

01;06

К расчету дифракции рентгеновских лучей от многослойных латеральных кристаллических структур произвольных композиционного состава и формы

© В.И. Пунегов, А.И. Максимов, С.И. Колосов, К.М. Павлов

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар, Россия
Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар, Россия
Centre for Synchrotron Science, School of Physics, Monash
University, Melbourne, Victoria 3800, Australia
E-mail: punegov@syktsu.ru

Поступило в Редакцию 4 августа 2006 г.

В кинематическом приближении разработана теория дифракция рентгеновских лучей от латеральных кристаллов произвольной формы и произвольного химического (композиционного) состава в вертикальном направлении. Проведено численное моделирование рентгеновской дифракции от таких структур применительно к трехосевой рентгеновской дифрактометрии.

PACS: 61.10.Dp, 68.65.La

1. Введение. Многослойные кристаллические структуры в планарном исполнении, включая селективные квантовые ямы и короткопериодные сверхрешетки, нашли широкое применение в современной нано- и оптоэлектронике. В последние годы все большее внимание ученых привлекают латеральные низкоразмерные наноструктуры, такие как квантовые нити и точки [1,2], а также создаваемые методом жидкофазной эпитаксии химически неоднородные островковые системы [2]. Экспериментальные рентгенодифракционные исследования этих объектов сопровождаются теоретическим анализом, основанным на численных расчетах. Как правило, эти расчеты ограничены либо случаем простых латерально-симметричных структур трапецеидального сечения [1], либо используют трудоемкий метод конечных элементов [2]. Однако возможны случаи, когда сечение многослойных латеральных объектов имеет сложную форму и не является строго симметричным. Поэтому цель настоящей работы состоит в разработке эффективного метода расчета

рентгеновской дифракции от многослойных латеральных кристаллов произвольной формы и произвольного химического состава по глубине структуры.

Основные уравнения. В кинематическом (борновском) приближении амплитуда дифракционной волны от кристалла ограниченных латеральных размеров и толщиной l может быть записана в виде [3]

$$E_h(q_x, q_z) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_0^l dz e^{(iq_z - \mu)z} \int_{\Omega_L(z)}^{\Omega_R(z)} dx a_h(x, z) e^{iq_x x} \Phi(x, z), \quad (1)$$

где коэффициент $a_h(x, z)$ характеризует отражательную способность кристалла, μ — коэффициент поглощения. Вектор \mathbf{q} определяет отклонение вектора рассеяния $\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ от узла обратной решетки \mathbf{h} , где $|\mathbf{h}| = 2\pi/d_{hkl}$, d_{hkl} — межплоскостное расстояние, $\mathbf{k}_{0,h}$ — волновые векторы падающего и дифракционного рентгеновского пучка. Под интегралом в (1) присутствует двумерный фазовый фактор $\Phi(x, z) = \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}(x, z))$, зависящий от вида деформации кристаллической решетки в латеральном вдоль x и вертикальном вдоль z направлении. Пределы интегрирования $\Omega_L(z)$ и $\Omega_R(z)$ задаются формой латеральных границ исследуемого кристалла. Строго говоря, соотношение (1) может служить исходной формулой численного интегрирования при вычислении углового распределения интенсивности рассеяния от кристаллов произвольной формы и композиционного химического состава. Однако этот подход эквивалентен в какой-то мере трудоемкому методу конечных элементов и требует значительных временных затрат при расчетах больших массивов, например карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Кроме того, такая процедура неизбежно ведет к накоплению ошибок в процессе численного интегрирования.

Данная проблема существенно упрощается, если латеральный кристалл можно представить в виде слоистой структуры [4]. В пределах каждого слоя химический состав (отражательная способность кристалла), латеральная и вертикальная деформация решетки остаются постоянными величинами, а сечения этого слоя в общем случае имеют форму трапеции, которая при определенных условиях трансформируется в прямоугольник или параллелограмм. Другими словами, мы выбираем сечение кристалла, левая и правая границы которого представляют собой кусочно-непрерывные линейные функции от координаты z .

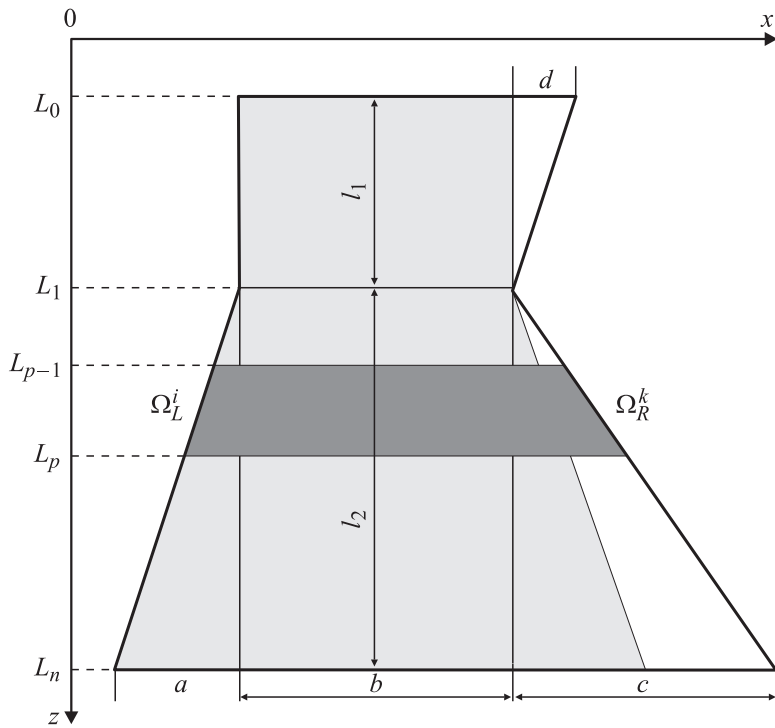


Рис. 1. Модель многослойной латеральной структуры с произвольной формой сечения.

Кристалл разбивается на отдельные трапеции путем проведения горизонтальных прямых $z = L_0, z = L_1, \dots, z = L_n$ через каждую точку излома кусочно-непрерывных функций $\Omega_L(z)$ и $\Omega_R(z)$, где n — количество полученных трапеций (рис. 1). Таким образом, интеграл по z в формуле (1) разбивается на сумму интегралов

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

Поскольку область интегрирования в каждом слагаемом с номером p представляет собой трапецию, то кусочно-непрерывные функции $\Omega_L(z)$ и $\Omega_R(z)$ можно заменить соответствующими линейными функциями $\Omega_L^{(j,p)}(z) = K_L^{(j,p)}z + B_L^{(j,p)}$ и $\Omega_R^{(k,p)}(z) = K_R^{(k,p)}z + B_R^{(k,p)}$, которые описывают боковые стороны каждой трапеции с номером p . Коэффициенты $K_L^{(j,p)}$, $B_L^{(j,p)}$, $K_R^{(k,p)}$, $B_R^{(k,p)}$ определяются из координат точек излома кусочно-непрерывных функций. В выражении (2) $q_z^{(p)} = q_z + i\mu^{(p)} + h_z\varepsilon_z^{(p)}$, $q_x^{(p)} = q_x + h_x\varepsilon_x^{(p)}$, где $\varepsilon_{x,z}^{(p)}$ — деформации решетки слоя с номером p в латеральном и вертикальном направлении и $h_{x,z}$ — соответствующие проекции вектора обратной решетки. Проводя интегрирование по координате x в (2) и вводя обозначения $q_L^{(p)} = q_x^{(p)}K_L^{(j,p)} + q_z^{(p)}$, $q_R^{(p)} = q_x^{(p)}K_R^{(k,p)} + q_z^{(p)}$, получаем

$$E_h(q_x, q_z) = \sum_{p=1}^n e^{i\psi_p} E_h^{(p)}(q_x, q_z), \quad (3)$$

где $\psi_p = q_z^{(p)}(L_p + L_{p-1})/2 + q_x^{(p)}[B_L^{(j,p)} + K_L^{(j,p)}(L_p + L_{p-1})/2]$ — фазовый множитель, зависящий от глубины залегания слоя с номером p и его формы сечения в плоскости дифракции. Амплитуда отражения от этого слоя представима в виде

$$E_h^{(p)}(q_x, q_z) = \frac{a_h^{(p)}l_p}{\sqrt{2\pi}q_x^{(p)}} \left(\exp(i\varphi_p) \sin c(q_R^{(p)}l_p/2) - \sin c(q_L^{(p)}l_p/2) \right). \quad (4)$$

Здесь $\varphi_p = q_x^{(p)}[(B_R^{(k,p)} - B_L^{(j,p)}) + (K_R^{(k,p)} - K_L^{(j,p)})(L_{p-1} + L_p)/2]$ и $\sin c(x) = \sin(x)/x$.

Итак, через простое решение (4) для элементарного латерального слоя нами получено выражение (3) для вычисления амплитудного коэффициента отражения от многослойных латеральных кристаллов произвольной формы и произвольного химического состава в вертикальном направлении.

Численное моделирование. Численные расчеты карт распределения интенсивностей рассеяния вблизи узла обратной решетки от многослойных латеральных структур проведены с использованием формул (3)–(5). В расчетах использованы параметры (004)-отражения σ -поляризованного $\text{CuK}\alpha$ излучения для латеральных кристаллов GaAs/AlGaAs.

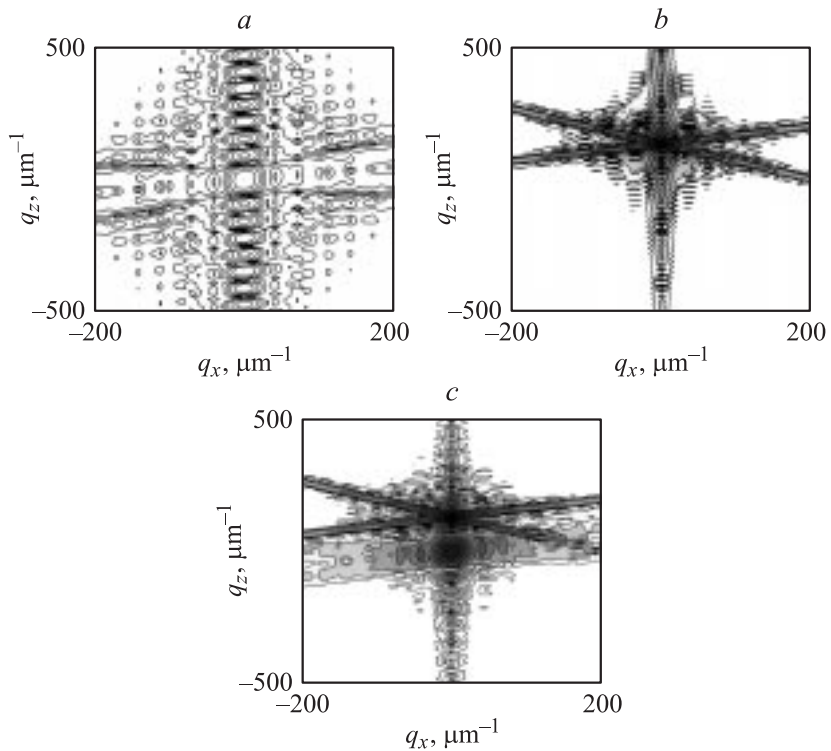


Рис. 2. Карты распределения интенсивности рассеяния от латерального кристалла GaAs/AlGaAs, изображенного на рис. 1 (см. текст).

Для численного моделирования мы приняли модель латерального кристалла, изображенного на рис. 1. Верхняя часть кристалла GaAs, имеет форму сечения прямоугольной трапеции со структурными размерами $l_1 = 100 \text{ nm}$, $b = 200 \text{ nm}$ и $d = 50 \text{ nm}$ (рис. 1). Нижняя часть кристалла AlGaAs с относительной деформацией решетки $\varepsilon_z = 3 \cdot 10^{-3}$ также имеет трапециевидальное сечение. При этом высота трапеции $l_2 = 300 \text{ nm}$, размеры отрезков основания трапеции $a = 100 \text{ nm}$ и $c = 200 \text{ nm}$.

На рис. 2 представлены карты распределения интенсивности рассеяния от верхней (рис. 2, a) и нижней (рис. 2, b) части латерального

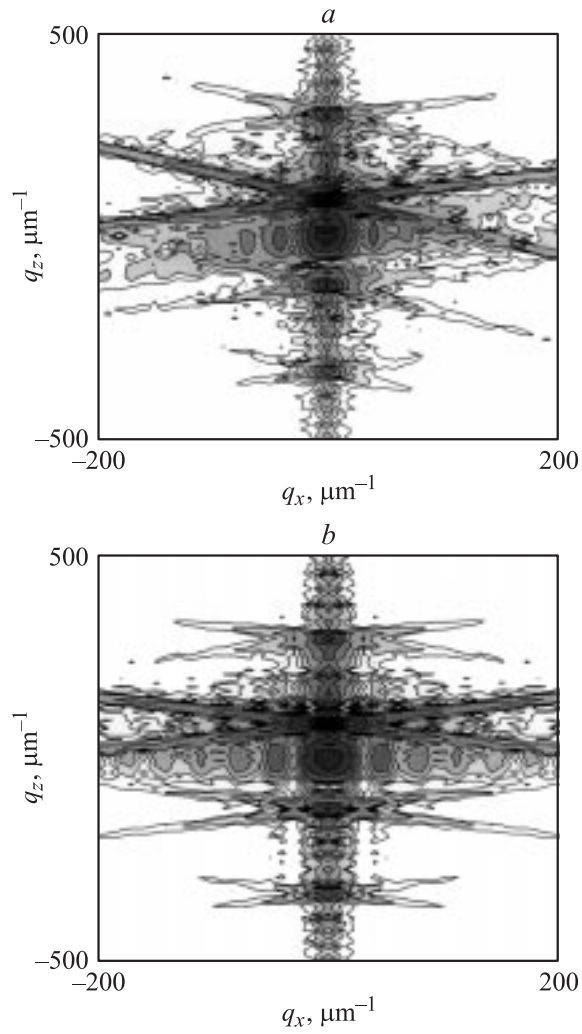


Рис. 3. Карты распределения интенсивности рассеяния от латеральной структуры со сверхрешеткой: *a* — асимметричная форма сечения кристалла (жирная линия на рис. 1), *b* — симметричная форма сечения кристалла (фигура серого цвета на рис. 1).

кристалла по отдельности. Направления дополнительных полос интенсивностей рентгеновского рассеяния зависят от геометрии боковых сторон трапеции [1]. Дифракционное рассеяние от кристалла с единым сечением (бикристалла, состоящего из верхней и нижней частей) демонстрирует рис. 2, *c*). Здесь и на других рисунках контуры равной интенсивности изображены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями составляет 0.316.

На рис. 3 показаны карты распределения интенсивности рассеяния от латеральных структур, нижние части которых представляют собой десятипериодную сверхрешетку GaAs/AlGaAs. Толщина слоя арсенида галлия в периоде сверхрешетки $t_{\text{GaAs}} = 10 \text{ nm}$. Толщина соседнего слоя AlGaAs $t_{\text{AlGaAs}} = 20 \text{ nm}$. Модуляция композиционного состава нижней части латерального кристалла является причиной появления дополнительных полос интенсивностей, расстояние между которыми обратно пропорционально величине периода сверхрешетки $t_{\text{GaAs}} + t_{\text{AlGaAs}}$ [1]. Если сечение латерального кристалла имеет асимметричную форму относительно вертикальной оси, то и дифракционная картина распределения интенсивности рассеяния имеет асимметричный вид (рис. 3, *a*). В случае симметричной формы сечения латерального кристалла (фигура серого цвета на рис. 1, $a = c = 100 \text{ nm}$, $d = 0$) мы получаем симметричный вид контуров равной интенсивности дифракционного рассеяния (рис. 3, *b*).

Таким образом, предложенный метод расчета дифракции рентгеновских лучей от многослойных латеральных структур отличается быстротой и легкостью вычислений, поскольку не содержит процедур интегрирования. В среднем вычисление одной карты распределения интенсивности рассеяния с массивом 100×100 на современном персональном компьютере занимает несколько секунд. Следовательно, данный метод может быть эффективно использован для анализа экспериментальных результатов рентгеновской дифракции от латеральных структур [1,2].

Работа выполнена при финансовой поддержке целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы“ (проект РНП.2.1.1.3425), РФФИ (07-02-00090) и Australian Research Council's Discovery funding scheme (projects No DP0556840, DP0556492).

Список литературы

- [1] *Pietsch U., Holy V., Baumbach T.* High Resolution X-ray Scattering — from Thin Films to Lateral Nanostructures. New York: Springer-Verlag, 2004. 408 p.
- [2] *Schmidbauer M.* X-Ray Diffuse Scattering from Self-Organized Mesoscopic Semiconductor Structures. Berlin: Springer-Verlag, 2004. 202 p.
- [3] *Nesterets Ya.I., Punegov V.I.* // Acta Cryst. A. 2000. V. A56. N 6. P. 540–548.
- [4] *Kirste L., Pavlov K.M., Mudie S.T., Punegov V.I., Herres N.* // J. Appl. Cryst. 2005. V. 38. P. 183–192.