

01;05

Паракристаллическая модель в статистической теории рентгеновской дифракции на эпитаксиальных слоях с квантовыми точками

© В.И. Пунегов

Коми научный центр УРО РАН, Сыктывкар
E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Поступило в Редакцию 3 марта 2011 г.

Разработана статистическая теория кинематической дифракции на наноструктурированных кристаллических системах с учетом пространственной корреляции квантовых точек (КТ). Для описания латерального распределения КТ в эпитаксиальном слое использована двумерная паракристаллическая модель. Проведено численное моделирование углового распределения диффузного рассеяния в зависимости от степени латеральной упорядоченности КТ.

Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия является перспективным неразрушающим методом для анализа полупроводниковых систем с самоорганизованными квантовыми точками (КТ) [1–5]. Создаваемые методами эпитаксиального роста КТ, как правило, занимают определенные позиции в латеральной плоскости, тем самым создают тот или иной пространственный порядок. Известно, что высшей степенью пространственного порядка является упаковка атомов в идеальном кристалле. Однако строгая трансляция позиций в решетке практически в природе не встречается. С другой стороны, и идеальный беспорядок в расположении самоорганизованных объектов достигается крайне редко, так как нельзя пренебречь корреляциями между этими объектами, расположенными по соседству друг с другом. Поэтому чаще всего можно встретить промежуточное состояние между идеальным порядком и идеальным беспорядком. Разного вида включения, нарушающие трансляционную упорядоченность кристаллической решетки, вызывают диффузное рассеяние рентгеновских лучей.

Для описания корреляций между ближайшими соседями могут быть использованы два подхода, основанные на формализме паракристал-

лического строения [6] или функции радиального распределения [7]. Как паракристаллическая модель, так и модель радиального распределения базируются на введении вероятностной функции нахождения КТ, однако модель радиального распределения применима только в случае изотропного распределения КТ вдоль ростовой поверхности. Отметим, что паракристаллическая модель в различных вариантах использовалась для анализа экспериментальных результатов в методе малоуглового рассеяния рентгеновских лучей при скользящих углах падения [8,9], трехкristальной рентгеновской дифрактометрии [9] и дифракции в скользящей геометрии [10]. Влияние пространственной корреляции КТ на диффузное рассеяние с использованием функции радиального рассеяния теоретически исследовалось в [11].

В данной работе на основе концепции идеальной паракристаллической решетки для точечных единиц [12] разработана статистическая теория кинематической дифракции на эпитаксиальных слоях с КТ различной степенью латеральной упорядоченности.

Рассмотрим полупроводниковую систему, состоящую из подложки, на которой осажден тонкий слой другого вещества. При определенных ростовых условиях в результате самосборки в слое формируются КТ, которые нарушают трансляционный порядок кристаллической решетки. Эти нарушения являются причиной возникновения диффузного рассеяния. Общее решение для когерентного рассеяния в кинематическом приближении получено в [13]. Выражение для интенсивности диффузного рассеяния как функцию вектора \mathbf{q} ($\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$, \mathbf{Q} — вектор рассеяния, \mathbf{h} — вектор обратной решетки) запишем в виде

$$I_h^d(\mathbf{q}) = |a_h|^2 (1 - f^2) V_0 \text{Re}[\tau(\mathbf{q})], \quad (1)$$

где V_0 — засвеченный рентгеновским пучком объем кристаллического слоя с КТ, $f = \langle \exp(i\mathbf{h}\delta\mathbf{u}) \rangle$ — статический фактор Дебая–Валлера, $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — случайные атомные смещения в кристаллической матрице, вызванные КТ, a_h — параметр, характеризующий рассеивающую способность кристаллического слоя [3,4].

В статистической теории дифракции корреляционный объем $\tau(\mathbf{q})$ отвечает за угловое распределение диффузного рассеяния [13,14]. В случае, когда отсутствует пространственная корреляция КТ, корреляционный объем $\tau(\mathbf{q})$ является фурье-преобразованием собственной корреляционной функции Като $g(\rho)$ [15]. Эта функция ставится в соответствие с формой, размерами КТ [16], а также наведенными

упругими деформациями вблизи КТ [17]. Поскольку угловое распределение диффузного рассеяния зависит не только от характеристик самих КТ, но и от их взаимного пространственного расположения, введем в рассмотрение корреляционную функцию $G(\boldsymbol{\rho})$, учитывая оба этих фактора. Такая корреляционная функция может быть представлена в виде свертки функции пространственного распределения КТ $W(\boldsymbol{\rho})$ и их собственной корреляционной функции $g(\boldsymbol{\rho})$:

$$G(\boldsymbol{\rho}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}' W(\boldsymbol{\rho}') g(\boldsymbol{\rho}' - \boldsymbol{\rho}). \quad (2)$$

Определим корреляционный объем диффузного рассеяния от пространственно коррелированных КТ как фурье-преобразование $G(\boldsymbol{\rho})$:

$$\tau(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d(\boldsymbol{\rho}) G(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}). \quad (3)$$

Если КТ распределены хаотически, т.е. отсутствует какой-либо порядок в их расположении, корреляционная функция $G(\boldsymbol{\rho})$ непосредственно трансформируется в собственную корреляционную функцию $g(\boldsymbol{\rho})$. С учетом (2) корреляционный объем (3) запишется в виде произведения

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_0(\mathbf{q})F(\mathbf{q}), \quad (4)$$

где $\tau_0(\mathbf{q})$ — корреляционный объем (функция формы) отдельной КТ [16,17] и

$$F(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho} \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}) W(\boldsymbol{\rho}) \quad (5)$$

— интерференционный структурный фактор, описывающий пространственный порядок в расположении КТ.

Рассмотрим двумерную функцию $W(\rho_x, \rho_y)$, описывающую ближний структурный порядок в расположении КТ. Жесткая фиксация равновесных положений всех КТ, вводимая для дальнего порядка, здесь отсутствует. Выберем два характерных направления расположения КТ в латеральной плоскости (x, y) , которые определяются базисными векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} . Пусть заданы функции расположения первых соседей

$H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$, у которых верхние индексы a и b указывают на соответствующие латеральные направления. Степень размытия этой функции ставится в соответствие со степенью латерального разупорядочения КТ. Распределение вторых соседей задается функцией

$$H_2^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) \otimes H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y)^{\otimes 2},$$

где знаком \otimes обозначена свертка функций. Свертывание функции самой собою (автокорреляция) дает дополнительное размытие, такое, что результирующее размытие увеличивается, причем высота пика уменьшается. Обобщая рассуждения на описание распределения следующих соседей, например, с номером m в латеральном направлении \mathbf{a} , получаем

$$H_m^a(\rho_x, \rho_y) = H_1^a(\rho_x, \rho_y)^{\otimes m}. \quad (6)$$

Можно показать, что дисперсия (среднеквадратичное отклонение) пространственного распределения КТ растет с номером m как $\Delta_m^a = \Delta_1^a \sqrt{m}$. Пусть в направлении вектора \mathbf{a} число КТ равно N_a , в направлении \mathbf{b} соответственно N_b . При конечном числе КТ функции $H_m^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$ должны быть нормированы к $(N_{a,b} - |m|)$, так как вес пиков $W(\rho_x, \rho_y)$ уменьшается с возрастанием $|m|$. Поэтому следует писать, например, для направления \mathbf{a}

$$W^a(\rho_x, \rho_y) = \delta(\rho_x) + \sum_{m=1}^{N_a} \frac{(N_a - |m|)}{N_a} (H_m^a(\rho_x, \rho_y) + H_{-m}^a(\rho_x, \rho_y)). \quad (7)$$

Аналогичная запись справедлива и для другой зависимости $W^b(\rho_x, \rho_y)$, поэтому латеральное распределение КТ будет описываться сверткой этих функций. В результате для интерференционного структурного фактора получаем

$$F(q_x, q_y) = F_a(q_x, q_y)F_b(q_x, q_y), \quad (8)$$

где структурные факторы разных направлений имеют вид

$$F_{a,b}(q_x, q_y) = 1 + \frac{2}{N_{a,b}} \times \operatorname{Re} \left(\frac{Z_1^{a,b}(q_x, q_y)((1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y))N_{a,b} - (1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y)^{N_{a,b}}))}{(1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y))^2} \right). \quad (9)$$

Здесь

$$Z_1^{a,b}(q_x, q_y) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \exp(i[q_x \rho_x + q_y \rho_y]) H_1^a(\rho_x, \rho_y) \quad (10)$$

— фурье-образы единичных функций распределения КТ. Отметим, что в рамках другого теоретического подхода решение типа (9) было получено для модели рассеивающих элементов с одномерной квазипериодической решеткой [18]. В случае бесконечного числа КТ ($N_{a,b} \rightarrow \infty$) интерференционный структурный фактор (9) преобразуется к более простому виду [8–10]. В традиционной трехкристальной схеме рентгеновской дифракции угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве зависит от параметров q_x и q_z . Поэтому для этой дифракционной схемы вместо (9) в численных расчетах следует использовать

$$\bar{F}(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y F(q_x, q_y). \quad (11)$$

На основе полученных решений проведено численное моделирование углового распределения когерентного и диффузного рассеяния от системы InGaAs/GaAs(001) с КТ InAs эллипсоидальной формы [17]. В расчетах использованы параметры, соответствующие (004) отражению σ -поляризованного $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучения. Высота КТ составляла 10 nm, диаметр — 20 nm. Пространственно коррелированные КТ в эпитаксиальном слое InGaAs образуют стохастическую квадратную решетку, размытие решетки описывается нормальным (гауссовым) распределением. Вычисления проводились для большого числа КТ ($N_{a,b} \rightarrow \infty$). Функции распределения КТ $W(\rho_x)$ для разных значений дисперсии и соответствующие этим функциям интерференционные структурные факторы $\bar{F}(q_x)$ показаны на рис. 1.

Расчетные карты распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки (004) GaAs показаны на рис. 2. Вертикальная центральная полоса на этих картах соответствует когерентному рассеянию от слоя InGaAs с КТ и полубесконечной подложки GaAs. В отсутствие пространственной корреляции контуры равной интенсивности соответствуют типичному „хуанговскому“ рассеянию от слоя с одинаковыми

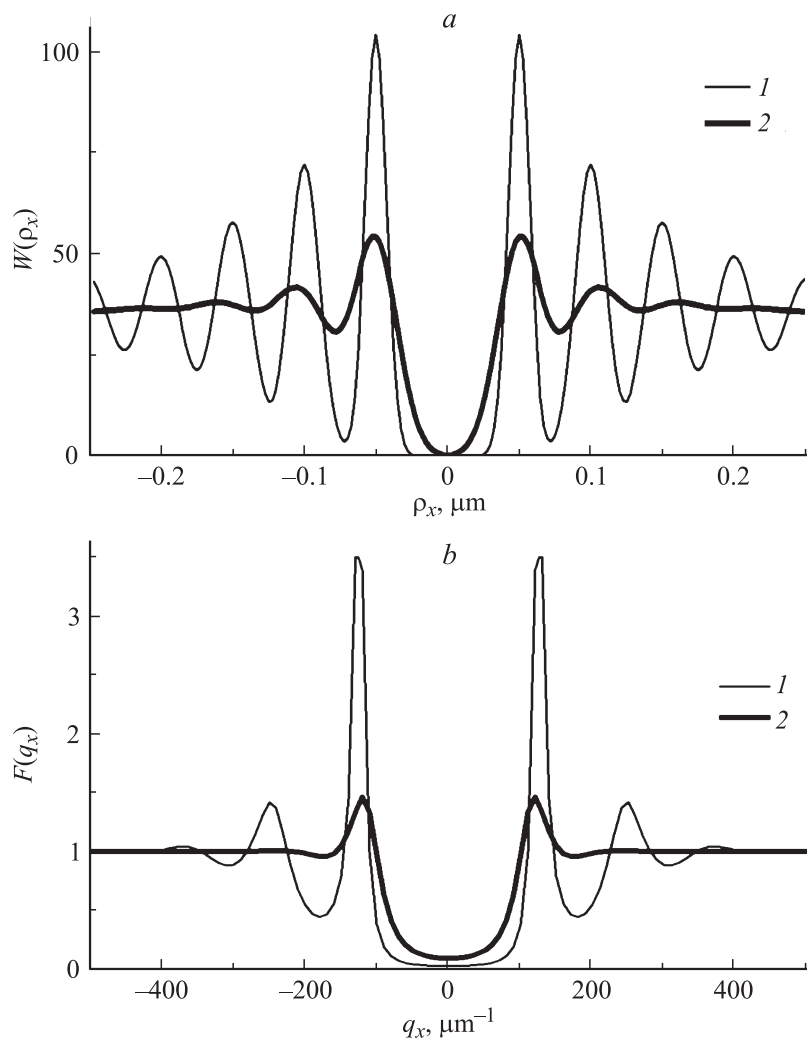


Рис. 1. *a* — функции распределения КТ $W(\rho_x)$ (без учета центрального δ -образного максимума); *b* — соответствующие этим функциям интерференционные структурные факторы $\bar{F}(q_x)$. Среднее расстояние между КТ $T_a = 50$ nm, дисперсия: 1 — $\Delta^a = 0.15T_a = 7.5$ nm; 2 — $\Delta^a = 0.3T_a = 15$ nm.

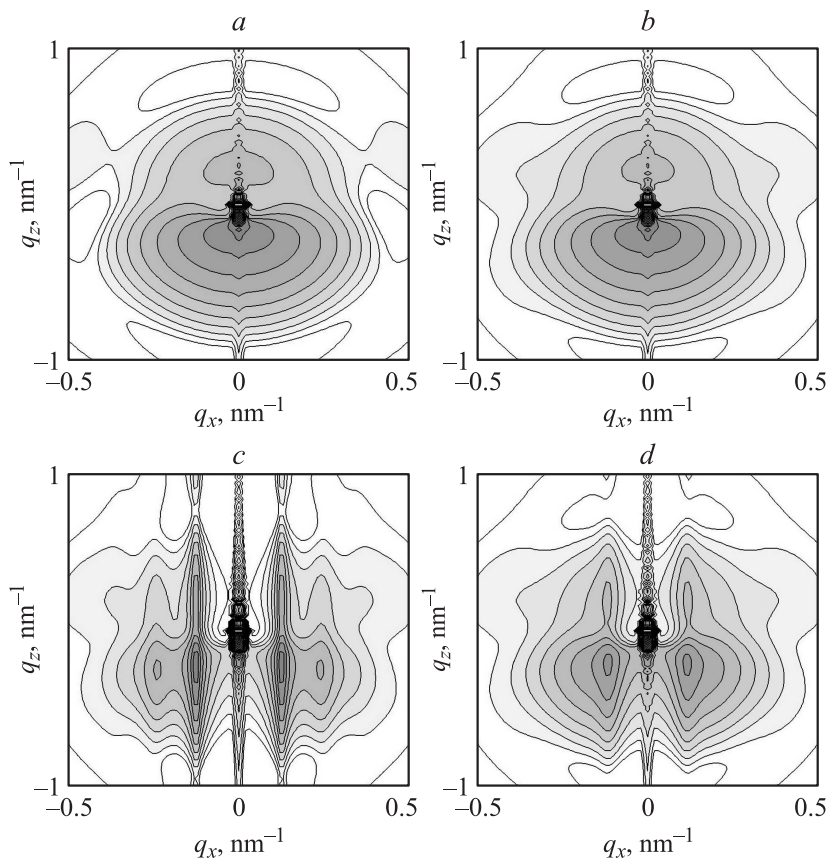


Рис. 2. Расчетные карты распределения интенсивности рассеяния от системы InGaAs/GaAs с КТ вблизи узла обратной решетки (004)GaAs без учета (*a*, *b*) и с учетом (*c*, *d*) пространственной корреляции. Среднее расстояние между КТ $T_a = 50$ nm, дисперсия: *c* — $\Delta^a = 0.15T_a = 7.5$ nm; *d* — $\Delta^a = 0.3T_a = 15$ nm. Отношение интенсивностей между соседними контурами приведено в логарифмическом масштабе и равно 0.45. *a* — КТ одного размера, высота 10 nm, диаметр 20 nm; *b* — *d* — КТ разного размера, дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлениях составляет 30%.

(рис. 2, *a*) и разными (рис. 2, *b*) по размерам КТ. Наличие ближнего порядка в расположении КТ заметно видоизменяет дифракционную картину (рис. 2, *c, d*). Появляются дополнительные интерференционные полосы, хаарктеризующие степень латеральной упорядоченности КТ (рис. 2, *c*). Размытие латеральной решетки влечет соответствующее уширение интерференционных полос (рис. 2, *d*). Отметим, что наличие таких характерных интерференционных полос от пространственно коррелированных Si–Ge-островков экспериментально наблюдалось на картах распределения интенсивности рассеяния вблизи узла (004) Si [9].

Таким образом, разработанная теория позволяет проводить количественный анализ полупроводниковых систем с учетом формы, размеров и пространственной корреляции КТ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-02-00445-а) и Программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН–РЦП-2011 (проект П1).

Список литературы

- [1] Holy V., Stangl J., Fromherz T., Lechher T., Wintersberger E., Bauer G., Dais C., Muller E., Grutzmacher D. // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 035324 (1–10).
- [2] Фалеев Н.Н., Павлов К.М., Пунегов В.И., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Мухрин С.С., Устинов В.М., Tabuchi M., Takeda Y. // ФТП. 1999. Т. 33. В. 11. С. 1359–1368; Faleev N.N., Egorov A.Yu., Zhukov A.E., Kovsh A.R., Mikhrin S.S., Punegov V.I., Pavlov K.M., Tabuchi M., Takeda Y. // Semiconductors. 1999. V. 33. N 11. P. 1229–1237.
- [3] Пунегов В.И. // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. В. 20. С. 8–14; Punegov V.I. // Tech. Phys. Lett. 2008. V. 34. P. 864–866.
- [4] Пунегов В.И., Фалеев Н.Н. // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. В. 7. С. 483–489; Punegov V.I., Faleev N.N. // JETP Letters. 2010. V. 92. N 7. P. 437–443.
- [5] Mazur Yu.I., Wang Zh.M., Salamo G.J., Strelchuk V.V., Kladko V.P., Machulin V.F., Valakh M.Ya., Manasreh M.O. // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. P. 023517 (1–10).
- [6] Hosemann R. // Z. Phys. 1950. V. 128. N 1. P. 465–492.
- [7] Zernike F., Prins J.A. // Zeitschr. Phys. 1927. V. 41. P. 184–194.
- [8] Buljan M., Desnica U.V., Ivanda M., Radic N., Dubcek P., Drazic G., Salamon K., Bernstorff S., Holy V. // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 035310 (1–11).

- [9] *Schmidbauer M., Hanke M., Köhler R.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 115323 (1-8).
- [10] *Kegel I., Metzger T.H., Peisl J., Schittenhelm P., Abstreiter G.* // Appl. Phys. Lett. 1999. V. 74. P. 2978–2980.
- [11] *Бушуев В.А.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. N 9. С. 29–34; *Bushuev V.A.* // J. Surf. Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2007. V. 1. N 5. С. 522–527.
- [12] *Eads J.L., Millane R.P.* // Acta Cryst. A. 2001. V. 57. P. 507–517.
- [13] *Nesterets Ya.I., Punegov V.I.* // Acta Cryst. A. 2000. V. 56. P. 540–548.
- [14] *Pavlov K.M., Punegov V.I.* // Acta Cryst. A. 2000. V. 56. P. 227–234.
- [15] *Kato N.* // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. P. 763–769.
- [16] *Пунегов В.И.* // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. В. 1. С. 41–47; *Punegov V.I.* // Tech. Phys. Lett. 2009. V. 35. P. 20–22.
- [17] *Пунегов В.И., Сивков Д.В., Кладько В.П.* // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. В. 8. С. 41–48.
- [18] *Пунегов В.И., Ломов А.А.* // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. В. 6. С. 30–35; *Punegov V.I., Lomov A.A.* // Tech. Phys. Lett. 2008. V. 34. P. 238–240.