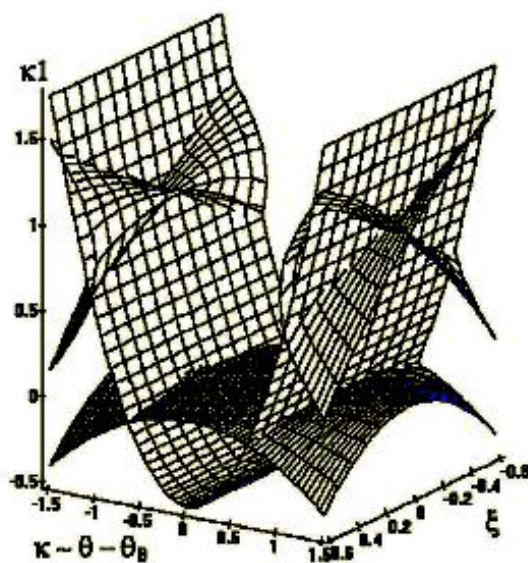




**РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННАЯ ДИАГНОСТИКА
УПРУГО-НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР**



НАЛЬЧИК 2008

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Х.М. БЕРБЕКОВА

**РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННАЯ ДИАГНОСТИКА
УПРУГО-НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР**

Под редакцией Б.С. Карамурзова и Ю.П. Хапачева

НАЛЬЧИК 2008

УДК 53(01);539.26:539.3:548.7

ББК 22.37:22.346

Р 39

Рецензент:

доктор физико-математических наук,
заведующий лабораторией Физико-технического института
Российской академии наук им. акад. А.Ф. Иоффе

Л.М. Сорокин

Р 39 Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур: Монография. – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2008. – 206 с.

Приведены основные уравнения анизотропной теории упругости для многослойных гетероструктур, учитывающие пластическую деформацию, несоответствие параметров решеток и изменение компонент тензора упругой жесткости.

Изложены основные физические принципы современных методов высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии для измерения компонент тензора деформации и кривизны гетероструктур с неоднородным распределением дефектов.

Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния упругих деформаций и случайно распределенных наноразмерных дефектов в объеме динамически рассеивающего монокристалла на величину полной интегральной отражательной способности при различной степени асимметрии отражений.

Рассмотрены проблемы термодинамической устойчивости, близкому порядку и самоорганизации нанокластеров в субмолекулярных сплавах типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ полупроводниковых соединений III-V и II-VI. Самоорганизация изоэлектронных нанокластеров в ряде описанных полупроводниковых соединений III-V и II-VI открывает возможности создания экситонных ловушек, лишенных обычно имеющихся недостатков.

Книга предназначена для студентов, аспирантов и научных сотрудников, специализирующихся в области физики твердого тела.

Авторы монографии: глава 1 – А.Н. Багов, Ю.А. Динаев, А.А. Дышеков, Т.И. Оранова, Ю.П. Хапачев; глава 2 – Р.Н. Кютт, главы 3 и 4 – Е.Г. Лень, В.В. Молодкин, А.И. Низкова, акад. НАН Украины А.П. Шпак; глава 5 – В.А. Елюхин.

УДК 53(01);539.26:539.3:548.7

ББК 22.37:22.346

ISBN 978-5-7558-0442-4

© Кабардино-Балкарский
государственный университет, 2008

ПРЕДИСЛОВИЕ НАУЧНЫХ РЕДАКТОРОВ

Резкое улучшение качества традиционных, а также освоение новых полупроводниковых материалов позволили в последние годы перейти к созданию больших, сверхбольших и сверхбыстродействующих интегральных схем, принципиально новых оптоэлектронных и СВЧ-приборов, существенно повысить степень миниатюризации микроэлектронных устройств. Несмотря на то, что «материалом номер один» по-прежнему остается кремний, современное развитие твердотельной электроники отмечено широким вовлечением в нее новых полупроводниковых материалов.

Дальнейшие перспективы связываются прежде всего с арсенидом галлия, фосфидом индия, тройными и четверными изопериодическими твердыми растворами на основе групп $A^{III}B^V$ и $A^{IV}B^{VI}$. Эти материалы технологически несравненно более сложны, чем кремний, однако и к их качеству предъявляются достаточно жесткие требования: необходимы бездислокационные монокристаллы больших размеров с равномерным распределением легирующих примесей и собственных точечных дефектов. К эпитаксиальным пленкам этих материалов предъявляются еще и свои, специфические требования.

Контроль качества таких структур с заданными физическими свойствами осуществляется различными способами, однако рентгеновская дифрактометрия является пока одним из наиболее эффективных неразрушающих методов определения параметров реальной структуры. Создание уникальных высокоразрешающих рентгенодифракционных методов происходит в последние годы настолько быстро, что изложение этих вопросов полностью отсутствует не только в учебной литературе, но даже в специальных научных монографиях.

Данная монография, по мнению авторов, должна частично восполнить этот пробел. В основу содержания книги положены теоретические и экспериментальные результаты, отраженные авторами в серии оригинальных, а также и обзорных статей в отечественных и зарубежных изданиях: «Кристаллография» «Металлофизика и новейшие технологии» «Методы структурного анализа» (серия «Проблемы современной кристаллографии») «Crystallography Review» Кроме того, отдельные разделы читались авторами в соответствующих спецкурсах

МГУ, Санкт-Петербургского государственного политехнического университета и Кабардино-Балкарского госуниверситета.

В первой главе монографии приведен обзор зависимости физических и структурных характеристик гетероструктур от их упруго и пластически деформированного состояния. Представлена последовательная континуальная теория упругости гетероструктур. Приведены основные уравнения этой теории для многослойных гетероструктур с учетом их анизотропии. Эти уравнения учитывают пластическую деформацию и несоответствие параметров решеток слоев относительно подложки. Особое внимание уделено учету изменения компонент тензора упругой жесткости в слоях различных составов. Приведено решение одномерной задачи упруго- и пластически деформированного состояния для гетероструктур кубической системы. Рассмотрены частные случаи двухслойной гетероструктуры с переменными компонентами тензора упругой жесткости в отсутствие пластической деформации и с постоянными компонентами тензора упругой жесткости при наличии в гетероструктуре дислокаций.

Вторая глава монографии посвящена современным аспектам определения параметров дефектной структуры эпитаксиальных слоев рентгенодифракционными методами. Освещаются вопросы анализа угловых уширений дифракционных отражений для разной геометрии дифракции и определения на этой основе плотности отдельных семейств дислокаций. Рассматривается построение карт распределения интенсивности вокруг узлов обратной решетки и зависимость формы распределения от дислокационной структуры. Показано влияние различных типов микроструктуры на форму дифракционных пиков. Приведен широкий набор экспериментальных примеров применения рентгенодифракционных методик.

Представлены основные физические принципы современных методов высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии при исследовании структуры монокристаллов с неоднородным распределением деформаций и дефектов в тонких приповерхностных слоях. Возможности двух- и трехкристальной дифрактометрии продемонстрированы на конкретных примерах структурной диагностики эпитаксиальных слоев, ионно-имплантированных кристаллов до и после термического и импульсного лазерного отжига. Кроме того, хорошо известны данные по определению таких важных параметров структуры как толщина слоя, профиль деформации, рельеф поверхности, тип, размер и концентрация дефектов в зависимости от условий обработки и отжига кристаллов.

Однако, до последнего времени оставалась проблема создания новых высокоинформативных методов диагностики случайно распределенных наноразмерных дефектов (СРНД), которые не могут наблюдаться традиционными неразрушающими методами, такими, как рентгеновская топография, для которой такие наноразмерные либо в одном из измерений, либо во всех трех измерениях дефекты оказываются за пределами чувствительности метода. Поэтому, на повестке дня стояла разработка физических основ метода деформационных зависимостей полной интегральной отражательной способности (ПИОС), которая должна быть уникально чувствительной к СРНД. Этому и посвящены третья и четвертая главы монографии.

Теоретически и экспериментально доказано наличие зависимостей от однородной упругой макроскопической деформации интегральной интенсивности диффузного рассеяния, экстинкционных факторов или коэффициентов экстинкции, обусловленных рассеянием на дефектах как для когерентной, так и для диффузной составляющих ПИОС и эффективного статического фактора Дебая-Валлера, показатель которого считается пропорциональным интегральной интенсивности диффузного рассеяния.

Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния упругих деформаций (УД) и СРНД в объеме динамически рассеивающего монокристалла на величину ПИОС при различной степени асимметрии отражений, которая позволяет существенно усиливать эффект влияния УД на ПИОС. Показано, что неаддитивность совместного влияния СРНД и УД на величину ПИОС Лауэ-рефлексов свидетельствует о существенной роли эффектов экстинкции из-за рассеяния на СРНД и об относительном росте их влияния на ПИОС при возрастании УД, что обеспечивается, к примеру, присутствием в исследуемом монокристалле крупных в двух измерениях и наноразмерных в одном измерении СРНД, влияние которых на величину ПИОС оказывается по отмеченным причинам сравнимым с влиянием упругой деформации при любой силе изгиба и при любой степени асимметрии используемых Лауэ-рефлексов. Наноразмерные в трех измерениях дефекты при обычно достаточно низких их концентрациях из-за слабого проявления для них указанных экстинкционных эффектов приводят к аддитивному влиянию СРНД и УД на ПИОС при любой степени асимметрии отражений.

Доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД путем факторизации выражений для ПИОС на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. В том числе феноменологически впервые деформационные поправки к факторам экстинкции деформационных зависимостей брэгговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с микродефектами также факторизованы на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. При этом найдена в явном виде зависимость указанных поправок от характеристик СРНД. Это впервые обеспечило возможность адекватного количественного определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС.

Последняя, четвертая глава посвящена термодинамической устойчивости, ближнему порядку и самоорганизации нанокластеров в субмолекулярных сплавах типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ полупроводниковых соединений AIII-BV и AII-BVI. Эти сплавы играют ключевую роль в полупроводниковых оптоэлектронных приборах. Термодинамическая устойчивость полупроводниковых материалов, определяющая срок службы приборов, устанавливает области составов этих сплавов, пригодные для практического применения. Изучение их кристаллической структуры на микроскопическом уровне необходимо для максимальной реализации их возможностей. Именно микроскопический уровень исследования необходим для описания таких их свойств, как ширина запрещенной зоны, внутренние напряжения, наличие и свойства локализованных состояний, формирующих изоэлектронные экситонные ловушки. Различие термодинамических характеристик и постоянных решетки, входящих в эти сплавы полупроводниковых соединений, приводят к корреляционным эффектам в расположении атомов, таким, как ближний порядок или концентрации связей, входящих в сплавы соединений, и самоорганизация нанокластеров. Наиболее интересной как с научной, так и с практической точек зрения, выглядит часть главы, посвященная самоорганизации изоэлектронных нанокластеров. В последнее время резко активизировался интерес к полупроводниковым материалам с изоэлектронными экситонными ловушками. Такие материалы должны стать основой для однофотонных излучателей, необходимых для квантовых компьютеров, и квантовой криптографии. Самоорганизация изоэлектронных нанокластеров в ряде описанных полупроводниковых соединений AIII-BV и AII-BVI открывает возможности создания экси-

тонных ловушек, лишенных обычно имеющихся недостатков. Такие нанокластеры должны быть идеальными квантовыми точками абсолютно одинакового размера.

Таким образом, настоящая коллективная монография посвящена не только изложению теоретических и экспериментальных основ указанных новых методов дифрактометрии и освещению их диагностических возможностей, но и термодинамической устойчивости, ближайшему порядку и самоорганизации нанокластеров в субмолекулярных сплавах типа $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ полупроводниковых соединений АIII-BV и АII-BVI. Авторы данной монографии являются непосредственными создателями методов четвертого поколения диагностики дефектов в кристаллах, многослойных гетеросистемах и наноструктурах. Эти методы оказались чувствительными и к наноразмерным дефектам, которые не поддаются изучению топографическими методами.

Авторы монографии представляют коллективы Кабардино-Балкарского государственного университета (г. Нальчик), ФТИ РАН им. А.Ф. Иоффе (г. Санкт-Петербург), Института металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины (г. Киев) и Научного центра Мексики (г. Мехико) (Departamento de Ingeniería Eléctrica-SEES, CINVESTAV-IPN, Avenida IPN 2508, México, Distrito Federal, 07360, México)

Книга может быть полезна для студентов, аспирантов и научных сотрудников младшего научного возраста, специализирующихся в области физики твердого тела, полупроводникового материаловедения и рентгеновской диагностики кристаллов и тонких пленок.

Научные редакторы –

доктор технических наук,
профессор **Б.С. Карамурзов**

доктор физико-математических наук,
профессор **Ю.П. Хапачев**

Литература

1. Jordan A.S. and Ilegems M. J. Phys. Chem. Solids 36 (1975) 329.
2. Onabe K. J. Phys. Chem. Solids 43 (1982) 1071.
3. Landolt-Börnstein, New Series, Vol. 17, Edited by M. Shulz, and H. Weiss, Springer, Berlin, 1984.
4. Elyukhin V.A. and Ebanoidze M.K. Russian J. Phys. Chem. 61 (1987)1461.
5. Mikkelsen J.C. Jr. and Boyce J.B. Phys. Rev. B 28 (1983) 7130.
6. Musgrave M.J.P. and Pople J.A. Proc. Roy. Soc. (London), A268 (1962) 474.
7. Keating P.N. Phys. Rev. 145 (1966) 637.
8. Martin R.M. Phys. Rev. 1 (1970) 4005.
9. Martins J.L. and Zunger A. Phys. Rev. B 30 (1984) 6217.
10. Baranowski J.M. J. Phys. C: Solid State Phys. 17 (1984) 6287.
11. Harrison W.A., Elementary Electronic Structure, World Scientific, Singapore, 1999.
12. Geppert T., Wagner J., Köhler K., Ganser P. and Maier M. Appl. Phys. Lett. 80 (2002) 2081.
13. Phillips J.C. Bonds and Bands in Semiconductors, Academic. New York, 1973.
14. Jones K.S. in Handbook of Compound Semiconductors, Eds. P. H. Holloway and G. E. McGuire, Noyes, Park Ridge. New Jersey, 1995.
15. Cahn J.W. Acta Metall. 10 (1962) 179.
16. Elyukhin V.A. and Sorokina L.P. and Nikishin S.A. Crystal Growth & Design 4 (2004) 337.
17. Elyukhin V.A., Sorokina L.P. and Rodriguez de Santiago M. J. Appl. Phys. 94 (2003) 6346.
18. Elyukhin V.A., Sánchez-R. V.M. and Elyukhina O.V. Appl. Phys. Lett. 85 (2004) 1704.
19. Elyukhin V.A. and Elyukhina O.V. J. Appl. Phys. 99 (2006) 033504.
20. Elyukhin V.A. and Díaz S.F. Albarran, Physica E 35 (2006) 33.
21. Elyukhina O.V., Sokolovskii G.S., Kuchinskii V.I. and Elyukhin V.A. Tech. Phys. Lett. 32 (2006) 818.
22. Sanderson R.T. Chemical Bonds and Bond Energy, Academic. New York, 1971.
23. Elyukhin V.A. Escobosa A. and Sánchez-R. V.M. Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 173110.

24. Elyukhin V.A. and Sorokina L.P. Sov. Phys. Dokl. 31 (1986) 342.
25. Martin R.M. Phys. Rev. B 6 (1972) 4546.
26. Elyukhin V.A. and Nikishin S.A. Semicond. Sci. Technol. 11 (1996) 917.
27. Elyukhin V.A., Sorokina L.P. and Rodriguez de Santiago M. Phys. Status Solidi (b) 244 (2007) 1639.
28. Elyukhin V.A. Appl. Phys. Lett. 92 (2008) 103115.
29. Dietz R.E., Thomas D.G. and Hopfield J.J. Phys. Rev. Lett. 8 (1962) 391.
30. Hopfield J.J., Thomas D.G. and Lynch R.T. Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 312.
31. Seong M.J., Miotkowski I. and Ramdas A.K. Phys. Rev. B 58 (1998) 7734.
32. Seong M.J., Miotkowski I. and Ramdas A.K. Phys. Rev. B 59 (1999) 12911.
33. Wyckoff R.W.G. Crystal Structures, Vol. 1, Interscience. New York, 1965.
34. Van Vechten J.A. and Phillips J.C. Phys. Rev. B 2 (1970) 2160.
35. Seong M.J., Alawadhi H., Miotkowski I., Ramdas A.K. and Miotkowska S. Phys. Rev. 62 (2000) 1866.
36. Dean P.J., Thomas D.G. and Frosch C.J. J. Phys. C: Solid State Phys. 17 (1984) 747.

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие научных редакторов	3
Глава 1. Многослойные эпитаксиальные наносистемы. Упруго-напряженное состояние и рентгенодифракционные методы его определения	8
Введение	8
1.1. Влияние деформаций и напряжений на физические характеристики полупроводниковых гетероструктур	10
1.2. Основные физические характеристики эпитаксиальных сверхрешеток	17
1.3. Кубическая и гексагональная фазы в гетероэпитаксиальной структуре GaP/Zn(Mg)S	22
1.4. Основные источники искажений внутренней структуры и формы кристалла	28
1.5. Уравнения теории упругости для кристалла, искаженного действием внешних сил, дислокационных и температурных источников внутренних напряжений	32
1.6. Уравнения теории упругости для кристалла, искаженного распределением точечных дефектов	36
1.7. Полная система уравнений теории упругости для наногетероструктур. Тензор НПП	39
1.8. Вид тензора упругой жесткости для гетероструктур с ориентациями пленок (001), (110), (111) кубической и (0001), (2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0) гексагональной сингоний	43
1.9. Основные уравнения для решения задачи упруго- и пластически деформированного состояния гетероструктур кубической и гексагональной сингоний с учетом изменения по глубине тензора упругой жесткости	47
1.10. Решение задачи упруго- и пластически деформированного состояния	49
1.11. Рентгенодифракционные методы определения упруго-напряженного состояния наногетероструктур	64
Литература	76
Глава 2. Рентгенодифракционное определение параметров микроструктуры эпитаксиальных слоев	83
2.1. Построение Вильямсона-Холла	84
2.2. Экспериментальный пример. Эпитаксиальная система MnF ₂ -CaF ₂ -Si(001)	86
2.3. Анализ полуширин для дислокационных слоев. Связь с плотностью дислокаций	89

2.4. Недостаточность мозаичной модели. Анизотропия уширений для эпитаксиальных пленок АЗ-нитридов	91
2.5. Анализ распределения интенсивности в обратном пространстве (mapping)	95
2.6. Анализ формы дифракционных пиков	100
Литература	103
Глава 3. Природа влияния наноразмерных дефектов и упругого изгиба на динамическое рассеяние рентгеновского излучения в кристаллах	105
Введение	105
3.1. Влияние упругого изгиба на диффузное рассеяние и экстинкционные эффекты в монокристаллах с дефектами	108
3.2. Установление природы возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния УД и СРНД на величину ПИОС	116
3.4. Количественное описание влияния на ПИОС упругого изгиба для монокристаллов с разными характеристиками СРНД	120
3.5. Изучение совместного влияния изгиба и СРНД различных типов и размеров на величину ПИОС	127
3.6. Использование деформационных зависимостей ПИОС для диагностики СРНД в монокристалле	132
Литература	137
Глава 4. Новые диагностические возможности деформационных зависимостей полной интегральной отражательной способности кристаллов с дефектами	139
4.1. Лауэ-дифракция в тонком кристалле	139
4.2. Определение величин параметров деформационной модели	143
4.3. Диагностика дефектов монокристаллов по деформационным зависимостям полной интегральной отражательной способности. Лауэ-дифракция в условиях аномального прохождения	152
4.4. Повышение информативности диагностики дефектной структуры монокристаллов путем комбинирования деформационных зависимостей ПИОС в приближениях «тонкого» и «толстого» кристаллов	164
Выводы	171

Литература	172
Глава 5. Ближний порядок и самоорганизация нанокластеров в полупроводниковых твердых растворах $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$...	173
Введение	173
5.1. Четверные твердые растворы $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ четырех бинарных соединений	175
5.2. Строго регулярное приближение для четверных регулярных растворов $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$	179
5.3. Квазихимическое приближение для четверных твердых растворов $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$	180
5.4. Ближний порядок в четверных твердых растворах $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$	184
5.5. Зона несмешиваемости четверных твердых растворов $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$	186
5.6. Модель поля валентной силы	188
5.7. Теория Харрисона и подход Барановского для оценки коэффициентов жесткости бинарных соединений со структурой цинковой обманки	191
5.8. Самоорганизация нанокластеров	192
5.9. Фазовая диаграмма кластерно упорядоченных сплавов $A_x^{\text{III}}B_{1-x}^{\text{III}}C_y^{\text{V}}D_{1-y}^{\text{V}}$	195
5.10. Фазовые диаграммы кластерно упорядоченных сплавов $A_x^{\text{II}}B_{1-x}^{\text{II}}C_y^{\text{VI}}D_{1-y}^{\text{VI}}$	199
Литература	201

НАУЧНОЕ ИЗДАНИЕ

Багов Алий Николаевич
Динаев Юсуф Анварович
Дышеков Артур Альбекович
Оранова Татьяна Ивановна
Хапачев Юрий Пшиканович
Кютт Регинальд Николаевич
Лень Евгений Георгиевич
Молодкин Виталий Вадимович
Низкова Анна Ивановна
Шпак Анатолий Петрович
Елюхин Вячеслав Александрович

**РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННАЯ ДИАГНОСТИКА
УПРУГО-НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР**

Компьютерная верстка ***В.Н. Мидовой***

В печать 13.11.2008. Формат 60х84 ¹/₁₆.
Печать трафаретная. Бумага офсетная. 12.09 усл.п.л. 12.0 уч.-изд.л.
Тираж 300 экз. Заказ № 5629.
Кабардино-Балкарский государственный университет.
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Полиграфический участок ИПЦ КБГУ
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.