].

Всі досліджувані зразки вирощувалися на напівізолюючому арсеніді галію (100) на установці МВЕ. П'ять серій зразків були вирощені, зі змістом індію 0.2, 0.25, 0.28, 0.3 й 0.35, відповідно. Виміру КДВ для симетричних 400, 200 й асиметричних 311 рефлексів проводилися на двокристальному спектрометрі (кристалмонохроматор GaAs(100), Cu_α-випромінювання, 400 відбиття).

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

Експериментальні КДВ, а також результати припасування теоретичних кривих для симетричного відбиття 004 від деяких зразків з різним змістом індію у твердому розчині представлені на рис.5.1. Видно, що крім піка підкладки й основного максимуму, викликаного середньою граткою структури (нульового сателіта), на хвостах КДВ спостерігається складна інтерференційна структура, що представляє собою взаємодія хвиль із однаковими періодами коливань [104]. Осциляції з малим періодом $\Delta \mathcal{G}$ відповідають за товщину всієї структури, а більше довгоперіодні осциляції мають яскраво виражений максимум, що свідчить про формування в приповерхній області зразків періодичної структури монокристалічних шарів. Аналіз КДВ (як симетричних 400, так й асиметричних 311) показав, що всі структури, у тім або іншому ступені є псевдоморфними. З урахуванням цієї обставини була проведена оцінка змісту індію у квантових ямах. Ці оцінки наведені в табл.5.1.



Рис.5.1. Розрахункові (суцільна лінія) і експериментальні (маркери) КДВ для рефлексу 004 у структурах з вмістом індію: а) x=0.25; б) x=0.35.

Таблиця.5.1

Склад і параметри квантових ям In_xGa_{1-x}As за даними X - променевої дифрактометрії.

Номер струк-	G	Товщина КЯ,	Товщина ша-	Період НГР,
тури	Склад	НМ	ру GaAs, нм	Нм
1	0.2	4.5	15.9	20.38
2	0.25	5.5	17.91	23.41
3	0.28	5.0	17.31	22.31
4	0.2 0.3	0.7 4.0	16.94	21.69
5	1 0.17	0.7 4.4	17.88	22.98

В результаті процедури підгонки для рефлексу 400 були отримані товщини шарів у періоді надгратки (НГ), розподіл домішки в межах КЯ, а також зміна параметра гратки в напрямку росту структури. Ці результати узагальнені в табл.5.1 і 5.2. В передостанньому стовпчику табл.5.2 наведені значення усередненого параметра

Таблиця 5.2.

Деформаційні параметри квантових ям In_xGa_{1-x}As за даними X-дифрактометрії (симетричний рефлекс 400).

Номер	Деформація в шарах		∆а/а в релак-	<&>	<&>
зразка	ε ₁ ,	ε ₂ , GaAs	сованому	в періоді НГ,	в періоді НГ, ви-
	InGaAs		періоді НГ	форм.(7.35)	значена з поло-
					ження "О"
					сателіта
1	0.023	0.000185	0.0032	0.00529	0.00501
2	0.025	0.000185	0.00419	0.00599	0.00586
3	0.0285	0.000851	0.0045	0.00705	0.00696
4	0.03	0.00185	0.00444	0.00779	0.00754
	0.029				
5	0.045	0.00075	0.00453	0.00834	0.00799
	0.0322				

деформації по періоду НГ уздовж напрямку росту для всіх структур, що розраховується по формулі:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon_1 t_1 + \varepsilon_2 t_2}{t_1 + t_2}.$$
 (5.2)

В останньому стовпчику цієї ж таблиці наведені середні значення деформацій у періоді НГ, отримані з кутового положення нульового сателіта 004 відбиття. Як видно із цього порівняння, результати, отримані різними підходами, добре корелюють між собою. Однак, порівняння цих значень із даними для релаксированной структури, що має аналогічну сполуку, показує, що всі зразки перебувають у деформованому стані. Якщо врахувати підвищену рухливість індію, то можна припустити про наявність деякого розмиття КЯ. Зміна складу КЯ відбувається при внутрішній дифузії деякої кількості індію із двох граничних шарів КЯ в бар'єрний шар GaAs, а атоми Ga дифундують в КЯ. Структура квантових ям така, що верхні й нижні її шари виявляються розмитими й з меншим змістом індію, чим більше глибокі стосовно інтерфейсу частини квантової ями. Можливі профілі розмиття КЯ для зразків 4 і 5 представлені на рис.5.2.



Рис.5.2. Профілі розподілу індію в моношарах КЯ для зразків з вмістом індію 0.28 (а) і 0.35 (б)

На рис.5.3 наведені деякі КДВ (розрахункові й експериментальні) для рефлексу 311 у геометрії падаючого ковзного пучка. Їхній аналіз також свідчить про можливий релаксаційних і дифузійних (індій) процесах у зразках 3-5. Дані про структури, отримані в процесі припасування для рефлексів 311 наведені в табл.5.3. Розширення піків сателітів для 400 та 311 рефлексів може бути викликано перерозподілом індію усередині шару.



Рис.5.3. Розрахункові (суцільна лінія) і експериментальні (точки) КДВ для рефлекса 113 в структурах з вмістом індію: а) x=0.28; б) x=0.25.

Отримані значення деформації для напрямку паралельного гетерограниці, у зразках №3, 4 й 5 свідчать про значну релаксацію гратки, тобто про частковий зрив псевдоморфного росту. Це дозволяє зробити деякі висновки про те, що тут з'являється тривимірний ріст острівцевих структур [106].

Таблиця 5.3.

Значення параметрів деформації шарів в площині інтерфейсу, отримані в різко-асиметричній геометрії зйомки КДВ (рефлекс 311).

Номер зразка	Деформація в	Деформація, па-	Положення
	Сар шарі	ралельна	нульового
	GaAs	інтерфейсу	сателіта
			кут,сек
1	0.00035	0.00047	-806
2	0.00023	0.00026	-952
3	0.00031	0.00091	-1092
4	0.00501	0.00067	-1206
5	0.00083	0.00060	-1285

Експериментальні КДВ 004 для зразків 4 й 5 свідчать про те, що основний об'єм квантового шару складається із двох областей, що відрізняються по складу від заданого. Основний шар з композицією (x=0.17) і додатковий шар з більшим складом (x=0.9), який імовірно, включає острівцеві структури. Про утворення тривимірних острівцевих структур свідчить як розширення піків сателітів низьких порядків, так і зсув огинаючої лінії в бік менших кутів. Яскравим прикладом, що свідчить на користь тривимірної структури для зразка з (x=0.35) є спектр КДВ від багатошарової системи для рефлексу 400, який зображений на рис.5.4.

Рис.5.4 наочно демонструє подавлення періодичної сателітної структури, викликаної острівцями в області великих негативних кутів (зразок 5). Розрахункові КДВ забезпечують найкращу узгодженість з експериментальними результатами для процентного вмісту In в КЯ, показаного на рис.5.2. Нарешті відзначимо, що на користь утворення тривимірної острівцевої структури свідчить і спектр КДВ, знятий при скануванні кристала на деякій віддалі від точного положення Брегга [107]. В цьому випадку на фоні подавлених когерентних піків добре видно пік, утворений дифузною компонентою інтенсивності від квантових точок. По його напівширині була проведена оцінка розмірів КТ вздовж напрямку інтерфейсу, яка складала в нашому випадку 73.5 нм. Це значення близьке по величині до отриманих в роботі [108] середніх розмірів квантових острівців.

Узгодження між експериментальними і теоретично розрахованими КДВ свідчить про те, що багатошарова структура, утворена на підкладці GaAs має хорошу кристалічну якість, а границя розділу між бар'єрними шарами GaAs і КЯ Ga_{1-x}In_xAs для зразків із вмістом індію 0.2-0.25 чітка і когерентна. Подальше підвищення концентрації індію в твердому розчині приводить до порушення псевдоморфного росту і утворення тривимірних острівців. При цьому довільний розподіл In в системах такого роду, може приводити до збільшення ступеня локального безпорядку і деформації, що, відповідно, впливає на рухливість і довжину дифузії носіїв заряду.



Рис.5.4. Розрахункова (2) і експериментальна (1) КДВ для рефлексу 004 в структурі з вмістом індію х=0.35.

При припасуванні теоретичних КДВ до експериментальних аналізувалися найбільш можливі і ймовірні ситуації. Для знаходження більш повної відповідності між теоретичними й експериментальними КДВ дослідження проводилися з використанням не лише кінематичної, але й динамічної теорії розсіяння Х - променів. Максимально повного узгодження розрахункових і експериментальних КДВ можна досягти лише з урахуванням інструментальних факторів, що, в принципі неважко, та з включенням в теоретичну модель ефектів дифузного розсіяння від мікродефектів в шарах і від шорсткості міжшарових границь [47].

5.2. Дифракція на масиві квантових точок

При Странськи-Крастанова способі росту з напруженої епітаксійної НГ самоорганізована структура може бути утворена при рості на поверхні напруженого шару. Структура складається із двомірної безлічі маленьких острівців (квантові точки). Із збільшенням числа шарів у НГ, розподіл точкових розмірів стає гомогенним, і впорядкування точок поліпшується [99, 108]. Точки утворюють двовимірну, майже періодичну множину, осі якої збігаються з напрямками найменшого значення пружного модуля кристала, тобто в алмазній структурі вздовж [102] напрямку. У вертикальному напрямку, положення точок на сусідніх інтерфейсах корельовані і викликані полями напруг, що розповсюджуються від прихованої точки до поверхні [109]. Таким чином, точки мають тенденцію бути вбудованими в безладній тривимірній гратці, чий вертикальний параметр гратки рівний періоду НГ.



Рис.5.5. Проекція розподілів інтенсивності дифузного піка навколо SL₀ (a) і SL₁, (б) на вісь q_x для різних відбиттів (1 – 004 відбиття, 2 – 404, 3 - 113).

Для дифракційних 004-відбиттів дифузні максимуми симетричні відносно q_x осі (Рис.5.5.). Тому більш детальну інформацію про розподіл деформаційних полів у структурах із квантовими точками можна одержати з аналізу асиметричних двомірних карт розсіювання ХП у оберненому просторі. В асиметричній схемі дифракції розподіл інтенсивності близько до SL₁, зміщений до менших значень Q_x . Цей зсув пропорційний горизонтальній компоненті дифракційного вектора. Таким чином, це викликано напругою, і дифрагована інтенсивність формується областями з більшим параметром гратки *a* в площині. Із цього зсуву можна визначити середню латеральну напругу $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ в точках [100].

Як показано вище, з числових розрахунків розподілу напруги навколо ізольованої точки випливає, що між точкою і кремнієвою граткою існує область стискування, в той час, як нижче й вище точок, гратка розширена (див. рис. 5.6). Тому, ін-
тенсивність близько до SL₁ фомується головним чином від об'єму точки.

В області близько до піка SL₀ інтенсивність проявляє протилежну асиметрію; це зміщення до більших Q_x . Однак, це зміщення не пропорційне h, і положення Q_x максимуму інтенсивності залежить лише від азимута площини розсіяння, тобто значення Q_x те ж саме для 113 і 224 відбиттів і збільшується на фактор $\sqrt{2}$ в 404. Таким



Рис.5.6. Схема можливих розподілів деформацій навколо квантових точок: (а, в) – стискування, (б) – розтяг.

чином, цей максимум є перший латеральний сателіт від точкової множини, гратка множини квадратна, і її осі паралельні (100) [110].

Проаналізуємо перетини двовимірних карт розподілу інтенсивності паралельно площині росту структур. Поблизу сателіта нульового порядку SL_0 (для малих значень q) дифузне розсіяння визна-

чається головним чином областю деформації і розсіянням ґраткою Si, вдалині від острівців (квантових точок). Максимум дифузної інтенсивності навколо SL₀, як випливає з рис.5.5, зміщений в додатному q_x напрямку, тобто в напрямку більшого h_x , що відповідає стискаючій деформації кристалічної ґратки кремнію в областях між точками на рівні 5.062×10^{-4} .

Поблизу сателіта першого порядку SL₁ дифузне розсіяння визначене областю деформації і розсіянням кристалічною ґраткою острівців. Максимум дифузної інтенсивності навколо SL₁ зміщений в бік менших значень q_x , що відповідає деформації розтягу кристалічної ґратки точки. Середнє значення цієї деформації складає 1.119×10^{-3} .

Основним методом дослідження багатошарових квантових структур є X - дифрактометрія високої роздільної здатності [55]. Цим методом досліджені як технологічні параметри (товщина шарів, склад квантової ями (точки)), так і структурні рівень деформації в шарах, ступінь їхнього структурного впорядкування і досконалості. Деякі особливості впливу утворення КТ на розмиття сателітної структури спектрів відзначене в [111], а також висунуте припущення про зменшення параметра дальнього порядку.

В [30, 52] розвинута теорія розсіювання ХП такими об'єктами, яка включає розгляд як когерентної, так і дифузної (викликаною наявністю дефектів в шарах) складових інтенсивності.

Розрахунок КДВ будемо проводити по формулах динамічної теорії розсіювання ХП, що зводиться до рекурентних співвідношень, які зв'язують амплітуду відбиття від N шарів $R_{h,N}$ з амплітудами відбиття $R_{h,1}$ і проходження $R_{0,1}$ від верхнього шару з амплітудами (N-1) наступних шарів (розділ 5.1).

Для розрахунку дифузної частини розсіювання використаємо модель, запропоновану в [110]. Відправною точкою в розрахунках дифузної компоненти розсіяння ХП служить функція форми, що дорівнює одиниці всередині КТ і нулю зовні:

$$\chi_{h}(r) = \sum_{j} \left[\Omega(r - R_{j}) \chi_{hD} + (1 - \Omega(r - R_{j})) \chi_{hL} \right],$$
(5.3)

де χ_{hD} і χ_{hL} – коефіцієнти Фур'є-поляризованості, відповідно, КТ і навколишньої матриці, R_j – положення центра КТ. Зневажаючи анізотропією й різницею в пружних постійних, виразимо деформаційне поле t(r;Z), що оточує одну точку (центровану в r = 0) як суперпозицію деформаційних полів $t_0(r - r';Z)d^3r'$ елементарних точкових дефектів від внутрішніх точок r':

$$t(r;Z) = \int d^{3}r't_{0}(r-r';Z)\Omega(r').$$
(5.4)

Деформаційне поле t(r;Z) залежить не тільки від взаємного положення \vec{r} точки спостереження щодо точкового центра, але також і від глибини Z центра точки нижче вільної поверхні (стосовно пружної релаксації в поверхні). Всі позначення відповідають, наведеним в [110]. Деформаційне поле ізотропного елементарного точкового дефекту в пружному ізотропному континуумі можна розрахувати згідно [112]. Для розрахунків використаємо функцію $\varphi(r,Z) = \vec{h} \cdot \vec{t}(\vec{r},Z)$ і її Фур'є-перетворення:

$$\varphi(q,Z) = \int d^3 \vec{r} \, \varphi(r,Z) \exp(i \vec{q} \vec{r}) \tag{5.5}$$

Використовуючи дані [110], одержимо вираз для розподілу дифузійної складової інтенсивності з врахуванням кореляцій в розташуванні квантових точок:

$$I(\vec{q}) = const \cdot w_{parall}(q) \begin{bmatrix} |F_1|^2 H(iq_Z, -iq_Z; \xi_{corr}) + |F_2|^2 H(iq_{parr}, -iq_{parr}; \xi_{corr}) + \\ 2 \operatorname{Re}|F_1F_2| H(iq_Z, -iq_{parr}; \xi_{corr}) \end{bmatrix} (5.5)$$

де
$$H(a,b,\xi_{corr}) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} \exp(aZ_n + bZ_m) \exp(-|Z_n - Z_m|/\xi_{corr})$$
.

З врахуванням приведених вище формул, запишемо вираз для симуляції виміряної інтенсивності:

$$J(q_x, q_z) = const \int_{-K\Psi}^{K\Psi} dq_y I(\vec{q}) \,.$$
(5.7)

Основні експериментальні спектри КДВ для симетричного 400 відбиття в режимі (ω-сканування (1) і (ω-29 – з аналізатором (2) наведені на рис.5.7 [113]. Досліджувалися надграткові структури із квантовими точками 8x(11ML (In,Ga)As/67ML GaAs), вирощені на напівізолюючому арсеніді галію (100) на установці МПЕ.



Рис.5.7. Експериментальні дифракційні спектри для 400-відбиття: 1- ωсканування (двокристальний варіант); 2 - 2θ-ω - сканування (трикристальний варіант); КТ–піки від квантових точок.

На спектрах спостерігається сателітна структура піків основної НГ а також, викликана наявністю КТ. Спостережувані на них особливості можна якісно просто пояснити. Видно, що крім піка підкладки й основного максимуму, викликаного середньою граткою структури (нульового сателіта), на хвостах КДВ спостерігається складна інтерференційна структура, що являє собою взаємодію хвиль із однаковими періодами коливань [114]. В ідеальній гратці модульовані і дифракційні піки від острівців (КТ) і від усередненої гратки шарів. Крім сателітів, відповідальних за період НГ, на КДВ спостерігається також система широких сателітів, зміщених по куту відносно надграткових. При цьому період їхній аналогічний періоду основної надгратки. Ці сателіти вірогідно повинні відповідати розсіянню від квантових точок. Особливо чітко вони проявляються при ω -2 θ скануванні без аналізатора (1).

Порівняння двох- і трикристальних (з аналізатором) кривих гойдання показує, що піки, які позначені на графіку як (КТ), дійсно викликані розсіюванням від квантових точок з тією ж періодичністю. Аналізуючи зсув цієї системи сателітів щодо нульового, для основної НГ, можна визначити середню напругу в гратці КТ. Звідси, використовуючи рівняння Пуассона, одержимо середній склад КТ. Ці дані наведені в табл.5.4.

Таблиця.5.4

Склад і параметри НГ з квантовими ямами In_xGa_{1-x}As за даними X - променевої дифрактометрії.

Номер струк-	Склад	Середня де-	Товщина ша-	Період НГ,
тури		формація в	ру GaAs, нм	Нм
		періоді НГ,%		
1	0.2	4.5	18.91	22.9±0.2
2	0.25	5.5	15.87	17.8±0.3

Підтвердженням вищесказаному є двомірні карти оберненого простору навколо вузлів 400 та 224. На рис.5.8 наведені карти, зняті в симетричному 400- (а) і асиметричному 224 (б) відбиттях [113]. З рисунка видно, що додаткові сателіти на КДВ 400 дійсно відповідають системі впорядкованих максимумів інтенсивності. Причому це впорядкування спостерігається як у напрямку росту q_z (уздовж вектора дифракції), так і в площині інтерфейсу (у напрямках $q_x(q_y)$). Період цих впорядкованих максимумів відрізняється у двох взаємоперпендикулярних напрямках. Вздовж вектора дифракції він збігається з періодом НГ, і трохи збільшується в латеральному напрямку. Сама присутність впорядкованої системи максимумів вже свідчить про високу якість НГ із квантовими точками, наявність яких і підтверджується картиною розсіювання [114].Ще більш детальну інформацію про структуру деформаційних полів у цих НГ можна одержати з аналізу асиметричних двомірних карт розсіювання ХП у оберненому просторі. На цих картах чітко спостерігається розсіювання від підкладки, сателітна структура від НГ, а також піки, викликані впорядкованою структурою квантових точок. Порівняємо переріз, показаний прямою на карті вузла оберненої гратки 400 зі спектром ω-сканування (рис.5.9). Видно, що максимуми перетину двомірної карти розподілу інтенсивності, що відповідають розсіюванню від КТ і КДВ збігаються, що дає підставу вважати двокристальну *ю*-криву гойдання дуже інформативним інструментом для дослідження структур із квантовими точками.



Рис.5.8. Карти розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі поблизу вузлів 400 (a) і 224 (б) для структури InGaAs/GaAs. Випромінювання – СuKα1. Η – дифракційний вектор, КТ–розсіяння від квантових точок.



Рис.5.9. Фрагменти експериментальних дифракційних спектрів: 1- ωсканування (двокристальний варіант); 2 - ω - 2θ - переріз (з аналізатором) двовимірної карти розсіяння вздовж напрямку вказаного стрілкою (ω-2θ скан) на рис.5.8 (а).

Проаналізуємо тепер переріз вздовж вектора q_x поблизу сателіта першого порядку (рис.5.10). На відміну від аналогічних перерізів, наведених в роботі [114], в нашому випадку спостерігаються дифузні піки по обидва боки від когерентного сателіта основної надгратки. Положення максимумів дифузних піків вздовж q_x відповідно буде відповідати внеску деформаційних полів навколо квантових точок в латеральній площині. Тому їх положення можна пов'язати з напругами в латеральній площині ($q_x^{max} \sim \varepsilon_{xx}$). Отримані значення латеральних напруг у КТ наведені в табл.5.5.

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



Рис.5.10. Проекція перерізу піків дифузного розсіяння біля сателіта SL₋₁ на вісь q_x , отримана з КОП навколо вузла 400 (1) і 224 (2) для 17 періодної структури InGaAs/GaAs.

Іншою важливою причиною розділення тонкої структури сателітів є досконалість шарів і їхня однорідність по площі. Як було показано раніше [33], навіть при хорошій інструментальній роздільній здатності картина сателітної структури для структурних рефлексів сильно залежить від наявності дефектів у тому, або іншому шарі НГ.

Таблиця 5.5.

Параметри квантових точок In_xGa_{1-x}As за даними X - променевої дифрактометрії.

Номер струк-	Середній	Латеральні	Середній ла-	Висота КТ,
тури	склад КТ, %	напруги в КТ,	теральний	НМ
		%	розмір КТ, нм	
1	58	0.0004	98	7.0
2	63	0.0003	86	7.8

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

Відзначимо також, що наявність деформованих областей в структурах, викликаних квантовими точками, на відміну від інших типів порушень, не дає істотного впливу на когерентність дифрагованого випромінювання й, отже, на просторову роздільну здатність методу ВРХД.

5.3. Дослідження структур з латеральними модуляціями складу за допомогою двомірних карт розсіяння Х-променів в оберненому просторі

Вирощування короткоперіодних НГ (КПНГ) часто приводить до гетероструктур з ненавмисними латеральними змінами в складі сполуки. Особливо сильна й упорядкована композиційна модуляція виникає при рості номінально погодженої КПНГ при наявності в періодах біля чотирьох моношарів (МШ). Ця стимульована ростом модуляція вперше спостерігалася авторами [115]. Залежно від системи сплаву, горизонтальна модуляція може бути або одномірною [116, 117] або двовимірною [118] за характером. Одновимірна (1-D) модуляція в КПНГ, що формує горизонтальну довжину хвилі, утворює подібні до дротів області, в той час як двовимірна (2-D) модуляція утворює гратку - або подібні до точки області. У більш товстих КПНГ модульовані області можуть безупинно самовирівнюватися вертикально; 1-D подібні до дротів області подовжуються в напрямку росту, щоб сформувати подібні до аркуша області або горизонтальні квантові ями. Точно так же 2-D подібні до точки області подовжуються, формуючи стержні. Ця горизонтальна надструктура створює відповідні горизонтальні сателіти в оберненому просторі, які можуть бути проаналізовані неруйнуючим методом ВРХД.

Розглянемо спочатку латерально утворений кристал, який включає індивідуальні латерально однорідні ламелі, де всі структурні зміни відбуваються нормально до ламелей, наприклад, ідеально когерентна НГ, вирощена на сингулярній підкладці. Структура реального простору вздовж нормального напрямку до поверхні проявляється в оберненому просторі як відповідне розширення точок оберненої гратки в модульовані стрижні, орієнтовані нормально до ламелей, які формують кристал. Звичайні, одномірні КДВ, які виникають уздовж цих стрижнів, формують карту розподілу дифрагованої інтенсивності. Якщо ламелі латерально досконалі, то повна локальна структура оберненого простору відома із кривої гойдання.

Тепер, розглянемо, випадок порушення досконалості в площині шаруватих кристалів, при внесенні дефектів (наприклад дислокацій, порожнин, або преципітатів), мікроструктури (наприклад квантова точка або дротові множини, поверхнева морфологія, або шорсткість інтерфейсу), або горизонтальні варіації складу (наприклад відділені фази, або домени). Вставка цих латеральних дефектів приводить до ламелей, які є тепер неоднорідними по напрямку в площині. Латеральна структура в площині в реальному просторі відповідає латеральній структурі у оберненому просторі. Цю горизонтальну структуру можна бачити в Х - променевих дифракційних експериментах як тривимірний розподіл дифузного розсіяння ХП, в області оберненого простору, з боку суміжного з положеннями перерізів кристалічних стрижнів. Основна мета картографії оберненого простору полягає в тому, щоб визначити детальну тривимірну структуру, що виникає при наявності горизонтальних неоднорідностей у кристалі. Належна інтерпретація карт оберненого простору (і кривих гойдання також) часто вимагає розуміння їхнього тривимірного характеру.

Латеральна композиційна модуляція в короткоперіодної НГ - усього лише один певний тип латеральної неоднорідності, яка може бути вивчена картографуванням її відповідної структури в оберненому просторі. Латеральна надструктура в реальному просторі утворює відповідні латеральні сателіти в кожній точці оберненої гратки. Латеральний [110] розподіл сателітів, викликаних композиційною модуляцією $2\pi/p_{CM}$, де p_{CM} - період латеральної модуляції. Нормальна до поверхні КПНГ модуляція частково перетинається з латеральною композиційною модуляцією. Таким чином, плями КПНГ очікуються уздовж нормалі [001] до поверхні. Вплив 2-D композиційної модуляції в реальному просторі (1-D безпосередня модуляція по [110] і SPS модуляція по [001]) створюють 2-D мережу сателітів у кожній точці оберненої гратки.

Отже, скалярний добуток, що $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}$ вектора розсіяння, \mathbf{K} , і положення пружно спотвореної області гратки, \mathbf{r} , не дає ніяких, пов'язаних з напругою, внесків в латеральну сателітну інтенсивність для (002) і (004) відбиттів. Сателітна інтенсивність залежить тільки від хімічних модуляцій, які виражені через структурний фактор комірки. Сателітні амплітуди пропорційні амплітуді локальних фракцій подвійного сплаву, помножених на різницю атомних факторів розсіювання. Слабкі (002) сателіти помітні, тому, що порівняно слабкий квазізаборонений (002) рефлекс дає слабкий фон, що дозволяє їхнє виявлення. Слабкі (004) сателіти також існують; але вони не спостерігаються, тому що їх затінює високий дифузний фон сильного 004 рефлексу. На відміну від симетричних відбиттів, асиметричні рефлекси представлені пов'язаним з напругою ненульовим фазовим зсувом $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}$. Цей добуток пов'язаний із внеском в інтенсивність латеральних сателітів, і пропорційний фундаментальному структурному фактору. Сателіт біля вузла (224), що не є квазізабороненим відбиттям, буде, таким чином, більш сильним.



Рис.5.11. Схематичне зображення структур з латеральними модуляціями складу: a) – стандартна модель; б) із зміщеними шарами. Точками позначено положення вертикальних і горизонтальних сателітів в оберненому просторі. Буквами *u* - ,*w* – позначені, відповідно, області з надлишком Ga і In.

Виникнення латеральної впорядкованості в системі сателітів може бути викликано наявністю модуляцій складу по площині росту. Хвилястості товщини в подвійних шарах надгратки є основною причиною латеральних модуляцій складу (ЛМС), стандартна модель яких, зображена на рис.5.11(а) [119]. 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 НГ. Паралелограм зображує ділянку одиниці надструктури, що відповідає і вертикальним і горизонтальним структурам. Нахил основи комірки відносно (001) площини приводить до рівного нахилу вертикальних супутникових піків відносно [001] напрямку. Рис.5.11(б) зображує схематично відповідні дифракційні піки в оберненому просторі для обох моделей.

Хоча хвилястості товщини спостерігаються і в скануючому електроному мікроскопі, це не обов'язково свідчить, що існує латеральна модуляція хімічного складу. Для періодичної горизонтальної структури, тобто хвилястості товщини, і модуляції складу,

бреггівські дифракційні піки оточені набором латеральних сателітів. Хвилястості товщини приводять до появи латеральних сателітів, які присутні в високих порядках

вертикальних сателітів, однак, тільки ЛМС будуть оточені латеральними сателітами нульового порядку.

На рис.5.12 наведена одна з таких карт, знята в симетричному 400-відбитті для одного із зразків InGaAs/GaAs. З рисунка видно, що додаткові сателіти на КДВ 400 дійсно відповідають системі впорядкованих максимумів інтенсивності. Причому це впорядкування спостерігається як в напрямку росту q_z (вздовж вектора дифракції), так і в площині інтерфейсу (латеральні сателіти в напрямках $q_x(q_y)$). Період цих впорядкованих максимумів відрізняється в двох взаємоперпендикулярних напрямках. Вздовж вектора дифракції він збігається з періодом НГ, і небагато збільшується в латеральному напрямку. Ще більш детальну інформацію про структуру деформаційних полів у цих



Рис.5.12. Карта розподілу дифузної інтенсивності навколо вузла 400 для зразка In-GaAs/GaAs (8 періодна структура).

НГ можна одержати з аналізу асиметричних двовимірних карт розсіяння ХП у оберненому просторі. На рис.5.13 наведені перерізи в площині розсіяння двовимірних карт для асиметричного 224 відбиття. Як видно з рисунка (5.13), спостерігаються окремі сателіти, які характеризують сильну латеральну модуляцію складу в структурі з періодом 4 моношари (МШ). Для структури з трьома МШ в періоді спостерігається схожа ситуація. І нарешті в НГ з періодом 1МШ на КОП вже не спостерігається латеральних сателітів.



Рис.5.13. Карти оберненого простору навколо вузла 224 (а) та 004 (б) для КПНГ з латеральними модуляціями складу.

Наявність дальнього порядку в розташуванні цих максимумів на двовимірних картах в оберненому просторі свідчить про латеральне й нормальне впорядкування областей з різними модуляціями складу. Однак варто помітити, що фазові кореляції в напрямку вектора дифракції (оберненої гратки) більш сильні, ніж в паралельному напрямку.

При переході від (004) до (224) рефлексу спостерігаються прості, але важливі деталі, які далі підтверджують, що горизонтальні сателіти є результатом ефектів кореляції в-площині. Оскільки обидві обернені гратки вказують, на те, що сателіти залишаються розташованими вздовж напрямку [110], то, відстань між сателітами на обох картах майже однакова.

Для визначення об'ємної долі сплаву $In_xGa_{1-x}As$ і деформованої InAs структури в точці, проінтегруємо відповідні дифракційні інтенсивності по області вимірювання в оберненому просторі. Фракція релаксованого $In_xGa_{1-x}As$ проти частково деформованого InAs прямо пропорційна відношенню відповідних інтегральних інтенсивностей дифракційних піків. Використовуючи це співвідношення, одержимо значення 3% для відносної долі сполуки $In_xGa_{1-x}As$. В принципі, однак, цей розрахунок виключає змочуючу плівку, як було пояснено вище. Доля $In_xGa_{1-x}As$ є малою в порі-

внянні з попередніми повідомленнями, однак ця невідповідність може бути пояснена різницею в температурних вимірах і умовами вирощування при низькій температурі [120].

Короткі висновки

Встановлено, що наявність дальнього порядку в розташуванні дифузних максимумів на двовимірних картах в оберненому просторі свідчить про латеральне та нормальне впорядкування квантових точок з різними періодами. Це підтверджено також і формою ω - кривих поблизу надструктурних максимумів. Однак варто відмітити, що впорядкування КТ (фазові кореляції) в напрямку вектора дифракції (напрямку росту) більш сильні, ніж в латеральному (паралельному поверхні) напрямку.

Запропоновано методику контролю нормальних і латеральних складових деформації шарів в короткоперіодних НГ з точністю до 0.0001, яка полягає у вимірюваннях симетричних та асиметричних КДВ.Показано, що при використанні двокристальної схеми дифракції є можливість контролю наявності квантових точок в НГ та їх параметрів за рахунок реєстрації одночасно внеску як когерентного, так і дифузного розсіяння від точок.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

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

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

шарів та одержати інформацію про структуру окремих шарів НГ, наприклад, AlAs, InAs.

- 4. КЗР є дуже чутливими до складу твердого розчину в квантових ямах. Причому в залежності від співвідношення величин параметрів a_2/a_1 та F_2/F_1 змінюється поведінка системи сателітів на КДВ від структур. Аналіз відношення інтенсивностей сателітів вищих порядків до інтенсивності нульового дозволяє визначити як склад твердого розчину, так і наявність напруг у субшарах (асиметрія пікових інтенсивностей сателітів вищих порядків). Задовільне узгодження між експериментальними і теоретично розрахованими КДВ для 200 рефлексу свідчить про те, що теоретичні передумови, використані в цій роботі, є правочинними.
- Проведені дослідження показали, що дифракційні характеристики 002 відбиттів є дуже чутливими для виявлення неоднорідностей границь розділу багатошарових структур, а також до хімічних зв'язків, утворених на границях.
- 6. Високороздільна дифракція Х-променів є інформативним методом для аналізу закритих квантових точкових структур. При порівнянні рентгенівських спектрів InGaAs шарів з квантовими точками і без них зменшення ефективного вмісту індію в змочувальних шарах зафіксовано в зразках із точками.
- 7. Аналіз КДВ для симетричних та асиметричних рефлексів показав, що досліджувані структури в тій, або іншій мірі є псевдоморфними. Врахування цієї обставини дозволило провести оцінку середнього вмісту індію у квантових ямах. В результаті процедури підгонки були отримані товщини шарів у періоді НГ, а також зміна параметра гратки в напрямках росту структури і паралельно інтерфейсу.
- Встановлено, що наявність дальнього порядку в розташуванні дифузних максимумів на двовимірних картах в оберненому просторі свідчить про латеральне та нормальне впорядкування квантових точок з різними періодами. Це підтверджено також і формою ω - кривих поблизу надструктурних максимумів. Однак варто відмітити, що впорядкування КТ (фазові кореляції) в

напрямку вектора дифракції (напрямку росту) більш сильні, ніж в латеральному (паралельному поверхні) напрямку.

- Запропоновано методику контролю нормальних і латеральних складових деформації шарів в короткоперіодних НГ з точністю до 0.0001, яка полягає у вимірюваннях симетричних та асиметричних КДВ.
- Показано, що при використанні двокристальної схеми дифракції є можливість контролю наявності квантових точок в НГ та їх параметрів за рахунок реєстрації одночасно внеску як когерентного, так і дифузного розсіяння від точок.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- M. Schmidbauer, X-Ray Diffuse Scattering from Self-Organized Mesoscopic Semiconductor Structures// Springer Tracts in Modern Physics Vol. 199 (Springer, Berlin, 2004).
- Даценко Л.И., Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б.Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии // - Киев: Академпериодика, 2002. - 342 с.
- 3. Pietsch U., Holy V., Baumbach T. High-Resolution X-Ray Scattering From Thin Films to Lateral Nanostructures. (New York: Springer: 2nd ed., 2004), 408 p.
- Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновский лучей. М.: ИЛ, 1950. - 572 с.
- 5. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967.- 336 с.
- 6. Пинскер З.Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах.- М.: Наука, 1974.- 368 с.
- Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей.- М.: Изд-во МГУ, 1978.- 277 с.
- 8. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982.- 390 с.
- Колпаков А.В. Динамическая дифракция рентгеновских лучей. М.: Изд-во МГУ, 1989. – 156 с
- Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. - К.: Наукова думка, 1983. - 408 с.
- Рябошапка К.П. Физика рассеяния рентгеновских лучей деформированными кристаллами. - К.: Наукова думка, 1993. - 316 с.
- Kato N. Statistical Dynamical Theory of Crystal Diffraction // Acta Cryst. A.-1980.- Vol. 36, № 5.- P. 763-778
- Haddad Al.M., Becker P.J. On the statistical theory of diffraction application to silicon// Acta Cryst. A. - 1988. - Vol. 44, № 2. - P. 262-270

- Бушуев В.А. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах с учетом углового распределения интенсивности // Кристаллография. - 1989.- Т. 34, № 2. - С. 279-287.
- Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н. Рентгеновское диффузное рассеяние в кристаллах со слоистой неоднородностью // Металлофизика.- 1986.- Т. 8, № 3.- С. 35-45.
- 16. Молодкин В.Б. Динамическая теория рассеяния кристаллами с макроскопически однородно распределенными дефектами произвольного типа: Автореф. дис... д-ра. физ.-мат. наук: 01.04.07/ АН УССР Ин-т Металофизики. - К:, 1984.- 28 с.
- 17. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осиновский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. К.: Наукова думка, 1984.- 198 с.
- Datsenko L.I., Khrupa V.I., Kislovskii E.N. Bormann effect in elastically bent crystals with structural defects // Phys. Stat. Sol. A.- 1981.- Vol. 68, № 2.- P. 399-404
- 19. Tanner B.K. X-ray topography and precision diffractometry of semiconducting materials // J. Electrochem. Soc. 1989.- Vol. 136, № 11.- P. 3438-3449.
- Lal K., Goswami S.N., Wurfl J. Effect of metallization on crystalline perfection and level of stress in semi-insulating and n-type gallium arsenide single crystal wafers // J.Appl. Phys. - 1990. - Vol. 67, № 9.- P. 4105-4113.
- 21. Немошкаленко В.В., Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Кисловский Е.Н., Кривицкий В.П., Лень Е.Г., Первак Е.В., Айс Дж.Е., Ларсон Б.К. Динамическая интерпретация полной кривой отражения в случае рентгеновской дифракции по Брэггу монокристаллами с микродефектами: Препр./ НАН Украины. Ин-т металлофизики; 2.1998. - К.: 1998. - 41 с.
- Fujimoto I. Structural aspects of non-stoichiometry and heavy doping of GaAs // Materials Science and Engineering. - 1992. - Vol. B14. - P. 426-438.

- Bak-Misiuk J., Paszkowicz W., Domagala J. Determination of Ga_{1-x}Al_xAs epitaxial layer composition by X-ray intensity measurements of quasi-forbidden reflections // J. Cryst. Crowth. 1993.- Vol. 126. P. 168-173.
- 24. Кладько В.П. Вплив типу власних точкових дефектів на інтенсивність дифрагованих рентгенівських променів для квазізаборонених рефлексів //УФЖ. - 1994. - Т. 39, № 3. - С. 330-333.
- 25. Даценко Л.И., Кладько В.П., Мельник В.М., Мачулин В.Ф. Особенности толщинных осцилляций интенсивности при рассеянии рентгеновских лучей вблизи К-края поглощения галлия для квазизапрещенных отражений // Металлофизика и новейшие технологии. - 1999. - Т.21, №8. - С.46-54.
- 26. Кладько В.П., Даценко Л.І., Мачулін В.Ф. Вплив дефектів структури GaAs на характер Лауе-дифракції рентгенівських променів з довжинами хвиль, близькими до К-країв поглинання атомів підграток // УФЖ. 1999. Т.44, № 9. С. 1148-1156.
- 27. Dawson B., Willis B.T.M. Anharmonic vibration and forbidden reflactions in silicon and germanium// Pros. Roy. Soc. A.- 1966.- Vol. 298.- P. 307-315.
- Pietsch U., Mahlberg J., Unger K. Investigation of Dynamical Bound Charge Transfer in GaAs by Changing X-Ray Reflection Power under High Electric Field // Phys. Stat. Solidy (b).- 1985.- Vol. 131.- P. 67-73.
- Tanner B.R. and Bowen D.K. Characterization of Crystal Growth Defects by X-Ray Methods. // Plenium Press, New York, 1980. – 616 p.
- Holy V., Pietch U., Baumbach T. High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers. // Berlin: Springer, 1998. – 212 c.
- 31. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Шпак А.В., Мачулин В.Ф., Кладько В.П., Прокопенко И.В., Кютт Р.Н., Кисловский Е.Н., Олиховский С.И., Фодчук И.М., Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов. – Київ: Академперіодика, 2005. – 388 с.
- 32. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. //- М.: Мир, 1989. 438 с.,
- Holy V., Kubena J., Ploog K. X-Ray Analysis of Structural Defects in a Semiconductor Superlattice// Phys.Stat.Sol.(b). – 1990. – Vol.162, N2. – P. 347-361.

- Speriosu V.S., Vreelang T. X-ray rocking curve analysis of superlattice // J. Appl. Phys. – 1984. – Vol. 56, N6. – P.1591-1600.
- 35. Herzog H.-J. // Sol. Stat. Phenomena. 1993. Vol. 32-33. P. 523.
- 36. Кладько В.П., Даценко Л.И., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б. Поведение сателлитных дифракционных максимумов коротко-периодных сверхрешеток GaAs-AlAs с различной степенью кристаллического совершенства слоев // Металлофизика и новейшие технологии. – 2003. - Vol. 25, №5. – С.597-615.
- 37. Tapfer I., Ploog K. X-ray interference in ultrathin epitaxial layers: A versatile method for the structural analysis of single quantum wells and heterointerfaces // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 40, N14. P.9802-9810.
- Mukai K., Nakata Y., Otsubo K., Sugawara M., Yokoyama N., Ishikawa H., 1.3-μm CW lasing characteristics of self-assembled InGaAs-GaAs quantum dots // IEEE J. Quantum Electron. – 2000. – Vol. 36. – P. 472 - 478.
- Li H., Zhuang Q., Wang Z., Daniels-Race T. Influence of indium composition on the surface morphology of self-organized InxGa1–xAs quantum dots on GaAs substrates// Appl. Phys. – 2000. – Vol.87. – P. 188-191.
- Brussaferi L., Sanguinatti S., Grilli E. Thermally activated carrier transfer and luminescence line shape in self-organized InAs quantum dots //Appl.Phys.Lett. – 1996. – Vol.69. №22– P. 3354-3356.
- 41. Chu L., Zrenner A., Bohm G., Abstraiter G. Lateral intersubband photocurrent spectroscopy on InAs/GaAs quantum dots// Appl. Phys. Lett. 2000. Vol. 76. 14 P. 1944-1946.
- Пунегов В.И. Погашение сателлитных максимумов сверхрешетки с периодически распределенными дефектами// ФТТ. – 1995. - Т. 37, №4. – С. 1134-1148.
- 43. Нестерец Я.И., Пунегов В.И., Павлов К.М., Фалеев Н.Н. Исследование структурных характеристик полупроводниковой сверхрешетки (InGa)As/ GaAs с использованием высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии// Журнал технической физики. - 1999. – Т.69, №2. - С. 44-53.

- 44. D V Korbutyak1, V P Klad'ko1, S G Krylyuk1, V G Litovchenko1, A V Shalimov2 and A V Kuchuk2, Influence of layer deformation on thermal quenching of exciton photoluminescence in short-period GaAs/AlAs superlattices//Semicond. Sci. Technol., 19: 475-479 (2004).
- 45. T. Mano, R. Nötzel, G. J. Hamhuis, T. J. Eijkemans, and J. H. Wolter, Direct imaging of self-organized anisotropic strain engineering for improved onedimensional ordering of (In,Ga)As quantum dot arrays //J. Appl. Phys., 95, No. 1: 109-114 (2004).
- 46. Holy V., J. Stangl, G. Springholz, M. Pinczolits, G. Bauer, I. Kegel, T.H. Metzger, Lateral and vertical ordering of self-assembled PbSe quantum dots studied by highresolution x-ray diffraction// *Physica B*, 283: 65 (2000).
- 47. I. Kegel, T. H. Metzger, A. Lorke, J. Peisl, J. Stangl, G. Bauer, J. M. García, and P. M. Petroff, Nanometer-Scale Resolution of Strain and Interdiffusion in Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots// *Phys. Rev. Lett.*, 85, No. 8: 1694-1697 (2000).
- 48. Zhuang Q.D., Li J.M., Zeng Y.P., Pan L., Li H.X., Kong M.Y., Lin L.Y. Structural characterization of InGaAs/GaAs quantum dots superlattice infrared photodetector structures// J.Cryst.Growth. 1999. Vol. 200. №3– P. 375-381.
- Dong Pan, Y. P. Zeng, J. Wu, H. M. Wang, C. H. Chang, J. M. Li, and M. Y. Kong, Self-formed InGaAs/GaAs quantum dot superlattice and direct observation on strain distribution in the capped superlattice// *Appl. Phys. Lett.*, 70, No. 18: 2440-2442 (1997).
- A. Krost, J. Biasing, F. Heinrichsdorf, and D. Bimberg, In enrichment in (In,Ga)As/GaAs quantum dots studied by high-resolution x-ray diffraction and pole figure analysis *Appl. Phys. Lett.*, 75, No. 19: 2957-2959 (1999).
- Nesterets Y.I., Punegov V.I. The statistical kinematical theory of X-ray diffraction as applied to reciprocal-space mapping// Acta Cryst.(A). – 2000. – Vol. A56. – P. 540-548.

- Pavlov K.M., Punegov V.I. Statistical dynamical theory of X-ray diffraction in the Bragg case: application to triple-crystal diffractometry// Acta Cryst.(A). – 2000. – Vol. A56. – P. 227-234.
- Haase M., Prost W., Velling P., Liu Q., Tegude F.J. HR XRD for the analysis of ultrathin centrosymmetric strained DB-RTD heterostructures// Thin Solid Films. – 1998. – Vol. 319, N 1-2. – P. 25-28.
- Hu S.M. Stress from a parallelepipedic thermal inclusion in a semispace// J.Appl. Phys. - 1989. - Vol.66. - P. 2741-2748.
- 55. Darchuber A.A., Koppensteiner E., Bauer G., Wang P.D., Song Y.P., Sotomayor Torres C.M., Holland M.C. Structural investigations of GaAs/AlAs quantum wires and quantum dots by X-ray reciprocal space mapping// J. Phys. D.: Appl.Phys. -1995. – Vol. 28, No 4. – P.195-199.
- Fewster, P.F., and Andrew, N.L., Determining the lattice relaxation in semiconductor layer systems by x-ray diffraction //(1993), J. Appl. Phys. 74. 3121-3125
- Fewster, P.F., and Andrew, N.L., Applications of multiple-crystal diffractometry//, J. Phys. D-(1995)- Vol. 28. A97
- Fewster, P.F., and Andrew, N.X., Absolute Lattice-Parameter Measurement//, J. Appl. Cryst(1995)-, Vol. 28. p. 451-458.
- L. G. Parrat. Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays//Phys. Rev. -(1954)- Vol. 95, №2, p.359-369.
- 60. W. J. Bartels, W. Nijman, X-ray double-crystal diffractometry of Ga1–xAlxAs epitaxial layers// J. Cryst. Growth (1978)- Vol.44, №5 p.518-525.
- 61. W. J. Bartels, J. Hornstra, D. J. W. Lobeek, X-ray diffraction of multilayers and superlattices //(1986) Acta Crystallogr. Sect. A 42, 539-545.
- M. A. G. Halliwell, M. H. Lyons, M. J. Hill, The interpretation of X-ray rocking curves from III–V semiconductor device structures // J. Cryst. Growth (1984) Vol. 68, №2, 523-531.

- H. Holloway, X-ray interferometry and its application to determination of layer thickness and strain in quantum-well structures// J. Appl. Phys.- (1990)- Vol. 67, 6229-6236.
- 64. Iida A., Kohra K. Separate measurements of dynamical and kinematical X-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer // Phys. Stat. Sol. (a). 1979. V.51. №2– P.533-542.
- 65. Кладько В.П., Домагала Я., Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Даценко Л.И., Маннинен С., Максименко З.В. // Металлофизика и новейшие технологии, 2001, Т.23, №2, С.241-254.
- Neumann H.B., Rutt U., Bouchard R., Schneider J.R., Nagasava H. The resolution function of a triple-crystal diffractometer for high-energy synchrotron radiation in nondispersive Laue geometry// J.Appl.Cryst. - 1994.-V.27. - P.1030-1038.
- Bloch R., Bahr D., Olde J., Brugemann L., Press W. X-ray-diffraction measurements from imperfect GaAs crystals: Evidence for near-surface defects// Phys. Rev. (B). – 1990. – 42, N8. – P.5093-5099.
- Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Кисловский Е.Н., Кривицкий В.П., Лось А.В., Первак Е.Б., Айс Дж.Е., Ларсон Б.К. // Металлофизика и новейшие технологии. – 1997. – Т.19, №12. – С.25-34.
- Molodkin V.B., Nemoshkalenko V.V., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Reshetnyk O.V., Vladimirova T.A., Krivitsky V.P., Machulin V.F., Prokopenko I.V., Ice G.E., Larson B.C. Theoretical and experimental principles of the differential - integral triple-crystal X-ray diffractometry of imperfect single crystals.// Preprint UNSC 3. Kyiv. - 1998. - 22 p.
- Fewster P.F. X-ray analysis of thin films and multilayers // Rep. Prog. Phys. 1996.
 V.59. P.1339–1407.
- 71. Фалеев Н.Н., Мусихин Ю.Г., Суворова А.А., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Устинов В.М., Tabuchi М., Takeda Ү. Исследование анизотропии пространственного распределения квантовых точек In(Ga)As в многослойных гетероструктурах In(Ga)As/GaAs методами рентгеновской дифрактометрии и

просвечивающей электронной микроскопии// Физика и техника полупроводников. – 2001. – Т. 35, вып.8. – С. 969-978.

- Fewster P.F. Characterization of quantum wells by X-ray diffraction//. J.Phys. D.: Appl. Phys. (1993) V.26, A142.
- 73. Guinier A. X-ray Diffraction in Crystal, imperfect Crystal and Amorphous Bodies.W.H.Freeman, San Francisco, 1963.
- J. Kervarec, M. Baudet, J. Caulet, P. Auvray, J. Y. Emery and A. Regreny Some 74. of characterization of aspects the X-ray structural (Ga1xAlxAs)n1(GaAs)n2/GaAs(001) superlattices// (1984)J.Appl.Cryst. V.17. №3, 196-205.
- 75. Fewster P.F. (1986). Philips J.Res,. V.41, 268.
- 76. Fewster P.F. Thin Films Growth Techniques. Plenum Press, New York. -1987
- 77. Eric E. Fullerton, Ivan K. Schuller, H. Vanderstraeten, and Y. Bruynseraede Structural refinement of superlattices from x-ray diffraction// Phys. Rev. (B). (1992)V.45, №16, 9292-9310.
- 78. Fewster P.F. Interface roughness and period variations in MQW structures determined by X-ray diffraction// J.Appl.Cryst., (1988).V.21, №5, 524-529.
- 79. Tapfer I., Ploog K. Improved assessment of structural properties of AlxGa1xAs/GaAs heterostructures and superlattices by double-crystal x-ray diffraction// Phys. Rev. B, (1986). V.33. №8, P.5565-5574.
- Shuller I.K. New Class of Layered Materials //Phys. Rev. Lett. (1980) Vol. 44, №24. 1597-1600.
- В.И.Пунегов. Рентгеновская дифракция на полупроводниковой сверхрешетке с микродефектами// Письма в ЖТФ. (1992) Т.18, №4: 66-70.
- В.И.Пунегов. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на кристаллах с непрерывно изменяющимся по толщине параметром решетки// Кристаллография. (1990), Т.35, №3: 576-583.
- R.N.Kyutt, P.V.Petrashen, L.M.Sorokin. Strain profiles in ion-doped silicon obtained from X-ray rocking curves// Phys. Stat. Sol. (a), (1980) Vol.60, No.2, p.381-389.

- 84. В.А.Бушуев. ФТТ. 31, №11: 70 (1989).
- В.П.Кладько, Л.И.Даценко, В.Ф.Мачулин, В.Б.Молодкин. // Металлофизика и нов. технологии. – 2003. – 25, №4. – С.556-564.
- 86. V.Kladko, L.Datsenko, V.Machulin, J.Domagala, P.Lytvyn, J.Bak-Misiuk, A.Kuchuk, A.Korchovyi. Formation of rocking curves for quasi-forbidden reflections in short-periodic superlattices GaAs/AlGaAs// J.Appl.Cryst. (2004). V.37., №1 P.150-155.
- V.Kladko, L.Datsenko, A.Korchovy, V.Machulin, P.Lytvyn, A.Shalimov, A.Kuchuk, P.Kogutyuk. Investigation of superlattice structure parameters using quasi-forbidden reflections // Semicond. Phys. Quantum & Optoelectr. (2003). 6, No3. P.293-298.
- 88. В.П.Кладько, В.Ф.Мачулин, И.В.Прокопенко, П.М.Литвин, П.П.Когутюк, А.А.Корчевой. Применение квазизапрещненых рентгеновских рефлексов для исследования многослойных периодических структур // Металлофизика и нов. технологии. – 2004. – 26, №2. – С.217-227.
- Ю.Н.Дроздов, С.А.Гусев, Е.Н.Садова, В.М.Данильцев, О.И.Хрыкин,
 В.И.Шашкин. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. (2003). №2. 67.
- 90. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Гудименко О.Й., Корчовий А.А., Стрельчук В.В., Прокопенко І.В. Рентгенодифракционные исследования 2D-3D структурных переходов в наноразмерных многослойных периодических структурах// Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології, (2003), Т.1, вип.2, С.447-457.
- 91. Д.К. Боуэн, Б.К. Танер Високоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография// СПб. Наука, 2002.
- 92. Bocchi, C. & Ferrari, C. A study of thin buried layers in III-V compound heterostructures by high-resolution X-ray diffraction // (1995). J. Phys. D: Appl. Phys., 28, №4A, A164-A168.
- 93. Hart, I., Fewster, P.F., Ashwin, M.J., Fahy, M.R., Newman, R.C. Measurement of interface roughness in a superlattice of delta-barriers of Al in GaAs using high-

resolution X-ray diffractometry // (1995). J. Phys. D: Appl. Phys., 28, №4A, A154-A158.

- 94. Francesio L., Francozi P., Landgren G. A high-resolution X-ray diffraction study in InGaAs/InP superlattices // (1995). J. Phys. D: Appl. Phys., 28, №4A, A169-A171.
- 95. Kyutt, R.N., Shubina, T.V., Sorokin, S.V., Solnyshkov, D.D., Ivanov, S.V., Willander, M. X-ray diffraction determination of the interface structure of CdSe/BeTe superlattices // (2003). J. Phys. D: Appl. Phys., 36, №10 A A166-A171.
- 96. D.K. Bowen & B.K. Tanner High-Resolution X-ray Diffractometry and Topography// Taylor & Francis, -1998
- 97. N. Stranski and L. von Krastanov. Akad. Wiss. Lit. Mainz, Natur. K1. IIb 146, 797 (1939).
- 98. Z.Zhuang, J.Stangl, A.A.Darchuber, G.Bauer, P.Mikulik, V.Holy, N.Darowski, U.Pietsch. J. Mater. Science. 10, 215, (1999).
- 99. J.Tersoff, C.Teichert, M.G.Lagalli. Self-Organization in Growth of Quantum Dot Superlattices// Phys. Rev. Lett. Vol.76. №10, 1675-1678, (1996).
- 100. A.A.Darchuber, P.Schittenhelm, V.Holy, J.Stangl, G.Bauer. High-resolution x-ray diffraction from multilayered self-assembled Ge dots// Phys. Rev. B Vol. 55. №11 15652, (1997).
- 101. M. Hesse, J. Stangl, V. Holy', T. Roch, and G. Bauer, O.G. Schmidt, U. Denker, B. Struth. Effect of overgrowth on shape, composition, and strain of SiGe islands on Si(001)// Phys. Rew. B Vol.66, №8, 085321 (2002).
- 102. V. Shchukin, N. N. Ledentsov, and D. Bimberg, *Epitaxy of Nanostructures, Nanoscience and Technology* Springer, Berlin, 2003d.
- 103. J. R. Levine, J. B. Cohen, Y. W. Chung, and P. Georgopoulos, J. Grazing-incidence small-angle X-ray scattering: new tool for studying thin film growth// Appl. Crystallogr. Vol.22, №6, 528-532 (1989).
- 104. K.Pashke, T.Geue, T.A.Baberka, A.Bolm, U.Pietch, M.Rosch, E.Batke, F.Faller, K.Kerkkel., J. Oshinowo, and A. Forchel Characterization of lateral semiconductor nanostructures by means of x-ray grazing-incidence diffraction// Appl. Phys.Lett. Vol.70, №8, 1031-1033, (1997)

- K. Brunner, J. Zhu, G. Abstreiter, O. Kienzle, and F. Ernst, Step bunching and correlated SiGe nanostructures on Si(113)// Thin Solid Films Vol.369, №1-2, 39-42 (2000).
- 106. M. Schmidbauer, T. Wiebach, H. Raidt, M. Hanke, R. Köhler, and H. Wawra, Ordering of self-assembled Si1-xGex islands studied by grazing incidence smallangle x-ray scattering and atomic force microscopy// Phys. Rev. B Vol.58, №16, 10523-10531 (1998).
- 107. I. Kegel, T. H. Metzger, J. Peisl, P. Schittenhelm, and G. Abstreiter, Lateral ordering of coherent Ge islands on Si(001) studied by triple-crystal grazing incidence diffraction// Appl. Phys. Lett. Vol.74, №20, 2978-2980 (1999).
- 108. Q.Xie, A.Madhukar, P.Chen, N.P.Kobayashi. Vertically Self-Organized InAs Quantum Box Islands on GaAs(100)// Phys. Rev. Lett. Vol.75. №13, 2542-2545, (1995).
- 109. N.Darowski, U.Pietch, Y.Zhuang, S.Zerlaut, G.Bauer, D.Lubbert, T.Baumbach, Inplane strain and strain relaxation in laterally patterned periodic arrays of Si/SiGe quantum wires and dot arrays// Appl. Phys.Lett. Vol.73, №6, 806-808, (1998).
- 110. V.Holy, A.A.Darchuber, J.Stangl, S.Zerlauth, F.Shaffler, G.Bauer, N.Darowski,
 D.Lubbert, U.Pietsch, I.Varva. Coplanar and grazing incidence x-ray-diffraction investigation of self-organized SiGe quantum dot multilayers// Phys. Rev. B Vol.58.
 №12 7934-7943, (1998).
- 111. V.P.Kladko, L.I.Datsenko, A.V.Kuchuk, A.V.Shalimov, J.Domagala, A.A.Korchovy. Investigation of GaAs/AlAs short-periodic superlattices by highresolution x-ray diffractometry// Ukr.Phys.Journ. 49, No 1, 345, (2004).
- 112. V.B. Molodkin, S.I.Olikhovski, M.E.Osinovski, Phys. Metals, 5, 1 (1984).
- 113. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Молодкін В.Б., А.А.Корчевой, Первак Е.В., Ефанов А.Н., Скакунова Е.С., Когутюк П.П.. Влияние упорядочения квантовых точек в многослойных периодических структурах на характер брэгговской дифракции// Металлофизика и новейшие технологии. 26, №10. 1255 (2004).

- 114. Фалеев Н.Н., Павлов К.М., Пунегов В.И., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Михрин С.С., Устинов В.М., Tabuchi М., Takeda Y. Рентгенодифракционные исследования многослойных гетероструктур InAs-GaAs с квантовыми точками // Физика и техника полупроводников. 1999. Т.33. Вып. 11., С.1359-1368
- 115. K.C.Hsieh, J.N.Baillargeon, K.J.Cheng. Compositional modulation and long-range ordering in GaP/InP short-period superlattices grown by gas source molecular beam epitaxy// Appl. Phys. Lett. Vol.57, №21, 2244-2246, (1990).
- 116. A.C.Chen, A.M.Moy, L.J.Chou, K.C.Hsieh, K.J.Chen. Effect of substrate misorientation on the growth of GaxIn1 – xP lateral quantum wells// Appl. Phys. Lett. Vol.66, №20, 2694-2696, (1995).
- 117. S.T.Chou, K.J.Chen, L.J.Chou, K.C.Hsieh. GaxIn1-xAs quantum wire heterostructures formed by strain-induced lateral-layer ordering// J.Appl. Phys. Vol.78, №10, 6270-6275, (1995).
- A. G. Norman, S. P. Ahrenkiel, H. Moutinho, M. M. Al-Jassim, A. Mascarenhas, J. Mirecki Millunchick, S. R. Lee, R. D. Twesten, D. M. Follstaedt, J. L. Reno, and E. D. Jones Strain-dependent morphology of spontaneous lateral composition modulations in (AlAs)m(InAs)n short-period superlattices grown by molecular beam epitaxy// Appl. Phys. Lett. Vol.73, №13, 1844-1846, (1998).
- D.W.Stokes, R.L.Forrest, J.H.Li, S.C.Moss, B.Z.Nosho, B.R.Bennett, L.J.Whitman, M.Goldenberg. Lateral composition modulation in InAs/GaSb superlattices // J. Appl. Phys. Vol.93, №1, 311-315 (2003).
- 120. B. A. Joyce, J. L. Sudijono, J. L. Belk, H. Yamaguchi, X. M. Zhang, H. T. Dobbs, A. Zangwill, D. D. Vvedensky, and T. S. Jones. A Scanning Tunneling Microscopy-Reflection High Energy Electron Diffraction-Rate Equation Study of the Molecular Beam Epitaxial Growth of InAs on GaAs(001), (110) and (111)A--Quantum Dots and Two-Dimensional Modes// Jpn. J. Appl. Phys. Vol.36, №6B, 4111-4117 (1997).

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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