

УДК 539.26/27:548.4

©1994

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ В СИСТЕМАХ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ С ВЫСОКИМ УРОВНЕМ НЕСООТВЕТСТВИЯ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТОК

Р.Н.Кютт, Л.М.Сорокин, Т.С.Аргунова, С.С.Рувимов

Трехкристалльной рентгеновской дифрактометрией и просвечивающей электронной микроскопией исследованы закономерности дефектообразования в гетерокомпозициях с большим уровнем несоответствия параметров решетки пленки и подложки: GaAs/Si ($\Delta a/a = 4\%$), GaSb/GaAs ($\Delta a/a = 8\%$), InSb/GaAs ($\Delta a/a = 16\%$). Измерены значения полуширин рентгеновских отражений в двух ортогональных направлениях: параллельно и перпендикулярно вектору дифракции для нескольких порядков отражения и разной геометрии дифракции. Установлено, что для всех исследованных систем уширение кривых отражения пленки в поперечном направлении ($w \perp$) заметно больше, чем в продольном ($w \parallel$). Электронная микроскопия выявила несколько областей с различной плотностью дислокаций по толщине эпитаксиального слоя. Установлено соответствие между полученными дифракционными закономерностями и дислокационной структурой эпитаксиального слоя (без учета тонкой области вблизи границы раздела).

Рентгеновская дифрактометрия широко используется для получения структурных параметров эпитаксиальных систем. Двукристалльный дифрактометр дает возможность определять деформации и толщины эпитаксиальных пленок [1,2], а для совершенных псевдоморфных систем — профиль распределения деформации по глубине путем моделирования кривых отражения [3,4]. Присутствие дефектов в эпитаксиальных слоях приводит к увеличению угловой ширины максимумов отражения на кривых качания. Однако анализа одной этой величины недостаточно как для идентификации типа структурных дефектов, так и получения их параметров.

Для преодоления этого недостатка в последнее время все чаще используется дифференциальная дифрактометрия как в двукристалльном [5,6], так и трехкристалльном варианте [7-10]. Она позволяет проводить детальное измерение двумерного распределения интенсивности в обратном пространстве и на его основе получать более полную информацию о структуреном совершенстве.

Эпитаксиальные системы с высоким уровнем несоответствия параметров решетки слой-подложка (больше 1%) обладают общими структурными особенностями. Изучению этих объектов посвящено немало рентгенодифракционных работ [11-15], выполненных в двукристалльном интегральном варианте.

В настоящей работе расширены и систематизированы результаты трехкристалльной дифрактометрии нескольких типов объектов, начатые в [16,17]. Данные рентгеновского анализа сопоставляются с результатами прямого наблюдения с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

1. Методика

Трехкристалльная дифференциальная дифрактометрия рассматривает интенсивность дифракции в зависимости от двух угловых параметров — углов падения и отражения (или угла поворота образца α и анализатора ϑ). Схема измерений представлена на рис. 1 с различной геометрией измерения (образец в симметричном и асимметричном положении Брэгга и симметричном положении Лауэ). Кроме того, использовалась также дифракция в скользящей геометрии для образца, когда и падающий, и отраженные лучи составляют малые скользящие углы с поверхностью, а нормаль к последней почти перпендикулярна к плоскости рассеяния.

В двухкристалльной интегральной дифрактометрии измеряется одна кривая отражения $i(\alpha)$ для данного рефлекса — счетчик с широко открытой щелью вбирает все отраженные волны. В трехкристалльной схеме возможны три варианта или моды сканирования, которые удобно рассматривать в терминах представления Эвальда в обратном пространстве: а) ω -сканирование, перпендикулярно вектору обратной решетки \mathbf{H} ; б) $\omega-2\omega$ -сканирование, параллельно вектору обратной решетки \mathbf{H} ; в) 2ω -сканирование, вдоль сферы Эвальда перпендикулярно волновому вектору \mathbf{k}_H .

Система координат в плоскости рассеяния выбирается с центром в узле H_0 обратной решетки подложки и осями $q_\alpha \perp \mathbf{H}$ и $q_H \parallel \mathbf{H}$. Координаты точки наблюдения (конец векторов \mathbf{k}_H и дифракции $\mathbf{s} = \mathbf{k}_H - \mathbf{k}_0$) связаны с углами α и ϑ следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} q_H &= -k\vartheta \cos \vartheta_B, \\ q_\alpha &= k \sin \vartheta(2\alpha + \vartheta). \end{aligned} \quad (1)$$

Поскольку интенсивность дифракции не локализована точно в узле обратной решетки, а занимает некоторую область около него, для получения картины распределения требуется измерить серию кривых какой-либо из мод сканирования.

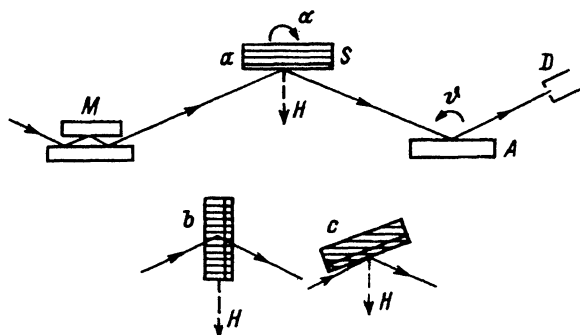


Рис. 1. Схема трехкристалльного дифрактометра. Образец в симметричной брэгговской (а), симметричной Лауэ (б) и асимметричной брэгговской геометрии (с).

M — монохроматор, S — образец, A — анализатор, D — детектор.

Эпитаксиальные гетероструктуры (как однослойные, так и многослойные) характеризуются изменением параметра решетки от одного слоя к другому, т.е. длиной вектора \mathbf{H} . Поэтому оптимальным для них представляется способ измерения серии кривых ω -сканирования при разных угловых положениях анализатора ϑ , соответствующих пересечению оси q_H в разных точках, особенно в узлах соответствующих слоев.

Результаты трехкристалльных измерений могут быть представлены как в виде серии кривых какой-либо из мод сканирования, так и в виде контуров равной интенсивности в плоскости рассеяния (двумерной карты).

Поскольку в данной работе речь идет об однослойных гетероструктурах с однородными по составу пленками, то результаты эксперимента анализируются в основном в терминах угловой полуширины рефлекса в двух направлениях — поперечном ($\perp \mathbf{H}$) и продольном ($\parallel \mathbf{H}$), обозначенных как $w \perp$ и $w \parallel$. Как уже отмечалось выше, первая из них получается из ω -сканирования, вторая из $\omega-2\omega$ -сканирования. В некоторых случаях $w \parallel$ определялась из интегрального распределения интенсивности вдоль \mathbf{H} , когда строилась зависимость интегральной интенсивности ω -кривых от угла анализатора ϑ .

В работе исследовались три системы гетероструктур с разным уровнем несоответствия: GaSb/GaAs ($\Delta a/a = 8\%$), GaAs/Si ($\Delta a/a = 4\%$), InSb/GaAs ($\Delta a/a = 16\%$).

Пленки выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии, их толщина варьировалась в пределах 1–6 μm .

2. Результаты

а) Рентгенодифракционный анализ. На рис. 2 представлены типичные кривые для отражения (004) образца GaAs/Si, полученные в двух направлениях сканирования. Значения полуширин $\perp \mathbf{H}$ и $\parallel \mathbf{H}$ для всех измеренных образцов приведены в табл. 1–3. Там же даны параметры кривых, измеренных в скользящей геометрии дифракции (СГД).

Из рис. 2 видно, что полуширины в направлении, перпендикулярном вектору дифракции, значительно больше, чем в продольном направлении, а данные таблиц показывают, что это имеет место для всех

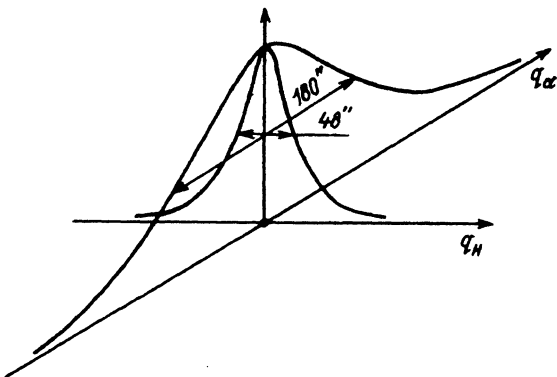


Рис. 2. Дифракционные кривые ω (вдоль q_α) и $\omega-2\omega$ (вдоль q_H) мод сканирования для образца № 13 GaAs/Si, 004-отражение, CuK_α -излучение.

Полуширины указаны в шкале порога образца.

Таблица 1

Полуширины (в угловых секундах) рефлексов в двух ортогональных направлениях в плоскости рассеяния параллельно ($w \parallel$) и перпендикулярно ($w \perp$) вектору обратной решетки \mathbf{H} для дифракционной геометрии ($\text{Cu}K_\alpha$ -излучение) для GaSb/GaAs

Номер образца	Симметричное отражение, $\mathbf{H}=[004]$		СГД, $\mathbf{H}=[220]$	
	$w \parallel$	$w \perp$	$w \parallel$	$w \perp$
813	40	154	—	—
777	48	160	45	140
785	53	165	—	—
764	58	215	60	200
759	—	—	40	140

Таблица 2

Полуширины рефлексов (в угловых секундах) в двух ортогональных направлениях в плоскости рассеяния параллельно ($w \parallel$) и перпендикулярно ($w \perp$) вектору обратной решетки \mathbf{H} и деформация эпитаксиальных слоев в системе GaAs/Si

Номер образца	t , μm	400— $\text{Cu}K_\alpha$		200— $\text{Cu}K_\alpha$	$\epsilon \cdot 10^{-4}$
		брэгговская геометрия		СГД*	
		$w \parallel$	$w \perp$	w	
13	6.5	48	180	210	-9.9
3	1.7	105	510	470	-11.7
1	1.2	210	900	—	-7.7
15	0.8	330	1900	1800	-2.3

* Для СГД дана полуширина двукристалльной кривой.

Таблица 3

Полуширины рефлексов (в угловых секундах) в двух ортогональных направлениях в плоскости рассеяния параллельно ($w \parallel$) и перпендикулярно ($w \perp$) вектору обратной решетки \mathbf{H} для эпитаксиальных пленок в системе InSb/GaAs

Номер образца	400— $\text{Cu}K_\alpha$ брэгговская дифракция	
	$w \parallel$	$w \perp$
867	150	403
900	82	195

образцов трех исследованных систем, т.е. независимо от того, каковы абсолютные значения этих величин. Отметим, что для систем GaAs/Si и InSb/GaAs полуширины варьируются в довольно широких пределах от образца к образцу в зависимости от условий выращивания. Для образцов системы GaSb/GaAs эксперимент дает более близкие значения $w \perp$ и $w \parallel$.

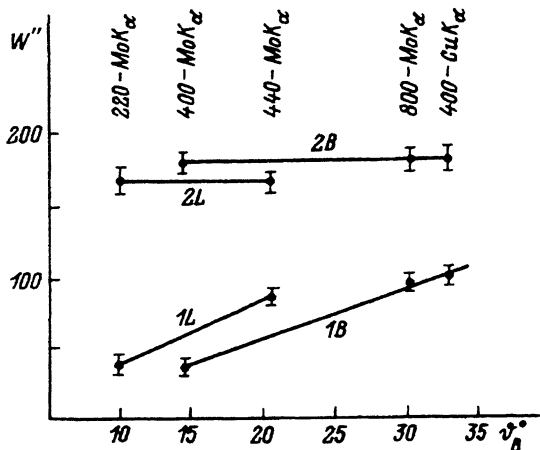


Рис. 3. Зависимость полуширины рефлексов, измеренных параллельно и перпендикулярно вектору обратной решетки, от брэгговского угла для образца № 13 (001)GaAs/Si.

1B, 1L, 2B, 2L — полуширины $w \parallel$ и $w \perp$ в Брэгг- и Лауэ-геометрии соответственно.

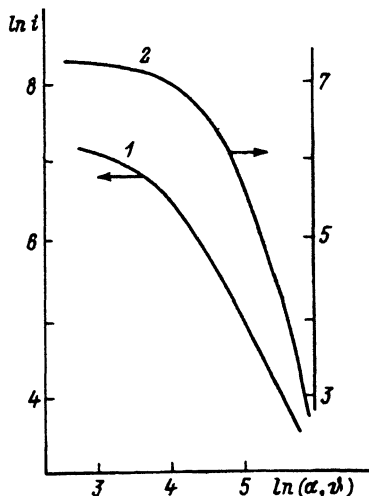


Рис. 4. Изменение интенсивности дифракции вдоль вектора обратной решетки (1) и перпендикулярно ему (2) для образца № 13 (001) GaAs/Si, 004-отражение, $\text{CuK}\alpha$ -излучение.

По оси абсцисс нанесены соответствующие углы анализатора ($\ln \vartheta$) и образца ($\ln \alpha$).

Для выяснения физической природы уширения рентгеновских рефлексов недостаточно двух параметров из описания ($w \perp$, $w \parallel$). Дополнительную информацию дает, как известно, зависимость полуширин рефлексов от брэгговского угла. Поэтому измерялись целая серия брэгговских рефлексов для $\text{MoK}\alpha$ и $\text{CuK}\alpha$ -излучений, а для системы GaAs/Si — также симметричные Лауэ-рефлексы 220, 440, 400.

Графики зависимости $w \perp$ и $w \parallel$ от брэгговского угла для одного из образцов системы GaAs/Si приведены на рис. 3. Аналогичные кривые были получены и для других образцов всех трех систем. Их анализ позволил вывести следующие закономерности: 1) полуширина кривых в перпендикулярном направлении не зависит от длины волны и порядка отражения, 2) полуширина отражения в параллельном направлении имеет зависимость, близкую к пропорциональной $\text{tg } \vartheta_B$.

Другой важной характеристикой дифракционных кривых, проливающих свет на природу структурных дефектов, является форма максимумов и закон изменения интенсивности на «хвостах» отражений. На рис. 4 на примере одного из образцов показано, как изменяется интенсивность дифракции в двух направлениях: перпендикулярно \mathbf{H} (для ω -кривой) и параллельно \mathbf{H} ($\omega-2\omega$ -кривая) с увеличением угла отклонения от брэгговского положения (в логарифмическом масштабе). Аналогичные зависимости имеют место и для других образцов. Из рис. 4 видно, что распределение интенсивности, перпендикулярное \mathbf{H} , имеет гауссовскую форму, хотя и с несколько более медленным уменьшением интенсивности на «хвостах» (близкую к $1/\alpha^{3-3.5}$). Что

касается формы кривой параллельно \mathbf{H} , то она близка к лоренцевскому виду

$$i \sim \frac{1}{\alpha^2 + w^2}, \quad (2)$$

т.е. изменение интенсивности описывается квадратичным законом.

С помощью измерения асимметричного брэгговского рефлекса было установлено, что во всех трех системах на гетерогранице пленка-подложка имеет место практически полная компенсация напряжений, т.е. в первом приближении $(\Delta d/d)_{\parallel} = (\Delta d/d)_{\perp}$, где Δd — разница в межплоскостных расстояниях пленки и подложки.

Для выявления малых остаточных или термоупругих напряжений было проведено сравнение отражения от пленки с соответствующим отражением эталонного монокристалла GaSb, GaAs с точной фиксацией разницы в «нулевых» углах анализатора ϑ_A

$$(\Delta d/d) = \frac{d^{\text{film}} - d^{\text{st}}}{d^{\text{st}}} = -1/2 (\vartheta_A^{\text{film}} - \vartheta_A^{\text{st}}) / \text{tg } \vartheta_B. \quad (3)$$

Для системы GaSb/GaAs зафиксированные таким образом деформации малы и составляют $|(\Delta d/d)'| < 2 \cdot 10^{-4}$.

Более ясная ситуация наблюдалась для системы GaAs/Si. Здесь также имело место уменьшение межплоскостного расстояния d_{\perp} пленки GaAs по сравнению с монокристаллом GaAs (табл. 2). Такой знак $(\Delta d/d)_{\perp}$ не может быть следствием неполной компенсации напряжений несоответствия, так как $a(\text{GaAs}) > a(\text{Si})$ и величина d_{\perp} должна увеличиваться по сравнению с межплоскостным расстоянием монокристалла за счет пуассоновских сил. Единственным объяснением наблюдаемого эффекта являются термоупругие напряжения, возникающие за счет разницы в коэффициентах теплового расширения $\gamma(\text{GaAs})$ и $\gamma(\text{Si})$. При этом разница между тангенциальными межплоскостными расстояниями d пленки GaAs и монокристалла GaAs будет

$$|(\Delta d/d)'|_{\parallel} = (\gamma_{\text{GaAs}} - \gamma_{\text{Si}}) \Delta T. \quad (4)$$

Для нормальной составляющей межплоскостного расстояния

$$|(\Delta d/d)'|_{\perp} = -\frac{\nu}{1-\nu} (\gamma_{\text{GaAs}} - \gamma_{\text{Si}}) \Delta T. \quad (5)$$

Наглядной иллюстрацией сказанного служит рис. 5, где изображены пики распределения интенсивности вдоль \mathbf{H} (в шкале углов анализатора) для симметричного брэгговского и симметричного лауэвского отражения 400- MoK_{α} -излучения для образца № 1. Пик брэгговского отражения смещен влево, а Лауэ-рефлекса — вправо от положения максимума для монокристалла-эталона, т.е. $(\Delta d/d)'_{\parallel} > 0$, $(\Delta d/d)'_{\perp} < 0$.

Заметные термоупругие напряжения обусловлены значительной разницей в коэффициентах теплового расширения GaAs и Si ($\gamma_{\text{GaAs}} = 6 \cdot 10^{-6}$, $\gamma_{\text{Si}} = 3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) [18]. Что касается разницы в значениях $(\Delta d/d)'_{\perp}$ для разных образцов, то она может быть вызвана или разницей в температуре выращивания, или неполным снятием несоответствия при образовании дислокаций.

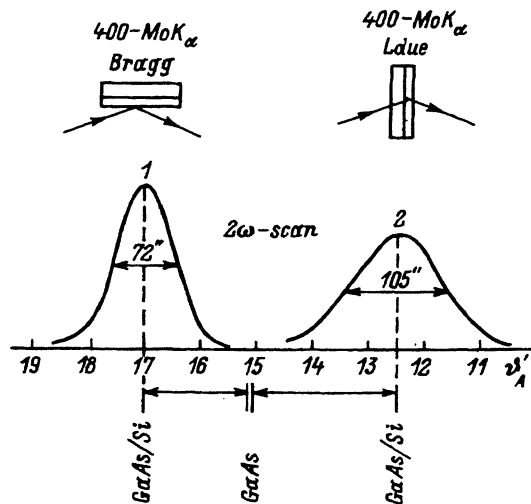


Рис. 5. Положение на угловой шкале анализатора пиков 2ω -сканирования отражения $004\text{-MoK}\alpha$ в симметричной брэгговской (1) и симметричной Лауэ-геометрии (2) для образца № 3 GaAs/Si относительно эталонного монокристалла GaAs.

Для системы GaAs/Si появляется еще одна дополнительная возможность анализа, поскольку здесь мы можем измерить рефлексы в Лауэ-геометрии с вектором обратной решетки, параллельным гетерогранице. Из рис. 3 видно, что для Лауэ-рефлексов имеют место те же закономерности изменения параметров $w \perp$ и $w \parallel$, как и в брэгговской геометрии. Однако ширины Лауэ-рефлексов отличаются от ширин брэгговских рефлексов. При этом уширение, нормальное к H , хотя и остается постоянным для разных порядков, меньше, чем соответствующая величина в брэгговской геометрии. С другой стороны, зависимость $w \parallel$ от брэгговского угла, также пропорциональная $\text{tg } \vartheta_B$, проходит несколько ниже, чем в брэгговском случае. В табл. 1, 2 приведены также ширины кривых, измеренных в СГД. При этом глубина проникновения излучения ($\text{CuK}\alpha$) в кристалл значительно меньше, чем в стандартной геометрии ($\sim 0.1 \text{ nm}$), т.е. только самый верхний слой эпитаксиальной пленки участвует в дифракции. И хотя здесь также возможно отличие $w \perp$ СГД и $w \parallel$ СГД от значений, полученных в симметричном рефлексе из-за другой геометрии измерений, близость w СГД к соответствующим величинам для стандартных дифракционных отражений указывает на одинаковый уровень структурного совершенства приповерхностного слоя (для СГД) и среднего объема пленки (для стандартной брэгговской геометрии).

б) Электронно-микроскопические наблюдения. В исследованных структурах, по данным ПЭМ, наблюдаются следующие дефекты: дислокации несоответствия (краевые Ломера и 60° -ного типа), прорастающие дислокации, дефекты упаковки, микродвойники и в случае системы GaAs/Si — антифазные границы.

На рис. 6, а, б представлена типичная дефектная структура в образцах № 13 (высокого совершенства) и № 15 (низкого совершенства) для системы (001) GaAs/Si (табл. 2). Несмотря на то что в зависимости от условий выращивания и разориентации подложки плотность дефектов и относительная доля дефектов разного типа варьируются в достаточно широких пределах, дислокационная структура эпитаксиальных

слоев демонстрирует общие черты для всех трех систем. Во-первых, плотность дислокаций существенно уменьшается на расстоянии примерно 200–400 нм от гетерограницы. Это видно на ПЭМ изображениях как для поперечных (001 GaAs/Si; рис. 6, *a*), так поперечных и планарных (№ 900, 001 InSb/GaAs; рис. 7, *a*, *b*) образцов. В последнем случае плотность дислокаций составляет 10^{10} см⁻² около границы и 10^8 см⁻² вблизи поверхности. Большинство дислокаций имеет вектор Бюргерса $a/2\langle 110 \rangle$, они лежат в плоскостях скольжения типа $\{111\}$. Вблизи поверхности они являются в основном винтовыми и распределены в первом приближении хаотически. Тем не менее наблюдаются также группы параллельных дислокаций с одним и тем же вектором Бюргерса, которые могут быть рассмотрены как фрагменты малоугловых границ.

Вблизи гетерограницы имеется трехмерная дислокационная сетка. Для (001) GaSb/GaAs и InSb/GaAs образцов электронно-микроскопические снимки поперечных срезов показывают, что средние расстояния между дислокациями несоответствия равны соответственно 5.5 и 2.8 нм. Анализ изображения высокого разрешения дислокационных ядер показывает, что большинство из них являются дислокациями типа Ломера с вектором Бюргерса $a/2\langle 110 \rangle$, лежащим в плоскости гетерограницы. Такая структура находится в соответствии с фактом полной компенсации напряжений несоответствия. Выявлены также и 60°-ные дислокации, генерируемые на гетерогранице в процессе ро-

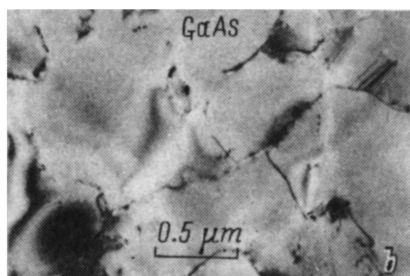
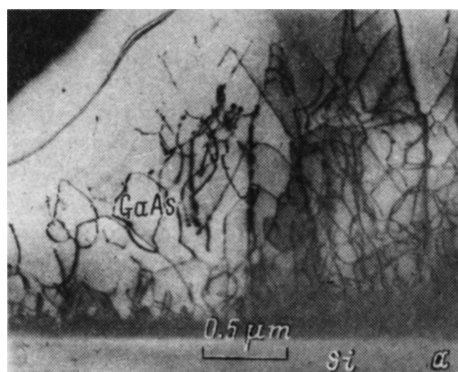


Рис. 6. Электронно-микроскопическое изображение поперечного (*a*) распределения дефектов для GaAs/Si (образец № 13, табл. 2) и планарного (*b*) для той же системы (образец № 15, табл. 2).

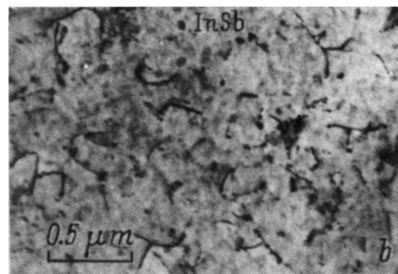
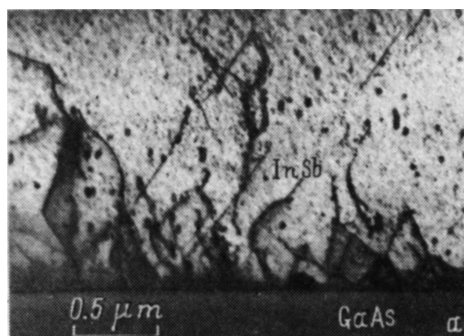


Рис. 7. Электронно-микроскопическое изображение поперечного (*a*) и планарного (*b*) распределения дефектов для InSb/GaAs (образец № 900, табл. 3).

ста слоёв. Их плотность меняется в достаточно широких пределах от образца к образцу в зависимости от условий роста и разориентации подложки. Эти дислокации в основном и ответственны за образование прорастающих дислокаций [19].

3. Обсуждение результатов

Основной задачей данного исследования является установление связи выявленных особенностей измеряемой дифракционной картины (усредненной по статистическому ансамблю дефектов) с конкретной дефектной структурой, наблюдаемой с помощью ПЭМ. Такая возможность основана на двух фактах, вытекающих из вышеизложенных экспериментальных результатов. Во-первых, общие закономерности: а) уширение рефлексов вдоль вектора \mathbf{H} и в перпендикулярном направлении, б) $w \perp > w \parallel$, в) $w \perp \neq f(\vartheta_B)$, г) $w \parallel \sim \text{tg } \vartheta_B$ имеют место для всех образцов независимо от типа подложки и пленки, ее толщины и режимов выращивания. Во-вторых, эти же образцы всех трех систем характеризуются одинаковой дислокационной структурой (по характеру распределения и типу дислокаций, хотя их плотность может сильно меняться от образца к образцу). Поэтому есть все основания заключить, что наблюдаемые дифракционные закономерности есть результат рассеяния на такого типа дислокационной структуре.

По данным ПЭМ, исследованные образцы имели условно три различные области с разной дислокационной структурой: плотная, частично регулярная сетка на гетерогранице, тонкий слой ($t \sim 0.2 \div 0.4 \mu\text{m}$) вблизи гетерограницы с высокой плотностью дислокаций ($\rho \sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$), толстый слой с много меньшей ($10^8 - 10^9 \text{ cm}^{-2}$) и слабо меняющейся плотностью дислокаций до самой поверхности. Поэтому вначале следует выяснить, какая из этих областей вносит определяющий вклад в уширение дифракционных рефлексов. Прежде всего нужно, очевидно, исключить влияние на рассеяние дислокационной сетки на гетерогранице. Основанием для этого является то, что дислокационная сетка полностью снимает напряжения несоответствия, т.е. плотность должна быть одинаковой для всех образцов одной системы, в то время как полуширины рефлексов могут сильно меняться от образца к образцу. Вероятно, для таких плотных сеток поля смещений не распространяются достаточно далеко, локализованы вблизи гетерограницы. Эта ситуация отличается от той, которая возникает в гетерокомпозициях с меньшим несоответствием параметров решеток подложки и слоя.

Из данных по полуширинам отражений видно, что соответствующие значения $w \perp$ и $w \parallel$ ложатся на одни и те же зависимости от брэгговского угла независимо от длины волны излучения. При этом глубина проникновения CuK_α - и MoK_α -излучений в кристалл для пленок InSb и GaSb существенно разная (например, для двух отражений с близкими брэгговскими углами ϑ : 200-CuK_α , $t_\mu = 1.23 \mu\text{m}$, 400-MoK_α , $t_\mu = 5.2 \mu\text{m}$). Это говорит о том, что нижний прилегающий к гетерогранице слой с большой плотностью дислокаций также вносит малый вклад в измеряемую интенсивность дифракции. Об этом же свидетельствуют и близкие значения полуширин отражений для СГД и стандартной брэгговской геометрии.

Таким образом, основной вклад в измеряемые рефлексы вносит верхний толстый слой эпитаксиальной пленки и именно с его дислокационной структурой и связаны наблюдаемые дифракционные закономерности.

Установление соответствия между искажениями решетки и обусловленной ими дифракционной картиной осуществляется двумя путями. Первый из них состоит в решении прямой задачи расчета дифракционной картины для статистического ансамбля дислокаций заданного типа с характерными направлениями линий дислокаций, векторов Бюргера и параметрами распределения дислокаций в слое. Этот подход достаточно сложен, трудоемок, и вряд ли возможно при этом строгое решение задачи без каких-либо дополнительных приближений. Кроме того, он ничего не дает в смысле установления обратной связи (решения обратной задачи) — получения параметров дефектов из дифракционных данных. Поэтому более естественным представляется сравнение полученных данных с картиной дифракции в кристаллах, в которых дефектные структуры заданы с помощью достаточно простых с ограниченным числом параметров моделей. Таких моделей для дислокационных искажений может быть предложено несколько, их обзор дан в [20].

Наиболее часто встречающейся в дифракционном анализе является модель блочного кристалла. Именно она используется в подавляющем числе случаев анализа нарушенных эпитаксиальных структур [21–23]. Эта модель характеризуется следующими параметрами: эффективный размер блоков $\langle t \rangle$, их средняя разориентация $\langle w \rangle$ и внутренние деформации в них $\langle \varepsilon \rangle$. Все эти величины могут быть получены из зависимости угловой ширины рефлекса в двух направлениях от брэгговского угла. При этом для симметричных брэгговских отражений $w \parallel$ состоит из двух составляющих

$$w \parallel^t = \frac{\lambda}{2\langle t_1 \rangle \cos \vartheta}, \quad w \parallel^\varepsilon = 2\langle \varepsilon \rangle \operatorname{tg} \vartheta_B, \quad (6)$$

а $w \perp$ — из не зависящей от брэгговского угла (ϑ_B) $w \perp^\omega$ и

$$w \perp^t = \frac{\lambda}{2\langle t_2 \rangle \sin \vartheta_B}. \quad (7)$$

Здесь $\langle t_1 \rangle$ и $\langle t_2 \rangle$ — эффективные размеры блоков в направлении, перпендикулярном гетерогранице и тангенциальном (параллельном) соответственно.

Полученные нами дифракционные данные показывают, что основной вклад в уширение вносят разориентация блоков ($w \perp = \operatorname{const}(\vartheta_B)$) и внутренние деформации в них ($w \parallel \sim \operatorname{tg} \vartheta_B$). Размерный эффект в пределах точности определения $w \perp$ и $w \parallel$ не виден, что в рамках блочной модели указывает на большие размеры блоков: $\langle t_1 \rangle > 0.8 \mu\text{м}$, $\langle t_2 \rangle > 1.0 \mu\text{м}$.

Следует заметить, что блочные кристаллы являются вполне определенной физической реальностью. Однако в нашем случае структура сильно рассогласованных эпитаксиальных слоев, по данным ПЭМ, существенно отличается от такого представления, использующегося при анализе рентгенодифракционных данных. И только в худших по качеству образцах системы GaAs/Si с помощью ПЭМ наблюдались от-

дельные блоки с более или менее четкими границами. Для всех других образцов блочное строение кристалла может быть использовано лишь в качестве очень грубого модельного представления.

С другой стороны, более близкое к наблюдаемой дислокационной структуре исследованных слоев представление о полностью хаотическом распределении прямолинейных дислокаций также не объясняет всех полученных дифракционных закономерностей. Хотя тангенциальная зависимость продольного уширения (параллельно вектору \mathbf{H}) полностью согласуется с таким распределением [20] и по формулам из $w \parallel$ получаются близкие к ПЭМ оценкам плотности дислокаций ($\rho \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$ для лучших по качеству образцов), очень большие значения поперечного уширения рефлексов (во всех случаях $w \perp$ значительно больше $w \parallel$, что наблюдалось и другими авторами [6]) не укладываются в модель хаотического распределения. Еще одно противоречие с последним заключается в законе спадания интенсивности на «хвостах» кривых качания ($\sim 1/\alpha^2$ в эксперименте и $1/\alpha^3$ по теории [20]).

Большая величина поперечного уширения (причем во всех трех геометриях измерения) не может быть связана с упругими полями смещений отдельных хаотически распределенных дислокаций. Для ее объяснения требуется предположить группирование дислокаций с одинаковыми векторами Бюргера. Именно такая структура приводит к образованию дислокационных стенок и значительному развороту соседних областей кристалла. Однако в нашем случае малоугловые границы в чистом виде отсутствуют. Это становится понятным при учете другого полученного нами результата, а именно того, что поперечное уширение кривых отражения для системы GaAs/Si больше в геометрии Брэгга по сравнению с Лауэ-дифракцией. Если бы имели дело только с малоугловыми границами, приводящими к развороту областей когерентного рассеяния, то развороты вокруг осей, лежащих в плоскости гетерограницы, давали бы одинаковые значения $w \perp^L$ и $w \perp^B$.

Очевидно, что уширение дифракционных отражений в разных геометриях съемки может быть увязано непосредственно со среднеквадратичными значениями компонент тензора микродисторсий в эпитаксиальном слое. При этом продольные уширения, параллельные соответствующему вектору обратной решетки, дают диагональные компоненты, а перпендикулярные вектору \mathbf{H} — недиагональные (сдвиговые) компоненты. В этом смысле разница в значениях w в Брэгг- и Лауэ-геометриях указывает на присутствие деформаций, обусловленных хаотически распределенными (неупорядоченными) дислокациями.

Тензор дисторсии описывается искажения, вызываемые дислокационным ансамблем. Его компоненты связаны с компонентами тензора плотности дислокаций. В настоящем эксперименте не были получены данные по всем компонентам тензора дисторсии, необходимые для описания дислокационного ансамбля. Однако уже в результате предварительного анализа можно сказать, что наблюдаемая разница в полуширинах дифракционных отражений ($w \parallel^B < w \parallel^L$ и $w \perp^L > w \perp^B$) говорит о преимущественном направлении линий дислокаций — перпендикулярном гетерогранице, — если их вектор не лежит в этой границе. Как уже отмечалось, два аспекта электронно-микроскопического анализа подтверждают эти выводы: преимущественно винтовой характер прорастающих и выходящих под углом к поверхности дислокаций

и присутствие групп одноименных дислокаций, образующих фрагменты малоугловых границ.

В заключение следует отметить, что качество лучших (по структурному совершенству) образцов для всех трех исследованных систем мало отличается друг от друга (табл. 1-3), т.е. не зависит от степени несоответствия. С другой стороны, влияние условий выращивания гораздо существенней сказывается на структурном совершенстве эпитаксиальных пленок. Эта особенность связана с трехмерным «островковым» механизмом роста таких пленок, при котором основную роль при дефектообразовании играет не критическая толщина пленки (которая в данной технологии очень мала), а скорость нормального и латерального роста островков и их коалесценция. Данный вопрос уже обсуждался в [16], он не является предметом рассмотрения данной статьи и поэтому нет необходимости подробно на нем останавливаться.

Работа поддержана Международным научным фондом и Американским физическим обществом.

Список литературы

- [1] Chu S.N.G., Macrander A., Sturge K.E., Jonson W.P. // J. Appl. Phys. 1986. V. 57. P. 249-257.
- [2] Кютт Р.Н., Хапачев Ю.П. // ЖТФ. 1993. Т. 63. № 12. С. 50-61.
- [3] Hill M.J., Tanner B.K., Halliwell M.A.G., Lyons M.H. // J. Appl. Cryst. 1985. V. 18. P. 446-451.
- [4] Tapfer L., Ploog K. // Phys. Rev. 1986. V. B33. P. 5565-5574.
- [5] Fantner E.J. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 47. P. 803-805.
- [6] Itoh N., Okamoto K. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. P. 1486-1491.
- [7] Lucas C.A., Hatton P.D., Bates S., Ryon T.W., Miles S., Tanner B.K. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. P. 1936-1940.
- [8] Кютт Р.Н., Аргунова Т.С. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 40-45.
- [9] Fewster P.F. // J. Appl. Cryst. 1989. V. 22. P. 64-70.
- [10] Koppensteiner E., Springholz G., Hamberger P., Bauer G. // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. P. 6062-6071.
- [11] Lucas N., Zabel H., Morcoc H., Unlun H. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. P. 2117-2119.
- [12] Lum R.M., Klingert R.B., Bylisma R.B., Glass A.M., Macrander A.T., Harris T.D., Lamont M.G. // J. Appl. Phys. 1988. V. 64. P. 6727-6732.
- [13] Soga T., Nozaki S., Noto N. // Jap. J. Appl. Phys. 1989. V. 28. P. 2441-2445.
- [14] Faterni M., Chaudhuri J., Mittereder J., Christov A. // J. Appl. Phys. 1993. V. 73. P. 1154-1160.
- [15] Rocher A.M. // Solid State Phenomena. 1991. V. 19&20. P. 563-572.
- [16] Кютт Р.Н., Шольд Р., Рувимов С.С., Аргунова Т.С., Будза А.А., Иванов С.В., Копьев П.С., Сорокин Л.М., Шеглов М.П. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 3. С. 724-725.
- [17] Антипов В.Т., Каллион Р.В., Кютт Р.Н., Никишин С.А., Рувимов С.С., Сивявский Д.В., Соловьев В.А., Сорокин Л.М., Фалеев Н.Н., Шеглов М.П. // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. № 2. С. 1-5.
- [18] Thermophysical Properties of Matters / Ed. Y.S.Toulouksian, K.K.Kirby, R.E.Taylor and T.Y.Lec. Plenum, New York, 1975. V. 12&13.
- [19] Showalter L.J., Hall E.L., Lewis N., Hashimoto S. // Thin Solid Films. 1990. V. 184. P. 437.
- [20] Рябошапка К.П. // Завод. лаб. 1981. № 5. С. 26-28.
- [21] Macrander A.T., Schwartz G.P., Guallieri G.J. // J. Appl. Phys. 1988. V. 64. P. 6733-6745.
- [22] Chauchari J., Shah S., Harbison J.P. // J. Appl. Phys. 1989. V. 66. P. 5573-5575.
- [23] Holy V., Kubena J., Abramof E., Lischka K., Peesek A., Koppensteiner E. // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. P. 1736-1743.