

01;05

## **Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей от эпитаксиального слоя с квантовыми кольцами**

© В.И. Пунегов

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар

E-mail: vrpunegov@dm.komisc.ru

*Поступило в Редакцию 4 мая 2008 г.*

Разработана теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей от кристаллического слоя с хаотически распределенными в латеральном направлении квантовыми кольцами. Модель квантового кольца выбрана в виде фигуры, образованной внешним усеченным конусом и вложенным внутренним перевернутым усеченным конусом („кратером“). Проведено численное моделирование карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве от эпитаксиального слоя с квантовыми кольцами разной формы. Показано, что угловое распределение диффузного рассеяния существенно зависит как от наклона образующей внешнего контура квантового кольца, так и от формы и размеров кратера.

PACS: 61.46.Db, 68.65.-k

Морфология низкоразмерных структур, в частности квантовых точек, сильно зависит от ростовых условий. Различные по форме квантовые точки в виде линз, капель, пирамид, конусов и т.д. создаются в результате вариаций потоков молекулярных пучков, изменений ростовых температур и скоростей, причем немаловажная роль отводится процессу прерывания эпитаксиального роста. Более того, при определенных технологических режимах самоорганизованные квантовые точки, например в форме линз, трансформируются в наноразмерные островки в виде „вулканов“ [1]. Этот новый тип наноструктур получил название квантовых колец. Кольцевая геометрия этих низкоразмерных объектов представляет особый интерес в связи с магнитооптическими и электронными применениями (см. [2] и приведенную в этой работе литературу). Поэтому большое внимание уделяется исследованию технологических процессов формирования формы и размеров квантовых

колец [3–6]. Для анализа морфологических особенностей квантовых колец на поверхности эпитаксиального роста широко применяется метод атомно-силовой микроскопии [1,3–6]. Однако возможности этого метода ограничены толщинами исследуемых слоев. Поэтому для вертикального массива из слоев с квантовыми кольцами результаты атомно-силовой микроскопии регистрируются последовательно за каждым очередным нанесением разделительного слоя [7]. Контроль всей системы с вертикально упорядоченными квантовыми кольцами проводится с помощью просвечивающей электронной микроскопии [7]. С другой стороны, существуют неразрушающие рентгеновские методы контроля устойчивости нанообъектов после нанесения сверху разделительных слоев [8]. Недавние исследования квантовых колец базируются на методах зеркального малоуглового рассеяния [9] и дифракции в скользящей геометрии [9,10]. Современные достижения высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии показали перспективность изучения самоорганизованных наноструктур с привлечением диффузного рассеяния рентгеновских лучей [11]. Несмотря на богатый экспериментальный материал по диффузному рассеянию на низкоразмерных структурах, в ряде случаев отсутствуют соответствующие теории, и анализ дифракционных данных преимущественно проводится в рамках численного метода конечных элементов [11]. В частности, отсутствует теория диффузного рассеяния от эпитаксиального слоя с квантовыми кольцами. Настоящая работа посвящена разработке этой теории.

Рассмотрим диффузное рассеяние рентгеновских лучей на кристаллическом слое толщиной  $l$  с латерально распределенными квантовыми кольцами. Пусть  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  — случайные атомные смещения, вызванные хаотическими нарушениями кристаллической структуры из-за возникновения кольцеобразных наноструктур. Интенсивность диффузионного рассеяния как функцию вектора  $\mathbf{q}$ , определяющего отклонение вектора рассеяния  $\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$  от узла обратной решетки, где  $\mathbf{k}_{0,h}$  — волновые векторы падающего и дифракционного рентгеновского пучка, запишем в виде

$$I_h^d(\mathbf{q}) = |a_h|^2(1 - f^2)S_0l\tau(\mathbf{q}), \quad (1)$$

где  $S_0$  — площадь засветки рентгеновским пучком поверхности кристаллического слоя,  $f = \langle \exp(i\mathbf{h}\delta\mathbf{u}) \rangle$  — [12] статический фактор Дебая–Валлера, характеризующий пространственные нарушения кристаллического слоя (величина статического фактора зависит от кон-

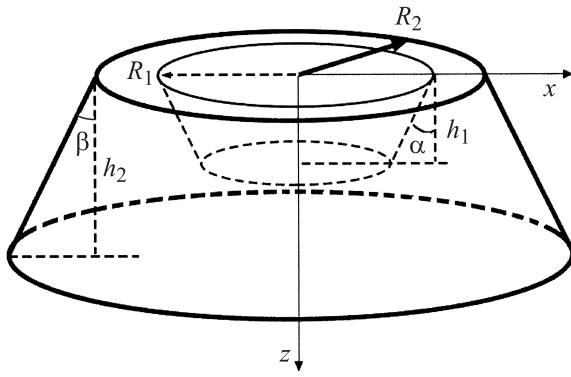


Рис. 1. Модель квантового кольца.

центрации квантовых колец в слое),  $\langle \dots \rangle$  означает статистическое усреднение,  $\mathbf{h}$  — вектор обратной решетки,  $a_h$  — рассеивающая способность среды [13].

Корреляционный объем  $\tau(\mathbf{q})$  можно представить в виде [14]

$$\tau(\mathbf{q}) \approx \frac{c}{(2\pi)^2 V_c (1-f^2)} |D(\mathbf{q})|^2. \quad (2)$$

Здесь

$$D(\mathbf{q}) = \int (1 - \exp(i\mathbf{h}\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3)$$

$c$  — концентрация квантовых колец в слое,  $V_c$  — объем элементарной ячейки кристалла. Интенсивность диффузного рассеяния (1) с учетом сделанных выше преобразований может быть представлена как

$$I_h^d(\mathbf{q}) = K_D |D(\mathbf{q})|^2. \quad (4)$$

Коэффициент  $K_D = c |a_h|^2 (S_0 l / V_c) / (2\pi)^2$  является постоянной величиной, следовательно, функция  $D(\mathbf{q})$  приобретает смысл амплитуды диффузного рассеяния.

Модель квантового кольца выбрана в виде фигуры, образованной внешним усеченным конусом и вложенным внутренним перевернутым усеченным конусом меньшего радиуса и меньшей высоты (рис. 1). Поля

атомных смещений для данной модели запишутся как

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \text{random, for } R_1 - z \tan(\alpha) \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq R_2 + z \tan(\beta), \\ \quad (z \leq h_1) & (z \leq h_2) \\ 0, \text{ for } \sqrt{x^2 + y^2} < R_1 - z \tan(\alpha), \sqrt{x^2 + y^2} > R_2 + z \tan(\beta), \end{cases} \quad (5)$$

где  $R_1$  и  $R_2$  — радиусы внутреннего и внешнего усеченных конусов при значении  $z = 0$ ,  $h_1$  и  $h_2$  — соответственно высоты этих конусов,  $\alpha$  и  $\beta$  — углы между высотой и образующей внутреннего и внешнего конуса. Модель квантовых колец, определенная (5), в общем случае соответствует форме „вулкана“. Такая форма чаще всего встречается на изображениях, полученных с помощью атомно-силовой микроскопии [1,3–8]. Если углы  $\alpha$  и  $\beta$  равны нулю и  $h_1 = h_2$ , то выражение (5) описывает объект в виде прямого полого цилиндра (диска).

Используем (5) для вычисления амплитуды диффузного рассеяния  $D(\mathbf{q})$ . Интегрирование в (3) выполним в цилиндрической системе координат. После несложных математических преобразований получим

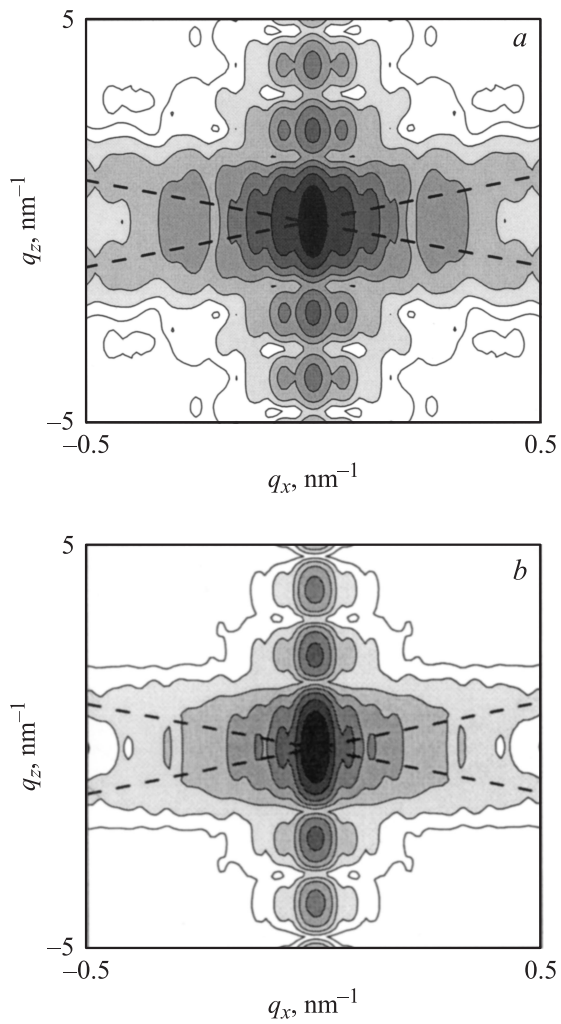
$$D(\mathbf{q}) = \Phi(\mathbf{q}; h_2, R_2, \beta) - \Phi(\mathbf{q}; h_1, R_1, \alpha). \quad (6)$$

Здесь  $\Phi(\mathbf{q}; h, R, \gamma) = 2\pi \int_0^h dz \exp(iq_z z) \frac{R+z \tan \gamma}{q_0} J_1(q_0[R+z \tan \gamma])$  — функция форм-фактора квантового кольца,  $q_0 = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ ,  $J_1(q_0 R)$  — функция Бесселя первого порядка.

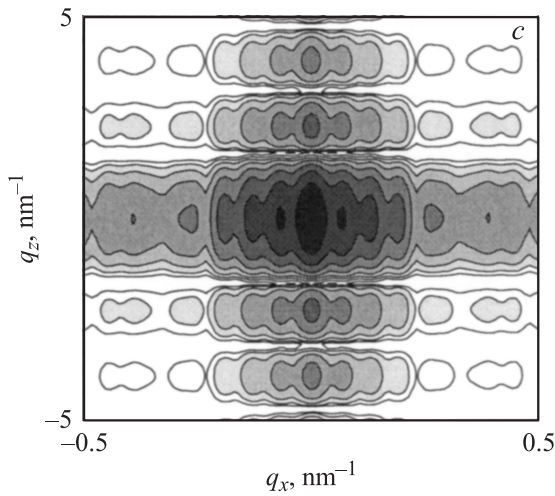
Для расчетов двумерных карт распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве следует воспользоваться следующим выражением [15]:

$$I_h^d(q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_y |D(\mathbf{q})|^2. \quad (7)$$

Соотношение (7) с учетом (6) для квантовых колец разной конфигурации использовалось в процедуре вычислений двумерных карт интенсивностей диффузного рассеяния (рис. 2). Все вычисления проведены для наноструктур, вершина которых имеет вид кольца с внешним радиусом  $R_2 = 60$  nm и внутренним радиусом (радиусом „кратера“)  $R_1 = 40$  nm. Высота квантового кольца  $h_2 = 4$  nm. Изменение формы



**Рис. 2.** Расчетные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от эпитаксиального слоя с квантовыми кольцами разной формы: *a* —  $\alpha = -60^\circ$ ,  $\beta = 60^\circ$ ,  $h_1 = 4$  nm и  $h_2 = 4$  nm; *b* —  $\alpha = 0^\circ$ ,  $\beta = 60^\circ$ ,  $h_1 = 0$  и  $h_2 = 4$  nm; *c* —  $\alpha = 0^\circ$ ,  $\beta = 0^\circ$ ,  $h_1 = 4$  nm и  $h_2 = 4$  nm.



**Рис. 2** (продолжение).

нанообъекта осуществлялось вариацией углов наклона образующих конусов  $\alpha$  и  $\beta$  и глубиной „кратера“  $h_1$ . Отношение между соседними изодиффузными линиями представлено в логарифмическом масштабе и составляет 0.316.

Для колец вулканообразной формы ( $\alpha = -60^\circ$ ,  $\beta = 60^\circ$  и  $h_1 = 4$  nm) картина диффузного рассеяния характеризуется расщеплением горизонтальной полосы на два направления, показанные штриховыми линиями (рис. 2, *a*). Эти направления зависят от угла наклона боковых поверхностей квантовых колец относительно оснований. Такое же расщепление наблюдается для модели наноостровков в отсутствие „кратеров“, т.е. в случае трансформации квантовых колец в квантовые точки в форме усеченного прямого конуса (рис. 2, *b*). Если форма квантового кольца соответствует прямому полуму цилиндру, то картина диффузного рассеяния формируется в виде двух перпендикулярных полос в вертикальном и латеральном направлении (рис. 2, *c*).

В заключение отметим, что в рассматриваемой теории все квантовые кольца имеют один и тот же размер, что, безусловно, не соответствует реальной ситуации. Поэтому на всех картах угловое распреде-

ление интенсивности диффузного рассеяния имеет явно выраженный осцилляционный характер. Для анализа экспериментальных измерений в рамках настоящей теории необходимо проводить статистическое усреднение как по размерам, так и по форме квантовых колец [16,17].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-00090-а).

## Список литературы

- [1] Garcia J.M., Medeiros-Ribeiro G., Schmidt K., Ngo T., Feng J.L., Lorke A., Kotthaus J., Petroff P.M. // *Appl. Phys. Lett.* 1997. V. 71. N 14. P. 2014–2016.
- [2] Saiga Y., Hirashima D.S., Usukura J. // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. P. 045343.
- [3] Ding F., Wang L., Kiravittaya S., Muller E., Rastelli A., Schmidt O.G. // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 90. P. 173104.
- [4] Zhao C., Chen Y.H., Xu B., Tang C.G., Wang Z.G., Ding F. // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 92. P. 063122.
- [5] Ling H.-S., Lee C.-P. // *Journal of Appl. Phys.* 2007. V. 102. P. 024314.
- [6] Yu L.W., Chen K.J., Song J., Xu J., Li W., Li X.F., Wang J.M., Huang X.F. // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. P. 166102.
- [7] Granados D., Garcia J.M., Ben T., Molina S.I. // *Appl. Phys. Lett.* 2005. V. 86. P. 071918.
- [8] Pietsch U., Holy V., Baumbach T. *High Resolution X-ray Scattring — from Thin Films to Lateral Nanostructures.* New York: Springer-Verlag, 2004. 408 p.
- [9] Sztucki M., Metzger T.H., Chamard V., Hesse A., Holy V. // *J. of Appl. Phys.* 2006. V. 99. P. 033519.
- [10] Hanke M., Mazur Yu.I., Marega E.Jr., AbuWaar Z.Y., Salamo G.J., Schafer P., Schmidbauer M. // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 91. P. 043103.
- [11] Schmidbauer M. *X-Ray Diffuse Scattering from Self-Organized Mesoscopic Semiconductor Structures.* Berlin: Springer-Verlag, 2004. 202 p.
- [12] Punegov V.I., Lomov A.A., Shcherbachev K.D. // *Phys. Stat. Sol. (a).* 2007. V. 204. P. 2620–2625.
- [13] Kato N. // *Acta Cryst.* 1980. V. A36. N 5. P. 763–769. 770–778.
- [14] Бушуев В.А. Угловое распределение интенсивностей динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами в геометриях Лауэ и Брэгга. М.: ВИНТИ, 1988. № 486-В88. 51 с.
- [15] Nesterets Ya.I., Punegov V.I. // *Acta Cryst. A.* 2000. V. A56. N 6. P. 540–548.
- [16] Boulle A., Conchon F., Guinebretière R. // *Acta Cryst. A.* 2006. V. A62. P. 11–16.
- [17] Пунегов В.И., Ломов А.А. // *Письма в ЖТФ.* 2008. Т. 34. В. 6. С. 30–35.