

05;06

Параметры многослойной гетероструктуры по результатам совместного анализа кривых дифракционного отражения от разных кристаллографических плоскостей

© А.А. Ломов, М.А. Чуев, Г.В. Ганин

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

E-mail: a.lomov@ns.crys.ras.ru

Физико-технологический институт РАН, Москва

Поступило в Редакцию 13 ноября 2003 г.

Методом двухкристальной рентгеновской дифрактометрии выполнены измерения кривых отражения от плоскостей (004), (113) и (115) псевдоморфной гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ с одной квантовой ямой толщиной 12 нм. Впервые проведена совместная подгонка дифракционных кривых от разных кристаллографических плоскостей, что позволило получить более достоверную информацию о толщине, деформации и аморфизации отдельных слоев гетероструктуры.

Введение. Исследования структуры приповерхностных слоев монокристаллов и многослойных кристаллических систем привлекают пристальное внимание как в фундаментальной физике, так и при решении прикладных задач. Среди современных методов диагностики высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия занимает особое место благодаря возможности восстановления профилей деформации и аморфизации по глубине. Впервые удачная попытка решения этой задачи была предпринята в работах [1,2]. В последующих работах по восстановлению искомым параметров исследователи столкнулись с проблемой неоднозначности, которая возникает из-за потери информации о фазе дифрагированной волны [3,4]. В [5] показано, что количество решений, приводящих к одному и тому же виду кривых дифракционного отражения, равно 2^N , где N — число подслоев, на которое разбивается приповерхностный слой. Для уменьшения числа

возможных решений обычно используют как априорные данные, так и результаты фазочувствительных методов [6,7]. В [8,9] при решении обратной задачи по восстановлению профилей деформации и аморфизации был использован метод χ^2 и было получено достаточно хорошее совпадение теоретических и экспериментальных данных при значениях χ^2 , близких к единице, что соответствует математическим критериям выбора правильного решения [10].

Полный набор рентгенодифракционных отражений содержит всю информацию об искажениях параметров структуры в исследуемом образце. Поэтому проблема неоднозначности может быть успешно преодолена в рамках моделирования большего числа отражений от различных семейств кристаллографических плоскостей. Этот подход является стандартным при расшифровке структуры кристаллов [11]. В [12,13] разные порядки отражения использовались для характеристики многослойных гетероструктур и сверхрешеток. Однако для исследования приповерхностных слоев монокристаллов одновременная подгонка дифракционных кривых от нескольких отражений ранее не применялась. Настоящая работа посвящена развитию методики восстановления профилей деформации и аморфизации при помощи одновременной подгонки кривых дифракционного отражения от различных кристаллографических плоскостей на примере гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Эксперимент. На поверхности монокристаллической подложки $\text{GaAs}(001)$ с разориентацией 3° в направлении $[110]$ методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) была выращена одиночная квантовая яма $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной $l = 13 \text{ nm}$ и содержанием индия $x = 0.08$. Для предотвращения диффузии примесей и дефектов из подложки в слой $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на поверхности всех образцов сначала выращивался буферный слой GaAs толщиной $0.5 \mu\text{m}$. Квантовая яма сверху закрывалась слоем GaAs толщиной 100 nm .

Кривые дифракционного отражения (КДО) записывались в режиме $\theta/2\theta$ сканирования с установленной перед детектором узкой щелью ($6-10'$). Схема эксперимента представлена на рис. 1. С учетом влияния коэффициента асимметрии $\beta(\psi)$ на динамическую дифракцию сканирование выполняется в режиме $\theta/(1+\beta)\theta$ [9]. Источником излучения служила рентгеновская трубка с медным анодом. Использовалась симметричная брэгговская дифракция от плоскостей (004) и кососимметричная от плоскостей (113) и (115). При установке кристалла-

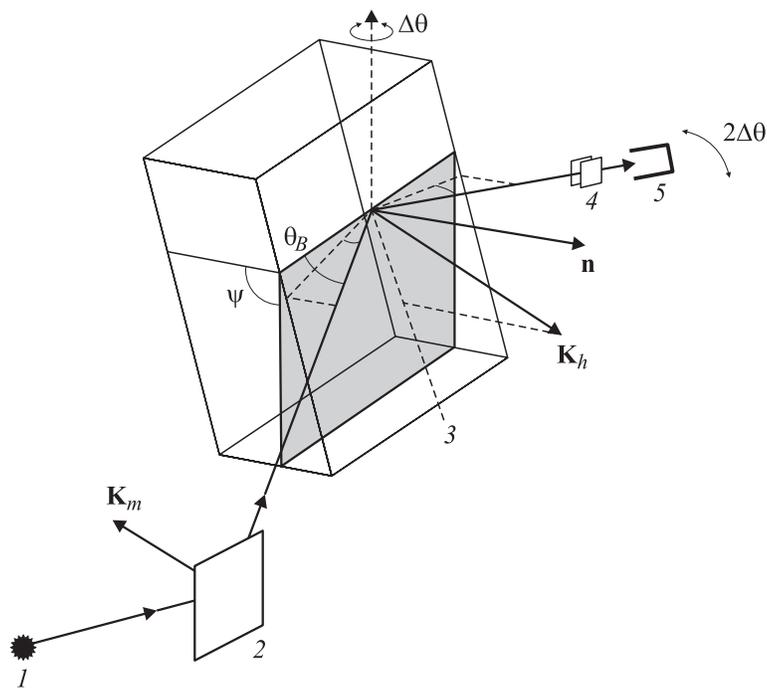


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 — источник излучения, 2 — кристалл монохроматора, 3 — образец, 4 — щели, 5 — детектор, \mathbf{n} — нормаль к поверхности образца, \mathbf{K}_m и \mathbf{K}_h — векторы обратных решеток кристаллов монохроматора и образца соответственно, θ_B — угол Брэгга.

образца в кососимметричную геометрию особое внимание было уделено юстировке образца и получению значения 1 для параметра β .

Обсуждение результатов. Экспериментальные КДО от плоскостей (004), (113) и (115) представлены на рис. 2 вертикальными штрихами. На кривых наблюдается большое количество осцилляций, что характерно для многослойных систем с высоким качеством выращенных слоев и относительно резкими межслоевыми границами. Отметим, что эти кривые заметно отличаются друг от друга. На первом этапе анализ КДО для каждого отражения проводился отдельно в соответствии с процедурой, описанной в [8,9]. В качестве начального приближения

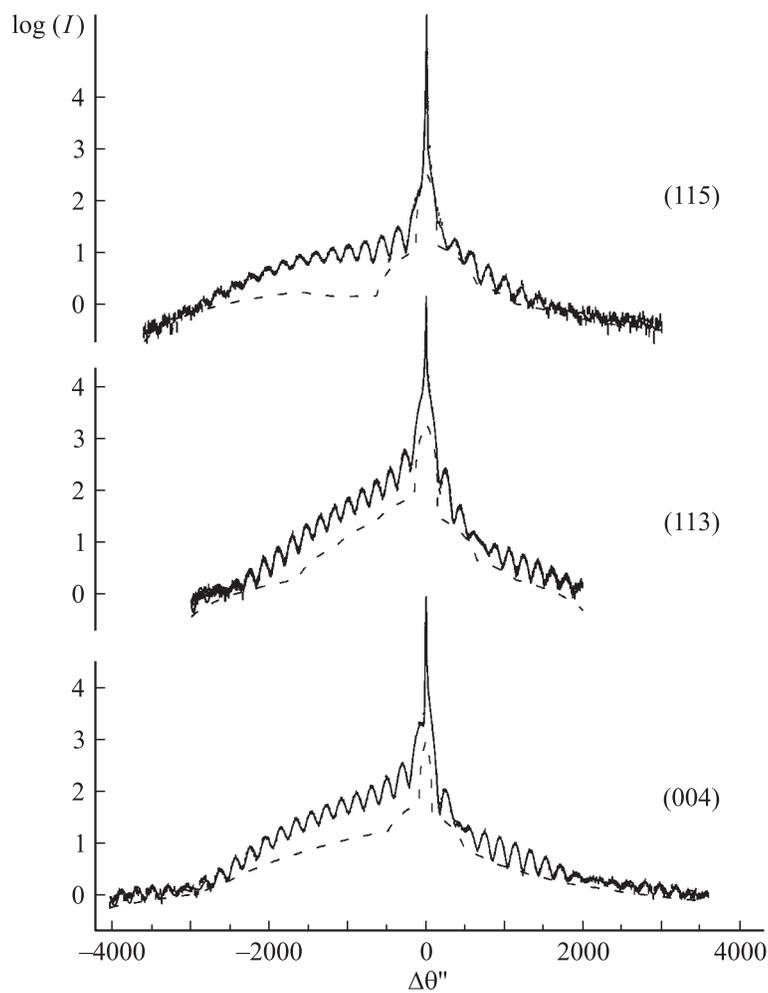


Рис. 2. Экспериментальные КДО от гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с квантовой ямой (вертикальные штрихи) и теоретическими кривыми (сплошные линии) для отражений 004, 113 и 115. Пунктирными линиями показан вклад некогерентного диффузного фона.

Параметры слоев исследованной гетероструктуры по данным независимого анализа КДО от различных кристаллографических плоскостей.

Слой	$hkl = 004, \chi^2 = 2.51$			$hkl = 113, \chi^2 = 2.52$			$hkl = 115, \chi^2 = 2.41$			
	l_j, nm	$\Delta a_j^\perp / a, \%$	f_j	l_j, nm	$\Delta a_j^\perp / a, \%$	f_j	l_j, nm	$\Delta a_j^\perp / a, \%$	f_j	
1	99.1(1)	-0.002(1)	1.00(1)	99.7(1)	-0.002(1)	0.95(1)	99.6(1)	-0.000(1)	0.86(1)	
2	11.9(1)	0.88(1)	0.99(1)	11.6(1)	0.85(1)	0.99(1)	12.4(2)	0.83(1)	0.86(2)	
3	498(3)	0.000(1)	0.97(1)	501(1)	0.000(1)	0.95(1)	501(1)	0.000(1)	0.94(3)	
Подложка			0.97(1)	Подложка			0.92(1)	Подложка		

были использованы параметры структуры ростовой модели. При подгонке варьировались толщина каждого подслоя l_j (j — номер подслоя), нормальная составляющая его деформации $\Delta a_j^\perp / a$ (a — параметр решетки подложки) и фактор аморфизации, определяемый статическим фактором Дебая–Валлера w_j :

$$f_j^{(h)} = \exp(-w_j^{(h)}) = \exp(-\langle (\mathbf{K}_h \mathbf{u})^2 \rangle_j), \quad (1)$$

где \mathbf{K}_h — вектор обратной решетки для заданного отражения hkl , а \mathbf{u} — вектор хаотического смещения атомов из регулярной позиции. Этот фактор описывает степень уменьшения отражательной способности подслоя из-за несовершенств кристаллической решетки. При подгонке КДО учитывалось также диффузное рассеяние [9].

Соответствующие теоретические кривые отражения, рассчитанные в рамках динамической теории дифракции рентгеновских лучей, показаны на рис. 2 сплошными линиями, а интенсивности диффузного рассеяния прерывистыми. Параметры структуры в четырехслойной модели, полученные в результате отдельного анализа КДО от отражений 004, 113 и 115 исследованного образца, показаны в таблице. Видно, что параметры, восстановленные в процессе отдельного анализа экспериментальных кривых, имеют близкие значения и соответствуют условиям роста. Однако их соответствующие значения различаются на величины, превышающие их среднеквадратичные ошибки. Введение в модель структуры дополнительных подслоев хотя и уменьшило значение χ^2 , но привело к возрастанию ошибок в определении параметров.

Отличие в значениях параметров (см. таблицу), независимо восстановленных по КДО от различных кристаллографических плоско-

стей, объясняется следующим. Во-первых, непосредственный вклад в дифракционное рассеяние от квантовой ямы мал. Поэтому форма КДО обусловлена главным образом когерентным сдвигом относительно подложки атомных плоскостей верхнего достаточно толстого слоя GaAs за счет находящейся между ними тонкой квантовой ямы. Наличие сдвига приводит к появлению дополнительной разности фаз между амплитудами рассеяния рентгеновских лучей от верхнего слоя и от подложки и, как следствие, к образованию большого числа осцилляций на „хвостах“ КДО. Результирующая дифракционная картина определяется величиной сдвига $\Delta u \approx (\Delta a_j^\perp/a) \times l_j$, т. е. два параметра квантовых ям оказываются связанными. Во-вторых, значения статических факторов Дебая–Валлера $f_j^{(h)}$ для разных отражений определяются в соответствии с формулой (1) величиной скалярного произведения векторов \mathbf{K}_h и \mathbf{u} и, следовательно, должны отличаться.

С целью устранения расхождения в получаемых при подгонке значениях параметров мы разработали процедуру совместного анализа разных наборов экспериментальных данных. В рамках метода χ^2 одновременно анализировались экспериментальные КДО от плоскостей (004), (113) и (115) с вариацией одних и тех же величин: толщин слоев l_j и искажений кристаллической решетки $\Delta a_j^\perp/a$. В простейшем приближении изотропного распределения хаотического смещения \mathbf{u} факторы $f_j^{(h)}$ определяются значениями модуля соответствующего вектора \mathbf{K}_h и среднеквадратичной величиной смещения $u_{0j} = \langle \mathbf{u}^2 \rangle_j$. Именно величины u_{0j} варьировались в процессе подгонки. В соответствии с этой процедурой была написана компьютерная программа совместной подгонки трех дифракционных кривых от разных отражений. Используя модель с одним набором параметров, нам удалось описать одновременно КДО от отражений 004, 113 и 115 с величиной $\chi^2 = 2.7$. В результате были уточнены значения параметров гетероструктуры, и, в частности, для параметров квантовой ямы получены следующие значения: $l_2 = 11.7(1)$ nm, $\Delta a_2^\perp/a = 0.89(1)\%$ и $u_{02} = 0.007(2)a$.

Заключение. Таким образом, одновременная подгонка трех экспериментальных КДО позволяет не только восстановить профили распределения параметров $\Delta a_j^\perp/a$ и u_{0j} в окрестности квантовой ямы, но также оценить анизотропию распределения хаотического смещения \mathbf{u} (в плоскости слоев и перпендикулярно им). Соответствующие результаты будут опубликованы в следующей работе.

Авторы выражают свою признательность Ю.Ф. Садофьеву за предоставление образцов для исследований, а также В.А. Бушуеву за интерес к работе и постоянное внимание к ее результатам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства промышленности, науки и технологий РФ (Государственный контракт N 37.029.1.1.0034), а также INTAS (грант N 01–0190).

Список литературы

- [1] *Burgeat P.J., Taupin D.* // Acta Cryst. 1968. V. A24. P. 99–102.
- [2] *Kyutt R.N., Petrashen P.V., Sorokin L.M.* // Phys. stat. sol. (a). 1980. V. 60. P. 381–389.
- [3] *Петрашень П.В.* // ФТТ. 1974. Т. 16. С. 2168–2175.
- [4] *Speriosu V.S., Nicolet M.A., Tandon J.L.* et al. // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. P. 1377–1379.
- [5] *Афанасьев А.М., Фанченко С.С.* // ДАН. 1986. Т. 287. С. 1395–1399.
- [6] *Golovchenko J.A., Batterman B.W., Brown W.L.* // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 2524–2527.
- [7] *Афанасьев А.М., Кон В.Г.* // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. С. 300–313.
- [8] *Афанасьев А.М., Чувев М.А., Имамов Р.М.* и др. // Кристаллография. 1997. Т. 42. № 3. С. 514–523.
- [9] *Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Ломов А.А.* и др. // Микроэлектроника. 2003. Т. 32. № 2. С. 83–89.
- [10] *Cramer H.* Mathematical Methods of Statistics. Princeton, New Jersey: Princeton Univ. Press, 1946.
- [11] *Вайнштейн Б.К.* Современная кристаллография. Т. 1. М.: Наука, 1979. 384 с.
- [12] *Darhuber A.A., Stangl J., Holy V.* et al. // Thin Solid Films. 1997. V. 306. P. 198–204.
- [13] *Kyutt R.N., Shubina T.V., Sorokin S.V.* et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2003. V. 36. P. A166.