

УДК 548.732

© 1992

ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА СВЕРХРЕШЕТКАХ В УСЛОВИЯХ СКОЛЬЗЯЩЕГО ПАДЕНИЯ

О. Г. Меликян, Р. М. Имамов, Д. В. Новиков

Построена динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетках в условиях скользящего падения и проведено сравнение расчетов с результатами экспериментальных измерений на примере CP GaAs—AlAs .

Изучение сложных многослойных структур и сверхрешеток (СР) представляет значительный интерес для физики твердого тела и оказывает большое влияние на современную технологию электронных приборов. СР имеют большое практическое применение и широко используются в настоящее время в различных областях техники. В частности, СР на основе полупроводников служат основой при создании твердотельных лазеров и современных элементов микроэлектронной техники. С точки зрения структуры такие СР отличаются весьма высоким совершенством кристаллической решетки составляющих сверхрешетку материалов.

Рентгенодифракционные методы традиционно используются для определения параметров СР различных типов, однако их возможности к настоящему времени далеко не исчерпаны. Исследованию рентгеновской дифракции на периодических гетероструктурах посвящено большое количество экспериментальных и теоретических работ (см. [1, 2] и ссылки в них), однако все эти исследования выполнены для стандартной (плоской) геометрии, когда эффекты зеркального отражения пренебрежимо малы.

Недавно были проведены экспериментальные исследования СР методом рентгеновской дифракции в условиях скользящего падения (РДСП), и была продемонстрирована высокая эффективность использования такой схемы [3, 4].

Дифракция в скользящей геометрии уже доказала свою эффективность при исследовании приповерхностных слоев совершенных кристаллов. В частности, ее применение открывает широкие возможности исследования структуры сверхрешеток по глубине. При этом дифракционные плоскости оказываются почти перпендикулярны к поверхности, что дает возможность исследовать напряжения, вызываемые несоответствиями в периодах решетки между слоями. Еще одно преимущество схемы РДСП связано с тем, что все фоновые компоненты рассеяния сосредоточены в окрестности основного брэгговского максимума [5]. Это позволяет наблюдать в чистом виде структурно-чувствительную (динамическую) компоненту дифракции на склонах кривой дифракционного отражения.

В связи с вышесказанным возникает необходимость построения теории дифракции на сверхрешетках при скользящем падении.

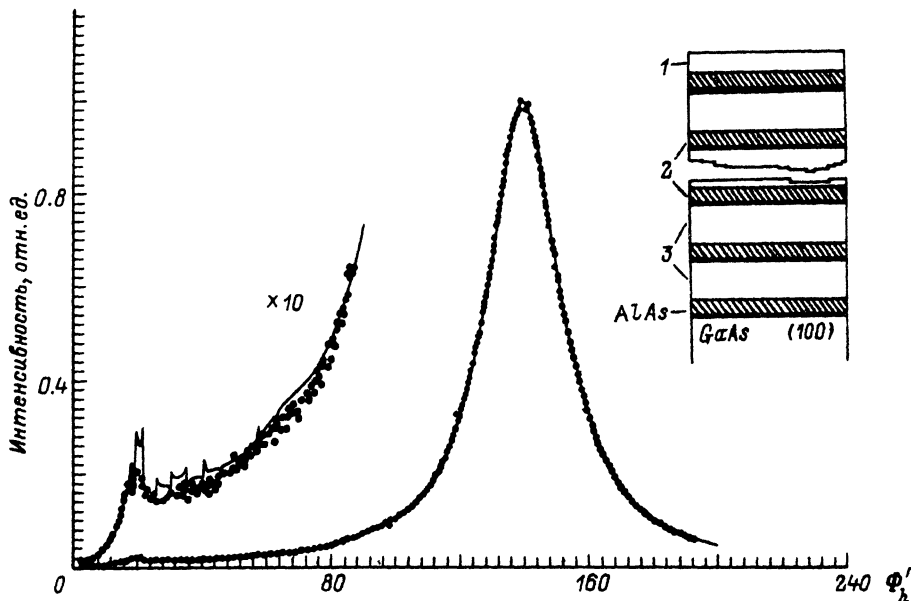


Рис. 1. Кривая дифракционного отражения в скользящей геометрии от СР GaAs—AlAs, (220)-отражение, $\text{CuK}\alpha$ -излучение. $\Phi_0 = 12^\circ$.

Сплошная линия — теория, точки — эксперимент. На вставке — схема строения сверхрешетки. 1 — 20, 2 — 12, 3 — 32 нм.

1. Динамическая теория дифракции в скользящей геометрии на сверхрешетках

В общем случае СР состоит из N_s одинаковых слоев (периодов), находящихся на идеальной подложке. В идеальной СР все параметры периодически изменяются при переходе от одного периода к другому.

Простейший вариант сверхрешетки можно осуществить, если составить ее из чередующихся пар слоев с постоянными значениями параметров в каждом слое (рис. 1). Такая модель соответствует хорошо известной из теории твердого тела модели Кронига—Пенни [6].

Волновые поля в кристалле удовлетворяют динамическим уравнениям дифракции [7, 8]

$$[\Delta + \kappa_0^2 \{1 + \kappa_0(r)\}] D_b(r) = \kappa_b(r) D_0(r),$$

$$[\Delta + \kappa_0^2 \{1 + \kappa_0(r)\}] D_0(r) = \kappa_{\bar{b}}(r) D_b(r), \quad (1)$$

где $\kappa_0, \kappa_b, \kappa_{\bar{b}}$ — Фурье-компоненты поляризуемости; $\kappa_0 = 2\pi/\lambda$ — волновой вектор (частота) падающего излучения; λ — длина волны; $\Delta = \partial^2/\partial z^2 + \partial^2/\partial \rho^2$ — трехмерный оператор Лапласа; ρ — двумерный радиус-вектор, лежащий в плоскости поверхности; z — координата вдоль нормали к поверхности.

Пусть $\chi_{01}, \chi_{b1}, \chi_{\bar{b}1}, \psi_1$ — параметры, характеризующие первый слой периодической структуры, а $\chi_{02}, \chi_{b2}, \chi_{\bar{b}2}, \psi_2$ — параметры второго слоя. Здесь параметр $\psi_{1,2}$ обозначает эффективный угол разориентации

$$\psi_{1,2} = 2\varphi_{1,2} \sin \theta_{B1,2}, \quad (2)$$

где φ , θ_B — угол разориентации и угол Брэгга дифракционных плоскостей.

Идеальная кристаллическая подложка характеризуется параметрами $\chi_{оп}$, $\chi_{лп}$, $\chi_{гп}$, ψ_p . Толщины первого и второго слоя соответственно t_1 и t_2 . Период сверхрешетки $T = t_1 + t_2$.

Решения уравнений дифракции (1) ищутся в виде

$$D_0(r) = D_0(z) \exp [ik_0 \rho], \quad k_h = k_0 + h,$$

$$D_h(r) = D_h(z) \exp [ik_h \rho + i \int_0^z \psi(z) dz]. \quad (3)$$

Тогда для функций $D_0(z)$ и $D_h(z)$ получается система уравнений с периодическими коэффициентами. Для решения этих уравнений можно использовать формализм блоховских волн, т. е. искать решения на классе функций, которые на периоде СР меняются на постоянный множитель.

$$D_a(z + T) = \exp(i\omega T) D_a(z), \quad a = \{0, h\}, \quad (4)$$

где ω — неизвестный, в общем случае комплексный параметр.

Поля $D_a(z)$ в каждом слое представляют собой суперпозицию четырех волн

$$D_{a\beta}(z) = \sum_{i=1}^4 D_{a\beta}^{(i)} \exp(i\kappa_0 u_\beta^{(i)} z), \quad \beta = 1, 2. \quad (5)$$

Здесь индекс β нумерует слой, к которому относится данное поле, а $u_\beta^{(i)}$ ($i = 1, \dots, 4$) представляют собой корни дисперсионного уравнения

$$(u_\beta^2 - \Phi_0^2 - \chi_{0\beta}) [(u_\beta + \varphi_\beta)^2 - \Phi_h^2 - \chi_{0\beta}] = \chi_{h\beta} \chi_{г\beta}, \quad (6)$$

где Φ_0 , Φ_h — соответственно углы скольжения падающего и дифрагированного излучения с поверхностью.

Амплитуды волновых полей $D_{a\beta}^{(i)}$, входящие в (5), являются неизвестными функциями и определяются из граничных условий и условия псевдопериодичности (4).

Граничные условия на поверхности, разделяющей первый и второй слои, имеют вид линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=1}^4 D_{a1}^{(i)} \exp(i\kappa_0 u_1^{(i)} t_1) = \sum_{i=1}^4 D_{a2}^{(i)}, \quad a = \{0, h\},$$

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^4 (u_1^{(i)} + \delta_{a,h} \psi_1) D_{a1}^{(i)} \exp(i\kappa_0 u_1^{(i)} t_1) = \\ & = \sum_{i=1}^4 (u_2^{(i)} + \delta_{a,h} \psi_2) D_{a2}^{(i)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Учитывая вытекающую из динамических уравнений дифракции связь между полями

$$D_{\beta\beta}^{(j)} = \frac{1}{\chi_{\beta}} \left[u_{\beta}^{(j)2} - \Phi_0^2 - \chi_{0\beta} \right] D_{0\beta}^{(j)}, \quad (8)$$

можно исключить из (7) поле D_{β} и переписать уравнения (7) в виде

$$\sum_{j=1}^4 (A_1 \varepsilon_1)_{ij} D_{01}^{(j)} = \sum_j (A_2)_{ij} D_{02}^{(j)} \quad (9)$$

или в символическом виде

$$A_1 \varepsilon_1 D_{01} = A_2 D_{02}, \quad (10)$$

где матрица a_{β} ($\beta = 1, 2$) имеет вид

$$\begin{aligned} (A_{\beta})_{1j} &= 1, \quad (A_{\beta})_{2j} = u_{\beta}^{(j)}, \\ (A_{\beta})_{3j} &= \frac{1}{\chi_{\beta}} \left(u_{\beta}^{(j)2} - \Phi_0^2 - \chi_{0\beta} \right), \quad (A_{\beta})_{4j} = u_{\beta}^{(j)} (A_{\beta})_{3j}, \end{aligned} \quad (11)$$

а диагональная матрица ε_{β} имеет следующие отличные от нуля элементы:

$$(\varepsilon_{\beta})_{jj} = \exp [i \chi_0 u_{\beta}^{(j)} t_{\beta}], \quad \beta = 1, 2. \quad (12)$$

Аналогично записываются граничные условия на поверхности, разделяющей второй и третий слои

$$A_2 \varepsilon_2 D_{02} = A_1 D_{03}. \quad (13)$$

Комбинируя (10) и (13) и учитывая условие (4), которое в векторном виде записывается как $D_{03} = \exp(i\omega T) D_{01}$, легко получить следующее уравнение для собственных функций:

$$\left[A_1^{-1} A_2 \varepsilon_2 A_2^{-1} A_1 \varepsilon_1 - e^{i\omega T} \right] D_{01} = 0. \quad (14)$$

Условие разрешимости последней системы

$$\det \left(A_1^{-1} A_2 \varepsilon_2 A_2^{-1} A_1 \varepsilon_1 - e^{i\omega T} \right) = 0 \quad (15)$$

представляет собой уравнение четвертой степени относительно $e^{i\omega T}$. Очевидно, что для идеального кристалла ($\chi_{01} = \chi_{02}$ и т. д.) $\omega^{(i)} = \chi_0 u^{(i)}$.

Данный метод обобщается также на случай, когда каждый период разбивается не на два, а на произвольное количество n слоев. Тогда уравнение (15) следует заменить соотношением

$$\left\{ A_1^{-1} \left(\prod_{j=1}^n (A_j \varepsilon_j A_j^{-1}) A_1 - e^{i\omega T} \right) \right\} D_{01} = 0, \quad (16)$$

где n — количество подслоев, на которые разбивается каждый период. Матрицы ε_j , A_j ($i = 1, \dots, n$) определяются для каждого подслоя согласно (11) и (12). Дисперсионное уравнение (15) следует заменить на соответствующее дисперсионное уравнение, вытекающее из условия совместимости (16). Каждому

из четырех корней ω данного дисперсионного уравнения соответствует поле $D_a^{\omega}(z)$ вида (5), где коэффициенты перед экспонентами есть собственные функции уравнения (16). Поле в СР представляет собой суперпозицию этих четырех решений

$$D_a(z) = \sum_{\omega} C_a D_a^{\omega}(z), \quad a = \{0, h\}. \quad (17)$$

Функции $D_a^{\omega}(z)$ удовлетворяют условию псевдопериодичности

$$D_a^{\omega}(z + T) = \exp(i\omega T) D_a^{\omega}(z), \quad (18)$$

в то время как общее решение (17) не обязано удовлетворять этому условию.

Неизвестные амплитуды окончательно определяются из граничных условий на поверхности кристалла и на поверхности, разделяющей сверхрешетку от подложки ($L = N_s T$ — толщина сверхрешетки, N_s — количество периодов, T — период сверхрешетки)

$$\begin{aligned} D_0(0) &= E_0 + E_s, \quad D_0(L) = D_{0П}^{(1)} + D_{0П}^{(2)}, \\ D_0'(0) &= i\kappa_0(E_0 - E_s), \\ D_0'(L) &= i\kappa_0 \left(u_{П}^{(1)} D_{0П}^{(1)} + u_{П}^{(2)} D_{0П}^{(2)} \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Для поля дифрагированной волны граничные условия имеют вид

$$\begin{aligned} D_h(0) &= E_h, \quad D_h(L) = D_{hП}^{(1)} + D_{hП}^{(2)}, \\ D_h'(0) + i\kappa_0 \psi_1 D_h(0) &= -i\kappa_0 \Phi_h E_h, \\ D_h'(L) + i\kappa_0 \psi_2 D_h(L) &= i\kappa_0 \left[\left(u_{П}^{(1)} + \psi_{П} \right) D_{hП}^{(1)} + \left(u_{П}^{(2)} + \psi \right) D_{hП}^{(2)} \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь $D_{0П}, D_{hП}$, $u_{П}$ — амплитуды полей и корни дисперсионного уравнения для подложки, соответствующие затухающим в глубь кристалла волнам.

2. Сравнение с экспериментом

Теоретические кривые дифракционного отражения от сверхрешеток GaAs—AlAs, вычисленные по приведенной выше схеме, представлены на рис. 1—4. Там же показаны и экспериментальные кривые, измеренные по методике [9].

Исследуемые образцы представляли собой модельные СР на основе GaAs—AlAs и были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs. Подложки имели ориентацию поверхности (100) с разориентацией 3° вдоль направления [112]. Сверхрешетки состояли из 10 пар слоев GaAs 32 нм—AlAs 12 нм, закрытых сверху защитным слоем GaAs толщиной 20 нм (рис. 1). Кривые полного внешнего отражения и двухкристалльные кривые качания подтверждают параметры, заданные условиями роста. Поверхность подложек GaAs была разориентирована от плоскости (100) на 3° , поэтому не составляло труда подобрать подходящие дифракционные плоскости (220), которые имели разориентацию $\varphi = 2^\circ$. Измерения производились на спектрометре ТРС с трубкой БСВ-21-Си мощностью 0.8 кВт (линейный фокус); монохроматор Ge(111), выходная щель

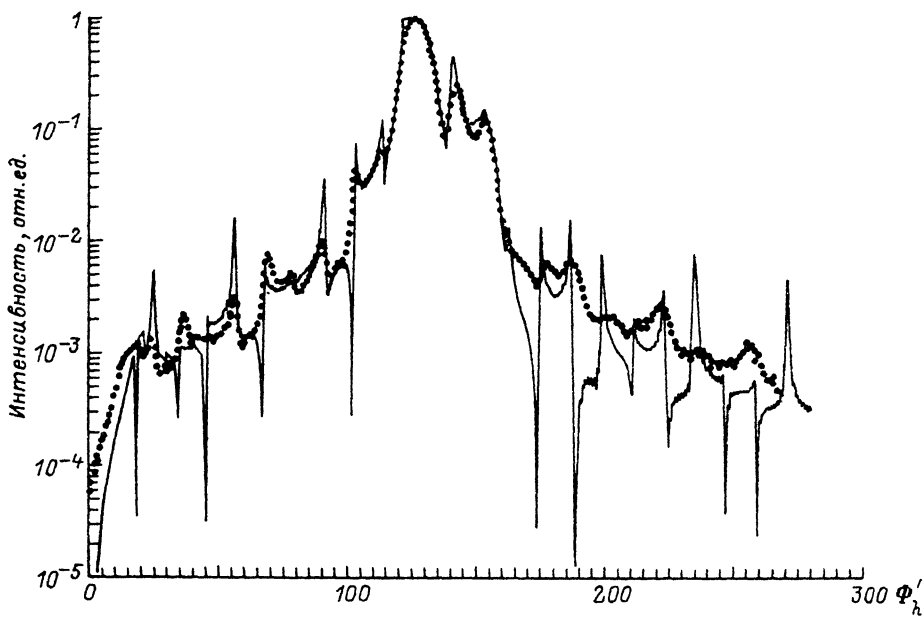


Рис. 2. Кривая дифракционного отражения в СГБЛ при $\Phi_0 = 22'$.

50 мкм. Детектор РКД-1-01 обеспечивал разрешение по углам выхода Φ_h не хуже $3'$.

При малых углах скольжения $\Phi_0 < \Phi_c$ резко уменьшается глубина проникновения электромагнитного поля в кристалл ($L_{ex} \sim 10$ нм) и СР ведет себя как монокристалл — в дифракции участвует практически только верхний слой GaAs (рис. 1). (Критические углы материалов слоев СР составляют для CuK_α излучения

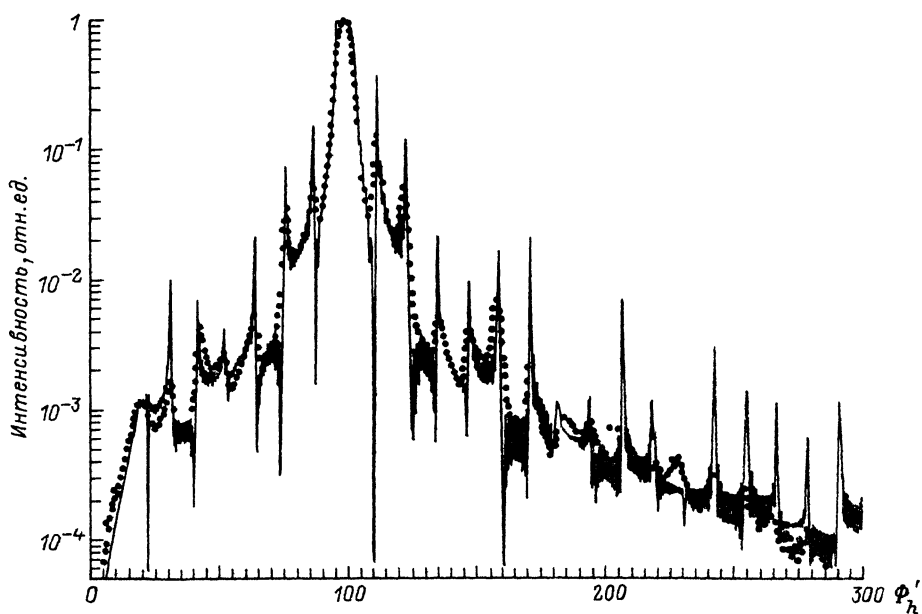


Рис. 3. Кривая дифракционного отражения в СГБЛ при $\Phi_0 = 45'$.

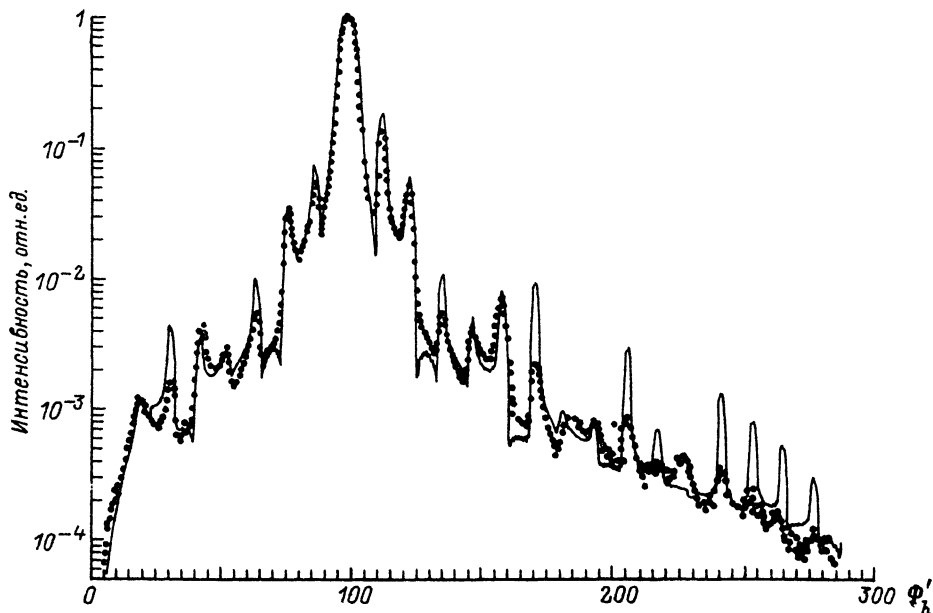


Рис. 4. Кривая дифракционного отражения рис. 3 с учетом усреднения.

Теоретический расчет произведен с учетом разрешающей способности детектора ($\sim 2.5'$).

$\Phi_c^{\text{GaAs}} = 18.5'$, $\Phi_c^{\text{AlAs}} = 16'$). Наличие на кривой при $\Phi_0 = \Phi_c$ поверхностного брэгговского пика свидетельствует об отсутствии на поверхности аморфной пленки, превышающей по толщине естественный окисел, который обычно образуется на поверхности монокристаллов GaAs. Это указывает на то, что защитный слой арсенида галлия толщиной до 20 нм достаточно надежно защищает нижележащий слой арсенида алюминия, склонный окисляться на воздухе. С другой стороны, наличие поверхностного брэгговского пика подтверждает высокое совершенство структуры верхнего слоя GaAs.

С увеличением угла Φ_0 возрастает глубина экстинкции и в дифракции принимает участие большое количество слоев (рис. 2, 3). На дифракционной кривой при этом появляются осцилляции, расстояние между которыми определяется периодом CP и составляет величину порядка $\lambda/2T \sim 12'$, а также наблюдается тонкая структура, обусловленная отражением волны от подложки (период осцилляций тонкой структуры есть величина порядка $\lambda/(2T) = \lambda/(2N_s T) \sim 1'$). При $\Phi_0 = 22'$ структура спутников первых порядков сформировалась практически полностью, а небольшое различие в спутниках высокого порядка при $\Phi_0 = 22'$ и $\Phi_0 = 45'$ подтверждает высокую чувствительность дифракции в скользящей геометрии Брэгга—Лауэ к реальному строению сверхрешетки.

Из рисунков видно, что имеет место хорошее качественное согласие теории и эксперимента. Однако, поскольку реальный образец не является идеальной сверхрешеткой, а содержит многочисленные дефекты роста и, кроме того, за счет погрешностей измерения (невысокое разрешение детектора, общий дрейф спектрометра и т. д.), экспериментальные кривые отличаются от расчетных. Уже простой учет разрешающей способности детектора ($\sim 2.5'$) приводит к тому, что теоретическая кривая рис. 3 приобретает вид кривой рис. 4. Спутники при этом уширяются, а тонкая структура практически исчезает, в результате чего соответствия между теоретической и экспериментальной кривыми существенно улучшается.

- [1] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М.: Мир, 1989, 240 с.
- [2] Barnett S. J. // *J. Crystal Growth*. 1990. V. 103. N 2. P. 335—343.
- [3] Новиков Д. В., Меликян О. Г., Ломов А. А., Имамов Р. М., Афанасьев А. М. // Тез. докл. Всесоюзной конф. «Поверхность-89». Черногоровка, 1989. С. 171.
- [4] Имамов Р. М., Новиков Д. В., Щелоков А. Н. // *Электронная промышленность*. 1990. № 5. С. 49—52.
- [5] Афанасьев А. М., Александров П. А., Имамов Р. М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М.: Наука, 1989. 152 с.
- [6] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. М.: Наука, 1978. 448 с.
- [7] Andreeva M. A., Rosete C., Kharachev Yu. P. // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1985. V. 88. N 2. P. 455—462.
- [8] Меликян О. Г. // *Кристаллография*, 1991. Т. 36. № 3. С. 549—554.
- [9] Ломов А. А., Новиков Д. В., Гоганов Д. А., Гуткевич С. М. // *ФТТ*. 1988. Т. 30. № 10. С. 2881—2884.

Институт кристаллографии РАН
Москва

Поступило в Редакцию
24 декабря 1991 г.
