

05;06

О рассеянии рентгеновских лучей на сверхрешетке с квантовыми точками

© В.И. Пунегов

Коми Научный Центр УрО РАН, Сыктывкар
E-mail: vrunegov@dm.komisc.ru

Поступило в Редакцию 5 марта 2008 г.

В кинематическом приближении разработана статистическая теория дифракции рентгеновских лучей на полупроводниковой сверхрешетке с квантовыми точками (КТ). В рамках теории с единых позиций описывается когерентное и диффузное рассеяние с учетом пространственной (вертикальной и латеральной) корреляции КТ. Проведено численное моделирование рентгеновской дифракции на сверхрешетке с учетом флуктуаций размеров квантовых точек. Показано влияние латеральной корреляции (ближнего порядка) КТ на угловое распределение интенсивности рассеяния. Расчетные карты интенсивностей рассеяния сравниваются с экспериментальными измерениями.

PACS: 61.10.Dp, 68.65.Cd, 68.65.Hb

Одной из основных проблем современной физики конденсированного состояния является изучение процессов формирования наноструктур при гетероэпитаксиальном росте полупроводниковых систем. Квантовые точки (КТ), образующиеся в псевдоморфных слоях твердотельных сверхрешеток (СР), открывают новые возможности для создания новых оптоэлектронных приборов [1]. В этой связи весьма актуальными становятся рентгенодифракционные исследования КТ и квантовых нитей с использованием лабораторных и синхротронных источников [2].

В работе разработана теория когерентного и диффузного рассеяния на полупроводниковой СР с квазиупорядоченными в латеральном направлении КТ в одном из слоев периода модулированной структуры.

В кинематическом приближении для ограниченной в латеральном направлении падающей волны с шириной засветки L_x запишем уравнение, описывающее когерентное рассеяние рентгеновских лучей на кристаллической структуре с изменяющимся по глубине химическим

составом и деформацией решетки:

$$-\frac{\partial E_h^c(q_x, q_z)}{\partial z} = i \exp(i(ba_0 - q_z)z) a_h(z) \bar{\phi}^*(z) f(z) W(q_x), \quad (1)$$

где $\bar{\phi}(z) = \exp(i\mathbf{h}(\mathbf{u}(z)))$ — описывает неслучайные крупномасштабные деформации в объеме кристалла, $f(z)$ — статический фактор Дебая-Валлера. Остальные обозначения, включая функцию $W(q_x)$, определены в [3].

Используя уравнение (1), найдем решение для амплитудного коэффициента отражения от полупроводниковой сверхрешетки. Пусть период дискретно-слоистой системы состоит из двух слоев различного композиционного состава. Каждый такой слой характеризуется своим межплоскостным расстоянием $d_{1,2}$ (индекс 1 относится к верхнему слою периода сверхрешетки) и собственной рассеивающей способностью $a_{1,2}$. Обозначим через l_1 и l_2 толщины слоев, образующие период сверхрешетки толщиной $l = l_1 + l_2$. Тогда $d_{SL} = (d_1 l_1 + d_2 l_2)/l$ — среднее межплоскостное расстояние сверхпериода. Величины $\varepsilon_1 = \Delta d_1/d$, $\varepsilon_2 = \Delta d_2/d$ определяют рассогласование межплоскостных расстояний слоев СР относительно подложки d , где $\Delta d_1 = d_1 - d$ и $\Delta d_2 = d_2 - d$. Тогда $\varepsilon_{SL} = (d_{SL} - d)/d = (\varepsilon_1 l_1 + \varepsilon_2 l_2)/l$ — относительная деформация среднего межплоскостного расстояния СР относительно подложки.

Следуя [4], для амплитудного коэффициента отражения $R^c(q_x, q_z) = E_h^c(q_x, q_z)|_{z=0}$ от сверхрешетки имеем

$$R^c(q_x, q_z) = i F_s(q_z) e^{i\psi} \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)} W(q_x), \quad (2)$$

где $y = A_1 l_1 + A_2 l_2$, $A_{1,2} = ((ba_0 - q_z) + \varepsilon_{1,2} h)/2$, $\psi = (N - 1)y + A_1 l_1$. Структурная амплитуда сверхрешетки имеет вид

$$F_s(q_z) = a_1 f_1 \frac{\sin(A_1 l_1)}{A_1} + e^{iy} a_2 f_2 \frac{\sin(A_2 l_2)}{A_2}. \quad (3)$$

Показатель экспоненты в (3) зависит от числа периодов сверхрешетки N , рассогласований межплоскостных расстояний $\varepsilon_{1,2}$ и угловой переменной q_z .

Анализ диффузного рассеяния от случайных нарушений идеальной периодичности проведен с использованием общего выражения для

некогерентной интенсивности рассеяния [3]. Пренебрегая первичной и вторичной экстинкцией, а также поглощением рентгеновских лучей на двойном слое, составляющем период СР, для интенсивности диффузного рассеяния получаем выражение

$$I_h^d(q_x, q_z) = D_{SL} \tau(q_x, q_z) L_z \langle T \rangle, \quad (4)$$

где L_z — толщина СР, $\langle T \rangle$ — среднее расстояние между центрами квантовых точек, $D_{SL} = (D_1 l_1 + D_2 l_2) / l$ — параметр, характеризующий интенсивность диффузного рассеяния от одного периода СР, при этом $D_i = |a_h^{(i)}|^2 (1 - f_i^2)$, $i = 1, 2$ — номер слоя периода СР. Здесь

$$\tau(q_x, q_z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |B_n|^2 \tau_n(q_x, q_z) \quad (5)$$

— корреляционная площадь СР, записанная в виде суммы локальных корреляционных площадей соответствующих дифракционных порядков $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\begin{aligned} \tau_n(q_x, q_z) &= \frac{L(q_x)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_z \exp(-i[(q_x - h\varepsilon_x)\rho_x + (q_z - nK_z - h\varepsilon_{SL}^D)\rho_z]) G_{SL}(\rho_x, 0, \rho_z). \end{aligned} \quad (6)$$

В (5) присутствуют Фурье-коэффициенты B_n периодической деформации СР в вертикальном направлении. Распределение диффузного рассеяния зависит от размеров и формы КТ, которые описываются корреляционной функцией $G_{SL}(\rho_x, 0, \rho_z)$. Возникновение КТ сопровождается атомными смещениями, создающими деформации в латеральном ε_x и вертикальном ε_{SL}^D направлениях. Кроме того, следует учесть, что ε_{SL}^D может отличаться от деформации ε_{SL} , поскольку диффузное рассеяние может возникать только в тех слоях СР, которые имеют случайные нарушения кристаллической структуры. Величина $K_z = 2\pi/l$ характеризует расстояние между дифракционными сателлитами СР в обратном пространстве.

Пусть M — среднее число квантовых точек в отдельном слое периода СР. Отметим, что в зависимости от технологических условий спонтанно образованные КТ характеризуются разным латеральным упорядочением в эпитаксиальном слое сверхрешетки. Пространственное расположение островковых образований, включая хаотическое распределение, ближний или дальний порядок КТ описывается выражением (6) и задается функцией латеральной когерентности

$$L(q_x) = M + \left\langle \sum_s^M \sum_{m \neq s}^M \exp(iq_x[\rho_s - \rho_m]) \right\rangle,$$

где угловые скобки означают статистическое усреднение по латеральным координатам ρ_m расположения квантовых точек, $m = 1, 2, \dots, M$. Влияние пространственной латеральной корреляции КТ на диффузное рассеяние подробно исследовано в [5].

На основе полученных решений для когерентного и диффузного рассеяния проведено численное моделирование рентгеновской дифракции от СР In(Ga)As/GaAs с пространственно распределенными КТ In(Ga)As цилиндрической формы. Корреляционная функция $G_{SL}(\rho_x, 0, \rho_z)$ для объектов цилиндрической формы применительно к условиям трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии получена в [3]. Модель СР соответствовала технологическим характеристикам экспериментально исследуемых образцов [6,7]. Кроме того, в численных расчетах использовались параметры, соответствующие экспериментальным измерениям на синхротронном источнике с длиной волны 0.16 нм [6,7].

На рис. 1 представлены две расчетные (a, b) и экспериментальная (c) карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Стрелками указаны дифракционные пики от подложки, совпадающие по параметру решетки буферного и защитного верхнего слоев GaAs, основного максимума СР (0) и дифракционных сателлитов. Угловое распределение интенсивности в обратном пространстве от СР с хаотически распределенными КТ изображено на рис. 1, a . Известно, что наличие ближнего структурного порядка КТ приводит к уширению изодиффузных линий вокруг дифракционных сателлитов, особенно для дальних дифракционных порядков. Это наглядно продемонстрировано в [7] на экспериментальных картах распределения интенсивности рассеяния при разных азимутальных направлениях положения образцов.

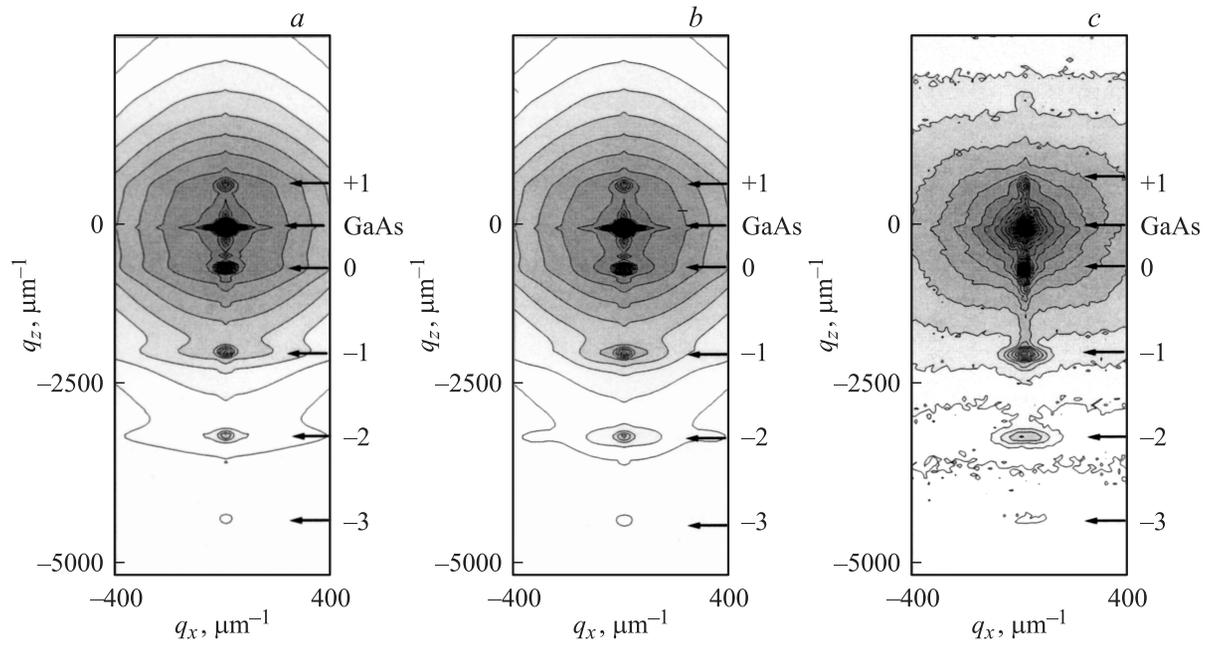


Рис. 1. Расчетные (*a,b*) и экспериментальная (*c*) карты распределения интенсивности рассеяния от сверхрешетки In(Ga)As/GaAs (10 периодов) с квантовыми точками In(Ga)As: *a*) хаотическое распределение КТ; *b*) наличие ближнего порядка в расположении КТ. Контуры равной интенсивности представлены в логарифмическом масштабе. Отношение между соседними линиями составляет 0.025.

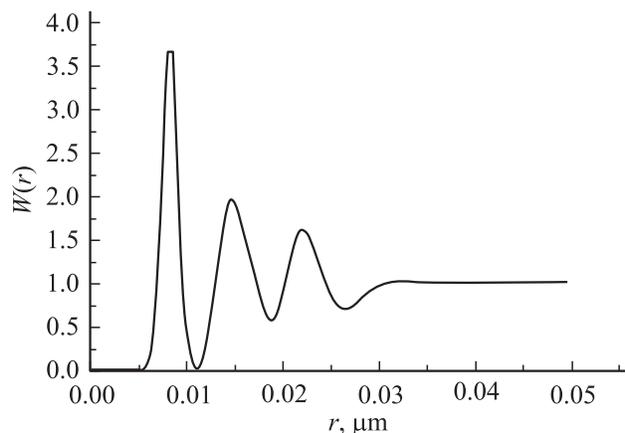


Рис. 2. Функция радиального распределения КТ, используемая в численных расчетах.

В численных расчетах наличие ближнего структурного порядка приводит к уширению изодиффузных линий вокруг спутных максимумов (рис. 1, *b*). Как и в эксперименте, этот эффект сильнее заметен для дальних спутников в силу того, что в этой угловой области пиковые значения когерентной интенсивности сравнимы с интенсивностью диффузного рассеяния. Несмотря на то, что латеральное распределение КТ преимущественно формирует искаженную квадратную структуру [1], в рассматриваемом случае более близкое сходство расчетной карты с экспериментальными измерениями (рис. 1, *c*) наблюдалось для гексагональной упаковки. Функция радиального распределения КТ в латеральном направлении показана на рис. 2. Что касается вертикальной упорядоченности КТ, то расчеты проводились для наноструктур, располагающихся коррелированно друг над другом. Кроме того, в расчетах учитывались флуктуации размеров КТ относительно их среднего радиуса $\langle R_{QD} \rangle$ и средней высоты $\langle h_{QD} \rangle$ по методу, изложенному в [8,9].

В процессе численного моделирования получены следующие структурные характеристики СР с квантовыми точками: период СР $l = 5.15$ nm, толщина слоя GaAs $l_1 = 4.64$ nm, InAs $l_2 = 0.51$ nm; число периодов СР $N = 10$; толщина верхнего защитного слоя 480 nm,

среднее расстояние между центрами КТ в латеральном направлении $\langle T \rangle = 3.3 \langle R_{QD} \rangle$, где $\langle R_{QD} \rangle = 2.5 \text{ nm}$. При средней высоте КТ $\langle h_{QD} \rangle = 0.5 \text{ nm}$ вертикальная длина корреляции составляет $\tau_z = 10 \text{ nm}$. Дисперсия флуктуаций размеров КТ в латеральном направлении составила $\sigma_R = \langle R_{QD} \rangle / 4$, в вертикальном направлении — $\sigma_h = \langle h_{QD} \rangle / 6$.

Таким образом, разработанная теория и основанный на ней численный расчет карт распределения интенсивности рассеяния с последующим сравнением с экспериментальными измерениями позволяют получить дополнительную количественную информацию о структурных характеристиках сверхрешеток с квантовыми точками.

Автор выражает благодарность Н.Н. Фалееву (University of Delaware Dept. of Electrical and Computer Engineering, USA) за предоставление экспериментальной карты интенсивности рассеяния от СР с КТ и плодотворные дискуссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 07-02-00090-а).

Список литературы

- [1] Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. // ФТП. 1988. Т. 32. С. 385.
- [2] Stangl J., Holy V., Bauer G. // Rev. Mod. Phys. 2004. V. 76. P. 725.
- [3] Puntegov V.I., Lomov A.A., Shcherbachev K.D. // Physica Status Solidi (a). 2007. V. 204. P. 2620.
- [4] Пунегов В.И. // ФТТ. 1995. Т. 37. С. 1134.
- [5] Бушуев В.А. // Поверхность. 2007. № 9. С. 29.
- [6] Фалеев Н.Н., Павлов К.М., Пунегов В.И., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Коши А.Р., Михрин С.С., Устинов В.М., Tabuchi M., Takeda Y. // ФТП. 1999. Т. 33. С. 1359.
- [7] Фалеев Н.Н., Мусихин Ю.Г., Суворова А.А., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Коши А.Р., Устинов В.М., Tabuchi M., Takeda Y. // ФТП. 2001. Т. 35. С. 969.
- [8] Bouille A., Conchon F., Guinebretière R. // Acta Cryst. A. 2006. V. A62. P. 11.
- [9] Пунегов В.И., Ломов А.А. // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. В. 6. С. 30.