УДК 548.732

## ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ ГЕТЕРОМАТЕРИАЛОВ НА ДИФРАКЦИЮ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА СВЕРХРЕШЕТКЕ С ДЕФЕКТОМ УПАКОВКИ

## А.М. МАНУКЯН\*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения <sup>\*</sup>hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 20 сентября 2013 г.)

Проведено теоретическое исследование зависимости интенсивности рентгеновских лучей, отраженных от сверхрешетки с дефектом упаковки между слоями, от степени взаимной диффузии гетероматериалов. Получены выражения для коэффициента отражения рентгеновских лучей в направлении сателлитов в зависимости от скачка фазы волны на дефекте упаковки, глубины его залегания и степени взаимной диффузии гетероматериалов, входящих в состав сверхрешетки.

#### 1. Введение

Модулированные структуры представляют собой кристаллы, в которых существует периодическая функция смещения с периодом искажений, намного превышающим постоянную решетки. В этом случае на электроны, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, действует дополнительный потенциал с намного большим периодом. Такие кристаллы принято называть сверхрешетками (СР). Наличие дополнительного потенциала в СР приводит к тому, что кристалл приобретает ряд специфических свойств, отсутствующих у однородного образца. Поскольку длина рентгеновской волны намного меньше периода дополнительного потенциала, то дифракция на нем возможна при малых углах падения. Если же рентгеновские лучи претерпевают брэгговскую дифракцию, то в кристалле возбуждаются модулированные волны с периодом, намного превышающим длину рентгеновской волны, и периодические искажения служат дифракционной решеткой для таких модулированных волн. Следствием этой дифракции является появление сателлитов вокруг основного максимума при дифракции рентгеновских лучей на СР.

Особое значение имеют СР на основе гетеропереходов. Это искусственные СР с заранее заданными параметрами, которые, благодаря ряду уникальных свойств (участки отрицательной дифференциальной проводимости на вольтамперной характеристике, резкая анизотропия внутризонного оптического поглощения и т.д.), имеют широкое применение в микроэлектронике и вычислительной технике [1-3]. Динамическая дифракция рентгеновского излучения применена в [4] для гармонической СР. В работе [5] развита динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на одномерной идеальной СР произвольной модели. Полученные результаты применены для СР разных моделей [6].

Гетероэпитаксиальные СР получают поочередным нанесением друг на друга тонких слоев различных полупроводников с близкими межплоскостными расстояниями. При этом возможно привнесение в СР различных дефектов, ухудшающих ее параметры. В связи с этим, очень важно исследование влияния дефектов на дифракционную картину при дифракции рентгеновских лучей на СР. Исследования гетероэпитаксиальных СР различными рентгеновскими методами проведены в работах [7-11]. В работах [7,11] для интерпретации экспериментальных результатов проводился учет непостоянства периода СР и диффузное рассеяние на тепловых фононах и несовершенствах СР. В работах [9,10] исследовано образование квантовых точек и проволок в СР. Влияние взаимной диффузии гетероматериалов бислоя на дифракционную картину при отжиге идеальной СР исследовано в работе [8].

Одним из возможных дефектов при получении гетероэпитаксиальных СР является дефект упаковки между слоями. Настоящая работа посвящена исследованию влияния взаимной диффузии гетероматериалов бислоя на дифракцию рентгеновских лучей на СР с дефектом упаковки.

#### 2. Сверхрешетка с дефектом упаковки

Рассмотрим гетероэпитаксиальную сверхрешетку толщиной  $Nz_0$  ( $z_0$  – период СР, N – число идентичных слоев). Пусть на глубине  $N_1z_0$  в СР содержится дефект упаковки. При этом плоскость дефекта делит кристалл на две СР толщиной  $N_1z_0$  и  $N_2z_0$ , соответственно ( $N_1 + N_2 = N$ ), в промежутке между которыми волны претерпевают скачок фазы  $\alpha = 2\pi h u$ , где h – вектор дифракции, u – вектор смещения. Пусть на эту СР падает плоская монохроматическая рентгеновская волна единичной амплитуды. Введем следующие обозначения:  $\Phi_h$  и  $\Phi_0$  – соответственно, амплитуды отражения и прохождения СР толщиной  $N_{z_0}$ ;  $r_{hN_i}$ ,  $r_{\bar{h}N_i}$  и  $t_{0N_i}$ ,  $t_{\bar{0}N_i}$  – соответственно, амплитуды отражения и прохождения СР толщиной  $N_{iz_0}$  (i = 1; 2), при этом черточка соответствует падению волны на обратную сторону отражающих плоскостей. Тогда, согласно [5], амплитуды отражения и прохождения СР имеют следующий вид:

$$\Phi_h = \exp(-i\alpha/2)r_{h_{N_1}}t_{\bar{0}N_2} + \exp(i\alpha/2)t_{0_{N_1}}r_{h_{N_2}}, \qquad (1)$$

$$\Phi_0 = \exp(-i\alpha/2)r_{h_{N_1}}r_{\bar{h}_{N_2}} + \exp(i\alpha/2)t_{0_{N_1}}t_{0_{N_2}}, \qquad (2)$$

Как показано в [5], поскольку в гетероэпитаксиальных СР  $z_0 \ll \Lambda$  ( $\Lambda$  – экстинкционная длина), то для получения амплитуд отражения и прохождения СР в направлениях дифракционных максимумов достаточно в соответствующих выражениях для идеального кристалла произвести замену Фурье-компоненты

поляризуемости кристалла  $\chi_h$  на модифицированную Фурье-компоненту  $\chi_{hm}$ :

$$\left|\chi_{hm}\right| = M_m \left|\chi_h\right|,\tag{3}$$

где  $M_m$  – структурный фактор СР, m – номер дифракционного максимума (сателлита).

В этом случае, подставляя в выражения (1) и (2) формулы амплитуд прохождения и отражения СР, для коэффициента отражения рентгеновских лучей от сверхрешетки с дефектом упаковки получаем следующее выражение:

$$R_{m} = R_{m0} - \left| f \right|^{2} \left( \frac{\sin^{2}(\alpha/2)}{p^{2} + 1} \sin(2A_{1m}) \sin(2A_{2m}) - \frac{4p\sin(\alpha/2)}{(p^{2} + 1)^{2}} \sin(2A_{1m}) \sin(2A_{2m}) (\sqrt{p^{2} + 1}\cos(\alpha/2)\sin(A_{m}) + p\sin(\alpha/2)\sin(A_{1m})\sin(A_{2m})) \right).$$
(4)

Здесь введены следующие обозначения:

$$R_{m0} = |f|^2 \sin^2(A_m) / (p^2 + 1)^2$$
(5)

– коэффициент отражения рентгеновской волны от одномерной идеальной сверхрешетки толщиной *Nz*<sub>0</sub>;

$$A_m = \pi N z_0 \beta M_m, \qquad (6)$$

$$A_{\rm im} = \pi N_1 z_0 \beta M_m, \qquad (7)$$

$$A_{2m} = \pi N_2 z_0 \beta M_m, \qquad (8)$$

$$\beta = kC(\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} / (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}, \qquad (9)$$

$$f = (\chi_h / \chi_{\bar{h}})^{1/2},$$
 (10)

 $\gamma_0$  и  $\gamma_h$  – соответственно, направляющие косинусы углов падения и отражения; *p* – безразмерный параметр, характеризующий отклонение от направления дифракционного максимума в пределах соответствующего сателлита.

Относительное изменение интенсивности в направлении m-го сателлита (p = 0), обусловленное наличием дефекта упаковки, имеет следующий вид:

$$R_r = \sin^2(\alpha/2)\sin(2A_{\rm im})\sin(2A_{\rm 2m})/\sin^2(A_{\rm m}).$$
(11)

Как видно из выражения (11) с учетом (6)–(10), относительное изменение интенсивности зависит как от скачка фазы на дефекте упаковки и глубины его залегания, так и от конкретной модели СР и номера сателлита. Относительное изменение интенсивности при отсутствии взаимной диффузии гетероматериалов исследовано в работе [12].

#### 3. Взаимная диффузия гетероматериалов

Искусственные сверхрешеточные кристаллы на основе гетеропереходов, как уже указывалось во введении, представляют собой систему чередующихся

слоев разных составов с близкими межплоскостными расстояниями (типа GaAs-AlAs). На раннем этапе после изготовления, когда отсутствует взаимная диффузия полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя, СР могут быть описаны прямоугольной (квадратичной, если слои из разных материалов имеют одинаковую толщину) моделью. Структурный фактор СР при квадратичной модели имеет следующий вид [6]:

$$M_{m} = \begin{cases} (\varepsilon_{0}/\pi) |\sin(\pi\varepsilon_{0}/4)/(m^{2}-\varepsilon_{0}^{2}/4)|, & m = 2n, \\ (\varepsilon_{0}/\pi) |\cos(\pi\varepsilon_{0}/4)/(m^{2}-\varepsilon_{0}^{2}/4)|, & m = 2n+1, \end{cases}$$
(12)

где

$$\varepsilon_0 = 2kz_0 \sin \overline{\Theta}_B tg \overline{\Theta} \Delta d / \overline{d}$$
(13)

– параметр, характеризующий степень несоответствия гетероматериалов,  $\Delta d$  – разность межплоскостных расстояний гетероструктур, черточка обозначает усреднение по периоду сверхрешетки.

Со временем происходит взаимная диффузия гетероматериалов, входящих в состав бислоя СР и квадратичная модель уже не подходит для описания сверхрешетки. Поскольку процесс диффузии происходит медленно, то вначале, когда между слоями гетероматериалов образуются диффузные слои, СР, описывается трапециевидной моделью. Если слои СР достаточно тонкие, то со временем вследствие взаимной диффузии полупроводниковые материалы, из которых состоит СР, будут перекрывать друг друга по всей толщине слоя. Такие СР описываются синусоидальной или треугольной моделью.

Пусть через некоторое время после изготовления сверхрешетки образовался переходной (диффузный) слой толщиной  $z_d$ . Толщины идеальных слоев обозначим через  $z_1$  и  $z_2$ . В этом случае СР описывается трапециевидной моделью, структурный фактор которой имеет следующий вид:

$$M_{m} = \left| \frac{\sin(\pi p_{1m} \varepsilon_{1})}{\pi p_{1m} \varepsilon_{0}} + (-1)^{m} \frac{\sin(\pi p_{2m} \varepsilon_{2})}{\pi p_{2m} \varepsilon_{0}} - F_{1m} - (-1)^{m} F_{2m} \right|,$$
(14)

где введены следующие обозначения:

$$p_{1m} = \frac{m - \varepsilon_2 - \varepsilon_d}{\varepsilon_0}, \qquad (15)$$

$$p_{2m} = \frac{m + \varepsilon_1 + \varepsilon_d}{\varepsilon_0}, \qquad (16)$$

$$\varepsilon_{j} = 2kz_{j}\sin\overline{\theta}_{B}\mathrm{tg}\overline{\theta}\Delta d/\overline{d} \quad (j=0;1;2;d), \qquad (17)$$

$$F_{jm} = \frac{\sqrt{\varepsilon_d}}{\varepsilon_0} (\sin(\pi p_{jm} \varepsilon_j) U_{3/2}(2q_{jm}^2, 0) - (-1)^j \cos(\pi p_{jm} \varepsilon_j) U_{1/2}(2q_{jm}, 0)), \quad (18)$$

$$q_{jm} = \sqrt{\pi \varepsilon_d p_{jm}} \quad (j = 1; 2), \qquad (19)$$

$$U_{v}(2x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k} x^{v+2k}}{\Gamma(v+2k+1)}$$
(20)

- функция Ломмеля двух переменных.

Подставив в выражения (14)-(20)  $z_d = 0$  и учитывая, что в квадратичной модели  $z_1 = z_2$ , получим формулу (12). С другой стороны, при полной взаимной диффузии полупроводниковых материалов, из которых состоит СР, подставив в (14)-(20)  $z_1 = z_2 = 0$ , получим структурный фактор треугольной модели.

На рис.1 приведены зависимости коэффициента отражения основного максимума (m = 0) СР с дефектом упаковки в зависимости от безразмерного параметра (p) отклонения от направления дифракционного максимума при  $\alpha = \pi$  и глубине залегания дефекта  $N_1 z_0 = 0.1 N z_0$ .



Рис.1. Зависимость интенсивности основного максимума  $R_0$  от степени взаимной диффузии гетероматериалов: (a)  $z_d = 0$ ; (b)  $2z_d = 0.4z_0$ ; (c)  $2z_d = 0.6z_0$ ; (d)  $z_1 = z_2 = 0$ .

Первый график (a) соответствует квадратичной модели, когда диффузный слой отсутствует. В дальнейшем образуется диффузный слой, суммарная величина которого в случае (b) составляет 40%, а в случае (c) 60% бислоя. Наконец, график (d) изображает коэффициент отражения при полной взаимной диффузии гетероматериалов.

Как видно из рисунка, с увеличением взаимной диффузии гетероматериалов происходит перераспределение интенсивности основного максимума. При этом величина основного максимума уменьшается, а величина осцилляций увеличивается.

## 4. Заключение

В работе показано, что при динамической дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетке с дефектом упаковки наличие взаимной диффузии полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя, приводит к перераспределению интенсивности отраженной волны. При  $\alpha = \pi$  и глубине залегания дефекта  $N_1 z_0 = 0.1 N z_0$  образование диффузного слоя приводит к подавлению интенсивности в направлении основного максимума. Чем больше величина диффузного слоя, тем больше его влияние на дифракционную картину.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. А.Я.Шик. ФТП, 8, 1841 (1974).
- 2. Л.В.Голубев, Е.И.Леонов. Сверхрешетки. М., Знание, 1977.
- 3. В.Т.Маслюк, П.А.Феннич. Полупроводниковые сверхрешетки. М., Зарубежная электронная техника, 1981.
- 4. Ю.П.Хапачев, Г.Ф.Кузнецов. Кристаллография, 28, 27 (1983).
- 5. D.M.Vardanyan, H.M.Manoukyan, H.M.Petrosyan. Acta Cryst., A41, 212 (1985).
- 6. D.M.Vardanyan, H.M.Manoukyan, H.M.Petrosyan. Acta Cryst., A41, 218 (1985).
- 7. А.М.Афанасьев, А.А.Зайцев, Р.М.Имамов. Кристаллография, 43, 1 (1998).
- 8. C.Engström, J.Birch, et al. J. Vac. Sci. Technol. A, 17, 5 (1999).
- 9. V.Holy, J.Stangl, G.Springholz, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 34, A1 (2001).
- 10. T.Roch, V.Holy, A.Daniel, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 34, A6 (2001).
- 11. А.А.Зайцев, И.А.Субботин, Э.М.Пашаев и др. Пленки-2004, Материалы Международной научной конференции, М., МИРЭ, 2004, с.49.
- 12. А.М.Манукян. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 10, 17 (2007).

#### ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՎՐԱ ՆՅՈՒԹԵՐԻ ՓՈԽԱԴԱՐՁ ԴԻՖՈՒՉԻԱՅԻ ԱՉԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԴԱՐՍՄԱՆ ԱՐԱՏ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԳԵՐՑԱՆՑԵՐՈՒՄ

#### Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է ռենտգենյան Հառագայթների դինամիկ դիֆրակցիան դարսման արատ պարունակող գերցանցերում՝ գերցանցը կազմող նյութերի փոխադարձ դիֆուզիայի պայմաններում։ Արտածված է ռենտգենյան Հառագայթների անդրադարձման գործակցի բանաձևը սատելիտների ուղղությամբ՝ կախված դարսման արատի խորությունից, նրա վրա ալիքի կրած փուլի թռիչքից և գերցանցը կազմող նյութերի փոխադարձ դիֆուզիայի աստիՀանից։

# INFLUENCE OF INTERDIFFUSION OF HETEROMATERIALS ON X-RAY DIFFRACTION BY SUPERLATTICE WITH STACKING FAULT

### H.M. MANUKYAN

X-ray dynamic diffraction by a superlattice with a stacking fault between the layers in the case of interdiffusion of superlattice components is considered theoretically. Expressions for the X-ray reflectance within satellite limits, depending on the wave's phase jump on the stacking fault, its depth and the extent of interdiffusion of superlattice components are obtained.