

01; 06; 07

© 1990 г.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ НА СВЕРХРЕШЕТКЕ

В. И. Пунегов

Построена статистическая динамическая теория дифракции на гармонической сверхрешетке. Модель сверхрешетки, помимо среднестатистического периодического профиля деформации, предполагает наличие случайных смещений атомов за счет флуктуаций концентрационного состава или присутствия микродефектов. Основными параметрами теории являются статический фактор Дебая—Валлера и корреляционная длина. Анализируется дифракция в модулированном кристалле с однородно распределенными микродефектами для наиболее простых корреляционных функций. Корреляционная длина сверхрешетки выражается через функции Бесселя. Обсуждается случай малых амплитуд модуляции.

Проведены численные расчеты кривых дифракционного отражения сверхрешетки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на толстой подложке GaAs в зависимости от значения статического фактора. Показано влияние диффузного рассеяния на форму основного максимума и первого сателлита сверхрешетки.

Введение

Дифракция рентгеновских лучей (РЛ) — эффективный неразрушающий метод исследования полупроводниковых [1] и ультразвуковых [2] сверхрешеток (СР). В основе теоретических исследований дифракции на гармонической СР лежат уравнения Такаги—Топэна [1]. Для расчетов кривых дифракционного отражения (КДО) от полупроводниковых СР с резкими изменениями параметров решетки на границах слоев используются рекуррентные соотношения [3]. Эти соотношения эффективно применяются для исследования дифракции на дискретно-слоистых кристаллах (гетероструктурах, эпитаксиальных пленках и т. д.) [4].

В рамках формализма дарвиновского суммирования волн [5] получены рекуррентные соотношения в резко асимметричной [6, 7] и в скользящей [8] геометриях, а также в условиях многоволновой дифракции [9].

Качество искусственно выращенных СР зависит от технологии их изготовления, однако при самой совершенной технологии не всегда удается избежать возникновения различных структурных дефектов СР. В ряде случаев дефектность структуры создается преднамеренно с целью управления энергетическим спектром СР.

Случайные отклонения состава твердого раствора от предполагаемого концентрационного профиля и другие микродефекты приводят к мелкомасштабным флуктуационным отклонениям параметра решетки и электронной плотности СР от заданного закона модуляции. Эти случайные атомные смещения приводят к диффузному фону, влияние которого на формирование двухкристалльных КДО не исследовано.

Как правило, при построении теории дифракции РЛ на сверхрешетке в рассмотрение берется лишь когерентное рассеяние, в то время как в эксперименте метода двухкристалльной дифрактометрии регистрируется суммарная интенсивность когерентно и диффузно рассеянных волн.

Основы статистической динамической теории дифракции для точечного источника в геометрии Лауэ заложены в [10]. Последовательный учет углового распределения когерентной, диффузной и суммарной интенсивности в рамках

статистической подхода проведен в работе [11]. В [12] предложена статистическая динамическая теория дифракции на кристалле с изменяющимся по толщине параметром решетки.

Исходя из общих положений [12] в данной работе рассматривается статистическая динамическая теория дифракции РЛ на гармонической СР.

Модель сверхрешетки и основные уравнения теории

Рассмотрим брэгговскую динамическую дифракцию РЛ на гармонической СР без учета модуляции электронной плотности. Параметр решетки в данной модели изменяется по толщине СР согласно закону

$$a(z) = a_0 + \Delta a \cos(2\pi z/L), \quad (1)$$

где a_0 — среднее значение параметра решетки; Δa , L — амплитуда и период модуляции СР.

Функция атомных смещений, соответствующая (1), имеет вид

$$u(z) = u_0 \sin(2\pi z/L), \quad (2)$$

где $u_0 = \Delta a \cdot L (2\pi a_0)^{-1}$.

Динамическая дифракция в деформированном кристалле описывается уравнениями Такаги. При наличии микродефектов смещение атомов относительно их положения в идеальной решетке в этих уравнениях можно представить в виде $\mathbf{u} = \langle \mathbf{u} \rangle + \delta \mathbf{u}$, где $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение, $\delta \mathbf{u}$ определяет случайные атомные смещения относительно среднестатистического профиля деформации СР. Причинами возникновения $\delta \mathbf{u}$ могут быть случайные отклонения амплитуды и периода модуляции от технологически заданного периодического закона, кластерные образования примесных атомов, скопления вакансий и т. п.

В общем случае флюктуационные мелкомасштабные смещения $\delta \mathbf{u}$ имеют не одномерную, а более сложную координатную зависимость. Строго говоря, это требует решения двумерной дифракционной задачи. Однако дальнейшее последовательное статистическое усреднение (см., например, [11, 13]) дает возможность использовать одномерные уравнения Такаги—Топэна. Для конкретных моделей дефектов корреляционные функции и корреляционные длины можно независимо рассчитать из более строгих подходов [14].

Используя процедуру статистического усреднения [10], получаем уравнения Такаги для когерентных полей, которые в свою очередь приводятся к уравнению Топэна [15]

$$i \frac{dQ}{dz} = \sigma_{-g} E Q^2 + Y Q + \sigma_g E, \quad (3)$$

где $Q = (E_g^0/E_0) \exp(i g \langle \mathbf{u} \rangle)$; $E_{0, g}^0$ — амплитуды когерентных полей в направлении прохождения и дифракции; g — вектор дифракции; $E = \langle \exp(i g \delta \mathbf{u}) \rangle$ — статистический фактор Дебая—Валлера.

В общепринятых обозначениях [16] коэффициенты $\sigma_{\pm g}$ имеют вид $\sigma_{\pm g} = \pi \chi_{\pm g} c / (\lambda |\gamma_{g, 0}|)$. Учет статистики микродефектов приводит к появлению дополнительного слагаемого $i 2\rho$ в выражении для Y

$$Y = \eta - \frac{d g \langle \mathbf{u} \rangle}{dz} + i 2\rho. \quad (4)$$

Здесь угловая переменная $\eta = (\pi/\lambda \gamma_0) [\chi_0(1+b) + 2b\Delta\vartheta \sin 2\vartheta_0]$ определяется величиной угловой отстройки, где ϑ_0 — угол Брегга для среднего значения параметра решетки СР. Диффузное поглощение когерентно рассеянных волн в уравнении (3) зависит от значения коэффициента $\rho = \sigma_g \sigma_{-g} (1 - E^2) \tau$. В этом соотношении корреляционная длина

$$\tau = \int_0^{\infty} \exp\{i\eta\xi - i g [\langle \mathbf{u}(z+\xi) \rangle - \langle \mathbf{u}(z) \rangle]\} G(\xi, z) d\xi \quad (5)$$

является функцией координаты z вглубь кристалла и величины углового параметра η . Статистическое распределение микродефектов по толщине СР определяется корреляционной функцией

$$G(\xi, z) = (1 - E^2)^{-1} \langle e^{-ig[\delta u(z+\xi) - \delta u(z)]} \rangle - E^2. \quad (6)$$

Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности находится из решения (3) $I_g^c(\Delta\vartheta) = |Q(\Delta\vartheta, z=0)|^2$. Уравнения для интенсивности диффузно рассеянных волн выводятся по известной процедуре [10, 11] с использованием уравнений Такаги для полных и когерентных амплитуд. В геометрии Брэгга для реально создаваемых толщин СР l угловое распределение интенсивности некогерентно рассеянных волн следует из интегрального выражения

$$I_g^d(\Delta\vartheta) = -2|\sigma_g|^2(1 - E^2) \int_0^l \overline{\tau_d(z, \Delta\vartheta)} \exp(-\mu_c z) I_0^c(z) dz, \quad (7)$$

где коэффициент μ_c определяется фотоэлектрическим и диффузным поглощением, $I_0^c(z)$ — когерентная интенсивность проходящей волны, $\overline{\tau_d(z, \Delta\vartheta)} = \text{Re } \tau$.

Корреляционная длина

Одним из основных параметров статистической динамической теории дифракции является корреляционная длина. Определение τ в виде (5) является наиболее общим, так как оно учитывает изменение параметра решетки и неоднородное распределение дефектов по толщине кристалла.

В данной работе для анализа корреляционной длины проведем ряд упрощений. Рассмотрим симметричную брэгговскую дифракцию на модулированном кристалле с кубической решеткой. Параметры, определяющие профиль деформации (1), представим в виде $\Delta a = \langle \Delta a \rangle + \delta a$; $L = \langle L \rangle + \delta L$, где $\langle \Delta a \rangle$, $\langle L \rangle$ — среднестатистические значения амплитуды и длины модуляции; δa и δL — соответствующие мелкомасштабные случайные отклонения этих параметров.

В строгой постановке задачи корреляционная функция (6) ищется через флуктуационные смещения $\delta \mathbf{u} = \delta \mathbf{u}(\delta a, \delta L)$ при заданной функции распределения случайных параметров δa и δL . Эта проблема требует дополнительных исследований и представляет отдельную задачу.

Следуя [10, 11], в рассмотрение введем более общую характеристику среды — корреляционную длину Като τ_0 [10] и ограничимся однородным распределением микродефектов.

В выражении для корреляционной длины СР присутствует поле атомных смещений вида $\mathbf{g} \langle \mathbf{u} \rangle = A \sin \nu z$, где $\nu = 2\pi/\langle L \rangle$, $A = \langle \Delta a \rangle \langle L \rangle n/a_0^2$, n — порядок отражения. Обычно для реальных полупроводниковых СР $\langle \Delta a \rangle/a_0 \sim 10^{-3} - 10^{-4}$; $\langle L \rangle \sim 10^{-1} - 10^{-3}$ мкм, при этом величина A порядка $10^{-2} - 10$. Для малых значений A ($A \leq 0.3$) в разложении экспоненты $\exp\{-iA \sin \nu(\xi + z)\}$ в ряд по функциям Бесселя [17]

$$e^{-iA \sin \nu(\xi + z)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(A) e^{-im\nu(\xi + z)}$$

можно ограничиться тремя членами ($m=0, \pm 1$).

В результате корреляционная длина СР запишется в виде

$$\tau = e^{iA \sin \nu z} \sum_{m=-1}^1 J_m(A) e^{-im\nu z} \int_0^{\infty} G(\xi) e^{i(\eta - m\nu)\xi} d\xi. \quad (8)$$

В этом выражении слагаемое с $J_0(A)$ отвечает за диффузное поглощение дифрагированного излучения и угловое распределение некогерентно рассеянных волн в области основного максимума СР. Члены с $J_{-1}(A)$ и $J_1(A)$ описывают распределение когерентной и диффузной интенсивности в угловом интервале первых сателлитов.

Численное моделирование КДО гармонической СР $Al_xGa_{1-x}As$ на толстой (полубесконечной) подложке GaAs выполнено на основе соотношений (3) и (7). В расчетах использованы параметры, соответствующие (004) отражению σ -поляризованного K_{a1} -излучения. Толщина СР соответствовала 3 мкм, период модуляции $\langle L \rangle = 0.06$ мкм, $\langle \Delta a \rangle / a_0 = 2 \cdot 10^{-4}$. Рассогласование $(a_0 - a_s) / a_0$ среднего параметра a_0 СР и параметра решетки подложки a_s равно 10^{-4} .

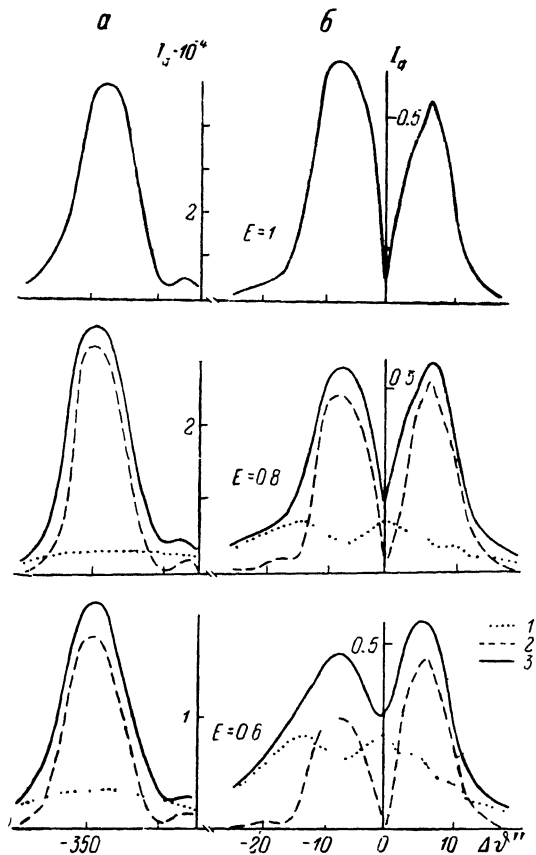


Рис. 1. Кривые дифракционного отражения для различных значений статического фактора E . Толщина сверхрешетки 3 мкм, $\tau_0 = 0.3$ мкм. a — первый сателлит, b — максимумы сверхрешетки (слева и подложки; 1 — диффузная, 2 — когерентная, 3 — суммарная интенсивности.

В качестве корреляционных функций однородно распределенных микродефектов выбраны простые зависимости вида

$$G(\xi) = \exp(-\pi\xi^2/4\tau_0^2),$$

$$G(\xi) = \exp(-\xi/\tau_0),$$

для которых интеграл в (8) вычисляется

$$\int_0^{\infty} \exp\{i\eta_m \xi - \pi\xi^2/4\tau_0^2\} d\xi = \tau_0 \exp\{-\tau_0^2 \eta_m^2 / \pi\} (1 + \operatorname{erf}[i\tau_0 \eta_m / \sqrt{\pi}]),$$

$$\int_0^{\infty} \exp\{(i\eta_m - 1/\tau_0)\xi\} d\xi = \tau_0 \{1 + (\eta_m \tau_0)^2\}^{-1} (1 + i\eta_m \tau_0),$$

где $\operatorname{erf}[\dots]$ — интеграл вероятностей, $\eta_m = \eta - m\nu$.

На рис. 1 представлены участки КДО сверхрешетки, соответствующие угловому распределению рассеянной интенсивности в области первого левого

спутника (профиль правого спутника для принятой модели имеет зеркально-симметричный вид) и основного максимума.

В отсутствие дефектов ($E=1$) основной пик СР, расположенный слева от пика подложки, по интенсивности превышает последний. Оба максимума сравниваются по высоте при значении статического фактора $E=0.8$. Заметим, что в угловой области расположения основного пика СР имеется экстинкционный провал диффузного фона. Интерференция волн, отраженных от СР и подложки, является причиной появления осцилляций на кривой диффузного рассеяния в угловой области пика подложки. Увеличение степени аморфизации СР ($E=0.6$) влечет уменьшение когерентной и увеличение диффузной компоненты рассеянной интенсивности. Некогерентно рассеянное излучение для значений статических факторов $E \leq 0.6$ сильнее влияет на профиль основного пика, чем на профиль спутника.

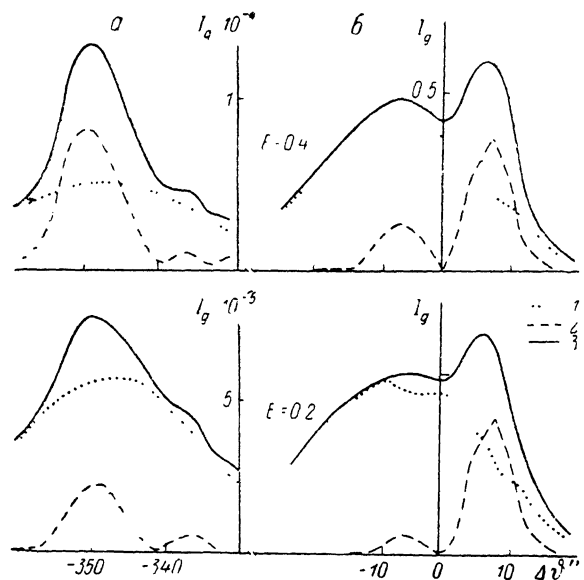


Рис. 2. Кривые дифракционного отражения сверхрешетки (рис. 1) с большой степенью аморфизации.

1 — диффузная, 2 — когерентная, 3 — суммарная интенсивности.

При большой степени аморфизации СР (рис. 2) профиль спутника и основного пика определяет диффузно рассеянное излучение.

Расчеты КДО, представленные на рис. 1 и 2, выполнены с использованием гауссовской корреляционной функции ($\tau_0=0.3$ мкм). Соответствующие вычисления с корреляционной функцией вида $G(\xi)=\exp(-\xi/\tau_0)$ имеют незначительное отличие. Это отличие заключается в формировании профиля диффузно рассеянной интенсивности, который более резко спадает с изменением угловой отстройки.

Установлено, что независимо от вида корреляционной функции уменьшение значения τ_0 дает уменьшение интенсивности диффузного фона и делает его более протяженным по углам.

В заключение отметим, что данная теория построена в рамках наиболее общих характеристик ерды — статического фактора Дебая—Валлера и корреляционной длины. Статический фактор определяет степень совершенства всей сверхрешетки.

Можно очертить дальнейшие пути развития теории. Это прежде всего конкретизация моделей дефектов, учет модуляции рассеивающей способности СР и, наконец, исследование явления дифракции в случае неоднородного распределения микродефектов.

Список литературы

- [1] Хапачев Ю. П., Кузнецов Г. Ф. // Кристаллография. 1983. Т. 28. № 1. С. 28—31.
 [2] Энтин И. Р. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. Вып. 1. С. 214—222.
 [3] Колпаков А. В., Беллев Ю. Н. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика. Астрон. 1985. Т. 26. № 3. С. 91—93.
 [4] Bartels W., Hornstra J., Lobeck D. J. W. // Acta Cryst. A. 1986. Vol. 42. P. 539—545.
 [5] Darwin C. G. // Phil. Mag. 1914. Vol. 27. P. 675—690.
 [6] Punegov V. I., Ladanov A. V. // Collected Abstracts of 12th Europ. Cryst. Meeting. Moscow, 1989. Vol. 3. P. 93.
 [7] Пунегов В. И., Ладанов А. В. // Поверхность. 1990. № 4. С. 45—50.
 [8] Пунегов В. И., Ладанов А. В. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 11. С. 188—189.
 [9] Ladanov A. V., Punegov V. I. // Collected Abstracts of 12th Europ. Cryst. Meeting. Moscow, 1989. Vol. 3. P. 137.
 [10] Kato N. // Acta Cryst. A. 1980. Vol. 36. N 5. P. 763—769.
 [11] Бушует В. А. // Кристаллография. 1989. Т. 34. № 2. С. 279—287.
 [12] Пунегов В. И. // Тез. III Совещания по Всесоюз. межвузовской программе «Рентген». Ереван, 1989. С. 22, 38.
 [13] Петрашень П. В. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 1. С. 35—43.
 [14] Бушует В. А. ВИНТИ. № 486-В88. Деп. в МГУ. М., 1988. 51 с.
 [15] Taurin D. // Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst. 1964. Vol. 87. P. 469—512.
 [16] Афанасьев А. М., Александров П. А., Иمامов Р. М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М.: Наука, 1989. 152 с.
 [17] Никифоров А. Ф., Уваров В. Б. Основы теории специальных функций. М.: Наука, 1974. 304 с.

Сыктывкарский государственный
университет

Поступило в Редакцию
24 января 1989 г.