

Наименьшее число пар слоев, необходимое для проявления сателлитной структуры при рентгеновской дифракции на сверхрешетках. Измерения и расчет упругих напряжений в чередующихся слоях сверхрешеток

© Г.Ф. Кузнецов[¶]

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
141190 Фрязино, Россия

(Получена 17 марта 2008 г. Принята к печати 10 мая 2008 г.)

Сверхрешетки типа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$ с величиной периода $T \geq 100$ нм изучены методами рентгеновской дифрактометрии и топографии. Показано, что для проявления в рентгенодифрактометрическом спектре сателлитов, необходимых для идентификации и измерения параметров сверхрешеток на монокристаллической подложке, достаточно нарастить только две пары чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Рентгенодифрактометрический метод позволяет обнаруживать и измерять параметры упругодеформированных и пластически деформированных сверхрешеток. Дана теория расчета и рассчитаны величины упругих напряжений в чередующихся слоях сверхрешеток $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$: для $N_1 = 10$ пар $\sigma_{2N} = 4.37 \cdot 10^5$ Па и $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Па, для $N_2 = 2$ $\sigma_{2N} = 6.16 \cdot 10^6$ Па и $\sigma_{2N-1} = -2.8 \cdot 10^7$ Па. Напряжение $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Па вызывает пластическую деформацию в слоях твердого раствора сверхрешетки с $N_1 = 10$.

PACS: 73.21.Cd, 61.05.-a

1. Введение

В последние десятилетия интенсивно разрабатываются технологии наращивания сверхрешеточных гетероэпитаксиальных структур и систем с малым числом квантовых ям [1–16]. Использование таких структур весьма перспективно в современной нанoeлектронике. Отсюда очевидна актуальность и рентгеновского определения наименьшего числа пар слоев, необходимых для проявления сверхрешеточных дифракционных эффектов. Кинематическая теория рентгеновской дифракции [10,11] показывает, что сателлиты нескольких порядков $J_{\pm j}$, располагающиеся по обеим сторонам от основного максимума J_0 сверхрешетки, являются необходимым и достаточным условием для рентгеновской идентификации и измерения параметров любых сверхрешеток. Однако методы исследования дефектов кристаллической решетки в самих сверхрешетках, как и в сложных сверхрешеточных структурах, остаются все еще недостаточно разработанными.

Для исследования дефектной структуры монокристаллов, гетероструктур и сверхрешеточных структур фирма „Филипс“ создала автоматический пятикристальный рентгеновский спектрометр [17,18], предлагая измерение ширины дифракционной кривой качания (ДКК) в качестве главного метода оценки совершенства кристаллической решетки. Рентгеновский метод ДКК является интегральным методом, однако из ширины ДКК нельзя получить ответа на главные вопросы, которые давали бы возможность быстро оптимизировать технологию выращивания многослойных приборных структур. Эти вопросы следующие: 1) Какие именно типы дефектов

кристаллической решетки имеются в анализируемой гетероструктуре? 2) Сколько дефектов и где они локализованы в монокристаллической системе? 3) Вследствие каких именно физических и технологических причин они образовались в растущем монокристалле или гетероэпитаксиальной приборной структуре? Далее мы покажем, что метод ДКК обеспечивает, к сожалению, лишь весьма ограниченные возможности в анализе дефектов структуры. Дефекты кристаллических решеток в самих сверхрешетках изучались в незначительной степени [2–6,7,9].

Автор предложил вместо одного рентгеновского метода ДКК использовать целый комплекс неразрушающих рентгеновских дифрактометрических и топографических методов для исследования дефектов кристаллической решетки монокристаллов-подложек, гетероэпитаксиальных многослойных структур, отдельных сверхрешеток и сложных сверхрешеточных приборных структур [2–9,14–16,19–26]. При этом в рентгенодифрактометрии (РД) автор использовал как геометрию вульф–брэгговской дифракции на внешнее отражение [2–9,14–16,25], так и геометрию Лауэ дифракции на прохождение через гетеросистему [7,24]. Последний метод [24] дает лучшие возможности в количественном измерении и расчете величин плотностей дислокаций в тонких гетероэпитаксиальных слоях при использовании теории дислокаций [27]. К методу ДКК был добавлен его более универсальный аналог — метод дифракционных псевдокривых качания (ДПКК) [7,14,26].

В 60-х годах XX века появилась рентгенотопография как прямой метод исследования дефектов кристаллической решетки пластинок монокристаллов. Для исследования дефектов монокристаллов, слабопоглощающих рентгеновское излучение, мы использовали рентгеното-

[¶] E-mail: gfk217@ire216.msk.su

пографический метод Лагна [19–21], для сильнопоглощающих — метод Бормана [22,23]. Были разработаны физические основы количественного рентгеновского топографического и дифрактометрического анализа дефектов кристаллической решетки массивных монокристаллов полупроводников, полупроводниковых пятислойных лазерных гетероструктур и сверхрешеточных приборных структур [5–9,14–16,23,25].

Решение поставленной проблемы принципиально важно для идентификации самих сверхрешеток [1–16], наноструктур [27] и для разработки количественной теории рентгеновской дифракции на сверхрешеточных многослойных гетероэпитаксиальных приборных структурах. Особенно важно разработать теорию дифракции на реальных приборных структурах с несколькими сверхрешетками при различных величинах периодов и количествах пар чередующихся слоев в каждой из сверхрешеток [2–16] или наноструктур [28].

2. Методика эксперимента

Двухкристальный рентгеновский спектрометр (ДКРС) реализован нами на базе серийного рентгеновского дифрактометра типа ДРОН-2 [7]. Для этого пришлось увеличить на 6° угол вращения установочной плиты для ГУР-5 и добавить устройство, фиксирующее плиту.

В качестве монохроматора использовали пластинку малодислокационного монокристалла (001)Ge в отражении (004)CuK α_1 рентгеновского излучения. Для получения монохроматического излучения CuK α_1 после монохроматора установили две щели шириной 50 мкм. Это позволило отсесть из дублета вторую линию CuK α_2 рентгеновского излучения анода Cu. На пути следования дифрагированного на исследуемом образце рентгеновского пучка перед счетчиком устанавливается третья узкая 50 мкм щель. Для перехода в исследованиях от РД метода к методу ДПКК достаточно удалить узкую 50 мкм щель с входного окна счетчика. Это увеличивает угловой размер его окна до $\sim 2^\circ$. В таком случае $\theta-2\theta$ -сканирование образца и счетчика реализует анализ исследуемой сверхрешеточной структуры по методу ДПКК [7–9,14].

3. Экспериментальные результаты

Для решения вышеназванной проблемы в ИРЭ РАН были выращены сверхрешетки-модели $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$ [5] с $N_1 = 10$ и с $N_2 = 2$ парами чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Наличие именно указанного числа пар чередующихся слоев в каждом из образцов сверхрешеток с $N_1 = 10$ и $N_2 = 2$ проверялось по содержанию элементов Al и Ga методом ВИМС (вторичной ионной масс-спектрометрии), любезно выполненным д-ром физ.-мат. наук А.С. Игнатьевым [5]. Прямым методом ВИМС подтверждено, что выращенные при молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) образцы большепериодных

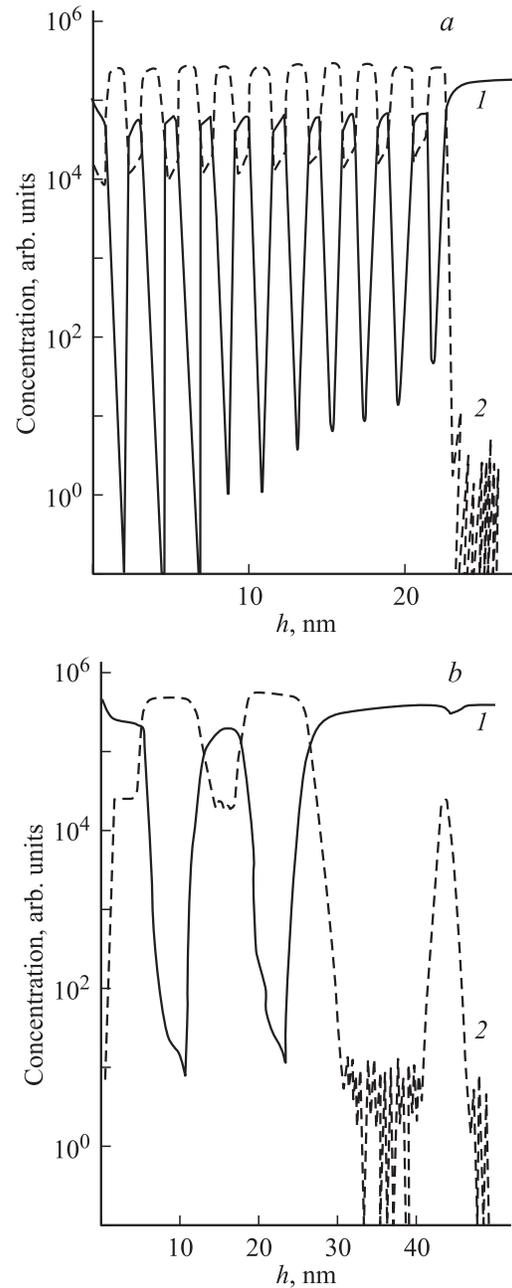


Рис. 1. Кривые распределения и концентрации атомов Al и Ga по толщине в слоях модельного образца большепериодной сверхрешетки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$. *a* — $N_1 = 10$, *b* — $N_2 = 2$. Кривые сняты разрушающим методом ВИМС: 1 — Ga, 2 — Al.

($T \geq 100$ нм) сверхрешеток (БПСР) действительно содержали: первая $N_1 = 10$ пар (рис. 1, *a*) и вторая $N_2 = 2$ пары (рис. 1, *b*) чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots$. На рис. 1, *a, b* распределение атомов Al по глубине представлено пунктирной линией, а Ga — сплошной линией.

На рис. 2 совмещены два рентгенодифракционных спектра от образца сверхрешетки с числом $N_1 = 10$ пар чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

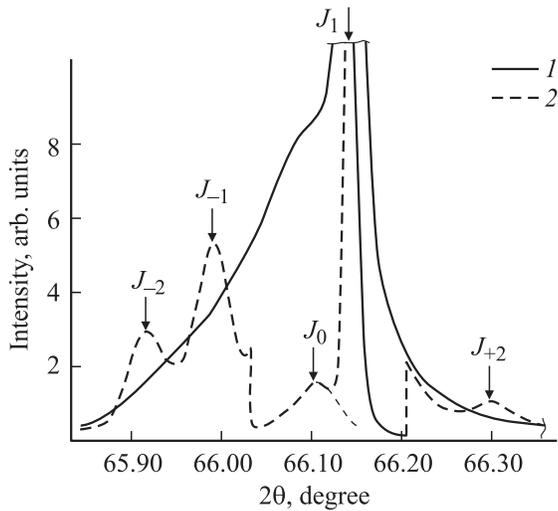


Рис. 2. Рентгеновские спектры от модельного образца большепериодной сверхрешетки $Al_xGa_{1-x}As/GaAs \dots / (001)GaAs$ с числом пар чередующихся слоев $N_1 = 10$ и величиной периода $T_1 = 101 \pm 4$ нм. Снято 1 — методом дифракционных псевдокривых качания и 2 — рентгенодифрактометрическим методом на двухкристалльном рентгеновском спектрометре в монохроматическом $CuK\alpha_1$ -излучении при отражении (004).

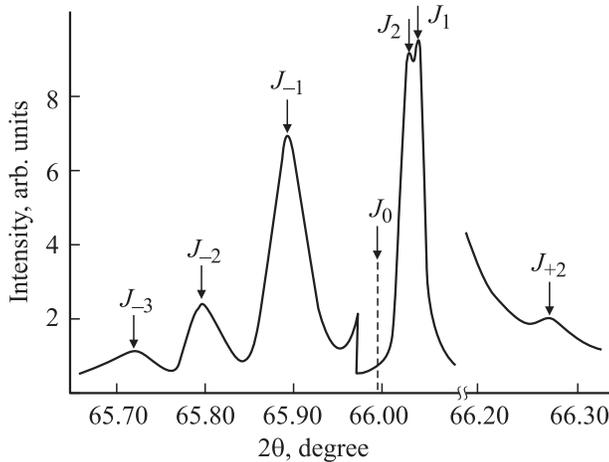


Рис. 3. Рентгенодифрактометрический спектр от модельного образца большепериодной сверхрешетки $Al_xGa_{1-x}As/GaAs \dots / (001)GaAs$ с числом пар чередующихся слоев $N_2 = 2$ и величиной периода $T_2 = 108.1 \pm 3.7$ нм. Снято рентгенодифрактометрическим методом на двухкристалльном рентгеновском спектрометре в монохроматическом $CuK\alpha_1$ -излучении при отражении (004).

ДПКК спектр всей сверхрешеточной структуры с подложкой (001)GaAs обозначен на рис. 2 сплошной кривой. РД спектр сверхрешетки с его основным максимумом J_0 и спутниками $J_{\pm j}$ обозначен на рис. 2 пунктирной кривой.

Нами получены экспериментальные доказательства того, что даже при наименьшем числе пар слоев, т. е. при $N_2 = 2$, на рентгенодифрактограмме рис. 3 уже хорошо

проявляются спутники как типичные сверхрешеточные дифракционные эффекты. Этот образец сверхрешетки зеркала наращивался при тех же условиях, что и образец с $N_1 = 10$. Однако в образце с двумя парами чередующихся слоев $N_2 = 2$ (рис. 3) обнаружен еще сравнительно толстый слой твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ с измеренной величиной концентрации $x = 0.06$, т. е. $Al_{0.06}Ga_{0.94}As$. Его максимум J_2 весьма близок и почти сливается с максимумом J_1 от подложки (004)GaAs.

Заметим, что при РД измерении и расчете концентрации твердого раствора в гетерозитаксиальных слоях любых материалов, как и в сверхрешетках, обязательно надо учитывать величину фактора Хорнстра $H = C_{11}/(C_{11} + 2C_{12})$ [7–9], где $C_{11} = 11.76 \cdot 10^{10}$ Па и $C_{12} = 5.268 \cdot 10^{10}$ Па — упругие константы материала, в нашем случае GaAs, приведенные в [29], и близкие величины для AlAs. Тогда для сверхрешетки типа $Al_xGa_{1-x}As/GaAs, Al_xGa_{1-x}As/GaAs \dots / (001)GaAs$ фактор Хорнстра $H = 0.527$. Он используется как множитель, чтобы при расчете величины концентрации твердого раствора правильно использовать экспериментально измеряемую величину ϵ^\perp перпендикулярной гетерогранице компоненты упругой деформации гетерослоев относительно монокристаллической подложки. Она регистрируется на РД кривой как величина $\epsilon^\perp = \Delta\theta_{1j}^\perp \text{ctg } \theta_1$. Тогда величина концентрации твердого раствора для любого из слоев на монокристаллической подложке рассчитывается по формуле [7–9]

$$x_j = [C_{11}/(C_{11} + 2C_{12})] \Delta\theta_{1j}^\perp \text{ctg } \theta_1 / [2(a_1 - a_2)/(a_1 + a_2)], \quad (1)$$

где a_1 и a_2 — периоды решеток соответственно подложки и любого j -го гетерослоя, $\Delta\theta_{1j}^\perp$ — разность углов брэгговской дифракции для максимумов любого из этих гетерослоев относительно подложки.

Для расчета концентрации твердого раствора в чередующихся слоях сверхрешетки надо брать разность углов $\Delta\theta_{01}^\perp$ основного максимума J_0 от самой сверхрешетки относительно максимума от ее подложки J_1 . При этом надо также в формулу (1) добавить множитель 2, чтобы получить концентрацию твердого раствора в самих чередующихся слоях сверхрешетки, а не ее среднюю величину по всей толщине анализируемой сверхрешетки. В результате получаем формулу (2) для расчета концентрации твердого раствора именно в отдельных слоях сверхрешетки [7–9,16]:

$$x_j = [C_{11}/(C_{11} + 2C_{12})] \Delta\theta_{10}^\perp \text{ctg } \theta_1 / [(a_1 - a_2)/(a_1 + a_2)], \quad (2)$$

где $\Delta\theta_{10}^\perp$ — разность дифракционных углов между максимумами от подложки J_1 и основным максимумом самой сверхрешетки J_0 . Измеренная неразрушающим РД методом величина концентрации твердого раствора в этих модельных образцах большепериодных сверхрешеток оказалась $x_1 = 0.55$ для образца с $N_1 = 10$ и $x_2 = 0.51$ для образца с $N_2 = 2$.

На рис. 3 приведена рентгенодифрактограмма от сверхрешетки с двумя парами $N_2 = 2$ чередующихся

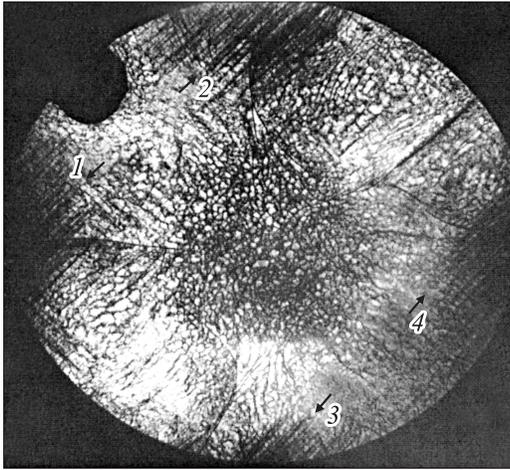


Рис. 4. Ячеистая дислокационная структура монокристаллической подложки (001)GaAs(Cr), выявленная рентгенограммой по Борману в отражении (220) CuK $\alpha_{1,2}$ -излучения.

слоев Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As/GaAs. Она снята методом РД в отражении (004) дифрагирующего монохроматического CuK α_1 -излучения. Из рис. 3 очевидно главное, что на нем зарегистрирован типичный рентгеновский спектр от сверхрешетки. Хотя в этом образце сверхрешетки наименьшее число пар $N_2 = 2$ чередующихся слоев. На этой дифрактограмме зарегистрированы дифракционный максимум от подложки (004)GaAs(Cr) с интенсивностью $J_1 = 3.5 \cdot 10^3$ импульса в секунду (имп./с) и 3 порядка отрицательных сателлитов $J_{-1} = 120$ имп./с, $J_{-2} = 30$ имп./с, $J_{-3} = 10$ имп./с. Однако из положительных сателлитов достаточно надежно зарегистрирован только один положительный сателлит 2-го порядка $J_{+2} = 7$ имп./с. К тому же в РД спектре от этой сверхрешетки с $N_2 = 2$ не удалось зарегистрировать ее основной максимум J_0 , поскольку его интенсивность оказалась слишком малой. Для определения его местоположения мы воспользовались тем, что на РД спектре от сверхрешетки с $N_2 = 2$ четко зарегистрированы положительный и отрицательный сателлиты 2-го порядка J_{+2} и J_{-2} . Это позволяет точку середины расстояния между сателлитами J_{+2} и J_{-2} принимать за начало системы отсчета, т.е. за точку углового положения основного J_0 максимума от этой сверхрешетки, но отсутствующего на дифрактограмме.

Положительный сателлит 1-го порядка J_{+1} утонул на фоне некогерентного рассеяния от дефектов самой монокристаллической подложки GaAs(Cr). Отснятая рентгенограмма на рис. 4 показала наличие сильно развитой ячеистой дислокационной структуры (ЯДС) в самой монокристаллической подложке (001)GaAs(Cr). Наличие ЯДС в самой подложке особенно сильно сказывается на уширении дифракционной кривой именно вблизи дифракционного максимума от самой подложки. Некогерентное рассеяние рентгеновского излучения на ЯДС является главной физической причиной такого локального уширения дифракционной кривой. Как ви-

дим из рентгенограммы на рис. 4, размеры ячеек дислокационной структуры в подложке изменяются в пределах от 30 мкм до 2.5–3.0 мм, а максимальный угол их разориентации достигает величины $\Delta\theta \approx 0.15^\circ$. Угловая ширина рассматриваемой ДПКК на рис. 3, как и классической ДКК, оказалась около $2\Delta\theta \approx 0.3^\circ$.

На рентгенограмме от данной подложки (001)GaAs(Cr) зарегистрированы также пучки прямолинейных дислокационных полупетель (помечены цифрами 1, 2, 3 и 4 на рентгенограмме рис. 4). Дислокационные пучки генерировались явно множеством поверхностных дислокационных источников. Срабатывание поверхностных дислокационных источников в процессе выращивания объемных монокристаллов теоретически было обосновано Орловым [30]. Поверхностные дислокационные источники сработали, очевидно, в растущем монокристалле только после того, как в нем уже сформировалась ЯДС. Это означает, что источники сработали при существенно более низкой температуре, чем температура кристаллизации растущего монокристалла. Подвижность вновь генерированных дислокаций в монокристалле уменьшается при понижении его температуры [31]. В результате этого дислокации уже не могли перестроиться в ЯДС, как это произошло с дислокациями, генерировавшимися на более ранней стадии выращивания монокристалла. Тогда эта часть слитка находилась еще при температуре, близкой к температуре его кристаллизации. При температуре кристаллизации растущего монокристалла подвижность дислокаций была значительно большей. Однако вершины этих дислокационных полупетель смогли распространиться внутрь объема выращенного монокристалла на расстояния 3–9 мм. Причем группы этих дислокационных пучков продвигались попарно навстречу одна к другой $1 \leftrightarrow 2$ и $3 \leftrightarrow 4$.

Для сверхрешетки с $N_1 = 10$ парами чередующихся слоев Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As/GaAs при РД съемке интенсивности дифракционного максимума от подложки GaAs(Cr) $J_1 = 2.6 \cdot 10^4$ имп./с, основной максимум от сверхрешетки $J_0 = 4 \cdot 10^3$ имп./с, его отрицательные сателлиты $J_{-1} = 5.2 \cdot 10^3$ имп./с, $J_{-2} = 3 \cdot 10^3$ имп./с и хорошо зарегистрирован положительный сателлит $J_{+2} = 20$ имп./с.

Величина периода сверхрешетки-зеркала с $N_2 = 2$, взятая как средняя величина измерений по всем сателлитам от нее, оказалась равной $T = 108.1 \pm 3.7$ нм при относительной ошибке около 3.5%. Приведем известную формулу (3) [7] для расчета величины периода сверхрешетки при кинематической дифракции:

$$T = \lambda j / 2\Delta\theta_j \cos \theta_0, \quad (3)$$

где $\lambda = 0.154057$ нм — длина волны используемого монохроматического рентгеновского излучения CuK α_1 , $j = 1, 2, 3, \dots$ — порядковый номер сателлита, $\Delta\theta_j$ — угловое расстояние между основным максимумом от сверхрешетки и максимумом сателлита данного порядка, θ_0 — величина угла брэгговской дифракции основного максимума J_0 от сверхрешетки.

Для образца БПСР с $N_1 = 10$ парами чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ средняя величина периода оказалась равной $T = 101 \pm 4$ нм при точности $\approx 4\%$. Приведем результаты расчетов величин периодов обсуждаемых модельных образцов БПСР по сателлитам различных порядков. Для образца с $N_1 = 10$ получено $T_{0,-1} = 93$ нм, $T_{0,-2} = 106$ нм, $T_{0,+2} = 105$ нм. Для образца с $N_2 = 2$ получено $T_{0,-1} = 103$ нм, $T_{0,\pm 2} = 108$ нм и $T_{0,-3} = 114$ нм. Из этих результатов видим, что в данных модельных образцах БПСР с увеличением номера сателлитов возрастает и величина периода сверхрешетки.

Сплошная дифракционная кривая на рис. 2 снята методом рентгеновской дифракционной псевдокривой качания (ДПКК) [7,9,14,16], которая регистрируется, как и РД кривая, при $\theta-2\theta$ -сканировании, но с полностью открытым входным окном счетчика. Именно при таких условиях сканирования на одной дифрактограмме, снятой методом ДПКК, удается регистрировать дифракционные максимумы как от гетерослоев, так и от их монокристаллической подложки даже при больших величинах несоответствия их периодов решеток между слоями и подложкой. Однако в нашем случае дифракционные максимумы от десяти пар чередующихся слоев самой сверхрешетки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ и ее монокристаллической подложки (001)GaAs(Cr), легированной атомами хрома, оказались настолько уширенными, что слились в одну общую их огибающую кривую. На этой кривой можно выделить только дифракционный максимум от подложки J_1 . Тогда как основной максимум от сверхрешетки J_0 и ее отрицательные J_{-1} , J_{-2} и положительный J_{+2} сателлиты утонули на фоне некогерентного рассеяния от этой сверхрешеточной гетероструктуры. Выявить наличие сверхрешетки в данной гетероструктуре нам удалось только тогда, когда мы повторили $\theta-2\theta$ -сканирование этого образца РД методом, т. е. после установки узкой 50 мкм вертикальной входной щели перед счетчиком. Таким образом, только РД методом, который выделяет когерентную составляющую рентгеновской дифракции и в значительной мере отсекает некогерентное рассеяние, мы зарегистрировали основной максимум от сверхрешетки J_0 и ее отрицательные J_{-1} , J_{-2} и положительный J_{+2} сателлиты (см. пунктирную кривую на рис. 2).

В связи с этим необходимо отметить, что для классической рентгеновской дифракционной кривой качания (ДКК), снимаемой при неподвижном полностью открытом входном окне счетчика, установленном под углом 2θ для дифракции от монокристаллической подложки, угловое положение дифракционной кривой от гетерослоя может оказаться далеко от углового положения неподвижного полностью открытого счетчика. Кроме того, как видим по сплошной кривой на рис. 2, кривая ДПКК, как и ДКК, не дает никакой однозначной информации ни о наличии сверхрешетки, ни о величине ее периода и концентрации твердого раствора. На ней зарегистрировано только приблизительное положение дифракционного максимума от подложки J_1 и колоссальное расширение всего дифракционного максимума от

всей системы сверхрешетка-подложка. Сплошная кривая, в нашем случае на рис. 2, вообще не подтверждает, что в данной системе имеется сверхрешетка.

Поскольку со всей определенностью доказано, что сверхрешетка имеется в гетероструктуре на рис. 2, то следует признать, что методами ДПКК и ДКК она просто не обнаруживается. Как было показано в [7,9,14,16,24], это означает, что в данной сверхрешетке в процессе выращивания произошла мощная генерация дислокаций. Следовательно, сверхрешетка в этом образце при $N_1 = 10$ в процессе выращивания претерпела очень сильную пластическую деформацию. В результате этого сама БПСР разбилась на множество взаимно разориентированных фрагментов. С другой стороны, в такое большое уширение кривой качания (сплошная кривая на рис. 2) определенный вклад внесен и некогерентным рассеянием рентгеновского излучения на сильно выраженной ячеистой дислокационной структуре (рис. 4) монокристаллической подложки (001)GaAs(Cr), легированной атомами хрома.

В сверхрешетке с двумя парами $N_2 = 2$ чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, напротив, пластическая деформация в процессе выращивания не произошла. Хотя эта сверхрешетка выращивалась по той же компьютерной программе, что и сверхрешетка с десятью парами $N_1 = 10$ чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, в которой произошла пластическая деформация с слоев сверхрешетки. Различие только в числе пар чередующихся слоев этих двух сверхрешеток. Далее выясним, при каких величинах упругих напряжений в слоях реальных сверхрешеток происходит пластическая деформация в процессе их выращивания.

Задача теоретического расчета распределения упругих напряжений в сверхрешетке с любым числом пар чередующихся слоев была решена автором гораздо раньше [6,7,9]. При этом предполагалось, что упругие константы, т. е. модули Юнга $E_1 \approx E_j = 8.8 \cdot 10^{10}$ Па, как и модули сдвиговой деформации $\mu = 3.358 \cdot 10^{10}$ Па и коэффициенты Пуассона $\nu = 0.31$, для GaAs, так и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ почти одинаковы.

Перенумеруем все слои сверхрешетки: $j = 1, 2, 3, \dots, (2N-1), 2N$, где все нечетные номера относятся к слоям твердого раствора, а четные — к слоям бинарного соединения, например, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и GaAs соответственно. Тогда напряжение растяжения для верхнего слоя бинарного соединения либо напряжение сжатия этого же слоя для сверхрешетки из других материалов можно рассчитать по формуле (4) [7,9]

$$\begin{aligned} \sigma_{2N} = & [\mu(1+\nu)/(1-\nu)] \{ [\varepsilon_{01}NT/(h_0+NT)] \\ & \times [1+3(2h_0+NT)(2h_0+2NT-T)/4(h_0+NT)^2] \\ & + [3T(2h_0+NT)/8(h_0+NT)^2] \}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $h_0 = 200 \cdot 10^{-6}$ м — толщина подложки, N — число пар чередующихся слоев в сверхрешетке или число ее

периодов, T — период сверхрешетки, ε_{01} — величина измеренной упругой деформации. В фигурных скобках — выражение для величины упругой деформации слоя. Для слоя твердого раствора с номером $(2N-1)$ расчет величины упругих напряжений в слое следует делать по формуле (5) [7,9]

$$\begin{aligned} \sigma_{2N-1} = & [\mu(1+\nu)/(1-\nu)] \{ \varepsilon_{01} [NT/(h_0+NT)] [1+2h_0/NT] \\ & + 3(2h_0+NT)(2h_0+2NT-3T)/4(h_0+NT)^2] \\ & + [3T(2h_0+NT)/8(h_0+NT)^2] \}. \end{aligned} \quad (5)$$

Второе слагаемое в квадратных скобках в выражении (5), характеризующее влияние толщины подложки на величину упругих напряжений в слое твердого раствора, играет решающую роль при обычном для реальных сверхрешеточных образцов условии, когда толщина подложки $h_0 \gg NT$ всей толщины сверхрешетки. Подстановка параметров реального образца сверхрешетки $N_1 = 10$, $T_1 = 101$ нм, $\varepsilon_{01} = 3.41595 \cdot 10^{-4}$, $\mu(1+\nu)/(1-\nu) = 6.37685 \cdot 10^{10}$ Па дает результаты: напряжение растяжения в верхнем слое бинарного соединения GaAs сверхрешетки $\sigma_{2N} = 4.37 \cdot 10^5$ Па и напряжение сжатия $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Па в верхнем слое ее твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$. Для сверхрешетки с наименьшим числом пар чередующихся слоев $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, т.е. с $N_2 = 2$, $T_2 = 108$ нм, при измеренной величине $\varepsilon_{01} = 2.19394 \cdot 10^{-4}$ и тех же упругих константах получены другие результаты: $\sigma_{2N} = 6.16 \cdot 10^6$ Па — напряжение растяжения в верхнем слое бинарного соединения GaAs сверхрешетки и $\sigma_{2N-1} = -2.8 \cdot 10^7$ Па — напряжение сжатия в верхнем слое ее твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$. Полученные результаты интересны тем, что напряжение в верхнем слое бинарного соединения GaAs уменьшается при увеличении пар чередующихся слоев. Тогда как напряжения в чередующихся слоях твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ сверхрешетки возрастают с увеличением числа пар $N_1 > N_2$ наращиваемых слоев. Для удобства анализа расположим рядом результаты расчета упругих напряжений в слоях этих двух сверхрешеток:

$$N_1 = 10 \text{ пар,}$$

$$\sigma_{2N} = 4.37 \cdot 10^5 \text{ Па и } \sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7 \text{ Па;}$$

$$N_2 = 2 \text{ пары,}$$

$$\sigma_{2N} = 6.16 \cdot 10^6 \text{ Па и } \sigma_{2N-1} = -2.8 \cdot 10^7 \text{ Па.}$$

Как видим, напряжения в верхнем слое GaAs сверхрешетки с $N_2 = 2$ парами чередующихся слоев значительно превышают упругие напряжения в верхнем слое GaAs сверхрешетки с $N_1 = 10$ парами слоев. Тогда как упругие напряжения в верхнем слое твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ в сверхрешетке с $N_2 = 2$ парами чередующихся слоев, напротив, в 1.5 раза меньше, чем в сверхрешетке с $N_1 = 10$ парами слоев. Это приводит нас к заключению, что упругие напряжения

величиной $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Па вполне достаточны, чтобы вызвать генерацию дислокаций, т.е. сдвиговую пластическую деформацию именно в слоях твердого раствора в сверхрешетке $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. // (001)GaAs с $N_1 = 10$ парами чередующихся слоев. Наличие пластической деформации в этом образце сверхрешетки доказано рентгеновским методом ДПКК (на рис. 2 обозначена сплошной кривой). Пластически деформированная большепериодная (> 100 нм) сверхрешетка в этом образце зарегистрирована только РД методом. Методы ДПКК и ДКК не смогли ее обнаружить и зарегистрировать.

Запишем выражение для расчета величины упругих напряжений сжатия для первого слоя твердого раствора в сверхрешетке, который наращивается на самой поверхности подложки и сопряжен с нею [7,9]:

$$\begin{aligned} \sigma_1 = & [\mu(1+\nu)/(1-\nu)] \{ \varepsilon_{01} [NT/(h_0+NT)] [1+(2h_0/NT)] \\ & + 3(2h_0+NT)(2h_0-2NT+T)/4(h_0+NT)^2] \\ & + [3T(2h_0+NT)/8(h_0+NT)^2] \}. \end{aligned} \quad (6)$$

Сопоставляя выражения (5) и (6), видим, что они различаются величиной третьего слагаемого в фигурных скобках. Как видим, по мере увеличения числа пар слоев наращиваемой сверхрешетки в них возрастают величины упругих напряжений. Вычтем из выражения (5) выражение (6). В результате получим выражение (7)

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{(2N-1),1} = & [3\mu(1+\nu)/(1-\nu)] \{ \varepsilon_{01} N(N-1) \\ & \times (2h_0+NT)/(h_0+NT)^3 \} T^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Используя (7), можем рассчитать изменения упругих напряжений в слое твердого раствора по толщине обеих сверхрешеток. Для сверхрешетки с $N_1 = 10$ парами чередующихся слоев возрастают упругие напряжения в верхнем слое твердого раствора достигает величины $\Delta\sigma_{(2N-1),1} = 9.87 \cdot 10^2$ Па, тогда как в сверхрешетке с $N_2 = 2$ парами слоев эта величина существенно меньше $\Delta\sigma_{(2N-1),1} = 16.3$ Па. Из приведенных расчетов следует также, что при увеличении числа пар чередующихся слоев в сверхрешетке будут возрастать и изменения величин упругих напряжений в ее слоях. Этот фактор придется, по-видимому, учитывать при создании электронных приборов на основе выращиваемых сверхрешеток с различным числом пар чередующихся слоев.

Сопоставляя ширины дифракционных максимумов от сверхрешетки с $N_1 = 10$, снятые методом ДПКК (сплошная кривая на рис. 2) и методом РД (пунктирная кривая на рис. 2), мы видим, что сателлиты от сверхрешетки проявляются только на РД кривой. На дифракционной кривой от этого же образца сверхрешетки, но снятой по методу ДПКК (сплошная кривая на рис. 2, а), видим только одну общую плавно огибающую кривую без каких бы то ни было определенных деталей дифракционного спектра.

4. Заключение

В данной работе экспериментально доказано, что для проявления спутников при рентгеновской дифракции на сверхрешетках достаточно нарастить минимум две пары чередующихся слоев. Например, нарастить сверхрешетку $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$ с двумя парами $N_2 = 2$ чередующихся слоев $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Дан теоретический расчет величин упругих напряжений в чередующихся слоях любых сверхрешеток, величины которых возрастают или уменьшаются при увеличении числа пар слоев в выращенной сверхрешетке.

Для сверхрешетки типа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$ с конкретными параметрами рассчитаны величины упругих напряжений $N_1 = 10$ пар $\sigma_{2N} = 4.37 \cdot 10^5$ Па и $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Па, для $N_2 = 2$ пары $\sigma_{2N} = 6.16 \cdot 10^6$ Па и $\sigma_{2N-1} = -2.8 \cdot 10^7$ Па.

Величина напряжений $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Па в верхнем слое твердого раствора сверхрешетки с $N_1 = 10$ парами чередующихся слоев вызывает пластическую деформацию сверхрешетки.

При рентгеновской дифракционной съемке методами ДКК и ДПКК наличие сверхрешетки в образцах с пластически деформированными чередующимися слоями обнаружить невозможно. Тогда как метод РД, регистрирующий основной максимум от сверхрешетки J_0 и его спутники J_{-1} , J_{-2} и J_{+2} , дает возможность четко зарегистрировать наличие сверхрешетки в образце и рассчитать ее реальные параметры.

Рентгеновскими дифракционными методами ДКК и ДПКК можно идентифицировать лишь те образцы сверхрешеток, у которых в процессах выращивания не происходит генерация дислокаций и, следовательно, не происходит пластическая деформация. Другими словами, методами ДКК и ДПКК можно идентифицировать лишь те образцы сверхрешеток, которые выращены практически идеальными.

Полученные результаты дают также перспективу для рентгенодифрактометрических (РД) измерений и контроля параметров наноструктур с квантовыми ямами. Для наноструктур наращивают очень тонкие слои твердых растворов полупроводников. Непременным условием успешного количественного РД-анализа наноструктур должно быть для дифрактометров типа ДРОН-2 или ДРОН-4М использование системы компьютерного накопления и компьютерной обработки полученной дифракционной информации.

Эти экспериментальные результаты дают нам возможность не только идентифицировать сами сверхрешетки и рассчитать величины их параметров. Они дадут возможность, как мы полагаем, глубже уяснить сущность явления дифракции рентгеновских волн на сверхрешетках. Она состоит в интерференции волн, отраженных от двух различных сред, каждая из которых к тому же разделена на отстоящие одна от другой одинаковые части и на одинаковом расстоянии.

Автор надеется, что эти результаты послужат научным обоснованием для исследования наноструктур с квантовыми ямами методом рентгеновской дифрактометрии при условии использования системы компьютерного накопления дифракционной информации на имеющемся рентгенодифрактометре. Использование именно двухкristального рентгеновского спектрометра, обладающего большей светосилой по сравнению с многокристалльными спектрометрами, подтверждается и другими авторами (см., например, [28]). Полученные результаты могут стать также и стимулом для разработки строго количественной теории рентгеновской дифракции на сверхрешетках и особенно на квантовых ямах.

В заключение выражаю благодарность д-ру физ.-мат. наук А.С. Игнатьеву за предоставленные модельные образцы БПСР для рентгеновских дифрактометрических и топографических исследований.

Список литературы

- [1] J. Hornstra, W.J. Bartels. *J. Cryst. Growth*, **44** (5), 513 (1978).
- [2] Ю.П. Хапачев, А.В. Колпаков, Г.Ф. Кузнецов, Р.Н. Кузьмин. *Кристаллография*, **24** (3), 430 (1979).
- [3] Ю.П. Хапачев, Г.Ф. Кузнецов. *Кристаллография*, **28** (1), 27 (1983).
- [4] К. Кабутов, О.Е. Коробов, Г.Ф. Кузнецов, В.Н. Маслов, Ю.П. Хапачев. *Кристаллография*, **28** (4), 647 (1983).
- [5] Г.Ф. Кузнецов, А.С. Игнатьев, В.А. Кусиков. *Деп. ВИНТИ № 200-093* (1993).
- [6] Г.Ф. Кузнецов, А.В. Колпаков, В.А. Кусиков, И.Р. Прудников. *Тез. докл. 1-й Росс. конф. по физике полупроводников* (Н.Новгород–Москва, 1993) т. 2, с. 311.
- [7] Г.Ф. Кузнецов. *Автореф. докт. дис. М., ИРЭ АН СССР* (1998).
- [8] Г.Ф. Кузнецов. *Электрон. техн., сер. 8. Управление качеством, стандартизация, метрология, испытания*, № 2, 12 (1985).
- [9] Г.Ф. Кузнецов. *Электрон. техн., сер. 8, Управление качеством, стандартизация, метрология, испытания*, № 3, 39 (1985).
- [10] А.В. Колпаков, И.Р. Прудников. *Вестн. МГУ. Физика, астрономия*, **32** (4), 3 (1991).
- [11] А.В. Колпаков, И.Р. Прудников. *Дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках* (М., изд-во МГУ, 1992).
- [12] V.S. Speriosu, T. Vreeland. *J. Appl. Phys.*, **56** (6), 1591 (1984).
- [13] T.H. Chiu, J.E. Zucker, T.K. Woodward. *Appl. Phys. Lett.*, **59** (26) (1991).
- [14] Г.Ф. Кузнецов. *Кристаллография*, **45** (2), 326 (2000).
- [15] Krishan Lal, Niranjana N. Goswami, Gregory F. Kuznetsov. In: *Semiconductor devices* ed. by Krishan Lal (Narosa Publishing House, New Delhi, India, 1996) p. 113.
- [16] Г.Ф. Кузнецов. *ФТП*, **41** (10), 1272 (2007).
- [17] P.F. Fewster. *J. Appl. Cryst.*, **22**, 64 (1989).
- [18] P.F. Fewster. In: *Physics of semiconductor devices*, by V. Kumar, S.K. Agarwal (Delhy, India, 1999) v. 2, p. 958.
- [19] А.Р. Ланг. *Прямые методы исследования дефектов в кристаллах* (М., Мир, 1965) с. 205, 259.
- [20] В.Ф. Миусков. *Рост кристаллов* (Л., Наука, 1965) т. 5, с. 300.

- [21] Г.Ф. Кузнецов. Кристаллография, **21** (4), 847 (1976).
- [22] И.Л. Шульпина. *Рост кристаллов* (Л., Наука, 1965) т. 5, с. 285.
- [23] G.F. Kuznetsov. In: *Physics of semiconductor devices*, ed. by V. Kumar, S.K. Agarwal (Delhy, India, 1999) v. 1, p. 179.
- [24] Г.Ф. Кузнецов. ЖТФ, **66** (1), 181 (1996).
- [25] Г.Ф. Кузнецов. Кристаллография, **46** (2), 320 (2001).
- [26] Г.Ф. Кузнецов. Кристаллография, **40** (5), 936 (1995).
- [27] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций* (М., Атомиздат, 1972) [Пер. с англ.: J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of dislocations* (N.Y.–St. Louis–San Francisco–Toronto–London–Sidney, McGraw-Hill Book Company)].
- [28] А.М. Афанасьев, М.А. Чуев, Р.М. Имамов, А.А. Ломов. Кристаллография, **45** (4), 715 (2000).
- [29] Е.М. Воронкова, Б.Н. Гречушников, Г.И. Дистлер, И.П. Петров. *Оптические материалы для инфракрасной техники* (М., Наука, 1965).
- [30] Л.Г. Орлов. ФТТ, **14** (12), 3691 (1972).
- [31] В.И. Никитенко. В кн.: *Материалы Всесоюзного совещания по дефектам структуры в полупроводниках* (Новосибирск, Наука, 1969) ч. 1, с. 195.

Редактор Л.В. Беляков

Least number of layer pairs necessary for display satellite structure under X-ray diffraction on superlattice. Measurements and calculation of elastic stresses in alternating layers of superlattices

G.F. Kuznetsov

Institute of Radioengineering and Electronics,
Russian Academy of Sciences
141190 Fryazino, Russia

Abstract Superlattices of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$ type with period $T \geq 100$ nm were studied by X-ray diffractometry and X-ray topography methods. It was shown that for identification and measuring the superlattice parameters that is enough to grow two pairs of alternating layers $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. X-ray diffractometry method makes it possible to discover a superlattice and to measure parameters of as elastically and plastically deformed superlattice. In the paper a theory of calculations is given and the magnitudes of elastic stresses in alternating layers of superlattices $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs} \dots / (001)\text{GaAs}$ are calculated. They are: for $N_1 = 10$ pairs $\sigma_{2N} = 4.37 \cdot 10^5$ Pa, $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Pa; for $N_2 = 2$ pairs $\sigma_{2N} = 6.16 \cdot 10^6$ Pa, $\sigma_{2N-1} = -2.8 \cdot 10^7$ Pa. The elastic stress $\sigma_{2N-1} = -4.37 \cdot 10^7$ Pa evokes plastic deformation in solid solution layers of superlattice with $N_1 = 10$ pairs of alternating layers.