

## ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

## Высокоразрешающая рентгеновская дифракция в кристаллических структурах с квантовыми точками

В.И. Пунегов

*Представлено современное состояние неразрушающих исследований полупроводниковых структур с квантовыми точками (КТ) в рамках метода высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии. С позиций формализма статистической теории дифракции рассмотрено когерентное и диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллических системах с нановключениями. Продемонстрировано влияние формы, упругих деформаций, латеральной и вертикальной корреляции КТ на угловое распределение диффузного рассеяния вблизи узла обратной решётки. На примере короткопериодных и многокомпонентных сверхрешёток с КТ показана эффективность модельного подхода для количественного анализа наноструктурированных материалов с использованием экспериментальных данных.*

**Ключевые слова:** высокоразрешающая рентгеновская дифракция, когерентное и диффузное рассеяние, сверхрешётка, квантовые точки

PACS numbers: 61.05.C-, 68.65.-k

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201505a.0449

## Содержание

1. Введение. Методы исследования структур с квантовыми точками (449).
2. Высокоразрешающая рентгеновская дифракция (450).  
2.1. Трёхосевая рентгеновская дифрактометрия. 2.2. Статистическая теория рентгеновской дифракции. Когерентное и диффузное рассеяние. 2.3. Прямая и обратная задача дифракции рентгеновских лучей.
3. Дифракция рентгеновских лучей в структурированных средах (454).  
3.1. Многослойные квантовые точки. 3.2. Полупроводниковые структуры с самоорганизованными квантовыми точками. 3.3. Дифракция на 3D периодических массивах квантовых точек.
4. Влияние формы, размеров и упругих деформаций квантовых точек на диффузное рассеяние рентгеновских лучей (457).  
4.1. Диффузное рассеяние от эпитаксиальных структур с квантовыми точками разной формы. 4.2. Сфероидальные квантовые точки.
5. Пространственная корреляция в расположении квантовых точек (464).  
5.1. Латеральная корреляция квантовых точек. Ближний порядок. 5.2. Вертикальная корреляция квантовых точек.
6. Количественный рентгенодифракционный анализ гетероструктур с квантовыми точками (469).  
6.1. Короткопериодные сверхрешётки с квантовыми точками. 6.2. Многокомпонентные гетероструктуры с квантовыми точками.

7. Заключение (476).

Список литературы (476).

### 1. Введение. Методы исследования структур с квантовыми точками

Массивы квантовых точек (КТ) в полупроводниковых системах имеют широкий спектр применений в нано- и оптоэлектронике, включая лазеры, солнечные элементы, транзисторы, эмиттеры, инфракрасные фотоприёмники и т.д. [1]. Поэтому основной проблемой остаётся неразрушающий контроль формы, размеров, упругих деформаций, композиционного состава и пространственного распределения КТ на большой площади их размещения в растущих эпитаксиальных слоях.

Изначально полупроводниковая оптоэлектроника базировалась исключительно на гетероструктурах со сверхтонкими активными слоями (квантовыми ямами), демонстрирующих эффекты размерного квантования только в одном направлении [2]. Анализ квантования большей размерности на примере квантовых нитей и КТ первоначально был проведён теоретически [3], поскольку изготовление структур с КТ оказалось более сложной задачей, чем создание устройств с квантовыми ямами. Впервые КТ экспериментально наблюдали в сверхрешётках InAs/GaAs с использованием просвечивающей электронной микроскопии [4]. Из параллельно проведённых в [4] рентгенодифракционных измерений была извлечена лишь информация об общей структуре сверхрешётки (СР). Поскольку кривые дифракционного отражения (КДО), регистрируемые с помощью двухкристального дифрактометра [4], характеризуют полное рентгеновское рассеяние, включая как когерентную, так и диффузную составляющую, получение данных о наличии

**В.И. Пунегов.** Коми научный центр УрО РАН,  
ул. Коммунистическая 24, 167982 Сыктывкар, Российская Федерация  
E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Статья поступила 9 января 2015 г., после доработки 8 февраля 2015 г.

КТ, тем более о свойствах наноструктур, лишь на основе анализа двухкристалльных КДО не представляется возможным.

Общеизвестными и часто используемыми методами изучения КТ являются просвечивающая электронная (ПЭМ) [5] и сканирующая туннельная (СТМ) [6] микроскопия. Просвечивающая электронная микроскопия позволяет получать информацию о размерах и упорядочении КТ, а также в какой-то мере о контурах наноструктур. С помощью сканирующей туннельной микроскопии проводятся измерения на атомарном уровне, что даёт возможность более детального изучения формы и композиционного состава отдельной КТ. К сожалению, эти методы являются сугубо локальными и исследования проводятся на весьма малых участках образца, поэтому судить о структурных характеристиках КТ во всём образце приходится с большой степенью осторожности. Другим недостатком этих методов является то, что приходится делать сколы образцов, тем самым разрушая исследуемый материал.

Методы, основанные на дифракции рентгеновских лучей (РЛ), позволяют получать структурные характеристики, усреднённые по всему образцу. Однако эти методы также имеют свои недостатки, самый существенный из которых — то, что в большинстве случаев методы являются непрямыми. Это диктует необходимость выбора адекватной модели, построения сопутствующей теории, на основе которой выполняется численное моделирование или решается обратная задача рентгеновской дифракции [7–9]. Немаловажный фактор — так называемая фазовая проблема, поскольку детектор в экспериментальной установке фиксирует модуль комплексного коэффициента отражения, а фаза рентгеновской волны при этом теряется.

Для изучения структурных характеристик КТ применяются различные схемы, базирующиеся на рассеянии рентгеновского и синхротронного излучения. В настоящее время наиболее распространённым и часто используемым является метод малоуглового рентгеновского рассеяния в скользящей геометрии (Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering, GISAXS) [10, 11]. С точки зрения обработки результатов и получения информации о форме КТ этот метод достаточно прост. Поскольку отражённый сигнал в виде рассеянной рентгеновской волны идёт от самой КТ, а не от более массивной матрицы, GISAXS, как правило, требует использования интенсивного синхротронного излучения (СИ). Более сложным для обработки экспериментальных данных является метод дифракции РЛ в скользящей геометрии (Grazing Incidence X-ray Diffraction, GIXD) [11]. В этом случае дифракционное отражение РЛ возникает от кристаллической матрицы, а КТ играют роль структурных дефектов.

Следует также выделить методы аномального рассеяния РЛ, в частности, многоволновую аномальную дифракцию (Multiwavelength Anomalous Diffraction, MAD) и метод тонкой структуры в условиях аномальной дифракции (Diffraction Anomalous Fine Structure, DAFS) [12]. В последние годы интенсивно развиваются методы, отличительной особенностью которых является использование сфокусированного рентгеновского пучка (Nano-beam X-ray Diffraction, NBXD) [13]. Наконец, нельзя не отметить методы когерентного рентгеновского рассеяния на КТ с использованием СИ [14]. Большинство из

перечисленных рентгеновских экспериментов не требует построения сложных теорий, как правило, численное моделирование проводится с помощью метода конечных элементов [15]. Отметим также, что методы малоуглового и аномального рассеяния детально анализируются в недавних обзорах [5, 10–12] и монографиях [15–17], практически все они реализуются на источниках синхротронного излучения, что препятствует широкому их использованию в современном материаловедении.

С другой стороны, отсутствует аналитический обзорный материал по исследованию кристаллических систем с КТ на основе традиционного метода компланарной высокоразрешающей рентгеновской дифракции (ВРД). Данное рассмотрение имеет цель восполнить этот пробел.

## 2. Высокорастворимая рентгеновская дифракция

Использование РЛ для решения различных дифракционных задач в первую очередь предполагает выбор рентгеновского пучка по длине волны, его монохроматичности и степени угловой расходимости. Большинство теоретических разработок в области рентгеновской кристаллооптики основываются на предположении о неограниченном фронте падающего монохроматического излучения. В реальной ситуации всё представляется несколько сложнее, поскольку любое излучение имеет как спектральную, так и угловую расходимость. Использование совершенных монокристаллов в качестве монохроматоров и устройств для формирования пучков в дифрактометрах позволяет достичь высокой коллимации и монохроматизации ( $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-5}$ ) излучения. В частности, расходимость хорошего синхротронного пучка может быть менее одной угловой секунды [15–18].

В последнее время большое количество дифракционных исследований выполняется с использованием синхротронных источников излучения. Главными преимуществами СИ являются: непрерывный спектр, высокая интенсивность и яркость, высокая степень поляризации и высокая коллимация по ходу пучка. К недостаткам СИ в сравнении с рентгеновской трубкой следует отнести плохое соотношение сигнал/шум, трудности подавления высоких гармоник и относительно низкую стабильность интенсивности излучения [17, 18].

Малая угловая и спектральная расходимость падающего на образец рентгеновского пучка достигается с помощью различных схем кристаллов-монохроматоров, коллиматоров и зеркал [18]. Уменьшение расходимости излучения возможно за счёт асимметричной геометрии кристалла-монохроматора, при этом дифракционные плоскости не параллельны поверхности кристалла, а составляют с ним некоторый угол  $\varphi$ . Сужение угловой ширины рентгеновского пучка также реализуется за счёт уменьшения восприимчивости  $\chi_h$  при выборе материала для кристалла-монохроматора. В настоящее время наиболее распространёнными материалами, служащими для изготовления монохроматоров, являются кристаллы кремния и германия. Отметим, что и алмаз, благодаря стойкости к радиационным повреждениям, часто используется в качестве монохроматоров для синхротронного излучения.

Использование элементов рентгеновской оптики позволяет формировать пучок с малой расходимостью и с

большей степенью монохроматичности для проведения дифракционного эксперимента. Необходимо также тщательно относиться к выбору выходной щели коллиматора. Ширина щели сильно влияет на размытие рентгеновского пучка, что может отразиться на результате измерений. Кроме того, предпочтительнее пользоваться кристаллами-монохроматорами с многократным отражением, называемыми щелевыми, впервые предложенными Бонзе и Хартом [19].

С другой стороны, подавление "хвостов" при многократном отражении сопровождается резким уменьшением коэффициента отражения. Действительно, результирующая кривая отражения после щелевого монохроматора является произведением нескольких таких кривых, однако при этом резко уменьшается интенсивность фона и увеличивается соотношение полезный сигнал/шум.

Двухкристальный рентгеновский дифрактометр состоит из источника рентгеновского излучения, щели перед монохроматором, исследуемого образца и детектора с широкой угловой апертурой. Такая схема была предложена Комптоном и Аллисоном [20]. В настоящее время двухкристальный дифрактометр иногда называют двухосевым дифрактометром, поскольку вместо кристаллов могут использоваться многослойные рентгеновские зеркала или, например, монохроматор может состоять из нескольких кристаллов.

Наличие монохроматора позволяет значительно снизить влияние спектрального состава излучения и создать монохроматический, с малой угловой расходимостью, линейно поляризованный пучок почти плоской рентгеновской волны.

В измерениях с использованием двухосевой дифрактометрии рентгеновский пучок, отражаясь от образца, претерпевает размытие из-за наличия как дефектов структуры, так и аппаратных искажений. Для того чтобы сигнал был зарегистрирован с высоким угловым разрешением, после образца перед детектором размещают анализатор. Такая схема, с учётом вращения образца и анализатора, получила название трёхкристальной рентгеновской дифрактометрии. Хотя исторически впервые такой прибор получил название трёхкристального спектрометра [21], однако в силу вышеупомянутых доводов, связанных с развитием рентгеновской оптики, в настоящее время его чаще всего называют трёхосевым дифрактометром.

### 2.1. Трёхосевая рентгеновская дифрактометрия

Итак, впервые схема трёхосевого дифрактометра была реализована при исследовании теплового диффузного рассеяния в кристаллах кремния, германия и алмаза в 1972 г. [21]. Годом позже трёхосевая схема использовалась для исследования дислокационных петель и включений в меди методом хуанговского рассеяния [22]. Методика трёхосевой дифрактометрии в современной интерпретации изложена в работе [23].

В качестве монохроматора и анализатора в методе трёхосевой дифрактометрии обычно используют высокосовершенные монокристаллы при параллельном бездисперсионном их расположении  $(n, -n, +n)$ . Регистрируемые КДО в зависимости от относительного вращения образца и анализатора получили название "сканов" в режиме  $\omega$ -,  $\varepsilon$ -,  $\theta/2\theta$ -сечений обратного  $\mathbf{q}(\omega, \varepsilon)$ -пространства.

Интенсивность отражения  $I_h(\mathbf{q})$  является функцией углов поворота образца  $\omega$  и анализатора  $\varepsilon$ , поэтому карта углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (Reciprocal Space Map, RSM) выглядит как контуры равной интенсивности  $I_h(\mathbf{q}) = I_h(\omega, \varepsilon) = \text{const}$ . Для её построения в прямоугольных  $(q_x, q_z)$  или в косоугольных  $(\omega, \varepsilon)$  координатах необходимо с заданным угловым разрешением выполнить измерения интенсивности рассеяния от образца путём записи серии сечений  $I_h(q_x, q_z)$  или  $I_h(\omega, \varepsilon)$ .

Схема формирования RSM при исследовании кристаллов с дефектами представлена в работе [23]. Карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве строятся вблизи узла обратной решётки  $\mathbf{h}$ , принадлежащего отражающим  $(hkl)$  плоскостям кристалла. Вектор рассеяния  $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$  обычно представляют в виде суммы  $\mathbf{Q} = \mathbf{h} + \mathbf{q}$ , где вектор  $\mathbf{q}$  задаёт отклонение вектора рассеяния от узла обратной решётки. В трёхосевой симметричной дифракционной схеме проекции вектора  $\mathbf{q}$  в плоскости дифракции определяются через угловые положения образца и анализатора:  $q_x = \kappa \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon)$  и  $q_z = -\kappa \cos \theta_B \varepsilon$ , где  $\theta_B$  — угол Брэгга. Из этих соотношений следует, что в случае симметричной дифракционной геометрии при вращении образца изменяется только  $q_x$  и анализируется пространство в направлении, перпендикулярном вектору обратной решётки  $\mathbf{h}$ .

Поворот кристалла-анализатора  $\varepsilon$  влияет как на  $q_z$ , так и на  $q_x$  и даёт распределение интенсивности вдоль сферы Эвальда. Для движения вдоль вектора  $\mathbf{h}$  необходимо выполнение условия  $q_x \equiv 0$ , при этом получаем  $2\omega = \varepsilon$ . Сканирование анализатора осуществляется со скоростью, вдвое большей скорости вращения образца, и его обычно называют  $(\omega - 2\theta)$ - или  $\theta/2\theta$ -сканированием. Отклонение образца из начального положения при неподвижном анализаторе ( $\omega$ -сканирование) соответствует повороту обратной решётки вокруг начала координат, поэтому конец вектора  $\mathbf{h}$  описывает дугу вокруг узла (000).

Если провести сечения вдали от узла обратной решётки в результате вращения кристалла образца по углу  $\omega$  и, например, при фиксированном положении кристалла-анализатора, то получим распределение интенсивности вдоль линии  $\varepsilon = \text{const}$ . В этом случае на кривой, помимо широкого диффузного пика при  $\omega \approx \varepsilon/2$ , будут наблюдаться три пика, называемых псевдопиком анализатора, главным пиком и псевдопиком монохроматора, а их угловые положения  $\omega = 0$ ,  $\omega = \varepsilon/2$  и  $\omega = \varepsilon$  соответственно. При другом способе сканирования, когда вращается анализатор, а положение образца остаётся фиксированным ( $\omega = \text{const}$ ), помимо диффузного фона будут наблюдаться два пика: псевдопик монохроматора при  $\varepsilon = \omega$  и главный пик при  $\varepsilon = 2\omega$ . В режиме записи  $(\omega - 2\theta)$ - или  $\theta/2\theta$ -сканирования имеем дело с сечением обратного пространства вдоль вектора  $\mathbf{h}$  (брэгговское рассеяние) и пик наблюдается в одной точке  $\omega = \varepsilon = 0$ , а полный профиль КДО регистрируется при  $\varepsilon = 2\omega$ .

Вид RSM зависит не только от исследуемого образца, но и от типа монохроматора и анализатора. Если эти рентгенооптические элементы созданы с учётом многократного отражения, то интенсивности псевдопиков на дифракционной картине существенно уменьшаются, а иногда и вовсе пропадают [24]. Поэтому весьма важной является проблема, связанная с влиянием инструмен-

тальных искажений на формирование карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве [25–27].

## 2.2. Статистическая теория рентгеновской дифракции. Когерентное и диффузное рассеяние

Для описания рассеяния рентгеновских лучей на структурах с КТ, как правило, применяется метод статистической теории дифракции. Известны различные варианты такой теории, в частности, основанные на использовании формализма Като [28–40], функции взаимной когерентности [41, 42] и кинематического подхода Дедерикса–Кривоглаза [43, 44]. Наиболее перспективной, хотя и более сложной, является трактовка статистической динамической теории Като [28], описывающая в едином блоке как когерентное, так и диффузное рассеяние. В рамках других методов [41–43] имеется лишь возможность анализа диффузного рассеяния без учёта когерентной составляющей. Поэтому эти методы применимы для больших значений проекций  $q_x$  и  $q_z$ , когда влиянием когерентной компоненты можно пренебречь.

При построении последовательной теории трёхкристалльной дифрактометрии возникает ряд серьёзных проблем, одна из которых связана с нормировкой интенсивностей. Обычно в теоретических разработках падающая плоская волна имеет бесконечную интенсивность, в то время как интенсивность диффузного рассеянных волн остаётся конечной. Интенсивности когерентных и диффузных волн становятся несоизмеримыми. С другой стороны, в эксперименте интенсивность первичного пучка от монохроматора засвечивает не всю поверхность, а её определённую площадь в зависимости от входной щели. Поэтому в теоретическом описании интенсивность рентгеновского пучка, падающего на образец, следует связывать с его латеральной шириной и в итоге считать интенсивность конечной величиной.

Ещё одна проблема возникает при экспериментальном разделении когерентной и диффузной интенсивностей рассеяния. В непосредственной близости от узла обратной решётки эти интенсивности накладываются друг на друга. Следовательно, незнание характера распределения когерентной и диффузной компоненты сильно затрудняет получение информации о структурных характеристиках исследуемого объекта.

Как отмечалось выше, формализм статистической динамической теории дифракции сферической волны на кристалле с дефектами предложен Като [28]. Для случая плоской волны эта теория модернизирована Бушувым [29, 30]. Для градиентных и многослойных кристаллов формализм статистической динамической теории разработан в [31–40]. В частности, вариант одномерной статистической динамической теории дифракции применён для исследования лазерных гетероструктур путём совместного анализа двух- и трёхкристалльных КДО в режиме  $\theta/2\theta$ -сканирования [7]. Этот же метод был использован в численном решении обратной задачи дифракции от градиентных полупроводниковых структур [8, 9]. Однако в рамках этих теорий отсутствует возможность анализировать карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве.

Общий случай статистической динамической теории для трёхкристалльной дифрактометрии описан в [37]. Эта

теория применима для кристаллов любой толщины, но, к сожалению, основные уравнения имеют сложную математическую структуру. В работах [35, 45] показано, что для кристаллов толщиной менее 10 мкм эффектами диффузного поглощения когерентных волн, многократным диффузным рассеянием и брэгговской дифракцией диффузных волн можно пренебречь. Поэтому теория [37] была модернизирована для описания рассеяния рентгеновских лучей в слоях и плёнках толщиной до 10 мкм [40]. При этом когерентное рассеяние рассматривается в рамках динамической дифракции, а диффузное рассеяние — с учётом только первичной экстинкции. Многократное диффузное рассеяние или, иными словами, вторичная экстинкция в расчёт не берётся, поскольку практически не влияет на дифракционную картину.

В реальных кристаллических структурах разные типы дефектов нарушают идеальную периодичность решётки. Если эти нарушения носят случайный характер, например, при наличии в объёме кристалла хаотически распределённых неоднородностей, то процесс дифракции рентгеновских лучей неизменно сопровождается выходом диффузного рассеяния. В нашем рассмотрении самоорганизованные КТ представляют собой определённый тип дефектов кристаллической структуры, образующихся из-за большого несоответствия в параметрах решётки квантовых точек и основной матрицы. Следует также иметь в виду неизбежно возникающие флуктуации в размерах наноструктур и их пространственно-корреляционные характеристики.

Заметим, что нарушения идеальной периодичности кристаллической решётки могут иметь неслучайный характер, например, при упругом изгибе образца. Такие нарушения описываются полем непрерывных атомных смещений  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ . При наличии дефектов кристаллической структуры функция атомных смещений  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  и, следовательно, фазовая функция  $\phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}))$  представляются в виде усреднённой и флуктуационной части

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle + \delta \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad \phi(\mathbf{r}) = \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle + \delta \phi(\mathbf{r}),$$

где  $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = \exp(i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle)$  описывает неслучайные крупномасштабные деформации в объёме кристалла. Случайные атомные смещения, вызванные статистически распределёнными в объёме кристалла дефектами, задаются флуктуационной фазовой функцией  $\delta \phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}))$ , при этом её усреднение  $f(\mathbf{r}) = \langle \delta \phi(\mathbf{r}) \rangle$  определяется как статистический фактор Дебая–Уоллера [28].

Дифракция рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах описывается системой связанных уравнений Такаги [46] для амплитуд проходящей,  $E_0(\mathbf{r})$ , и дифракционной,  $E_h(\mathbf{r})$ , волны. Эти уравнения широко используются для анализа кривых дифракционного отражения в двухкристалльной геометрии. Переход от двух- к трёхосевой дифрактометрии требует определённых математических преобразований, при этом в уравнениях дифракции вместо исходных амплитуд  $E_{0,h}(\mathbf{r})$  появляются их фурье-образы  $E_{0,h}(q_x, y, z)$ . Следующим шагом является статистическое усреднение уравнений дифракции, в результате амплитуды рентгеновских полей представляются в виде суммы когерентной  $\langle E_{0,h}(q_x, y, z) \rangle = E_{0,h}^c(q_x, y, z)$  и диффузной  $\delta E_{0,h}(q_x, y, z) = E_{0,h}^d(q_x, y, z)$  составляющих.

В статистической теории рентгеновской дифракции [40] получены уравнения, описывающие когерентное

рассеяние:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_0^c(q_x, y, z)}{\partial z} = i(a_0 - q_x \cot \theta_1) E_0^c(q_x, y, z) + \\ + i \frac{a_{-h} f}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' E_h^c(q_x - q', y, z) \bar{\phi}(q', y, z), \\ - \frac{\partial E_h^c(q_x, y, z)}{\partial z} = i(ba_0 + \eta - q_x \cot \theta_2) E_h^c(q_x, y, z) + \\ + i \frac{a_h f}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' E_0^c(q_x - q', y, z) \bar{\phi}^*(q', y, z), \end{array} \right. \quad (1)$$

где  $a_0 = \pi\chi_0/(\lambda\gamma_0)$ ,  $a_{h,-h} = C\pi\chi_{h,-h}/(\lambda\gamma_{h,0})$ ,  $\eta = (2\pi/\lambda\gamma_h) \times \sin(2\theta_B)\omega$  — угловой параметр, используемый в двухкристалльной дифрактометрии в режиме  $\theta/2\theta$ -сканирования,  $\lambda$  — длина волны рентгеновского излучения в вакууме,  $\omega = \theta - \theta_B$  — отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга  $\theta_B$ ,  $\gamma_{0,h} = \sin \theta_{1,2}$ ,  $\theta_{1,2} = \theta_B \mp \varphi$  — углы, определяющие направления падающего и дифракционного пучков относительно входной поверхности кристалла,  $\varphi$  — угол скоса отражающих плоскостей к поверхности образца,  $b = \gamma_0/\gamma_h$  — фактор асимметрии,  $C$  — поляризационный фактор,  $\chi_{0,h} = -r_0(\lambda^2/\pi V_c)F_{0,h}$  — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости,  $V_c$  — объём элементарной ячейки,  $r_0 = e^2/(mc^2)$  — классический радиус электрона,  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона,  $F_{0,h}$  — структурные факторы в направлении прохождения и дифракции. Для описания рассеяния рентгеновских лучей применительно к трёхосевой дифрактометрии угловой параметр  $\eta$  записывается через проекции вектора  $\mathbf{q}$  как  $\eta = q_x \cot \theta_2 - q_z$ . Присутствующие в правой части уравнений (1) параметры  $\bar{\phi}(q', y, z)$  и  $\bar{\phi}^*(q', y, z)$  представляют собой фурье-образы фазовых функций  $\phi(\mathbf{r})$  и  $\phi^*(\mathbf{r})$ , где звёздочка означает комплексное сопряжение.

В общем случае как диффузное, так и когерентное рассеяние присутствуют в сложном процессе динамической дифракции и описываются системой интегро-дифференциальных уравнений [37]. Полупроводниковые кристаллы опто- и наноэлектроники преимущественно исследуются в геометрии Брэгга, поэтому диффузное рассеяние можно описывать в кинематическом (борновском) приближении без учёта явлений вторичной экстинкции. Это существенно упрощает процедуру рассмотрения.

Рассмотрим распределение интенсивности диффузного рассеяния вблизи узла обратной решётки  $\mathbf{h}$  как функцию вектора  $\mathbf{q}$ . По определению, интенсивность диффузного рассеяния на поверхности кристалла выражается как [28, 44]

$$I_h^d(\mathbf{q}) = \langle E_h(\mathbf{q}) E_h^*(\mathbf{q}) \rangle - \langle E_h(\mathbf{q}) \rangle \langle E_h^*(\mathbf{q}) \rangle. \quad (2)$$

Первое соотношение в правой части (2) представляет интенсивность полного рассеяния, из которой вычитается когерентная составляющая. Используя формальное решение для когерентных волн (1), после несложных преобразований, применяемых в статистической динамической теории дифракции [28], получаем уравнение для углового распределения интенсивности диффузного рассеяния:

$$I_h^d(\mathbf{q}) = \int_0^l dz \int dx \int dy |a_h(\mathbf{r})|^2 (1 - f^2(\mathbf{r})) \times \exp[-(1+b)\mu z] \tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}) I_0^c(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $\mu$  — линейный коэффициент поглощения рентгеновских лучей,  $I_0^c(\mathbf{r})$  — интенсивность проходящего рентгеновского пучка в объёме кристалла в точке с координатой  $\mathbf{r}$ .

Соотношение (3) для интенсивности диффузного рассеяния применимо к кристаллическим средам, в объёме которых существуют пространственные изменения химического состава, дефектов структуры и протяжённых упругих деформаций кристаллической решётки. Формула (3) по виду совпадает с выражением для интенсивности некогерентного рассеяния от одномерно деформированных кристаллов в двухосевой схеме регистрации [31–33]. Отличие состоит в том, что в (3) вместо корреляционной длины в рассмотрение вводится корреляционный объём [37–38, 40]

$$\tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{\rho} g(\mathbf{r}, \mathbf{\rho}) \exp \left[ i(\mathbf{q}\mathbf{\rho} + \mathbf{h}(\langle \mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{\rho}) \rangle - \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle)) \right], \quad (4)$$

где вектор  $\mathbf{\rho}$  определяет смещение от заданной точки  $\mathbf{r}$ . Этот параметр характеризует угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния в деформированных кристаллах и зависит от структурных особенностей распределённых в объёме дефектов. Тип дефектов (форма, размеры, упругие деформации и т.д.) описывается собственной корреляционной функцией [28, 38]

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{\rho}) = \frac{\langle \exp [i\mathbf{h}(\delta \mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{\rho}) - \delta \mathbf{u}(\mathbf{r}))] \rangle - f^2(\mathbf{r})}{1 - f^2(\mathbf{r})}. \quad (5)$$

Для некоторых моделей дефектов аналитическое выражение собственной корреляционной функции получено в [38, 39, 47, 48]. Рассмотрение диффузного рассеяния в рамках трёхосевой дифрактометрии требует интегрирования (4) по переменной  $q_y$ . В результате корреляционный объём трансформируется в корреляционную площадь  $\tau(\mathbf{r}, q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_y \tau(\mathbf{r}, \mathbf{q})$  [38, 39]. В случае однородно распределённых дефектов решение для корреляционного объёма может быть представлено в иной форме. Если ввести функцию  $D(\mathbf{r}) = 1 - \exp(i\mathbf{h} \delta \mathbf{u}(\mathbf{r}))$  [49], то выражение для статического фактора Дебая – Уоллера запишется как

$$f = \exp \left( -\frac{c}{V_c} \int D(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right).$$

Кроме того, можно представить собственную корреляционную функцию (5) в виде

$$g(\mathbf{\rho}) = c [V_c(1 - f^2)]^{-1} \int D(\mathbf{r}) D^*(\mathbf{r} + \mathbf{\rho}) d\mathbf{r},$$

где  $c$  — концентрация дефектов в объёме кристалла. Введение функции пространственной переменной  $D(\mathbf{r})$  полезно для практических расчётов. В частности, соотношение для корреляционного объёма представимо через её фурье-образ  $D(\mathbf{q}) = \int D(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ :

$$\tau(\mathbf{q}) = c [V_c(1 - f^2)]^{-1} |D(\mathbf{q})|^2. \quad (6)$$

Поскольку угловое распределение интенсивности (3) пропорционально корреляционному объёму, параметр  $D(\mathbf{q})$  в (6) вполне логично трактовать как амплитуду

диффузного рассеяния. Представление  $\tau(\mathbf{q})$  в виде (6) использовалось в расчётах диффузного рассеяния от кристаллических сред со сферически-симметричными дефектами [50], квантовыми точками [51, 52] и квантовыми кольцами [53].

### 2.3. Прямая и обратная задача дифракции рентгеновских лучей

Построение теории, выбор модели твердотельной структуры и на основании этого последующее вычисление углового распределения интенсивности рассеяния принято считать прямой задачей рентгеновской дифракции. В настоящее время экспериментальные рентгенодифракционные измерения часто сопровождаются численным моделированием. При этом исследователей удовлетворяет качественное совпадение теоретических результатов и экспериментальных данных в рамках решения прямой задачи.

Особое место в рентгеновской дифракционной оптике занимает решение обратных задач определения параметров структурированной среды на основе рентгенодифракционных данных [7–9, 54–61]. Различные подходы использовались в процедуре восстановления структурных характеристик материалов с использованием методов высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии [7, 54–58], рефлектометрии [59, 60] и фазового контраста [61]. Анализ рентгенодифракционных кривых отражения (см. монографию [54] и приведённую там литературу) позволяет получить информацию о профиле деформаций кристаллической решётки, композиционном составе и статическом факторе Дебая–Уоллера. Уже на этом этапе возникают трудности в однозначном определении композиционного состава и структурных нарушений решётки, поскольку фурьекоэффициенты поляризуемости среды и статический фактор Дебая–Уоллера в уравнениях дифракции присутствуют в виде произведения и совместно отвечают за степень взаимодействия рентгеновских квантов со средой в условиях брэгговской дифракции. Для устранения неоднозначности необходимы дополнительные дифракционные измерения или данные других методов. Так, например, в [7] для численного решения обратной задачи использованы данные двух- и трёхкристальной дифрактометрии, а в работе [58] анализировались разные порядки дифракционного отражения.

В ходе решения обратной задачи существуют определённые нюансы. Поскольку обратная задача непосредственно связана с решениями дифференциальных, интегральных или интегро-дифференциальных уравнений, то важным является вопрос о корректности задачи [54]. Поэтому в первую очередь требуется рассматривать вопросы, связанные с существованием решения, его единственностью и устойчивостью. Необходимым условием корректности является также фазовая проблема, поскольку детектор в схеме дифрактометра фиксирует модуль комплексного коэффициента отражения, а фаза при этом теряется. Кроме того, решение обратной рентгенодифракционной задачи должно учитывать особенности самого эксперимента, ввиду того что неизбежно существуют ошибки измерений, а также накладываются аппаратные искажения на регистрируемый сигнал. С учётом всех перечисленных факторов в настоящее время получить исключительно однозначное решение обратной задачи практически невозможно.

Дифракционная задача многократно усложняется, если исследуемый объект содержит статистически распределённые включения в кристаллическом пространстве. Заметим, что эти включения практически всегда имеют ещё и разброс по размерам, поэтому говорить об абсолютной однозначности решения вообще бессмысленно. Задача получения информации о нановключениях в структурированной среде с указанием их индивидуального размера и точного пространственного расположения в принципе не может быть решена в ближайшее время даже с применением сверхмощных суперкомпьютеров. Следовательно, на данном этапе всегда идёт речь об усреднённых характеристиках исследуемого объекта.

В отличие от рентгеновской рефлектометрии [60], где взаимодействие рентгеновских квантов связано с электронной плотностью среды, необходимым условием рентгеновской дифракции является трансляционная упорядоченность атомов в кристаллической решётке. Следует отметить, что, несмотря на значительные успехи в ростовой технологии, кристаллических систем с идеальной структурой и однородными периодически расположенными в среде нановключениями на сегодняшний день не существует, поэтому в процессе дифракции выход когерентных рентгеновских волн всегда сопровождается диффузным рассеянием. Такое рассеяние имеет своё характерное угловое распределение интенсивности в зависимости от формы и размеров наноструктур, оно накладывается на когерентную составляющую, формируя общий регистрируемый сигнал. Это является существенным препятствием при решении безмодельных обратных задач.

Тем не менее решение обратных задач на основе минимизации функционала невязки экспериментальных данных и теоретических вычислений на базе выбранной модели позволяет с определённой точностью получать информацию о структурных характеристиках исследуемых объектов.

### 3. Дифракция рентгеновских лучей в структурированных средах

К кристаллическим структурированным средам относятся твердотельные системы и многослойные конструкции, в которых, помимо трансляционного периода основной матрицы, существует дополнительный период или другая пространственная вариация в результате применения современных технологий или внешних воздействий. К таким объектам относятся монокристаллические или многослойные поверхностные решётки, нанопористые слои, полупроводниковые сверхрешётки, самоорганизованные системы с квантовыми нитями и точками и др. Результаты исследований ряда наноструктурированных сред методом высокоразрешающей рентгеновской дифракции, в частности, латеральных поверхностных и скрытых в объёме матрицы решёток, самоорганизованных квантовых нитей, коррелированных поверхностных шероховатостей и т.д. изложены в монографии [62]. Для этих объектов эксперименты преимущественно проводились в скользящей геометрии, а расчёты выполнялись с использованием метода искажённых волн в борновском приближении (distorted wave-Born approximation).

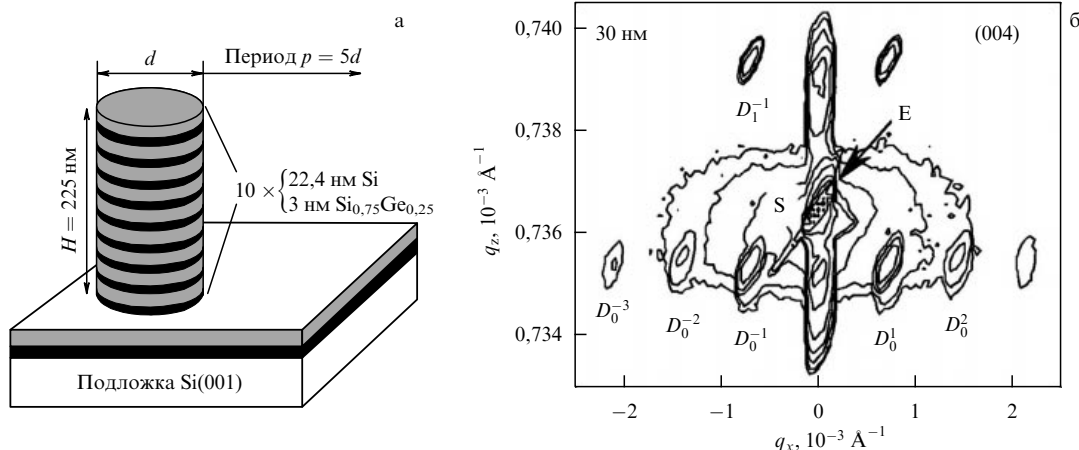


Рис. 1. Схематическое изображение многослойной КТ (а) и RSM от латеральной периодической структуры из Si/SiGe-квантовых точек (б) [67].

### 3.1. Многослойные квантовые точки

Рассмотрим применение высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии для исследования структур с КТ. Начнём с того, что карты распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей использовались для анализа многослойных GaAs/AlAs-квантовых точек, полученных электронно-лучевой литографией с последующим ионным травлением [63–66]. Контуры равной интенсивности измерены для узлов обратной решётки (004) и  $(\bar{1}\bar{1}3)$  и представляли собой картину из периодически расположенных сателлитов в вертикальном и латеральном направлениях. В отличие от самоорганизованных КТ, многослойные наноструктуры имели существенно большие размеры, по данным электронной микроскопии они представляли собой цилиндры высотой 640 нм и радиусом 65 нм. Такие КТ образовывали двумерную латеральную решётку с периодом в одном направлении 350 нм, а в другом (перпендикулярном) — 300 нм.

Для количественного анализа структурных характеристик КТ и их латеральной упорядоченности в [64] предложена двумерная модель расчётов когерентного и диффузного рассеяния. Методом сравнения численных результатов и экспериментальных данных получены усреднённые структурные характеристики КТ, в частности, средние значения деформаций в наноструктурах, а также усреднённый по ансамблю их размер, при этом средний радиус КТ по рентгенодифракционным данным оказался равным 50 нм вместо 65 нм на изображениях, полученных с помощью электронного микроскопа [64]. Анализ диффузного рассеяния показал наличие случайных атомных смещений в объёме многослойных квантовых точек. Формирование диффузного пятна вокруг узла GaAs объясняется присутствием дефектов в приповерхностном слое подложки. Остался не до конца выясненным факт значительно более сильного диффузного рассеяния для асимметричной дифракции по сравнению с отражением (004). Авторы [64] считают, что результаты численного моделирования в целом находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными для RSM от латерально упорядоченных многослойных КТ.

Позднее методом ВРД были исследованы многослойные КТ Si/SiGe [67]. Исходная Si/SiGe-сверхрешётка с квантовыми ямами выращена методом молекулярно-лучевой эпитаксии при температуре 600 °С. Латерально периодическая структура из КТ была также сформиро-

вана методом электронной литографии с последующим ионным травлением. Для ряда образцов КТ представляли собой цилиндры с радиусами 30, 40, 60 и 100 нм (рис. 1а).

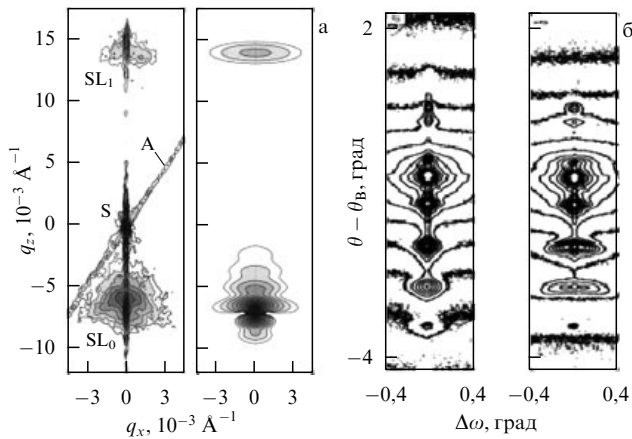
Как и в предыдущих работах [63–66], на RSM от многослойных Si/SiGe-КТ присутствовали дополнительные дифракционные порядки (сателлиты) в вертикальном и латеральном направлениях (рис. 1б). Относительно большой угловой размер сателлитов на RSM обусловлен наличием широкой щели детектора для увеличения интенсивности рассеяния. На рисунке 1б символ S означает дифракционный пик от подложки,  $D_i^j$  указывают на соответствующий дифракционный порядок (сателлит), где нижний индекс  $i$  маркирует сверхрешточный дифракционный порядок, а верхний индекс  $j$  относится к латеральному порядку, вызванному периодическим расположением КТ. Полоса E означает след сферы Эвальда в плоскости обратного пространства из-за ограниченного углового разрешения детектора дифрактометра. По рентгенодифракционным данным и на основе расчётов с применением метода конечных элементов в объёме многослойных квантовых точек Si/SiGe исследованы процессы упругой релаксации [67].

### 3.2. Полупроводниковые структуры с самоорганизованными квантовыми точками

Несмотря на то что впервые рост самоорганизованных InGaAs-КТ в структуре InAs/GaAs-сверхрешётки наблюдали в 1985 г. [4], лишь спустя десять лет данные высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии были использованы для качественного анализа Si/Ge-структур с КТ [68]. Угловые распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решётки от сверхрешётки с самоорганизованными квантовыми точками на основе SiGe [68–72] и InGaAs [73–77] показали наличие интерференционных диффузных максимумов вокруг сверхструктурных сателлитов когерентного рассеяния (рис. 2).

На основе статистической кинематической теории дифракции рентгеновских лучей проведено численное моделирование RSM [69, 70] с целью получения информации об упругих деформациях, вертикальной и латеральной корреляции КТ. В расчётах диффузного рассеяния авторами [69, 70] принята модель КТ цилиндрической формы. Упругие поля деформаций, вызванные наличием в кристаллической среде КТ, вычислялись с

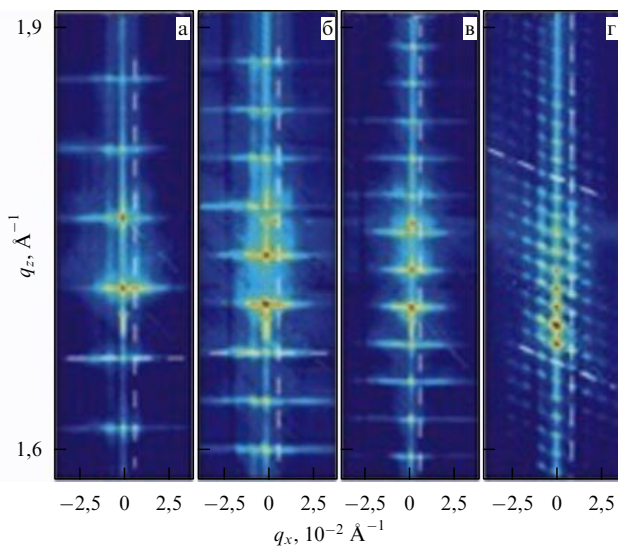




**Рис. 2.** (а) Измеренная (слева) и расчётная RSM вблизи узла (004) от Ge/Si-сверхрешётки с SiGe-КТ [70]; (б) измеренные RSM вблизи узла (004) от InAs/GaAs-сверхрешётки с InGaAs-КТ для разных азимутальных положений образца [77].

использованием функций Грина. Поскольку при сравнении экспериментальных и теоретических RSM в алгоритме расчётов бралась во внимание только диффузная компонента, имело место лишь качественное согласие результатов (рис. 2а). Тем не менее в статьях [69, 70] продемонстрирована уникальная возможность метода ВРД для исследования морфологии и упругих деформаций в структурах с самоорганизованными КТ.

Метод построения RSM в дальнейшем успешно использован для анализа PbSe/PbEuTe [78–80], EuTe/SnTe [81], InAs/InP [82] и ZnMgTe/ZnSe [83] многослойных систем с массивами КТ. Так, например, в работе [80] показано, что сверхрешётка PbSe/PbEuTe является уникальной, поскольку в ней формируются разнообразные межслойные корреляции в зависимости от изменений толщины разделяющего слоя PbEuTe, размеров PbSe-КТ или ростовой температуры. На рисунке 3 представ-



**Рис. 3.** RSM (111)-отражения от сверхрешёток PbSe/PbEuTe с разными толщинами разделяющих слоёв PbEuTe: (а) 10,4 нм, (б) 16,4 нм, (в) 21,4 нм, (г) 45,4 нм. В случаях (а–в) формируется 3D гексагональная решётка из КТ, в случае г — 3D тригональная решётка из КТ [80].

лены отражения RSM (111) от сверхрешёток PbSe/PbEuTe с разными толщинами разделяющих слоёв (спейсеров). При относительно малых толщинах спейсеров квантовые точки образуют 3D гексагональную решётку, при этом КТ располагаются строго друг над другом в вертикальном направлении. Наличие толстого разделяющего слоя приводит к образованию 3D тригональной решётки из КТ, линия стекирования в этом случае не является вертикальной, а имеет угол наклона, который определяется из анализа RSM (см. рис. 3). Помимо хорошо проявляющихся вертикальных дифракционных сателлитов, наблюдаются и латеральные осцилляции в распределении интенсивности рассеяния, вызванные ближним порядком КТ в горизонтальном направлении [80].

Угловое распределение диффузного рассеяния на RSM позволяет определить не только размеры, упругие деформации, пространственную корреляцию КТ, но также и наклон стекирования, т.е. отклонение от вертикального расположения КТ в ряд друг за другом относительно поверхности образца [80, 84–86]. Следует также отметить, что метод RSM успешно использовался для изучения морфологии цепочек из КТ с помощью измерения при разных азимутальных положениях образца [87, 88].

### 3.3. Дифракция на 3D периодических массивах квантовых точек

С помощью современных нанотехнологий создаются новые искусственные материалы с большими функциональными возможностями для устройств, применяемых в физике, химии, биологии и медицине. Самоорганизация наноструктур с использованием шаблонов признана в качестве возможного пути к достижению точного позиционирования нанобъектов для получения массивов, молекул и кристаллов из квантовых точек.

Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия применялась для определения размеров, химического состава и деформаций самоорганизованных островков Ge/Si(001) в виде трёхмерной решётки, выращенной на подложке (001)Si с предварительно протравленными с помощью электронно-лучевой литографии ямками, расположенными в форме квадратной сетки [89]. В рамках кинематического приближения выполнено численное моделирование измеренной интенсивности диффузного рассеяния с целью определения параметров островков. Для создания шаблонов с требуемой периодичностью и уменьшения размеров структур применялась ультрафиолетовая интерференционная литография (EUV-IL) на длине волны 13,5 нм [90].

Структурное совершенство трёхмерной периодической системы Si/SiGe исследовалось методом высоко-разрешающей дифрактометрии с использованием синхротронного излучения [89]. Карты RSM вблизи узлов обратной решётки (004) и (224) были измерены и проанализированы для получения количественной информации о позиционных нарушениях в расположении точек, а также фиксации содержания Ge в КТ. Авторами предложена структурная модель, описывающая упругие деформации в зависимости от формы и композиционного состава КТ, а также учитывающая пространственное расположение КТ [91]. Типичная RSM с ясно наблюдаемой структурой многочисленных дифракционных сателлитов в вертикальном и латеральном направлениях,



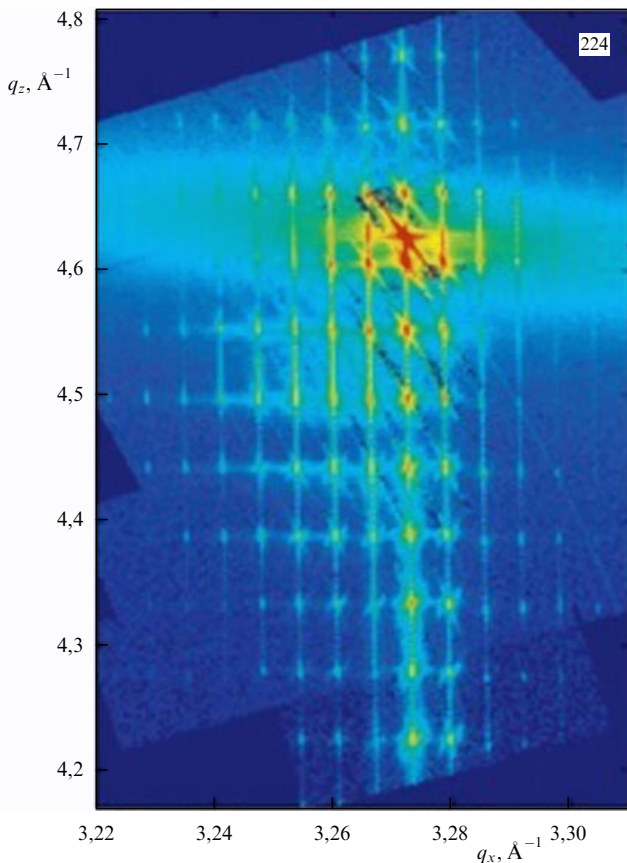


Рис. 4. RSM вблизи брэгговского пика (224) от трёхмерной периодической структуры SiGe-КТ [90].

которая присуща объектам с дальним порядком, показана на рис. 4 [90].

#### 4. Влияние формы, размеров и упругих деформаций квантовых точек на диффузное рассеяние рентгеновских лучей

Среди характеристик наноструктур в кристаллической среде особую роль играют их размеры, форма и упругие деформации, возникающие из-за несоответствия параметров решёток КТ и материала матрицы. В частности, упругие деформации приводят к существенным изменениям электронной зонной структуры материала. Кроме того, они играют важную роль в процессах пространственного упорядочения КТ в полупроводниковой матрице.

Исследованию распределений упругих деформаций внутри и вне самоорганизованных квантовых точек в последние годы уделяется пристальное внимание (см. обзор [92] и приведённую там литературу). Для вычисления этих деформаций применяются различные подходы, основанные на численных методах конечных элементов [93], молекулярной динамики [94], поля валентных сил [95], а также с использованием формализма функций Грина [96] и аналогии между задачами электростатики и теории упругости [97].

Проблема вычислений упругих деформаций в кристаллических системах с КТ является весьма сложной и, как правило, в редких случаях допускает аналитическое решение. С другой стороны, изучение систем с КТ

методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии требует построения моделей с учётом распределения упругих деформаций. Такая задача является ещё более сложной, поскольку требует как вычисления самих упругих деформаций, так и расчёта диффузного рассеяния рентгеновских лучей на искажениях кристаллической решётки, вызванных этими деформациями. По-видимому, из-за сложности таких исследований число работ в этом направлении в настоящее время незначительно [69–72].

Известно, что теория диффузного рассеяния достаточно полно разработана для модели сферически симметричных включений [44, 50], однако такая форма самоорганизованных КТ встречается крайне редко. Как правило, размер квантовой точки в латеральном направлении существенно превышает её вертикальный размер. В [69–72] рассматривалась цилиндрическая форма КТ, учитывалась упругая деформация и релаксация напряжений на свободной поверхности. В этих работах решение для вычисления диффузного рассеяния представлено в виде произведения фурье-образа поля смещений точечного дефекта и функции формы КТ. Такой подход не совсем корректен, поскольку пространственное изменение деформаций от включений, например, сфероидальной и цилиндрической формы, отличается [98]. С другой стороны, это отличие не столь существенно при трансформации включений от сферически симметричной фигуры к сфероидальной структуре.

#### 4.1. Диффузное рассеяние от эпитаксиальных структур с квантовыми точками разной формы

Как уже отмечалось, среди характеристик наноструктурированных материалов особая роль отводится форме КТ и упругим деформациям, возникающим из-за несоответствия параметров решёток КТ и материала матрицы. Известно, что ростовой механизм Странски–Крастанова (Stranski–Krastanow growth mode) ведёт к формированию самоорганизованных КТ, форма которых сильно зависит от ростовой температуры, соотношения компонентных потоков и скорости роста. При определённых условиях образуются КТ в форме линзы, эллипсоида, купола, правильной пирамиды или правильной усечённой пирамиды с квадратным основанием (см. обзор [99] и приведённую в нём литературу).

Для исследования формы и размеров КТ преимущественно используются методы просвечивающей электронной и атомно-силовой микроскопии [99]. В последние годы для более высокоразрешающих структурных исследований всё чаще используется метод сканирующей туннельной микроскопии [99]. Перечисленные методы, как правило, позволяют исследовать очень малые объёмы образцов и в основном дают изображения индивидуальных КТ. Кроме того, приготовление сколов практически приводит к разрушению изучаемых объектов. Поэтому возникает потребность в неразрушающем исследовании всего образца в целом и получении информации о статистически усреднённых характеристиках полупроводниковых систем с КТ.

Следуя [52], проанализируем диффузное рассеяние в кристаллическом слое со скрытыми КТ без учёта их пространственной корреляции. Более общие уравнения (3)–(6) в случае рассмотрения тонких слоёв с нановключениями существенно упростятся. Как отмечалось в разделе 2.2, угловое распределение интенсивности рас-

сеяния зависит от величины вектора  $\mathbf{q}$ , задающего отклонение вектора дифракции от узла обратной решётки. Выражение для интенсивности диффузного рассеяния в рассматриваемом случае имеет простой вид

$$I_h^d(\mathbf{q}) = K_D \operatorname{Re} [\tau(\mathbf{q})], \quad (7)$$

где

$$\tau(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} g(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{p}) \quad (8)$$

— собственный корреляционный объём,  $K_D$  — постоянный коэффициент [50]. Напомним, что термин *корреляционный объём* введён в [38] по аналогии с корреляционной длиной. Без учёта полей деформаций вне КТ собственная корреляционная функция  $g(\mathbf{p})$  в соотношении (8) описывает форму КТ. В узле обратной решётки, когда  $\mathbf{q} = 0$ , корреляционный объём равен объёму квантовой точки  $V_{\text{QD}}$ :

$$\tau(0) = \int_{V_{\text{QD}}} d\mathbf{p} g(\mathbf{p}) = V_{\text{QD}}.$$

Собственную корреляционную функцию КТ в кристаллической матрице можно представить в виде свёртки [49, 50]

$$g(\mathbf{p}) = \frac{1}{V_{\text{QD}}} \int D(\mathbf{r}) D^*(\mathbf{r} + \mathbf{p}) d\mathbf{r}, \quad (9)$$

где функция  $D(\mathbf{r})$  зависит от поля упругих деформаций и описывает локальные нарушения кристаллической решётки. Подставляя (9) в выражение для корреляционного объёма (8), получаем

$$\tau(\mathbf{q}) = \frac{|D(\mathbf{q})|^2}{V_{\text{QD}}}. \quad (10)$$

Здесь  $D(\mathbf{q})$  — фурье-образ функции  $D(\mathbf{r})$ .

Следуя [96], рассмотрим модель среды с КТ, периодически распределёнными в трёх направлениях. В этом случае тензор деформации массива КТ  $e_{rr}$  может быть представлен в виде трёхмерного ряда Фурье:

$$e_{rr}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_L} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{rr}^s(\xi_n) \exp(i\xi_n \mathbf{r}), \quad (11)$$

где  $V_L = d_1 d_2 d_3$ ,  $d_1, d_2, d_3$  — периоды трансляционного порядка КТ в соответствующих направлениях кристалла с кубической элементарной ячейкой и

$$\tilde{e}_{rr}^s(\xi) = \varepsilon_0 \tilde{\chi}_{\text{QD}}(\xi) \times \left[ 1 - \frac{C_{11} + 2C_{12}(C_{44}\xi^2/\xi_r^2 + C_{\text{an}})^{-1}}{1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \xi_p^2 / (C_{44}\xi^2 + C_{\text{an}}\xi_p^2)} \right] \quad (12)$$

— фурье-образ компоненты тензора деформации отдельной КТ внутри кубического кристалла [96]. Здесь  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  — упругие константы, коэффициент  $C_{\text{an}} = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$  описывает анизотропную часть тензора деформации,  $\varepsilon_0 = (a_M - a_{\text{QD}})/a_M$  — деформация несоответствия,  $a_M, a_{\text{QD}}$  — постоянные решётки основной матрицы и квантовой точки.

В (12) присутствует фурье-образ характеристической функции  $\chi_{\text{QD}}(\mathbf{r})$  квантовой точки [96]:

$$\tilde{\chi}_{\text{QD}}(\xi) = \int_{V_{\text{QD}}} \chi_{\text{QD}}(\mathbf{r}) \exp(i\xi \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (13)$$

где

$$\chi_{\text{QD}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in V_{\text{QD}} \\ 0, & \mathbf{r} \notin V_{\text{QD}} \end{cases}$$

и интегрирование проводится по всему объёму КТ. Отметим, что характеристическая функция КТ  $\chi_{\text{QD}}(\mathbf{r})$  является аналогом функции формы в теории рентгеновской дифракции, а её фурье-образ  $\tilde{\chi}_{\text{QD}}(\xi)$  по своей структуре совпадает с корреляционным объёмом при отсутствии упругих полей деформаций вокруг КТ.

Проекция поля упругих смещений на выделенное направление является результатом интегрирования тензора деформаций

$$U_r(\mathbf{r}) = \int_{\notin V_{\text{QD}}}^r e_{rr}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + U_{r0}, \quad (14)$$

где  $U_{r0}$  — начальное смещение на поверхностной границе квантовой точки и основной матрицы. Здесь уместно подчеркнуть, что в рамках рассматриваемой модели мы не учитываем реально существующую взаимную диффузию компонент матрицы и КТ. Подставляя (11) в (14), окончательно получаем

$$U_r(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_L} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{rr}^s(\xi_n) \frac{\exp(i\xi_n \mathbf{r})}{(\xi_n)_r} + U_{r0}, \quad (15)$$

где  $\tilde{e}_{rr}^s(\xi_n)$  задаётся соотношением (12).

Амплитуду диффузного рассеяния в (10) представим в виде суммы двух слагаемых:

$$D(\mathbf{q}) = D_{\text{Sw}}(\mathbf{q}) + D_{\text{D}}(\mathbf{q}). \quad (16)$$

Здесь первое слагаемое  $D_{\text{Sw}}(\mathbf{q})$  — амплитуда диффузного рассеяния от кристаллической матрицы без учёта упругих деформаций вне КТ (рассеяние Стокса – Вильсона). Второе слагаемое  $D_{\text{D}}(\mathbf{q})$  учитывает влияние полей атомных смещений вблизи КТ. Этот член суммы (16) может быть представлен как

$$D_{\text{D}}(\mathbf{q}) = \int_{\notin V_{\text{QD}}}^{\infty} [1 - \exp(i\mathbf{h}\mathbf{U})] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (17)$$

Численный расчёт диффузного рассеяния от кристалла со скрытыми КТ с учётом упругих атомных смещений (15) удобно проводить в обобщённой сферической системе координат. В итоге получаем следующее выражение для второго слагаемого суммы (16):

$$D_{\text{D}}(\mathbf{q}) = -2\pi \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta \times \int_{r_0(\theta)}^\infty dr r^2 U_r(r, \theta) \exp(iqr \cos \theta), \quad (18)$$

где  $r_0(\theta)$  — расстояние от центра КТ до её границы в вертикальной плоскости дифракции.

В рамках представленного подхода проведено численное моделирование распределения интенсивности

диффузного рассеяния от массива скрытых InAs-КТ разной формы в кристаллической матрице GaAs. Выбор КТ в форме цилиндра обусловлен тем, что это первая модель, которая использовалась для анализа диффузного рассеяния от Si/Ge-сверхрешётки в рамках концепции точечных дефектов в изотропном полубесконечном континууме [69–72]. Модели конусообразных и сфероидальных КТ описывают реально растущие КТ в форме пирамиды и эллипсоида соответственно. Более того, модель КТ сфероидальной формы хорошо аппроксимирует часто встречающиеся КТ в форме линзы [100]. Отметим, что из-за сложности вычислений особое место в наших исследованиях занимает анализ диффузного рассеяния от систем с КТ в форме пирамиды. Ещё одной значимой причиной рассмотрения указанных выше моделей КТ является существование аналитического решения для рассеяния Стокса–Вильсона.

Расчёты диффузного рассеяния выполнены для симметричного отражения (004) CuK $\alpha$ -излучения. На всех рисунках с изображениями карт распределения диффузного рассеяния отношение интенсивностей между соседними контурами даётся в логарифмическом масштабе и равно 0,316. Высота для всех моделей КТ, кроме пирамидальных включений, составляла  $h = 5$  нм, латеральный размер  $2R = 20$  нм. Для модели КТ в форме усечённого конуса угол  $\alpha$  между высотой и образующей равен  $45^\circ$ . Карты распределения упругих смещений представлены в линейном масштабе, отношение значений атомных смещений между соседними линиями  $0,6 \times 10^{-3}$  нм. Поскольку имеет место большое несоответствие параметров решётки InAs и GaAs, распределение деформаций внутри КТ, а также весьма слабое диффузное рассеяние от её внутренней части в расчётах не учитывались.

Размеры КТ в форме пирамиды выбраны с учётом вычислений диффузного рассеяния от систем с наноструктурами сфероидальной формы такого же объёма (высота  $h = 5$  нм и диаметр  $2R = 20$  нм). При условии равенства объёмов КТ в форме сфероида и усечённой пирамиды выбраны следующие параметры для пирамидальной модели: высота  $h = 4,37$  нм, длина стороны верхнего основания  $A_1 = 7,47$  нм, длина стороны нижнего основания  $A_2 = 16,2$  нм, угол  $\alpha$  между основанием и одной из граней пирамиды  $45^\circ$ .

Аналитические формулы для рассеяния Стокса–Вильсона от кристаллической среды с КТ цилиндрической, конусообразной и сфероидальной формы соответственно имеют вид

$$D_{\text{SW}}^{\text{cyl}}(\mathbf{q}) = 2\pi \frac{Rh}{q_0} J_1(q_0 R) \text{sinc}\left(\frac{q_z h}{2}\right),$$

$$D_{\text{SW}}^{\text{con}}(\mathbf{q}) = 2\pi \int_0^h dz \frac{R_z^{\text{con}}}{q_0} J_1(q_0 R_z^{\text{con}}) \exp(iq_z z),$$

$$D_{\text{SW}}^{\text{ell}}(\mathbf{q}) = 2\pi \int_{-h/2}^{h/2} dz \frac{R_z^{\text{ell}}}{q_0} J_1(q_0 R_z^{\text{ell}}) \exp(iq_z z),$$

где  $J_1(q_0 R)$  — функция Бесселя первого порядка,  $\text{sinc } x = \sin x/x$ ,  $R_z^{\text{con}} = R + z \tan \alpha$  и  $R_z^{\text{ell}} = R[1 - z^2/(h/2)^2]^{1/2}$  — изменяющиеся с координатой  $z$  радиусы КТ конусообразной и сфероидальной формы,  $q_0 = (q_x^2 + q_y^2)^{1/2}$ .

Аналитическое решение для рассеяния Стокса–Вильсона для КТ в форме усечённой пирамиды запи-

шется как

$$D_{\text{SW}}(\mathbf{q}) = 2\pi \frac{H}{q_x q_y} \left[ \text{sinc}(Hq_1) \exp(-i(R_1 - Hq_1)) + \text{sinc}(Hq_2) \exp(i(R_1 - Hq_2)) - \text{sinc}(Hq_3) \exp(i(R_2 - Hq_3)) - \text{sinc}(Hq_4) \exp(-i(R_2 - Hq_4)) \right],$$

где угловые параметры  $q_1, q_2, q_3, q_4$  задаются выражениями

$$q_1 = \frac{(q_x - q_y) \cot \alpha + q_z}{2}, \quad q_2 = \frac{(q_x - q_y) \cot \alpha - q_z}{2}, \\ q_3 = \frac{(q_x + q_y) \cot \alpha + q_z}{2}, \quad q_4 = \frac{(q_x + q_y) \cot \alpha - q_z}{2},$$

$H$  — высота пирамиды. Коэффициенты  $R_1$  и  $R_2$  имеют вид  $R_{1,2} = (q_x A_1 \mp q_y A_2)/2$ , где  $A_{1,2}$  — длины сторон верхнего и нижнего основания пирамиды.

На рисунке 5 представлены карты распределения упругих смещений и диффузного рассеяния для случая малой объёмной плотности КТ в кристаллической матрице. Среднее расстояние между соседними КТ равно 500 нм. В этом случае поля атомных смещений от КТ распространяются на достаточно большие расстояния. Такое пространственное изменение деформаций сказы-

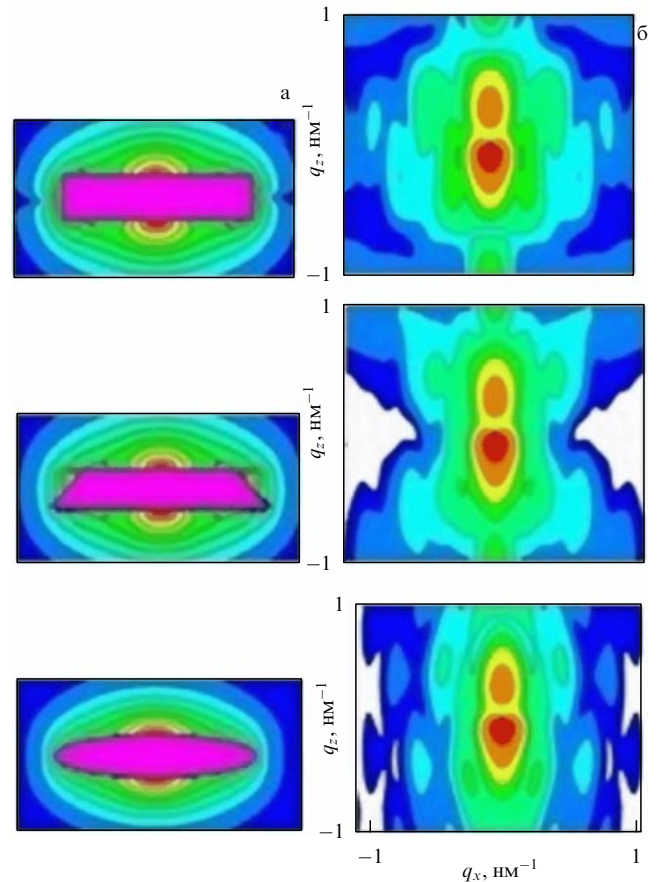
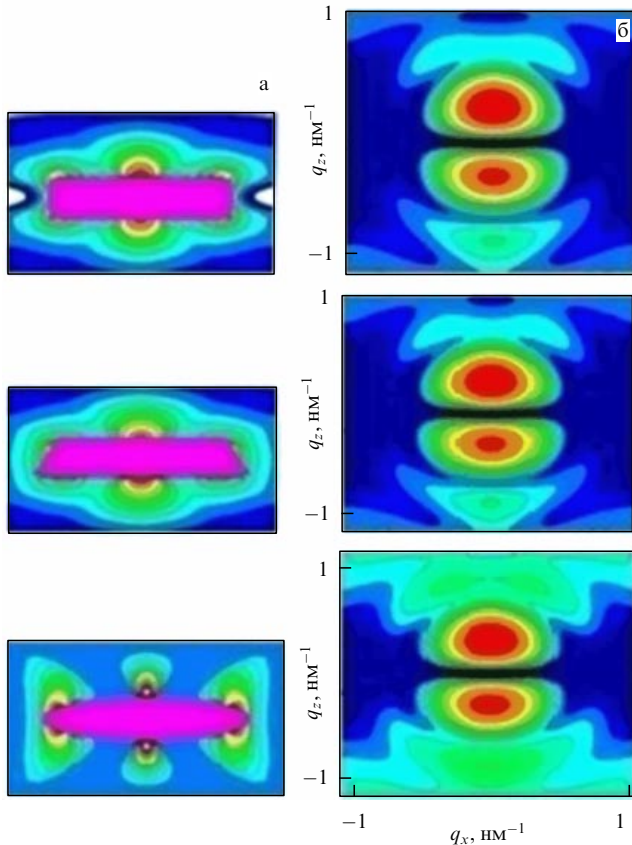


Рис. 5. Двумерные карты распределения упругих смещений (а) и диффузного рассеяния (б) от кристаллической матрицы GaAs с КТ InAs в форме цилиндра, усечённого конуса и эллипсоида (сверху вниз). Расстояние между соседними КТ в вертикальном и латеральном направлении 500 нм [52].

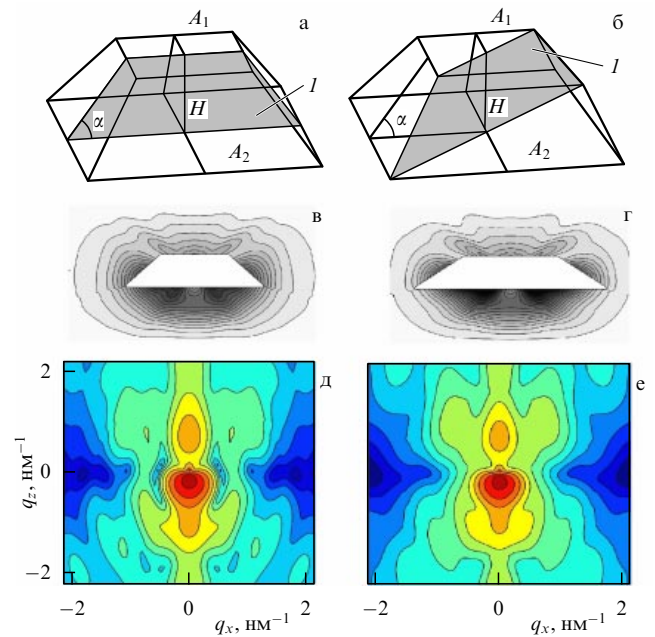




**Рис. 6.** Двумерные карты распределения упругих смещений (а) и диффузного рассеяния (б) от сверхрешётки InAs/GaAs с некоррелированными КТ InAs в форме цилиндра, усечённого конуса и эллипсоида (сверху вниз). Расстояние между соседними КТ в вертикальном направлении 20 нм, в латеральном направлении 30 нм [52].

вадается на угловом распределении интенсивности диффузного рассеяния. Атомные смещения вблизи сердцевин КТ влияют на формирование удалённого от узла обратной решётки распределения интенсивности диффузного рассеяния. Так, например, контуры равной интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с конусообразными КТ имеют характерный наклон, связанный с величиной угла  $\alpha$  между высотой и образующей конуса (см. рис. 5). В частности, такое поведение интенсивности вблизи узла обратной решётки возникает и в случае дифракции на кристаллических островках с трапецидальным сечением [101].

На рисунке 6 показаны карты распределения упругих смещений и диффузного рассеяния РЛ для КТ большой объёмной плотности. Вертикальное расстояние между КТ составляет 20 нм. Расстояние между соседними КТ в латеральном направлении 30 нм. Такое пространственное расположение КТ характерно для наноструктурированных сверхрешёток. В данном случае поля упругих атомных смещений быстро затухают с расстоянием. Следовательно, форма КТ слабо влияет на угловое распределение диффузного рассеяния (рис. 6б). Поэтому основным фактором при анализе диффузного рассеяния от сверхрешёток с КТ является не сама форма нановключений, а отношение высоты КТ к её латеральному размеру [102]. Всё же различия в угловом распределении диффузного рассеяния от сверхрешётки с КТ разной формы существуют (рис. 6б). Эти различия практически



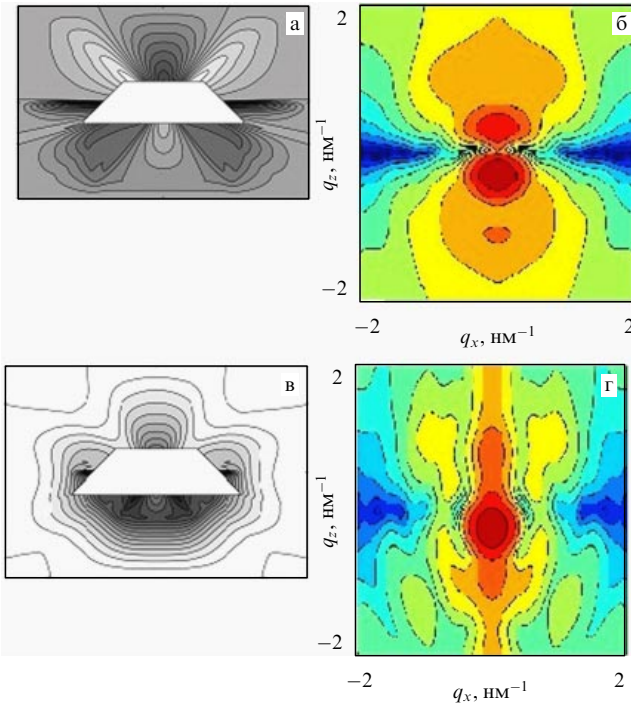
**Рис. 7.** (В цвете онлайн.) Ориентация плоскости дифракции  $l$  (показана серым цветом) относительно конфигурации КТ (а, б), соответствующие двумерные карты упругих деформаций (в, г) и углового распределения диффузного рассеяния (д, е). Расстояние между соседними КТ в вертикальном и латеральном направлении 250 нм, деформации несоответствия  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$  (в, г).

исчезают при учёте флуктуации размеров КТ и их пространственной корреляции. Поэтому в методе ВРД анализ диффузного рассеяния от сверхрешёток с КТ вполне достаточно выполнить в рамках наиболее простой для численных расчётов модели КТ. Самой предпочтительной является модель эллипсоидальных квантовых точек.

Рассмотрим более подробно результаты численного моделирования диффузного рассеяния от кристаллической среды с квантовыми точками в форме пирамиды. Известно, что деформация несоответствия постоянных решёток матрицы GaAs и КТ InGaAs определяется пространственным распределением композиционного состава в приграничной области нановключения. В численных расчётах использовались два значения деформаций несоответствия:  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$  и  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$ .

Следует отметить, что угловое распределение диффузного рассеяния от кристалла с пирамидальными КТ зависит от ориентации наноструктур относительно плоскости дифракции. На рисунке 7 показаны два положения плоскости дифракции относительно конфигурации КТ для азимутальных углов  $0^\circ$  (рис. 7а) и  $45^\circ$  (рис. 7б). На рисунке 7в, г представлены поля упругих смещений для случая малой объёмной плотности КТ в кристаллической матрице. Среднее расстояние между соседними КТ составляет 250 нм в вертикальном и латеральном направлениях. Соответствующие карты распределения диффузного рассеяния изображены на рис. 7д, е.

На рисунке 8 показаны двумерные карты упругих деформаций и углового распределения диффузного рассеяния для КТ большой объёмной плотности, что характерно для сверхрешёток в отсутствие вертикальной и латеральной корреляции наноструктур. Среднее вертикальное расстояние между КТ составляет 20 нм, расстоя-



**Рис. 8.** Двумерные карты упругих деформаций (а, в) и углового распределения диффузного рассеяния (б, г) от структуры InAs/GaAs с некоррелированными КТ InAs в форме усечённой пирамиды для деформаций несоответствия  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$  (а, б) и  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$  (в, г). Расстояние между соседними КТ в вертикальном направлении 20 нм, в латеральном направлении 30 нм.

ние между соседними КТ в латеральном направлении 30 нм. Численные расчёты показывают, что поведение упругих деформаций, а следовательно, и углового распределения диффузного рассеяния сильно зависит от деформаций несоответствия параметров решётки КТ и кристаллической матрицы.

Для относительно больших деформаций ( $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$ ) существенным становится вклад хуанговского рассеяния, что подтверждается проявлением "нулевой линии" при  $q_z = 0$  на карте диффузного рассеяния (рис. 8б). Для слабых деформаций ( $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$ ) преобладает рассеяние Стокса–Вильсона, обусловленное формой остова КТ. При этом чёткость нулевой линии пропадает и наблюдается характерное поведение диффузного рассеяния, непосредственно связанное с углом наклона граней пирамидальной КТ (рис. 8г). Отметим, что похожий характерный наклон контуров равной интенсивности диффузного рассеяния наблюдался в случае кристаллической среды с конусообразными КТ [52].

Из представленного рассмотрения следует, что результаты численного расчёта углового распределения диффузного рассеяния могут быть использованы для неразрушающего количественного анализа полупроводниковых систем с КТ разной формы. Единственная проблема, существующая в технологии выращивания самоорганизованных КТ, состоит в том, что пока не удаётся получить наноструктуры строго одинакового размера. Поэтому контуры распределения интенсивности рассеяния на измеренных RSM, как правило, размыты. Следовательно, при сопоставлении с теоретическими результатами в численных расчётах необходимо учитывать флуктуации размеров КТ.

## 4.2. Сферидальные квантовые точки

С помощью метода высокоразрешающей СТМ установлено, что форма квантовых точек InAs в кристаллической матрице GaAs лучше всего описывается эллипсоидом [6, 103, 104]. Более того, совсем недавно было показано, что покрытые сверху тонким слоем GaAs<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> квантовые точки InAs/GaAs также имеют эллипсоидальную форму [105]. Поскольку модель КТ в форме эллипсоида (сфероида) является наиболее простой для численных расчётов, ниже будет проведён детальный сравнительный анализ двух независимых подходов для вычисления диффузного рассеяния от наноструктурированных систем в рамках данной модели.

**4.2.1. Аналитическое решение задачи.** Итак, рассмотрим кристаллическую среду, в которой случайным образом распределены КТ сфероидальной формы. Поскольку параметр решётки квантовых точек, как правило, существенно отличается от периода кристаллической решётки основной матрицы в силу различий химического состава, на границе включений возникают упругие деформации несоответствия. Вектор атомных смещений в точке  $\mathbf{r}$  запишется в виде

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}) = A \int_V \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d\mathbf{r}',$$

где  $A = \varepsilon_0(1 + \nu)/(4\pi(1 - \nu))$ ,  $\varepsilon_0 = (a_{in} - a_m)/a_m$  — рассогласование решёток включения ( $a_{in}$ ) и матрицы ( $a_m$ ),  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $V$  — объём включения. Вектор атомных смещений вне КТ представим в виде ряда  $\mathbf{U}(\mathbf{r}) = \mathbf{U}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{U}_1(\mathbf{r}) + \mathbf{U}_2(\mathbf{r}) + \dots \mathbf{U}_n(\mathbf{r}) \dots$ , где каждый член суммы имеет вид

$$\mathbf{U}_n(\mathbf{r}) = A(n+1) \frac{\mathbf{r}}{r^{n+3}} P_n(\cos \theta) \Omega_n. \quad (19)$$

Здесь  $\Omega_n = \int_V d\mathbf{r}' r'^n P_n(\cos \theta')$ ,  $P_n(x)$  — полином Лежандра степени  $n$ . В выражении для множителя  $\Omega_n$  интегрирование ведётся по объёму КТ.

Рассмотрим модель КТ в форме сфероида [51]. Пусть  $l_z$  — вертикальная эллиптическая ось,  $R$  — радиус сечения сфероида в латеральной плоскости (латеральная полуось). Радиус  $R_0(\theta) = R\{1 + [(R/(2l_z))^2 - 1] \cos^2 \theta\}^{-1/2}$  задаёт границы КТ.

Для данной модели коэффициенты  $\Omega_n$ , входящие в (19), можно записать как

$$\Omega_n = \sum_{k=0}^{(n-1)/2} a_{nk} \int_{-1}^1 dx \frac{x^{2k-1}}{(1+cx^2)^{(n+3)/2}} \text{ для нечётных } n, \quad (20)$$

$$\Omega_n = \sum_{k=0}^{n/2} b_{nk} \int_{-1}^1 dx \frac{x^{2k}}{(1+cx^2)^{(n+3)/2}} \text{ для чётных } n,$$

где  $a_{nk}$  и  $b_{nk}$  — множители, зависящие от степени полинома Лежандра  $n$  и номера слагаемого  $k$ ,  $c = (2R/l_z)^2 - 1$ . Из соотношений (20) следует, что ненулевые значения имеют коэффициенты  $\Omega_n$  только с чётными номерами  $n$ . Подставив (20) в соотношение (19), после несложных преобразований приходим к тому, что вектор атомных смещений  $\mathbf{U}(\mathbf{r})$  вне КТ может быть представлен следующей суммой:

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}) = A \sum_{n=0}^{\infty} C_n \left( \left( \frac{l_z}{2} \right)^2 - R^2 \right)^n P_{2n}(\cos \theta) \frac{\mathbf{r}}{r^{2n+3}}. \quad (21)$$

Здесь  $A = AV_{\text{ell}}$ ,  $V_{\text{ell}} = 2\pi l_z R^2/3$  — объём КТ. Значения коэффициентов  $C_n$  первых десяти членов суммы (21) равны:

$$C_0 = 1, \quad C_1 = 0,24, \quad C_2 = 0,54 \times 10^{-1}, \quad C_3 = 0,12 \times 10^{-1}, \\ C_4 = 0,29 \times 10^{-2}, \quad C_5 = 0,67 \times 10^{-3}, \quad C_6 = 0,16 \times 10^{-3}, \\ C_7 = 0,37 \times 10^{-4}, \quad C_8 = 0,89 \times 10^{-5}, \quad C_9 = 0,11 \times 10^{-6}.$$

Амплитуду диффузного рассеяния в формуле для корреляционного объёма (10) запишем в виде

$$D(\mathbf{q}) = D_{\text{sw}}(\mathbf{q}) + D_{\text{H}}(\mathbf{q}) + \sum_{n=1}^{\infty} D_n(\mathbf{q}). \quad (22)$$

Здесь первое слагаемое  $D_{\text{sw}}(\mathbf{q})$  — амплитуда диффузного рассеяния от кристаллической матрицы без учёта упругих деформаций вне КТ. Второй член суммы (22) по аналогии с "кулоновскими" дефектами описывает хуанговское рассеяние [43, 44]. Расчёт этого слагаемого, или, другими словами, дипольного члена разложения удобно выполнить в обобщённой сферической системе координат. В итоге получаем следующее выражение для амплитуды хуанговского рассеяния:

$$D_{\text{H}}(\mathbf{q}) = \frac{2\pi A \mathbf{h} \mathbf{q}}{q^2} \Phi_0(q, R, l_z). \quad (23)$$

Функция  $\Phi_0(q, R, l_z)$  зависит от  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$  и параметров  $R, l_z$  рассматриваемого сфероида:

$$\Phi_0(q, R, l_z) = \int_{-1}^1 dx \exp[iq\rho(x, R, l_z)x],$$

где

$$\rho(x, R, l_z) = R \left\{ 1 + \left[ \frac{R^2}{(l_z/2)^2} - 1 \right] x^2 \right\}^{-1/2}.$$

Следующие мультипольные поправки в амплитуду диффузного рассеяния в зависимости от номера  $n$  имеют вид

$$D_n(\mathbf{q}) = 2\pi(-1)^{n+1} C_n A \left[ \left( \frac{l_z}{2} \right)^2 - R^2 \right]^n (\mathbf{h} \mathbf{q}) q^{2n-2} \Phi_n(q, R, l_z),$$

где

$$\Phi_n(q, R, l_z) = \int_{-1}^1 dx P_{2n}(x) x^{2n} \exp[iq\rho(x, R, l_z)x] \times \\ \times f_n(iq\rho(x, R, l_z)x).$$

Множитель  $f_n(iq\rho(x, R, l_z)x)$  в подынтегральном выражении представляет собой рекуррентную функцию вида

$$f_n(r) = \frac{1}{2n-1} \left( \frac{1}{r^{2n-1}} + \frac{1}{2n-2} \left( \frac{1}{r^{2n-2}} + f_{n-1}(r) \right) \right)$$

с начальным значением

$$f_1(r) = \frac{1}{r} + \frac{E_1(-r)}{\exp(r)},$$

где

$$E_1(iR) = \int_R^{\infty} dz \frac{\exp(-iz)}{z}$$

— интегральная экспонента.

Строго говоря, для неограниченной кристаллической среды поле атомных смещений  $\mathbf{U}(\mathbf{r})$  от отдельной КТ стремится к нулю при  $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ . Для плотноупакованных КТ, в которых расстояния между наноструктурами сопоставимы с их размерами, характер затуханий упругих деформаций будет другим. Поэтому для учёта влияния соседних КТ на распределение упругих смещений можно ввести понятие внешней границы затухания деформаций: расстояния, на котором поля атомных смещений спадают до нуля. Решая граничную задачу, приходим к заключению, что в выражении (21) для каждого члена мультипольного разложения с номером  $n$  множитель  $\mathbf{r}/r^{2n+3}$  следует заменить выражением

$$\left( 1 - \frac{R_0^{2n+3}(\theta)}{R_1^{2n+3}} \right)^{-1} \left( \frac{1}{r^{2n+3}} - \frac{1}{R_1^{2n+3}} \right) \mathbf{r},$$

где  $R_0(\theta)$  — расстояние, задающее границу на поверхности КТ, а  $R_1(\theta)$  — расстояние от центра КТ, на котором величина упругого смещения падает до нуля. В итоге вместо (21) вектор атомных смещений примет более сложный вид:

$$\mathbf{U}^{\text{lim}}(\mathbf{r}) = A \sum_{n=0}^{\infty} C_n \left( \left( \frac{l_z}{2} \right)^2 - R^2 \right)^n P_{2n}(\cos \theta) \times \\ \times \left( 1 - \frac{R_0^{2n+3}(\theta)}{R_1^{2n+3}} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{r^{2n+3}}{R_1^{2n+3}} \right) \frac{\mathbf{r}}{r^{2n+3}}. \quad (24)$$

При  $R_1(\theta) \rightarrow \infty$  выражение (24) непосредственно преобразуется в (21).

Для описания границы между соседними КТ, где упругие поля деформаций обращаются в нуль, можно рассмотреть две геометрические фигуры: прямоугольный параллелепипед со сторонами  $2d_x, 2d_y, 2d_z$  и сфероид с полуосями  $d_x, d_z$  (для нашей модели  $d_x = d_y$ ). В случае границы в форме прямоугольного параллелепипеда получаем

$$R_1(\theta) = \begin{cases} \frac{d_z}{2} & \text{при } \tan \theta = 0, \\ \frac{d_z}{2|\cos \theta|} & \text{при } \tan \theta \leq \frac{d_x}{d_z}, \\ \frac{d_x}{2|\sin \theta|} & \text{при } \tan \theta > \frac{d_x}{d_z}. \end{cases}$$

Сфероидальная граница описывается выражением вида

$$R_1(\theta) = \frac{d_x}{2\sqrt{1 + ((d_x/d_z)^2 - 1) \cos^2 \theta}}.$$

Квантовые точки, особенно в случае высокой плотности их расположения в ростовой плоскости, чаще всего образуют ближний порядок, характерный для латеральной квадратной решётки с основными осями вдоль направлений [100] и [010]. Кроме того, выше упоминалось о создании квадратных решёток из наноструктур с дальним порядком на специально подготовленных подложках с периодическим рельефом, получившим название кристаллов из квантовых точек [89–91]. Поэтому предпочтение при выборе формы границы поля упругих деформаций, где атомные смещения полностью затухают, следует делать для прямоугольного параллелепипеда. С другой стороны, встречаются системы с КТ, в которых формируется гексагональная решётка из КТ



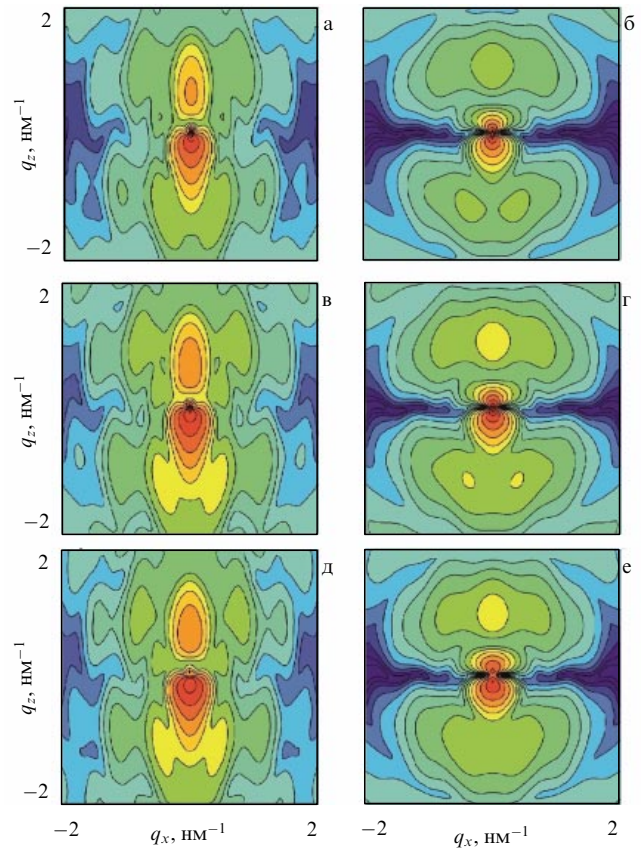
[80], что требует введения более сложных граничных условий. В определённом приближении для решения этой задачи можно воспользоваться моделью сферидальной границы.

**4.2.2. Численное моделирование.** В рамках нашего рассмотрения существуют два метода для исследования диффузного рассеяния рентгеновских лучей от кристаллической структуры с КТ сферидальной формы: аналитическое решение задачи и формализм функции Грина. Следующим естественным шагом является сравнительный анализ вычислений углового распределения интенсивности рассеяния на основе этих двух подходов. С этой целью рассмотрим кристаллическую матрицу GaAs, в которой распределены сферидальные КТ InAs высотой  $l_z = 5$  нм и латеральным радиусом  $R = 10$  нм. Результаты численных расчётов диффузного рассеяния представим в виде карт в обратном пространстве, отношение интенсивностей между соседними линиями для всех контуров равно 0,38.

Сначала рассмотрим случай, когда поля атомных смещений сферидальных КТ задаются формулой (21) и затухают на бесконечности. Если сферидальная форма КТ трансформируется в сферически-симметричную фигуру, то в выражении для упругих смещений (21) остаётся лишь нулевой член разложения, который будет описывать хорошо известный "кулоновский" спад деформации с удалением от границы КТ [44]. Чем сильнее отношение  $2R/l_z$  отличается от единицы, тем большее число членов разложения необходимо учитывать в процедуре численных расчётов диффузного рассеяния. Методом математического моделирования было установлено, что семи членов мультипольного разложения вполне достаточно для расчётов с указанными выше размерами КТ ( $2R/l_z = 4$ ). Учёт следующих членов разложения не даёт существенных изменений в расчётах, эти изменения накладываются в пределах погрешности вычислений.

На рисунке 9 представлены рассчитанные методами разложения по мультиполям (рис. 9а–г) и функции Грина (рис. 9д, е) карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла GaAs с квантовыми точками InGaAs в форме сфероида для деформаций несоответствия  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$  (рис. 9а, в, д) и  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$  (рис. 9б, г, е). Верхний ряд (рис. 9а, б) соответствует модели КТ, упругие поля атомных смещений которых не пересекаются и обращаются в нуль на бесконечности. Такая модель может быть реализована только в случае очень малой концентрации КТ, расстояние между которыми в трёх направлениях существенно превышает 250 нм. Для сравнения приведены мультипольные расчёты диффузного рассеяния с введением в рассмотрение плоскопараллельных границ между КТ на расстоянии 125 нм от центра наноструктур (рис. 9в, г). Хотя изображения контуров равной интенсивности на первый взгляд в целом похожи, однако имеются отличия в деталях.

Кроме того, для относительно больших деформаций несоответствия параметров решётки КТ и основной матрицы существенным становится вклад хуанговского рассеяния, что подтверждается проявлением нулевой линии при  $q_z = 0$  на карте обратного пространства (рис. 9б, г, е). Для слабых деформаций ( $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$ ) преобладает рассеяние Стокса–Вильсона, обусловленное формой КТ, при этом след нулевой линии пропадает (рис. 9а, в, д). Метод функции Грина изначально пред-

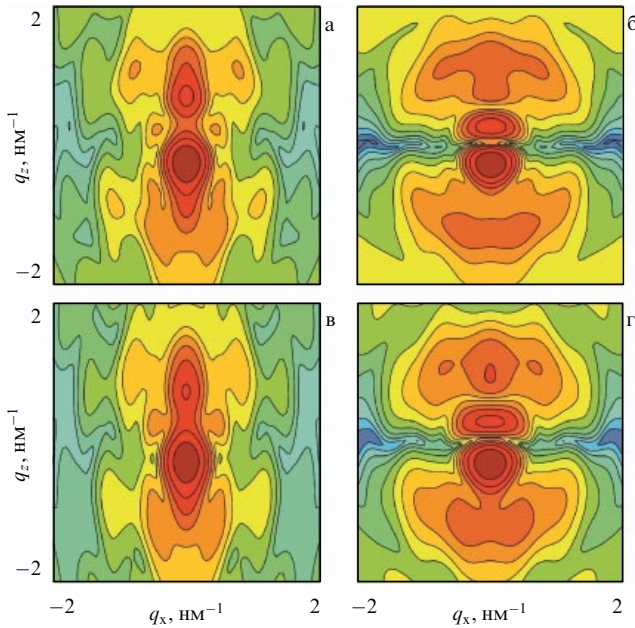


**Рис. 9.** Расчётные RSM диффузного рассеяния от кристалла GaAs со сферидальными КТ малой объёмной концентрации (расстояние между КТ в вертикальном и латеральном направлениях 250 нм): (а–г) разложение по мультиполям, (д, е) метод функции Грина. (а, в, д)  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$ , (б, г, е)  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$ .

полагает наличие конечного расстояния между соседними КТ. Расчёты карт углового распределения диффузного рассеяния с одинаковыми граничными условиями в рамках двух независимых подходов приводят к близким результатам (рис. 9в, д и г, е). Небольшие различия наблюдаются для деформаций несоответствия  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$  при положительных значениях  $q_z$  (рис. 9в, д), а также для рассогласования  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$  при отрицательных значениях  $q_z$  (рис. 9г, е).

Современные технологии позволяют преимущественно создавать системы с массивами КТ, в которых расстояние между соседними наноструктурами сравнимо с их размерами. В таких системах самоорганизованные наноструктуры имеют большую плотность, и поля упругих деформаций от квантовых точек спадают достаточно быстро к границам раздела ближайших соседей. На рисунке 10 показаны рассчитанные методами разложения по мультиполям (рис. 10а, б) и функции Грина (рис. 10в, г) карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла GaAs с квантовыми точками InGaAs в форме сфероида для деформаций несоответствия  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$  (рис. 10а, в) и  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$  (рис. 10б, г). Расстояние между соседними КТ в вертикальном направлении 20 нм, в латеральном направлении 30 нм, что характерно для полупроводниковых сверхрешёток [106]. Граница между КТ выбрана в форме прямоугольного параллелепипеда. Результаты расчётов диффузного рассеяния с использованием двух независи-





**Рис. 10.** Расчётные RSM диффузного рассеяния от кристалла GaAs со сферическими КТ большой объёмной концентрации (расстояние между КТ в вертикальном направлении 20 нм, в латеральных направлениях 30 нм): (а, б) разложение по мультиполям, (в, г) метод функции Грина. (а, в)  $\varepsilon_0^{(2)} = 0,003$ , (б, г)  $\varepsilon_0^{(1)} = 0,016$ .

мых методов, как и в случае малой концентрации наноструктур, отличаются незначительно. В целом для больших концентраций КТ характерно размытие пиковых значений диффузного рассеяния и более медленное уменьшение интенсивности при удалении от узла обратной решётки. Это указывает на то, что влияние рассеяния Стокса–Вильсона в данном случае более существенно, чем в случае малой концентрации КТ.

Наконец, методом численного моделирования было установлено, что для значительно удалённых друг от друга КТ вид граничных условий для поля упругих деформаций практически не влияет на характер диффузного рассеяния. В случае близко расположенных квантовых точек контуры равной интенсивности для границ в форме прямоугольного параллелепипеда и сфероида заметно отличаются. Более того, для сферической границы также имеет место отличие в угловом распределении диффузного рассеяния с использованием двух подходов. Это отличие в основном проявляется вдали от узла обратной решётки.

## 5. Пространственная корреляция в расположении квантовых точек

Упорядоченность квантовых точек в кристаллической матрице, или, иными словами, их пространственная корреляция в полупроводниковых структурах играет важную роль в явлении туннелирования носителей заряда в квантовой среде. Системы с вертикально совмещёнными КТ можно рассматривать в качестве базовых элементов для инжекционных гетеролазеров, солнечных элементов, транзисторов, квантовых компьютеров и других устройств [1].

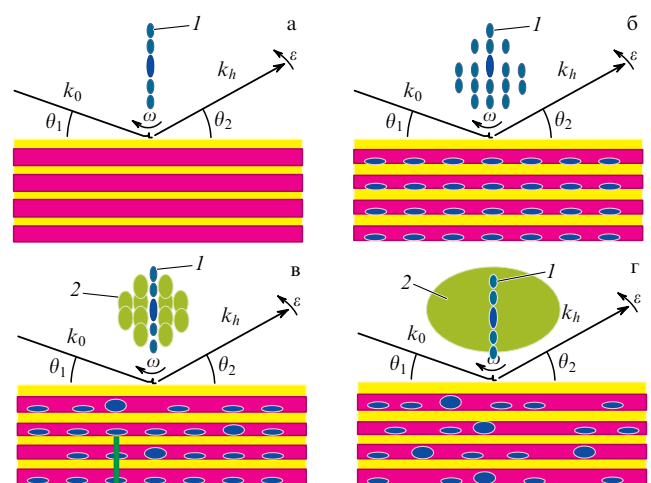
Отметим, что пространственная корреляция КТ может быть описана моделями дальнего или ближнего порядка. В случае дальнего порядка имеет место жёсткая фиксация равновесных положений всех КТ, при этом

равновесные положения имеют строгий трансляционный порядок. Для ближнего порядка значение имеет закон распределения ближайших соседних КТ, при этом отсутствует строгая периодическая расстановка всех соседей. В данном случае, если установлен закон распределения для ближайших соседей, то из него можно вывести всю функцию распределения. Ближний порядок может быть описан введением функции радиального распределения [107] либо на основе паракристаллической модели [108].

В полупроводниковых системах в зависимости от ростовых условий формируются массивы КТ разной упорядоченности, включая, с одной стороны, хаотически распределённые наноструктуры и, с другой стороны, регулярные строения (кристаллы) из квантовых точек. Понятно, что в природе не существует систем со строгим трансляционным порядком. Даже на первый взгляд совершенные кристаллы, выращенные с помощью современных технологий, содержат структурные дефекты. Это относится и к наноструктурированным средам, сформированным, например, с помощью методов литографии либо в условиях самоорганизации. Поэтому всегда при анализе данных рентгеновской дифракции необходимо учитывать когерентное рассеяние на упорядоченных объектах, а также диффузное рассеяние при наличии случайных отклонений от среднестатистической упорядоченности в рассматриваемой системе.

Что касается кристаллических систем с КТ, то практически всегда возникают разного рода отклонения от упорядоченного размещения наноструктур в пространстве. Каждое такое отклонение характерно влияет на угловое распределение интенсивности рассеяния. Попробуем в общих чертах на примере сверхрешётки с КТ проанализировать распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве. На рисунке 11 показано схематическое изображение пространственной корреляции КТ в сверхрешётке и её влияние на угловое распределение интенсивности рассеяния.

Сначала рассмотрим дифракцию рентгеновских лучей на идеальной сверхрешётке в отсутствие КТ. Если в объёме СР нет случайных неоднородностей или других



**Рис. 11.** (В цвете онлайн.) Схематическое изображение пространственной корреляции КТ в сверхрешётке и её влияния на угловое распределение интенсивности рассеяния. Синим цветом (области 1) изображена интенсивность когерентного рассеяния, зелёным цветом (области 2) — интенсивность диффузного рассеяния.

дефектов кристаллической решётки, то имеет место только когерентное рассеяние. Интенсивность рассеяния распределяется вдоль вектора обратной решётки (crystal truncation rod, CTR) (рис. 11а). Профиль интенсивности представляет собой совокупность вертикальных дифракционных порядков, расположенных на угловом расстоянии, обратно пропорциональном периоду СР. Если внутри сверхрешётки присутствует 3D периодический массив КТ, образуя тем самым "идеальный кристалл" из квантовых точек, то помимо CTR вблизи узла обратной решётки формируются дополнительные спутанные максимумы (рис. 11б). Угловые расстояния между спутанными обратно пропорциональны трансляционным периодам узлов из квантовых точек. Заметим, что в данном случае дифракционное рассеяние будет когерентным.

Предположим, что "кристалл" из КТ не является идеальным. Здесь возможны два случая. Первый случай относится к ситуации, когда КТ хаотически отклоняются из узлов 3D решётки на небольшие расстояния, при этом средний дальний порядок в их расположении сохраняется. Это имеет определённое сходство с "мгновенной фотографией" явления тепловых колебаний атомов в узлах кристаллической решётки. Как результат, угловые положения когерентных дифракционных пиков сохраняются, вокруг них возникают максимумы диффузного рассеяния (см. рис. 4). Если же нарушения 3D решётки из массива КТ не сохраняют дальний порядок, то тогда дополнительные дифракционные спутанные будут уже продуктом не когерентного, а диффузного рассеяния (рис. 11в). Наконец, в случае хаотического расположения КТ, вокруг когерентного CTR от сверхрешётки формируется размазанный контур диффузного рассеяния, характерный для некоррелированных КТ определённой формы (рис. 11г). Дифракция рентгеновских лучей в полупроводниковой сверхрешётке с хаотически распределёнными включениями теоретически исследована в работе [109]. Влияние пространственной корреляции дефектов на формирование диффузных максимумов показано в [110].

Самоорганизованные КТ в сверхрешётке, как правило, сохраняют дальний порядок, который связан с периодом СР. Однако при этом не сохраняется длина стекирования [111], т.е. в вертикальном ряду оказывается разное число КТ (рис. 12). Кроме того, наблюдается флуктуация в размерах КТ и разброс положений их центров вдоль линии стекирования.

В латеральном направлении самоорганизованные КТ сохраняют лишь ближний порядок в их расположении в слоях сверхрешётки. Все это указывает на то, что необ-

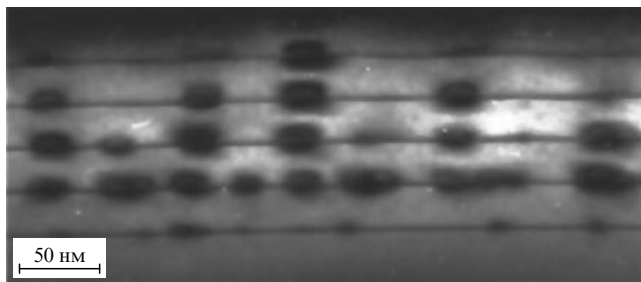


Рис. 12. Изображение InAs/GaAs-квантовых точек, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии [111].

ходим тщательный анализ влияния пространственной корреляции КТ на угловое распределение интенсивности рассеяния.

### 5.1. Латеральная корреляция квантовых точек.

#### Ближний порядок

Следуя [112], сначала рассмотрим влияние ближнего порядка в латеральном расположении КТ на диффузное рассеяние рентгеновских лучей. Известно, что как паракристаллическая модель, так и модель радиального распределения базируются на введении вероятностной функции нахождения КТ, однако модель радиального распределения применима только в случае изотропного распределения квантовых точек вдоль ростовой поверхности. Отметим, что паракристаллическая модель в различных вариантах использовалась для анализа экспериментальных результатов в методе малоуглового рассеяния рентгеновских лучей при скользящих углах падения [113, 114], трёхкристалльной рентгеновской дифрактометрии [114] и дифракции в скользящей геометрии [115]. Влияние пространственной корреляции КТ на диффузное рассеяние с использованием функции радиального распределения теоретически исследовалось в [116].

В [112] на основе концепции идеальной паракристаллической решётки для точечных единиц [117] разработана статистическая теория кинематической дифракции на эпитаксиальных слоях с КТ с различной степенью латеральной упорядоченности.

При определённых ростовых условиях в результате самосборки в кристаллическом слое формируются КТ, которые нарушают трансляционный порядок кристаллической решётки и являются причиной возникновения диффузного рассеяния. Если при этом в расположении КТ присутствует пространственная корреляция, то выражение для интенсивности диффузного рассеяния следует записать в виде

$$I_h^d(\mathbf{q}) = K_D \operatorname{Re} (T(\mathbf{q})) . \quad (25)$$

Здесь, в отличие от (7), вместо собственного корреляционного объёма  $\tau(\mathbf{q})$  введена в рассмотрение другая функция,  $T(\mathbf{q})$ , учитывающая пространственную корреляцию КТ. В случае, когда отсутствует пространственная корреляция КТ, корреляционный объём  $\tau(\mathbf{q})$  является фурье-преобразованием собственной корреляционной функции Като  $g(\mathbf{p})$ . Эта функция ставится в соответствие с формой, размерами КТ, а также наведёнными упругими деформациями вблизи квантовой точки. Поскольку угловое распределение диффузного рассеяния зависит не только от характеристик самих квантовых точек, но и от их взаимного пространственного расположения, введём в рассмотрение корреляционную функцию  $G(\mathbf{p})$ , учитывающую оба этих фактора. Такая корреляционная функция может быть представлена в виде свёртки функции пространственного распределения квантовых точек  $W(\mathbf{p})$  и их собственной корреляционной функции  $g(\mathbf{p})$ :

$$G(\mathbf{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}' W(\mathbf{p}') g(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) . \quad (26)$$

Определим параметр углового распределения диффузного рассеяния от пространственно-коррелированных КТ как фурье-преобразование  $G(\mathbf{p})$ ,

$$T(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} G(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{p}) . \quad (27)$$

Если КТ распределены хаотически, т.е. в их расположении отсутствует какой-либо порядок, то корреляционная функция  $G(\mathbf{p})$  непосредственно трансформируется в собственную корреляционную функцию  $g(\mathbf{p})$ . С учётом (26) корреляционный параметр (27) запишется в виде произведения

$$T(\mathbf{q}) = \tau(\mathbf{q}) F(\mathbf{q}), \quad (28)$$

где  $\tau(\mathbf{q})$  — корреляционный объём (функция формы) отдельной квантовой точки и

$$F(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{p}) W(\mathbf{p}) \quad (29)$$

— интерференционный структурный фактор, зависящий от пространственного упорядочения квантовых точек.

Рассмотрим двумерную функцию  $W(\rho_x, \rho_y)$ , описывающую ближний структурный порядок в расположении КТ. Как уже отмечалось, жёсткая фиксация равновесных положений всех КТ, вводимая для дальнего порядка, здесь отсутствует. Выберем два характерных направления расположения КТ в латеральной плоскости  $(x, y)$ , которые определяются базисными векторами  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Пусть заданы функции расположения первых соседей  $H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$ , у которых верхние индексы  $a$  и  $b$  указывают на соответствующие латеральные направления. Степень размытия этой функции ставится в соответствие со степенью латерального разупорядочения квантовых точек. Распределение вторых соседей задаётся функцией

$$\begin{aligned} H_2^{a,b}(\rho_x, \rho_y) &= H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) \otimes H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = \\ &= H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y)^{\otimes 2}, \end{aligned}$$

где знаком  $\otimes$  обозначена свёртка функций. Свёртывание функции самой собою (автокорреляция) даёт дополнительное размытие, такое, что результирующее размытие увеличивается, причём высота пика уменьшается. Обобщая рассуждения на описание распределения следующих соседей, например, с номером  $m$  в латеральном направлении  $\mathbf{a}$ , получаем

$$H_m^a(\rho_x, \rho_y) = H_1^a(\rho_x, \rho_y)^{\otimes m}. \quad (30)$$

Можно показать, что дисперсия (среднеквадратичное отклонение) пространственного распределения КТ растёт с номером  $m$  как  $\Delta_m^a = \Delta_1^a \sqrt{m}$ . Пусть в направлении вектора  $\mathbf{a}$  число КТ равно  $N_a$ , а в направлении  $\mathbf{b}$  соответственно  $N_b$ . При конечном числе квантовых точек функции  $H_m^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$  должны быть нормированы к  $(N_{a,b} - |m|)$ , так как вес пиков  $W(\rho_x, \rho_y)$  уменьшается с возрастанием  $|m|$ . Поэтому следует писать, например, для направления  $\mathbf{a}$ :

$$\begin{aligned} W^a(\rho_x, \rho_y) &= \delta(\rho_x) + \\ &+ \sum_{m=1}^{N_a} \frac{N_a - |m|}{N_a} (H_m^a(\rho_x, \rho_y) + H_{-m}^a(\rho_x, \rho_y)). \quad (31) \end{aligned}$$

Аналогичная запись справедлива и для другой зависимости,  $W^b(\rho_x, \rho_y)$ , поэтому латеральное распределение КТ будет описываться свёрткой этих функций. В результате для интерференционного структурного фактора получаем

$$F(q_x, q_y) = F_a(q_x, q_y) F_b(q_x, q_y), \quad (32)$$

где структурные факторы разных направлений имеют вид

$$\begin{aligned} F_{a,b}(q_x, q_y) &= 1 + \frac{2}{N_{a,b}} \times \\ &\times \operatorname{Re} \left\{ \frac{Z_1^{a,b}(q_x, q_y) [(1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y)) N_{a,b} - (1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y))^{N_{a,b}}]}{(1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y))^2} \right\}. \quad (33) \end{aligned}$$

Здесь

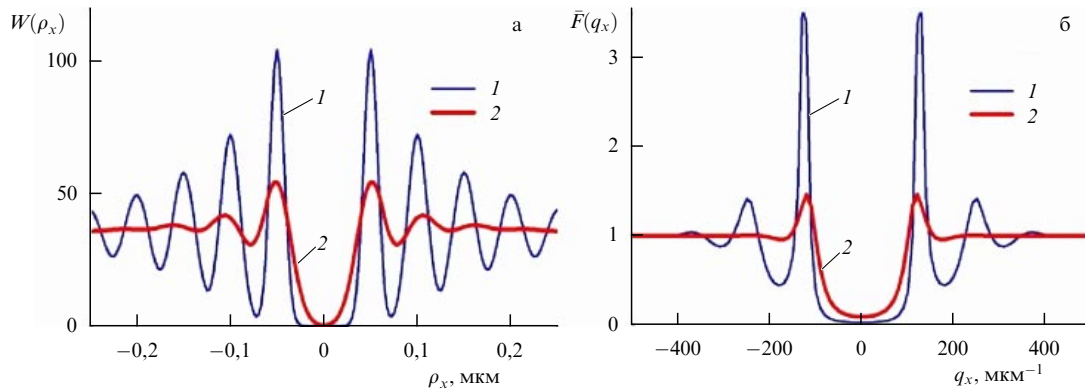
$$\begin{aligned} Z_1^{a,b}(q_x, q_y) &= \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \exp[i(q_x \rho_x + q_y \rho_y)] H_1^a(\rho_x, \rho_y) \quad (34) \end{aligned}$$

— фурье-образы единичных функций распределения КТ. Отметим, что в рамках другого теоретического подхода решение типа (33) было получено для модели рассеивающих элементов с одномерной квазипериодической решёткой [118]. В случае бесконечного числа КТ ( $N_{a,b} \rightarrow \infty$ ) интерференционный структурный фактор (33) преобразуется к более простому виду [113–115]. В традиционной трёхкристалльной схеме рентгеновской дифракции угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве зависит от параметров  $q_x$  и  $q_z$ . Поэтому для этой дифракционной схемы вместо (33) в численных расчётах следует использовать

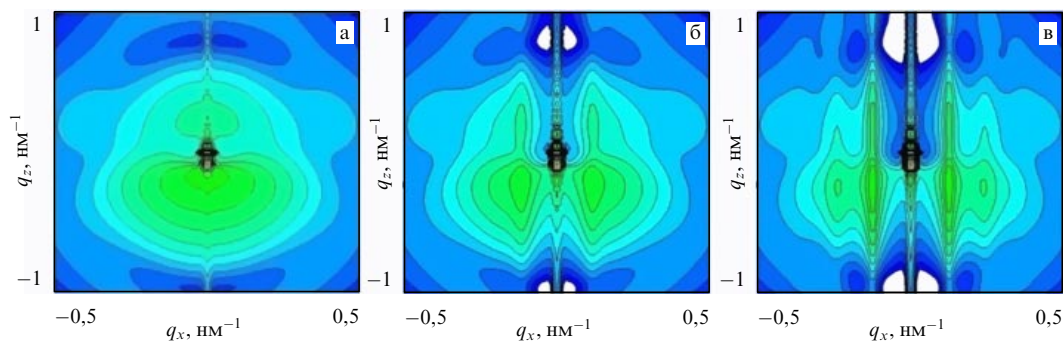
$$\bar{F}(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y F(q_x, q_y). \quad (35)$$

На основе полученных решений проведено численное моделирование углового распределения когерентного и диффузного рассеяния от системы InGaAs/GaAs(001) с квантовыми точками InAs эллипсоидальной формы. В расчётах использованы параметры, соответствующие (004)-отражению  $\sigma$ -поляризованного CuK $_{\alpha 1}$ -излучения. Высота КТ составляла 10 нм, диаметр — 20 нм. Пространственно коррелированные квантовые точки в эпитаксиальном слое InGaAs образуют стохастическую квадратную решётку, размытие решётки описывается нормальным (гауссовым) распределением. Вычисления проводились для большого числа КТ ( $N_{a,b} \rightarrow \infty$ ). Функции распределения квантовых точек  $W(\rho_x)$  для разных значений дисперсии и соответствующие этим функциям интерференционные структурные факторы  $\bar{F}(q_x)$  показаны на рис. 13.

Расчётные карты распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решётки (004) GaAs показаны на рис. 14. Вертикальная центральная полоса на этих картах соответствует когерентному рассеянию от слоя InGaAs с КТ и полубесконечной подложки GaAs. В отсутствие пространственной корреляции контуры равной интенсивности относятся к типичному хуанговскому рассеянию от слоя с хаотически распределёнными квантовыми точками (рис. 14а). Наличие ближнего порядка в расположении КТ заметно видоизменяет дифракционную картину (рис. 14б, в). Появляются дополнительные интерференционные полосы, характеризующие степень латеральной упорядоченности КТ (рис. 14в). Размытие латеральной решётки влечёт за собой соответствующее уширение интерференционных полос (рис. 14б). Отметим, что наличие таких характерных интерференционных полос от пространственно коррелированных островков



**Рис. 13.** (а) Функции распределения квантовых точек  $W(\rho_x)$  (без учёта центрального  $\delta$ -образного максимума) и (б) соответствующие этим функциям интерференционные структурные факторы  $\bar{F}(q_x)$ . Среднее расстояние между квантовыми точками  $T_a = 50$  нм, дисперсия  $\Delta^a = 0,15T_a = 7,5$  нм (1),  $\Delta^a = 0,3T_a = 15$  нм (2) [110].



**Рис. 14.** Расчётные карты распределения интенсивности рассеяния от системы InGaAs/GaAs с КТ вблизи узла обратной решётки (004)GaAs без (а) и с учётом (б, в) пространственной корреляции. Среднее расстояние между квантовыми точками  $T_a = 50$  нм, дисперсия  $\Delta^a = 0,3T_a = 15$  нм (б);  $\Delta^a = 0,15T_a = 7,5$  нм (в). Отношение интенсивностей между соседними контурами приведено в логарифмическом масштабе и равно 0,45.

SiGe экспериментально наблюдалось на картах распределения интенсивности рассеяния вблизи узла (004) Si [114].

## 5.2. Вертикальная корреляция квантовых точек

Первая модель для описания вертикальной корреляции КТ в теории дифракции рентгеновских лучей рассмотрена в работе [69]. В соответствии с формализмом теории стационарных случайных процессов [119], в [69] вводится корреляционная функция, регулирующая поведение диффузного рассеяния в зависимости от упорядоченности КТ. При стремлении корреляционной длины к бесконечному пределу диффузное рассеяние определяется структурным фактором СР. В другом предельном случае, когда длина корреляции равна нулю, интенсивность диффузного рассеяния пропорциональна числу периодов многослойной структуры.

На основании результатов исследования рентгеновской дифракции на СР в условиях скользящей геометрии в работе [120] предложена модель латеральных отклонений КТ от средней линии стекирования. В этой модели дисперсия отклонения растёт с ростом номера периода сверхрешётки  $n$  как  $\sigma_n = \sqrt{n}\sigma$ , где  $\sigma$  — дисперсия первого (нижнего) бислая СР. Заметим, что такой закон изменения дисперсии характерен для ближнего структурного порядка [114].

Вышеуказанные модели не учитывают главной особенности ростовой структуры сверхрешёток с КТ, а

именно длины стекирования. Действительно, число вертикально совмещённых КТ неодинаково в объёме многослойной структуры (см. рис. 12) и не всегда длина стекирования равна толщине многослойной системы. Более того, размытость диффузных максимумов, скорее, зависит от средней длины стекирования, чем от латеральных флуктуаций в КТ в ростовой плоскости. Поскольку число вертикально совмещённых КТ является основным параметром для современных приборов нано- и оптоэлектроники, рассмотрим более детально модель, учитывающую вертикальную корреляцию КТ в сверхрешётке в зависимости от длины стекирования [121].

Известно, что в сверхрешётке расположение квантовых точек в вертикальном направлении вдоль оси  $z$  имеет строго выраженный дальний порядок, связанный с периодическим чередованием слоёв разного химического состава. В латеральном направлении самоорганизованные КТ в большинстве случаев создают ближний порядок, который можно описать паракристаллической моделью [112]. Функция пространственного распределения квантовых точек  $W(\mathbf{p})$  может быть записана в виде произведения

$$W(\mathbf{p}) = W_L(\rho_x, \rho_y) W_V(\rho_z), \quad (36)$$

где  $W_L(\rho_x, \rho_y)$  описывает латеральное, а  $W_V(\rho_z)$  — вертикальное пространственное размещение КТ. Поскольку функция  $W_L(\rho_x, \rho_y)$  детально исследована в

разделе 5.1 настоящего обзора, латеральное распределение КТ оставим вне рамок текущего рассмотрения и для простоты примем  $W_L(\rho_x, \rho_y) \equiv 1$ .

Исследуем более детально вертикальную корреляционную функцию  $W_V(\rho_z)$ . Пусть функция  $w(z)$  задаёт вероятность размещения наночастицы в точке  $z$ , тогда положение другой частицы в точке  $z'$ , сдвинутой строго в вертикальном направлении на расстояние  $\rho_z = z - z'$ , описывается функцией  $w(z')$ . Тогда, по определению [122], вертикальная корреляционная функция может быть представлена в виде свёртки

$$W_V(\rho_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz w(z) w(z - \rho_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' w(z') w(z' + \rho_z). \quad (37)$$

Обычно вертикальное совмещение КТ формируется в условиях заданной ростовой технологии и зависит от многих параметров, в частности, от распределения упругих деформаций, толщин смачивающего и разделяющего (спейсера) слоёв, их композиционного состава, температуры роста и др. В результате последовательного осаждения смачивающих и разделяющих слоёв формируется СР с массивом квантовых точек, имеющих трансляционную упорядоченность в вертикальном направлении. Трансляционный период соответствует периоду сверхрешётки модуляции композиционного состава. Поэтому  $w(z)$ , описывающая стекирование КТ, является периодической функцией и  $w(z) = w(z + l_{SL})$ . Пусть  $l_V$  — вертикальное расстояние по толщине СР, на котором КТ выстроены в вертикальную колонку строго друг над другом. Назовём это расстояние толщиной стекирования КТ. С другой стороны, расстояние  $l_V$  может быть определено как вертикальная длина корреляции.

С учётом сказанного выше, корреляционный параметр (28), отвечающий за угловое распределение диффузного рассеяния от гетероструктур с КТ, может быть записан в виде произведения

$$T(\mathbf{q}) = \tau(\mathbf{q}) F_V(q_z). \quad (38)$$

Влияние вертикального совмещения КТ на распределение диффузного рассеяния описывается интерференционным структурным фактором

$$F_V(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_z \exp(iq_z \rho_z) W_V(\rho_z). \quad (39)$$

Подставив (37) в выражение (39), для интерференционного структурного фактора вдоль вертикального направления  $z$  получаем

$$F_V(q_z) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dz w(z) \exp(iq_z z) \right|^2. \quad (40)$$

Запишем интерференционный структурный фактор стекированных КТ в виде

$$F_V(q_z) = \begin{cases} F_V(q_z, l_V), & |z| \leq l_V, \\ 1, & |z| > l_V, \end{cases} \quad (41)$$

где

$$F_V(q_z, l_V) = \left| \frac{1}{2l_V} \int_{-l_V}^{l_V} dz w(z) \exp(iq_z z) \right|^2. \quad (42)$$

Такое представление структурного фактора стекированных КТ означает следующее: интерференционное диффузное рассеяние в вертикальном направлении формируется КТ, периодически расположенными вдоль оси  $z$  на расстоянии корреляционной длины. За пределами толщины стекирования корреляционные эффекты отсутствуют, поэтому  $F_V(q_z) \equiv 1$ . Если в СР нет вертикально совмещённых КТ, т.е. корреляционная длина  $l_V$  меньше периода СР  $l_{SL}$ , то интерференционный фактор в вертикальном направлении всегда принимает значение 1. Это означает, что в спектре углового распределения интенсивности будут отсутствовать сверхструктурные порядки диффузного рассеяния (сателлиты). Форма изодиффузных линий в этом случае зависит только от усреднённых структурных характеристик случайно распределённых вдоль оси  $z$  квантовых точек и описывается их собственным корреляционным объёмом (8).

Поскольку  $w(z)$ , как было отмечено выше, является периодической функцией, её можно рассматривать в рамках модели дальнего порядка и записать в виде ряда Фурье:

$$w(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \exp(-inK_{SL}z), \quad (43)$$

где  $K_{SL} = 2\pi/l_{SL}$  — период модуляции сверхрешётки в обратном пространстве (расстояние между дифракционными сателлитами). Фурье-коэффициенты в (43) равны

$$B_n = \frac{1}{l_{SL}} \int_{-l_{SL}/2}^{l_{SL}/2} w(z) \exp(inK_{SL}z) dz. \quad (44)$$

Подставляя (43) в (42), получаем

$$F_V(q_z, l_V) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left| B_n \frac{\sin[(q_z - nK_{SL})l_V]}{(q_z - nK_{SL})l_V} \right|^2. \quad (45)$$

Интерференционный фактор стекированных КТ в виде (45) имеет прозрачный физический смысл. Сверхструктурные максимумы диффузного рассеяния от СР с вертикально совмещёнными КТ формируются вблизи узла обратной решётки при значениях  $q_z^{SL} = nK_{SL} = 2\pi n/l_{SL}$ , где  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  указывает на порядковый номер диффузного сателлита. Интенсивности диффузных максимумов определяются фурье-коэффициентами  $B_n$ . Согласно (44), значения этих коэффициентов зависят от статистического распределения центров квантовых точек. Из-за разного размера КТ эти центры могут смещаться относительно гетерограницы между смачивающим слоем и спейсером. Ширины диффузных сателлитов в обратном пространстве вдоль вертикального направления зависят от корреляционной длины  $l_V$ . Поскольку в СР с самоорганизованными КТ толщины стекирования соседних вертикальных колонок из КТ могут отличаться (см. рис. 12), то для описания диффузного рассеяния необходимо ввести статистически усреднённую корреляционную длину  $\bar{l}_V$ , а также соответствующую дисперсию её вероятностного распределения. Интерференционный фактор стекированных КТ в этом случае может быть записан в виде

$$F_V(q_z, \bar{l}_V) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |B_n|^2 \Psi(q_z, \bar{l}_V, n), \quad (46)$$



где  $\Psi(q_z, \bar{l}_V, n)$  определяется вероятностной функцией распределения  $p(z, \bar{l}_V)$  корреляционных длин по толщине СР:

$$\Psi(q_z, \bar{l}_V, n) = \int_0^\infty \left| \frac{\sin[(q_z - nK_{SL})z]}{(q_z - nK_{SL})z} \right|^2 p(z, \bar{l}_V) dz. \quad (47)$$

Рассмотрим модель, в рамках которой вертикальная вероятностная функция распределения КТ в промежутке  $(-l_{SL}/2; l_{SL}/2)$  имеет вид

$$w(z) = \exp\left(-\frac{|z|}{a}\right). \quad (48)$$

Для этой экспоненциальной функции фурье-коэффициенты (44) имеют аналитическое выражение:

$$B_n = \frac{2a/l_{SL}}{1 + 4\pi^2(a/l_{SL})^2 n^2} \left[ 1 - i \exp\left(-\frac{l_{SL}}{2a}\right) (-1)^n \right]. \quad (49)$$

Численное моделирование углового распределения диффузного рассеяния проведём для двадцатипериодной сверхрешётки InAs/GaAs с КТ эллипсоидальной формы [51]. Период СР равен 20 нм, толщина GaAs-спейсера 15 нм. Средний латеральный радиус КТ  $R = 12,5$  нм, высота КТ  $l_z = 5$  нм. Статистическое усреднение по размерам КТ и по длине корреляции выполнено с использованием логарифмического нормального распределения. Дисперсия разброса КТ по размерам составляла 30% от радиуса и высоты квантовой точки. В расчётах использована формула (48) для описания вертикального распределения КТ, параметр  $a = 3$  нм.

На рисунке 15а представлена карта углового распределения интенсивности диффузного рассеяния в отсутствие вертикальной корреляции. Это выполняется при условии  $l_V < l_{SL}$ , т.е. в многослойной структуре отсутствуют колонки стекированных КТ. Здесь и на следую-

щих картах контуры равной интенсивности диффузного рассеяния представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями равно 0,4. Картина диффузного рассеяния на рис. 15а находится в полном соответствии с контурами равной интенсивности от кристалла с хаотически распределёнными включениями эллипсоидальной формы. Таким образом, некогерентное рассеяние на сверхрешётке в отсутствие вертикальной корреляции КТ не сопровождается формированием сверхструктурных сателлитов диффузного рассеяния.

На рисунке 15б, в показано влияние длины корреляции (толщины стекирования) на формирование углового распределения диффузного рассеяния. При малой длине корреляции  $\bar{l}_V = 2l_{SL}$  сателлиты диффузных максимумов в вертикальном направлении размыты (рис. 15б), полуширина диффузных пиков  $\Delta q_z \approx 0,035$  нм. На рисунке 15в представлен случай формирования картины диффузного рассеяния при условии  $\bar{l}_V = 20l_{SL}$ , т.е. полной вертикальной корреляции КТ. Угловое распределение интенсивности рассеяния от стекированных КТ по всей толщине СР характеризуется возникновением относительно высоких и очень узких ( $\Delta q_z \approx 0,0035$  нм<sup>-1</sup>) диффузных сателлитов.

## 6. Количественный рентгенодифракционный анализ гетероструктур с квантовыми точками

В процедуре исследований полупроводниковых систем с КТ методы электронной микроскопии и рентгеновской дифракции взаимно дополняют друг друга [123]. Если, например, просвечивающая электронная микроскопия даёт информацию на атомарном уровне, но для очень малого объёма исследуемого образца, то рентгеновская дифракция позволяет получать усреднённые данные по всему изучаемому объекту. Поскольку дифракционные методы являются непрямые, то основная проблема заключается в построении довольно сложной цепочки восстановления сложной структуры исследуемого материала по угловому распределению интенсивности рассеяния.

Первые попытки получения информации о кристаллических системах с квантовыми точками на основе анализа RSM были предприняты в [69, 70] с использованием кинематической теории дифракции Кривоглаза [44]. Однако такой подход нельзя отнести к количественному анализу, поскольку в расчёт бралось только диффузное рассеяние (рис. 2а). Как правило, диффузное рассеяние по интенсивности существенно меньше когерентной составляющей, хотя и распределяется в широком угловом интервале обратного пространства. Вблизи узла обратной решётки интенсивности когерентного и диффузного рассеяния накладываются друг на друга, тем самым формируя общий контур отражённой интенсивности. Следовательно, для количественного анализа кристаллических сред с КТ требуется ряд последовательных операций. Прежде всего, одновременный учёт когерентного и диффузного рассеяния возможен с использованием формализма статистической теории дифракции Като [28]. Необходимо сконструировать модель среды, используя при этом априорную информацию о ростовой структуре.

Следует учесть, что безмодельное решение обратной дифракционной задачи в данном случае невозможно, поскольку исследуются достаточно сложные структуры

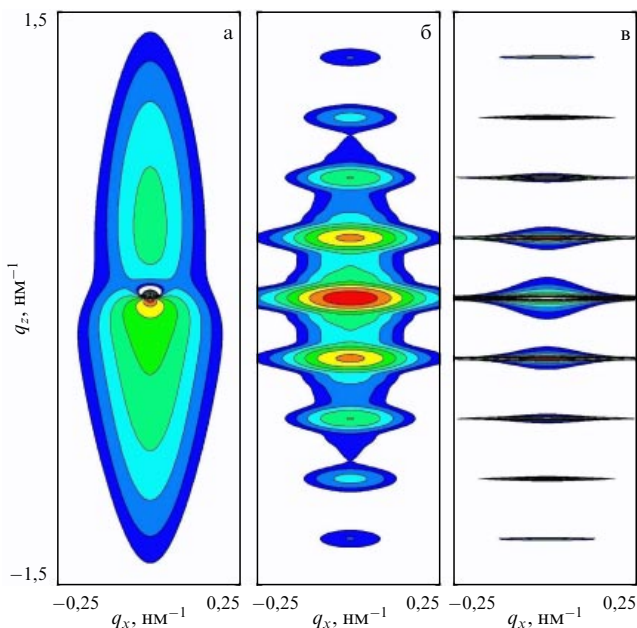


Рис. 15. Расчётные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от двадцатипериодной сверхрешётки с КТ: (а) отсутствие вертикальной корреляции,  $l_V < l_{SL}$ ; средняя корреляционная длина  $\bar{l}_V = 2l_{SL}$  (б),  $\bar{l}_V = 20l_{SL}$  (в); дисперсия стекирования  $\sigma_V = \bar{l}_V/4$ .

и в расчёт берутся одновременно когерентный и диффузный каналы рентгеновского рассеяния. Кроме того, в численных расчётах необходимо учитывать статистический разброс размеров КТ. Экспериментальные RSM полупроводниковых систем с КТ представляют собой большие массивы данных, обработка которых в общем случае требует привлечения современных суперкомпьютеров. Возможен другой путь решения проблемы, связанный с выделением вертикальных и горизонтальных сечений RSM вдоль когерентных и диффузных максимумов. И, наконец, задача количественного анализа существенно упростится, если экспериментальные дифракционные данные будут сопровождаться результатами других методов, например просвечивающей электронной микроскопии [123].

### 6.1. Короткопериодные сверхрешетки с квантовыми точками

В настоящее время короткопериодные СР с КТ, т.е. многослойные структуры со сверхтонкими разделяющими слоями, являются объектами большинства исследований [1]. Поэтому сначала рассмотрим применение метода высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии для неразрушающего количественного анализа периодической структуры с вертикально упорядоченными квантовыми точками. Анализ основан на численном моделировании карт распределения *полной интенсивности* рассеяния  $I_h^t(\mathbf{q}) = I_h^c(\mathbf{q}) + I_h^d(\mathbf{q})$  вблизи определённого узла обратной решётки, где  $I_h^c(\mathbf{q}) \sim f^2$  — интенсивность когерентного рассеяния,  $I_h^d(\mathbf{q}) \sim (1-f^2)$  — интенсивность диффузного рассеяния,  $f$  — статический фактор Дебая–Уоллера. Известно, что по данным когерентного рассеяния можно получить информацию о толщине и среднем градиенте концентрации в смачивающем слое, о толщине разделяющего слоя, флуктуации периода СР с КТ, композиционной вариации периода СР и т.д.

Как отмечалось выше, квантовые точки, в силу их статистического распределения в плоскости эпитаксиальных слоёв, могут рассматриваться как локальные дефекты структуры, вызывающие диффузное рассеяние и ослабляющие когерентную составляющую полного дифракционного рассеяния рентгеновского излучения. Статический фактор Дебая–Уоллера, связывающий когерентную и диффузную компоненты, в общем случае является произведением  $f = f_{\text{QD}} f_s$ , где  $f_{\text{QD}} = \exp(-c_{\text{QD}} V_{\text{QD}})$  — статический фактор, вызванный наличием КТ без учёта упругих деформаций. Множитель  $f_s$  — статический фактор, обусловленный упругой деформацией вокруг квантовых точек, а также другими нарушениями трансляционного порядка кристаллической решётки (наличием точечных или протяжённых дефектов, шероховатостей интерфейсов и т.д.). Здесь  $c_{\text{QD}}$  — объёмная концентрация КТ,  $V_{\text{QD}}$  — средний объём КТ.

В отличие от когерентной составляющей, диффузное рассеяние несёт информацию о самих квантовых точках, их форме, размере, упругой деформации, латеральной и вертикальной пространственной корреляции. Поскольку нами подробно исследовано возникновение диффузного рассеяния от кристаллической среды с КТ, остановимся на рассмотрении аналитического решения для когерентного рассеяния рентгеновского излучения в многокомпонентной (политипной) сверхрешётке с КТ [124–126].

Характерным параметром такой СР является её период, состоящий из  $P$  слоёв разного химического состава и, следовательно, слоёв с разным параметром решётки. Пусть  $d$  — межплоскостное расстояние кристаллической подложки,  $d_p$  — межплоскостные расстояния и  $l_p$  — толщины отдельных слоёв периода, где  $p = 1, 2, \dots, P$  задаёт номер слоя. Тогда среднее межплоскостное расстояние многокомпонентной СР запишется как  $d_{\text{SL}} = \sum_{p=1}^P d_p l_p / l_{\text{SL}}$ , где  $l_{\text{SL}} = \sum_{p=1}^P l_p$  — толщина периода СР. Совершенство кристаллической решётки каждого слоя СР определяется статическим фактором Дебая–Уоллера  $f_p$ .

Решение для амплитудного коэффициента отражения когерентных рентгеновских волн от  $N$ -периодной многокомпонентной СР представляется формулой

$$R_{\text{SL}}^c(q_x, q_z) = iF_c(q_z) N_c(q_z) W(q_x) \times \exp\left(i(N-1) \sum_{p=1}^P A_p(q_z) l_p\right), \quad (50)$$

где

$$W(q_x) = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \exp(iq_x x)$$

— параметр, зависящий от размера рентгеновского пучка,  $L_x$  — латеральный размер засветки поверхности сверхрешётки. Интерференционная функция Лауэ многокомпонентной сверхрешётки имеет вид

$$N^c(q_z) = \frac{\sin\left(N \sum_{p=1}^P A_p(q_z) l_p\right)}{\sin\left(\sum_{p=1}^P A_p(q_z) l_p\right)}.$$

Здесь  $A_p = (a_0^{(p)} - q_z + \varepsilon_p h)/2$  — угловой параметр,  $\varepsilon_p$  — деформация решётки  $p$ -го слоя периода СР. Структурная амплитуда многокомпонентной СР запишется как

$$F_{\text{SL}}^c(q_z) = \sum_{p=1}^P a_h^{(p)} f_p \frac{\sin(A_p(q_z) l_p)}{A_p(q_z)} \times \exp\left(i \sum_{k=1}^{p-1} 2A_k(q_z) l_k + iA_p(q_z) l_p\right).$$

Коэффициенты  $a_h^{(p)} = C\pi\chi_h^{(p)}/(\lambda\gamma_h)$  характеризуют взаимодействие рентгеновского поля с электронной плотностью среды чередующихся слоёв СР, где  $\gamma_h = |\sin\theta_{\text{В}}|$ ,  $\theta_{\text{В}}$  — угол Брэгга,  $C$  — поляризационный фактор,  $\lambda$  — длина волны рентгеновского излучения в вакууме. Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости  $\chi_h^{(p)}$  связаны со структурными факторами слоёв СР  $F_{hkl}^{(p)}$  соотношением  $\chi_h^{(p)} = -r_0\lambda^2 F_{hkl}^{(p)}/(\pi V_c)$ ,  $V_c$  — объём элементарной ячейки,  $r_0 = e^2/(mc^2)$  — классический радиус электрона,  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона. В случае двухкомпонентной СР ( $p = 1, 2$ ) решение (50) примет вид

$$R_{\text{SL}}^c(q_x, q_z) = iF_{\text{SL}}^c(q_z) \exp(i\psi) \frac{\sin(Ny)}{\sin y} W(q_x), \quad (51)$$

где  $y = A_1 l_1 + A_2 l_2$ ,  $A_{1,2} = (a_0 - q_z + \varepsilon_{1,2} h)/2$ ,  $\psi = (N-1)y + A_1 l_1$ . Структурная амплитуда сверхре-



шѐтки запишется как

$$F_{\text{SL}}^c(q_z) = a_h^{(1)} f_1 \frac{\sin(A_1 l_1)}{A_1} + \exp(iy) a_h^{(2)} f_2 \frac{\sin(A_2 l_2)}{A_2}.$$

Для сложных многослойных систем когерентное рассеяние вычисляется с использованием рекуррентной процедуры. Если гетероструктура состоит из  $N$  слоѐв, включая подложку, то амплитудный коэффициент отражения от гетероструктуры  $R_N^c(q_x, q_z)$  при известном коэффициенте отражения  $R_{N-1}^c(q_x, q_z)$  от  $(N-1)$  нижних слоѐв вычисляется по рекуррентной формуле [33]

$$R_N^c(q_x, q_z) = \frac{S_1^{(N)} b_2^{(N)} - S_2^{(N)} b_1^{(N)}}{S_1^{(N)} - S_2^{(N)}}, \quad (52)$$

где

$$\begin{aligned} S_1^{(N)} &= (R_{N-1}(q_x, q_z) - b_1^{(N)}) \exp(i\xi^{(N)} l_N), \\ S_2^{(N)} &= R_{N-1}(q_x, q_z) - b_2^{(N)}, \quad b_{1,2}^{(N)} = \frac{\xi_{1,2}^{(N)}}{f_N a_{-h}^N}, \\ \xi_{1,2}^{(N)} &= \frac{-q_z^N \pm \xi^{(N)}}{2}, \quad \xi^{(N)} = \sqrt{(q_z^N)^2 - 4a_h^N a_{-h}^N f_N^2}, \\ q_z^N &= (1+b)a_0^N + \varepsilon^N h + q_z, \quad \varepsilon^N = \frac{\Delta d_N}{d_0} \end{aligned}$$

— деформации решѐтки слоя с номером  $N$ .

Поскольку короткопериодные СР с КТ чаще всего являются двухкомпонентными, то расчѐты когерентного рассеяния проводятся с использованием формул (51) и (52). Численное моделирование диффузного рассеяния от кристаллических сред выполняется по изложенной выше процедуре с учётом формы, размеров, упругих деформаций КТ, а также их пространственной корреляции.

Количественный рентгенодифракционный анализ проведѐн для структуры, представляющей собой аналог фотолюминесцентной системы с барьерами  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  толщиной 2 мкм снизу и 450 нм сверху, верхним и нижним GaAs-волноводами толщиной 240 нм. Активной областью служила двадцатипериодная сверхрешѐтка с повторяющимися смачивающими (InAs) и разделяющими (GaAs) слоями. Структуры выращивались методом молекулярно-пучковой эпитаксии на нелегированных подложках GaAs(001). После удаления с поверхности подложки оксида мышьяка выращивался буферный слой GaAs при 610 °С толщиной 300 нм, на котором формировалась основная исследуемая структура. Квантовые точки осаждались при  $T = 480$  °С со скоростью  $\sim 0,035$  монослоя  $\text{с}^{-1}$ . Момент формирования КТ (при толщине осаждѐнного слоя  $\sim 1,7$  монослоя) отслеживался по появлению шевронов около дифракционных пятен на картине отражѐнных электронов [106].

Рентгенодифракционные измерения проводились на высокоразрешающем дифрактометре X'Pert MRD (PANalytical). В ходе измерений снимались двух- и трёхкристальные  $(\omega-2\theta)$ -кривые дифракционного отражения и трёхкристальные  $\omega$ -кривые на максимумах основных дифракционных пиков (GaAs(004), AlGaAs) и сверхструктурных спутников от многослойной активной области (0SL,  $\pm 1\text{SL}$  и других). Карты RSM дифрагируемого излучения снимались с кристаллом-анализатором в режиме  $(\omega-2\theta)/\omega$ -сканирования вблизи симметричного (004)-узла обратной решѐтки.

На основе априорных ростовых данных построена модель 20-периодной структуры GaAs(001)–AlGaAs–{InAs/GaAs} $_{20 \times \text{SL}}$  с квантовыми точками InAs. Первый этап количественного рентгенодифракционного анализа состоит в численном моделировании когерентной дифракции, поскольку её интенсивность существенно выше диффузной компоненты [106]. Когерентное рассеяние на многопериодных структурах рассчитывается на основе аналитического решения (51) и рекуррентной процедуры (52) для учёта дифракции на подложке и буферном слое. В рассматриваемом случае численное моделирование вертикального сечения RSM выполнено для (004)GaAs-отражения  $\sigma$ -поляризованного  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучения. Угол Брэгга для выбранного отражения составляет 33,026°, межплоскостное расстояние для GaAs-подложки  $d_{004} = 1,4133$  Å. Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости имеют значения:

$$\begin{aligned} \chi_0^{\text{GaAs}} &= (-2,889 + i0,084) \times 10^{-5}, \\ \chi_h^{\text{GaAs}} &= (-1,697 + i0,078) \times 10^{-5}, \\ \chi_0^{\text{InAs}} &= (-2,682 + i0,239) \times 10^{-5}, \\ \chi_h^{\text{InAs}} &= (-1,459 + i0,204) \times 10^{-5} \end{aligned}$$

(см. ссылку [127] и указанный в ней адрес сайта *X-Ray Server*).

Наилучшее согласие расчѐтов когерентного рассеяния и данных эксперимента получено для следующих параметров: толщина слоя InGaAs, содержащего InAs-КТ, равна 5,2 нм, средний состав по In 11%, толщина промежуточного слоя (спейсера) GaAs 14,8 нм, рассогласование параметров решѐтки  $\Delta d = d_{\text{InGaAs}} - d_{\text{GaAs}} = 2,2 \times 10^{-3}$  нм, упругая деформация  $\varepsilon = \Delta d/d_{\text{GaAs}} = 0,016$ , статический фактор Дебая–Уоллера слоя InGaAs с КТ  $f = 0,85$ .

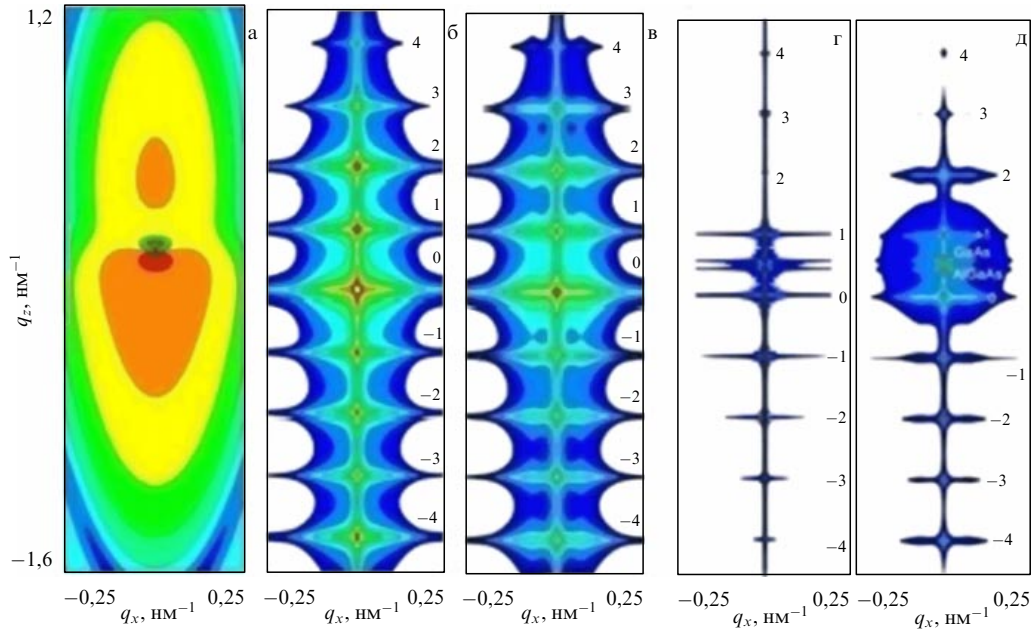
Следующий этап относится к последовательному моделированию диффузного рассеяния. Для этого необходимо учитывать особенности исследуемого объекта. Известно, что размеры самоорганизованных КТ в полупроводниковой матрице неодинаковы, хотя статистический разброс их объѐмов не слишком велик. Тем не менее в процедуре численного моделирования диффузного рассеяния следует проводить статистическое усреднение по вертикальным и латеральным размерам КТ, как это выполнялось, например, для пористых кристаллов [128, 129]. Придерживаясь формализма [130], статистическое усреднение по размерам КТ  $L$  можно провести с использованием логарифмического нормального распределения:

$$p_{\text{LN}}(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L\sigma_{\text{LN}}} \exp \left\{ -\frac{[\ln(L/\langle L \rangle) + \sigma_{\text{LN}}^2/2]^2}{2\sigma_{\text{LN}}^2} \right\} \quad (L \geq 0),$$

где  $\langle L \rangle = \int_0^\infty L p_{\text{LN}}(L) dL$  — средний размер КТ в латеральном или вертикальном направлении. Дисперсия размера квантовых точек  $\sigma_L^2 = \int_0^\infty (L - \langle L \rangle)^2 p_{\text{LN}}(L) dL$  и положение максимума в распределении КТ по размерам  $L_{\text{max}}$  запишутся как

$$\sigma_L^2 = [\exp(\sigma_{\text{LN}}^2) - 1] \langle L \rangle^2,$$

$$L_{\text{max}} = \exp \left( -\frac{3\sigma_{\text{LN}}^2}{2} \right) \langle L \rangle.$$



**Рис. 16.** Расчётные RSM диффузного (а–в), когерентного (г) и полного рассеяния (д) рентгеновских лучей. (а) Отсутствие пространственной корреляции в расположении КТ, (б) наличие вертикальной корреляции КТ, (в) наличие вертикальной и латеральной корреляции КТ.

В случае малого разброса по размерам КТ существует переход к нормальному распределению:

$$\sigma_L^2 \cong \sigma_{LN}^2 \langle L \rangle^2, \quad L_{\max} \cong \langle L \rangle.$$

Численные расчёты диффузного рассеяния стартуют для модели среды, в которой отсутствует пространственная корреляция в расположении КТ. При этом выбирается наиболее простая, но достаточно адекватная форма КТ. Модель сфероидальной КТ не только удовлетворяет этому требованию, она ещё и наиболее проста для статистического усреднения по размерам наноструктур.

На рисунке 16а показана расчётная карта углового распределения диффузного рассеяния от двадцатипериодной сверхрешётки InAs/GaAs с хаотически распределёнными КТ эллипсоидальной формы. В данном случае КТ в любом произвольно взятом периоде СР никоим образом не связаны с расположением квантовых точек в соседних слоях сверхрешётки. Латеральный радиус КТ составляет  $R = 12,5$  нм, высота КТ  $l_z = 5$  нм. В численных расчётах учтена латеральная плотность КТ, расстояние до границы соседней квантовой точки в горизонтальном направлении равно  $32,5$  нм. Это соответствует половине среднего расстояния между КТ. Указанные структурные параметры КТ получены при непосредственном сопоставлении расчётных и экспериментальных данных.

На рисунке 16б показано смоделированное распределение диффузного рассеяния сверхрешётки InAs/GaAs с учётом только вертикальной корреляции квантовых точек. Поскольку период СР строго выдержан и составляет  $20$  нм, вертикальная корреляция квантовых точек описывается в рамках модели дальнего порядка. Из рисунка 15 следует, что вертикальная корреляция сильно влияет на ширины полос диффузных максимумов в вертикальном направлении, уменьшая их с увеличением длины корреляции. Для исследуемой структуры сопо-

ставление численных расчётов и экспериментальных данных показало, что вертикальная корреляционная длина квантовых точек приблизительно равна  $140$  нм, что соответствует средней длине стекирования по толщине семи периодов двадцатипериодной СР.

Для описания латеральной корреляции между ближайшими квантовыми точками использован формализм паракристаллической решётки [112]. В рамках этой модели вводилась вероятностная функция нахождения КТ. В расчётной модели пространственно-коррелированные квантовые точки в эпитаксиальном слое InGaAs образуют стохастическую квадратную решётку, размытие решётки описывается нормальным (гауссовым) распределением. Функция распределения квантовых точек  $W(\rho_x)$  для среднего расстояния между центрами КТ  $a = 65$  нм и значения дисперсии  $\Delta^a = 0,45a = 29$  нм показаны на рис. 17а. Соответствующий этой функции интерференционный структурный фактор

$$F_L(q_x) = \int F_L(q_x, q_y) dq_y$$

показан на рис. 17б. Влияние вертикальной и латеральной корреляции на распределение диффузного рассеяния от СР демонстрирует рис. 16в. Среднее расстояние между квантовыми точками и соответствующая дисперсия получены непосредственным сопоставлением расчётных и экспериментальных данных.

Для сравнительного анализа экспериментальных и расчётных кривых сечений RSM использовалась процедура минимизации функционала невязки следующего вида:

$$\rho = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left[ \frac{I_{\text{exp}}(q_{x,z}^m) - I_{\text{calc}}(q_{x,z}^m)}{I_{\text{exp}}(q_{x,z}^m)} \right]^2, \quad (53)$$

где  $I_{\text{exp}}(q_{x,z}^m)$  — измеренная интенсивность в угловых положениях  $q_x^m$  для  $\omega$ -скана и  $q_z^m$  для  $(\omega - 2\theta)$ -скана,

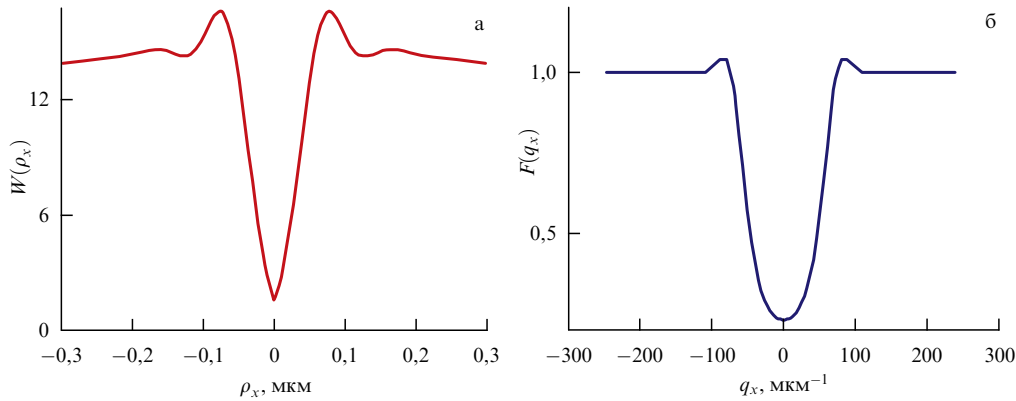


Рис. 17. Функция распределения квантовых точек (а) и интерференционный структурный фактор (б) для среднего расстояния между центрами КТ  $a = 65$  нм и значения дисперсии  $\Delta^a = 0,45a = 29$  нм [106].

$I_{\text{calc}}(q_{x,z}^m)$  — соответствующая расчётная полная интенсивность рассеяния,  $M$  — число угловых положений, в которых собиралась интенсивность рассеяния. В наших вычислениях для  $\omega$ -сканов  $M = 50$ , для  $(\omega - 2\theta)$ -скана  $M = 460$ . Минимизация функционала невязки проводилась для всех  $\omega$ -сечений спутников СР. Отклонение расчётных результатов от экспериментальных данных составляло около 5%.

В первом приближении численных расчётов когерентного рассеяния (рис. 16г) учёт латеральной ширины падающего рентгеновского пучка и её угловой расходимости описывался с помощью псевдовайтовской функции (pseudo-Voigt function) [131, 132]. В итоге полная интенсивность (рис. 16д) стала результатом суммирования диффузного (рис. 16в) и когерентного (рис. 16г) рассеяния. Более точный численный расчёт требует учёта инструментальной (аппаратной) функции экспериментальных исследований (рис. 18в).

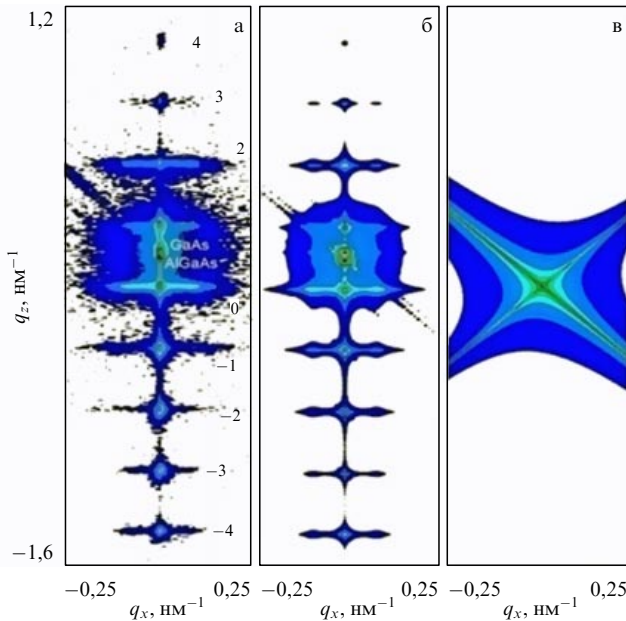


Рис. 18. Экспериментальная (а) и расчётная (б) RSM от двадцатипериодной СР GaAs(001)–AlGaAs–{InAs(QDs)/GaAs}<sub>20xSL</sub> вблизи узла обратной решётки GaAs(004). Наличие полосы анализатора на расчётной карте вызвано учётом инструментальной функции измерений (в).

На рисунке 18 представлены экспериментальная и расчётная карты распределения интенсивности рассеяния от двадцатипериодной СР GaAs(001)–AlGaAs–{InAs(QDs)/GaAs}<sub>20xSL</sub> вблизи узла обратной решётки GaAs(004). При расчёте полной интенсивности рассеяния от подложки и буферного слоя учитывалось влияние дефектов в рамках рассмотрения дислокационных моделей [133, 134]. Наилучшее количественное согласие между экспериментальными и расчётными  $\omega$ - и  $(\omega - 2\theta)$ -сканами достигнуто для значений статического фактора Дебая–Уоллера подложки  $f_s^{\text{subs}} = 0,96$  и AlGaAs-буферного слоя  $f_s = 0,94$ . Заметим, что без учёта длины стеккирования КТ при вычислении диффузного рассеяния такого согласия между экспериментом и расчётами получить не удаётся [135].

В процессе вычислений установлено, что значение статического фактора  $f_{\text{QD}} = \exp(-c_{\text{QD}}V_{\text{QD}}) = 0,927$ , где  $V_{\text{QD}} = (3\pi/2)R^2l_z = 1,6 \times 10^{-6}$  мкм<sup>3</sup> — средний объём квантовой точки без учёта упругих деформаций,  $R = 12,5$  нм — средний латеральный радиус КТ, средняя высота КТ  $l_z = 5$  нм (вертикальный размер),  $c_{\text{QD}} = 4,7 \times 10^4$  мкм<sup>-3</sup> — объёмная концентрация КТ в InGaAs-слое периода СР, что соответствует средней концентрации КТ в слое  $\sim 2,4 \times 10^{10}$  см<sup>-2</sup>. Концентрация  $c_{\text{QD}}$  вычислена с учётом высоты КТ и среднего расстояния между центрами КТ  $a = 65$  нм (средняя площадь отдельной КТ  $S_{\text{QD}} = a^2 = 4225$  нм<sup>2</sup>, поэтому средняя поверхностная концентрация КТ составляет величину  $\rho_{\text{QD}}^{\text{S}} = 1/S_{\text{QD}} = 2,367 \times 10^{10}$  см<sup>-2</sup>). Расчётная величина полного статического фактора Дебая–Уоллера для слоя InGaAs равна  $f = f_{\text{QD}}f_s = 0,85$ . Соответствующий этому значению статический фактор Дебая–Уоллера, обусловленный упругой деформацией и дефектами вблизи КТ, равен  $f_s = 0,917$ . Процедура усреднения по размерам КТ смазывает влияние формы наноструктуры на диффузное рассеяние, в этом случае основной структурной характеристикой КТ становится отношение  $\eta = h/D$  [102], где  $h$  — высота КТ и  $D$  — её диаметр. Для исследуемой структуры  $\eta = 0,2$ .

## 6.2. Многокомпонентные гетероструктуры с квантовыми точками

Межслойные корреляции КТ в многослойных структурах подчиняются некоторому механизму, согласно которому КТ в одном слое влияют на рост точек в следующем слое, т.е. информация о положении точки передаётся от

одного слоя к другому. Существуют три вида таких механизмов, а именно: сегрегационные химические процессы на поверхности, морфологические особенности волнистой поверхности, дальние взаимодействия упругих полей деформаций от КТ [136, 137]. Каждый из этих процессов вызывает изменения в деформации, поверхностной диффузии и поверхностном химическом потенциале через разделяющий слой. Если эти изменения достаточно большие, то они будут влиять на зарождение последующих квантовых точек, тем самым формируя вертикальные и латеральные корреляции в многослойных системах.

Зарождение КТ по механизму Странски – Крастанова является сложным процессом, который зависит от многих параметров. К таким параметрам следует отнести поверхностные напряжения, рассогласование решёток, толщину и композиционный состав смачивающего слоя, свободную энергию и локальную кривизну поверхности роста, а также ступенчатую структуру поверхности и кинетику ростового процесса. На планарной и химически однородной подложке эти параметры являются постоянными по ширине поверхности и, таким образом, имеет место зарождение однородных точек в случайных положениях на поверхности. В многослойных структурах вариации деформаций и композиционного состава химических элементов, вызванные зарощёнными КТ, приводят к преимущественному зарождению точек в определённых положениях на поверхности. Как результат, квантовые точки на этой поверхности становятся пространственно-коррелированными по отношению к точкам предыдущих слоёв и, таким образом, формируется межслойная корреляция КТ [137].

Толщина разделяющего слоя играет особую роль в формировании вертикально совмещённых массивов КТ. Известно, что с увеличением толщины разделяющего слоя межслойная корреляция КТ уменьшается [138, 139]. Следуя [125, 126], рассмотрим когерентное и диффузное рассеяние на СР с КТ при наличии многокомпонентного и относительно толстого разделяющего слоя. Исследуемые GaAs(001)–GaAs–AlGaAs–AlAs гетероструктуры лазерного типа были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии на точно ориентированных (001)GaAs-подложках. Схематическое изображение гетероструктур показано на рис. 19.

Основные слои —  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (толщина  $t \approx 1,2$  мкм), GaAs ( $t \approx 100$  нм), а также тонкие слои GaAs и AlAs в короткопериодных ( $t_{\text{SL}} \approx 3,6$  нм) сглаживающих сверхрешётках выращивались при температуре  $\approx 600$  °С, тогда как InAs-КТ и слои GaAs, непосредственно прилегаю-

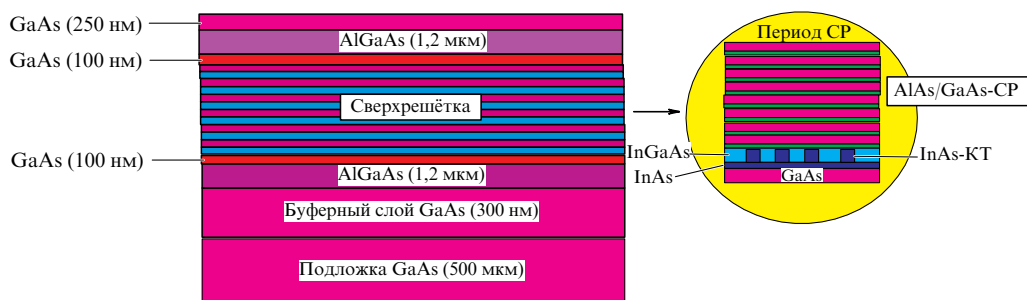
щие к ним ( $\approx 5$  нм нижний и  $\approx 2,5$  нм верхний), осадились при температуре  $\approx 480$  °С; поток мышьяка при осаждении КТ уменьшался в несколько раз с помощью регулируемого клапана на эффузионном источнике. Скорость осаждения InAs составляла  $\approx 0,03$ – $0,032$  моно-слоя  $\text{с}^{-1}$ .

Для увеличения однородности вертикального размера КТ температура подложки после осаждения верхнего прилегающего слоя GaAs повышалась до  $\approx 600$  °С с целью удаления выступающей верхней части КТ [140]. Затем наращивался слой GaAs толщиной  $\approx 5,0$  нм, на котором формировалась короткопериодная AlAs(1,1 нм)/GaAs(2,5 нм) сглаживающая сверхрешётка (9 пар слоёв). В исследованных сверхструктурах общее количество периодов с InAs-КТ составило 3, 6 и 10; полный период слоёв с КТ для первых двух образцов (3 и 6 периодов) составил  $\approx 54$  нм, для третьего образца (10 периодов)  $\approx 48$  нм.

Рентгенодифракционные измерения проводились на высокоразрешающем дифрактометре X'Pert MRD (PANalytical) с многослойным фокусирующим зеркалом, четырёхкратным Ge(220) монохроматором бартелевского типа, обеспечивающим расходимость падающего излучения  $\approx 12''$ , и трёхкратным Ge(220) анализатором с приёмной угловой апертурой  $\approx 7''$ – $8''$ . Использование рентгенооптической схемы с бартелевским монохроматором обеспечивает высокую монохроматизацию и коллимацию падающего  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучения, а высокоразрешающий анализатор позволяет пространственно разделить когерентную и диффузную компоненты рассеянного излучения для детального анализа кристаллического совершенства исследуемых объектов. Отражение GaAs(004) было использовано для измерения  $(\omega - 2\theta)$ - и  $\omega$ -кривых дифракционного отражения, а также карт распределения интенсивностей рассеяния вблизи узла обратной решётки.

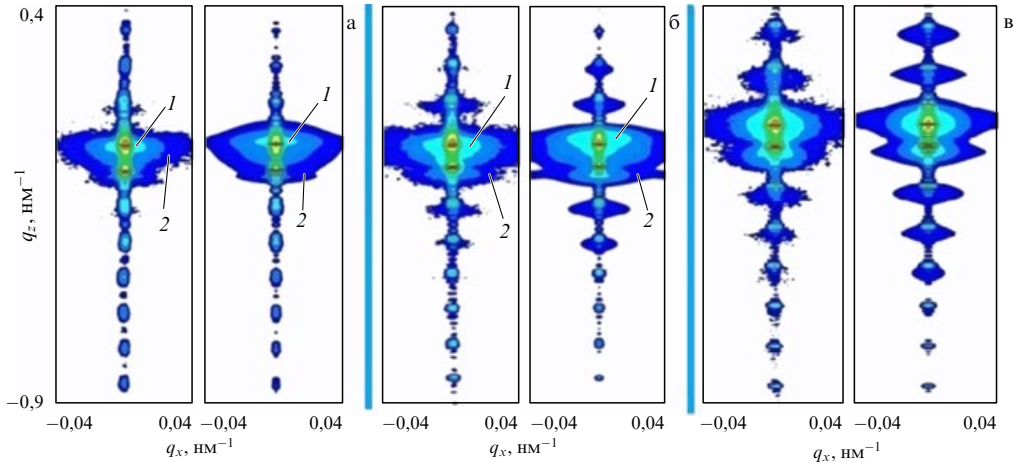
Расчёты RSM проводились по описанной методике с привлечением минимизации функционала невязки (53).

На рисунке 20 показаны измеренные и расчётные карты для образцов, содержащих 3, 6 и 10 периодов с КТ. Отчётливо видно появление когерентных (на RSM светло-голубого цвета, области 1) и диффузных (тёмно-синего цвета, области 2) дифракционных порядков. Если для СР с тремя периодами диффузное рассеяние от КТ проявляется слабо в силу малого числа слоёв с КТ (рис. 20а), то для двух других образцов явно прослеживается угловой сдвиг дифракционных пятен некогерентного рассеяния относительно когерентных пиков (рис. 20б, в) [125, 126].



**Рис. 19.** Схема гетероструктуры с многокомпонентной сверхрешёткой. Справа на вставке: схема структуры периода CP с квантовыми точками [125].





**Рис. 20.** (В цвете онлайн.) Экспериментальные (слева) и расчётные RSM вблизи узла (004) обратной решётки GaAs от трёх- (а), шести- (б) и десятипериодной (в) сверхрешёточной структуры с квантовыми точками [125, 126]. 1 — области светло-голубого цвета, 2 — области тёмно-синего цвета.

Строго говоря, во всех ранее рассмотренных моделях [141–146] и имеющихся экспериментальных данных [69, 75–77, 147] диффузное рассеяние рентгеновских лучей от модулированных искажённых кристаллов, включая сверхрешётки с КТ, возникает непосредственно вокруг сверхструктурных спутников когерентного рассеяния. В [125, 126] впервые представлены результаты, которые показывают, что максимумы диффузного рассеяния сдвинуты относительно когерентных сверхструктурных спутников на некоторое угловое расстояние. Объяснению этого ранее не наблюдавшегося эффекта изложено в работе [125].

Согласно (46) и (47), распределение диффузного рассеяния в обратном пространстве представляет собой периодическую функцию вдоль  $q_z$ -сечения. Период расположения диффузных максимумов  $K = 2\pi/l_{SL}$  совпадает с периодом когерентных дифракционных порядков. Рентгеновское излучение когерентно рассеивается на всех  $P$  слоях периода СР, при этом на несовершенных участках СР когерентная компонента ослабляется за счёт уменьшения статического фактора Дебая–Уоллера. Среднее межплоскостное расстояние СР  $d_{SL} = \sum_{p=1}^P d_p l_p / l_{SL}$ , согласно закону Брэгга  $2d_{SL} \sin \theta_{SL}^c = \lambda$ , определяет угловое положение  $\theta_{SL}^c$  основного (нулевого) дифракционного пика СР. Спутнитные максимумы в обратном пространстве сдвинуты на угловые расстояния  $nK$ , где  $n$  — номер дифракционного порядка.

Если в слоях гетероструктуры отсутствуют дефекты, то диффузное рассеяние не возникает. Оно возникает только в слоях, содержащих КТ, а также в близлежащих слоях, в которые проникают вызванные квантовыми точками упругие деформации. В многокомпонентной сверхрешётке этих слоёв может быть меньше, чем число слоёв в периоде СР ( $P$ ). Пусть число слоёв с дефектами, в которых возникает диффузное рассеяние, равно  $S$ , причём  $S \leq P$ . Следовательно, среднее межплоскостное расстояние сверхрешётки для диффузного рассеяния запишется как  $d_{SL}^D = \sum_{s=1}^S d_s l_s / l_{SL}^D$  [125, 148], где  $l_{SL}^D = \sum_{s=1}^S l_s$  — толщина дефектной части периода сверхрешётки. В общем случае  $d_{SL}^D$  может отличаться от среднего межплоскостного расстояния СР для когерентного рассеяния  $d_{SL}$ . В силу того же закона Брэгга  $2d_{SL}^D \sin \theta_{SL}^D = \lambda$ , где  $\theta_{SL}^D$  — угловое положение нулевого максимума диффуз-

ного рассеяния. Вблизи узла обратной решётки на RSM угловой сдвиг между максимумами когерентного и диффузного рассеяния определяется соотношением  $\Delta q_{SL} = h_{SL}^D - h_{SL}$ , где  $h_{SL}^D = 2\pi/d_{SL}^D$  и  $h_{SL} = 2\pi/d_{SL}$  [125].

В случае, когда упругие деформации от КТ распределены во всех слоях периода СР, т.е.  $P = S$ , средние межплоскостные расстояния для когерентного и диффузного рассеяния совпадают,  $d_{SL} = d_{SL}^D$ , поэтому совпадают и максимумы дифракционных порядков этих двух каналов рассеяния, т.е.  $\Delta q_{SL} = 0$ . Для однородных тонких разделяющих слоёв реализуется именно этот случай. Как следствие, сдвиг между максимумами когерентного и диффузного рассеяния не наблюдается [106].

Сравнение экспериментальных данных и расчётных RSM показывает, что максимумы диффузного рассеяния сдвинуты на величину  $\Delta q_{SL} = 0,025 \text{ nm}^{-1}$ . Это означает, что диффузное рассеяние возникает не по всей толщине периода сверхрешётки, а только в той её части, в которой присутствуют КТ и наведённые квантовыми точками упругие деформации. В частности, результаты расчётов показывают, что в случае шестипериодной СР деформации от КТ распространяются в направлении роста на 40 нм (толщина периода 54 нм), а в случае десятипериодной СР — на 32 нм (толщина периода 48 нм). Многокомпонентный разделительный слой не позволяет формировать хорошие массивы стекированных КТ. В отличие от короткопериодных СР, где средняя длина стекирования распространялась на семь периодов сверхрешётки [106], для многокомпонентной гетероструктуры вертикальная корреляционная длина КТ приблизительно равна двум периодам СР с дисперсией в четверть периода. Таким образом, установлено, что в многокомпонентной СР в среднем присутствуют всего две вертикально совмещённые КТ.

В процессе численного моделирования были определены размеры КТ. Средняя высота квантовых точек составляла 2,5 нм, средний латеральный размер был равен 20 нм. Дисперсия флуктуаций размеров КТ в вертикальном и латеральном направлениях составляла 30%. В многокомпонентных СР по данным дифракционного анализа также установлен ближний порядок в латеральном расположении КТ. Среднее расстояние между КТ составляло 50 нм, дисперсия равна 20 нм.

## 7. Заключение

В обзоре изложены пошаговые этапы неразрушающего рентгенодифракционного исследования полупроводниковых систем с квантовыми точками для количественного анализа RSM. Это весьма важно, так как ВРД с измерениями RSM используется для исследования новых систем с КТ. С помощью данных RSM, аномальной рентгеновской дифракции, высокоразрешающей СТМ и фотолюминесцентной спектроскопии совсем недавно были изучены структурные и оптические свойства сверхрешёток GaN/AlN с КТ [149]. Вертикальная корреляция КТ в системе ZnTe/ZnCdSe исследовалась с привлечением модели латеральных отклонений [120] для анализа дифракционных порядков на RSM [150, 151].

Определённая сложность количественного анализа RSM заключается в том, что экспериментальные карты распределения интенсивности рассеяния представляют собой большие массивы данных (на двумерной сетке примерно от 100 до 1000 значений в каждом направлении, что приблизительно соответствует диапазону от десяти тысяч до миллиона значений интенсивности на RSM). Задача упрощается, если брать в расчёт определённые сечения RSM. Для каждого значения интенсивности требуется либо проводить аналитические вычисления, либо численно решать интегральные или дифференциальные уравнения с достаточно большим количеством шагов. Поскольку в методе подгонки процедура вычислений повторяется многократно, то решение обратной задачи рентгеновской дифракции без использования суперкомпьютеров сильно усложняется.

Отметим, что расчёты RSM для КТ различной формы выполнялись в рамках других подходов. В частности, моделирование рентгеновского рассеяния от скрытых КТ (buried quantum dots) выполнено в рамках кинематической теории с использованием алгоритма конечных элементов и привлечением модели поля валентных сил Китинга (Keating model) для энергии упругих деформаций [152, 153]. Однако использование кинематического приближения для расчётов вектора обратной решётки от объёмной части в этих работах является не совсем корректным, поскольку для большого числа атомов, независимо от формы кристалла, имеет место динамическая дифракция [154].

Неакцентированное, слабо выраженное угловое смещение диффузного рассеяния от когерентных сателлитов на вертикальных сечениях RSM наблюдалось для сверхрешёток InAs/GaAs [155, 156] и Ge/Si [157] с КТ. К сожалению, в указанных работах не приводится убедительного физического объяснения этому явлению.

Ещё одно важное замечание следует сделать в отношении работ с использованием ВРД, но без картографирования, т.е. без измерений RSM [158–171]. Многие из них сопровождаются дополнительными измерениями, например, диффузного рассеяния [157], спектрами фотолюминесценции [158, 160, 163, 164, 168–171], снимками просвечивающей [161, 162, 168–171] и атомно-силовой [169] микроскопии. Вполне понятно, что сопутствующие эксперименты позволяют получать дополнительную информацию о системах с КТ. С другой стороны, одни лишь двухкристалльные кривые дифракционного отражения вряд ли могут дать возможность идентифицировать, например, пирамидальную форму квантовых точек InAs в полупроводниковых гетероструктурах или сделать

вывод о вертикальном совмещении (стекировании) КТ без анализа диффузного рассеяния [165–167].

Изложенный в настоящем обзоре подход может быть эффективно использован для количественного анализа других классов наноструктурированных сред, в частности, для исследования самоорганизованных [172] и полученных методами литографии [173–175] квантовых нитей, латерально ограниченных кристаллов разной формы [176–180], многослойных дифракционных решёток [181], латерально модулированных сверхрешёток [182, 183], тонких слоёв с квазипериодическими дислокациями [184], доменных [185, 186], пористых [187–190] структур и др.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-02-00272-а).

## Список литературы

1. Wang Z M (Ed.) *Self-Assembled Quantum Dots* (New York: Springer, 2008)
2. Alferov Zh I *Rev. Mod. Phys.* **73** 767 (2001); Алфёров Ж И *УФН* **172** 1068 (2002)
3. Arakawa Y, Sakaki H *Appl. Phys. Lett.* **40** 939 (1982)
4. Goldstein L et al. *Appl. Phys. Lett.* **47** 1099 (1985)
5. Bimberg D (Ed.) *Semiconductor Nanostructures* (Berlin: Springer, 2008)
6. Blokland J H et al. *Appl. Phys. Lett.* **94** 023107 (2009)
7. Павлов К М, Пунегов В И, Фалеев Н Н *ЖЭТФ* **107** 1967 (1995); Pavlov K M, Punegov V I, Faleev N N *JETP* **80** 1090 (1995)
8. Пунегов В И, Фалеев Н Н *ФТТ* **38** 255 (1996); Punegov V I, Faleev N N *Phys. Solid State* **38** 143 (1996)
9. Пунегов В И и др. *ФТТ* **38** 264 (1996); Punegov V I et al. *Phys. Solid State* **38** 148 (1996)
10. Renaud G, Lazzari R, Leroy F *Surf. Sci. Rep.* **64** 255 (2009)
11. Holý V, Buljan M, Lechner R T *Semicond. Sci. Technol.* **26** 064002 (2011)
12. Favre-Nicolin V et al. *Eur. Phys. J. Special Topics* **208** 189 (2012)
13. Chrastina D et al. *Nanotechnology* **23** 155702 (2012)
14. Vartanyants I A et al. *Phys. Rev. B* **71** 245302 (2005)
15. Schmidbauer M *X-Ray Diffuse Scattering from Self-Organized Mesoscopic Semiconductor Structures* (Berlin: Springer, 2004)
16. Pietsch U, Holý V, Baumbach T *High-Resolution X-ray Scattering: from Thin Films to Lateral Nanostructures* (New York: Springer, 2004)
17. Als-Nielsen J, McMorrow D *Elements of Modern X-ray Physics* (Hoboken: Wiley, 2011)
18. Caciuffo Ret al. *Phys. Rep.* **152** 1 (1987)
19. Bonse U, Hart M *Appl. Phys. Lett.* **7** 238 (1965)
20. Compton A H, Allison S K *X-ray in Theory and Experiment* (New York: D. Van Nostrand Co., 1935)
21. Eisenberger P, Alexandropoulos N G, Platzman P M *Phys. Rev. Lett.* **28** 1519 (1972)
22. Larson B C, Schmatz W *Phys. Rev. B* **10** 2307 (1974)
23. Iida A, Kohra K *Phys. Status Solidi A* **51** 533 (1979)
24. Fewster P F, Andrew N L J *Phys. D Appl. Phys.* **28** A97 (1995)
25. Gartstein E, Mandelbrot M, Mogilyanski D J *Phys. D Appl. Phys.* **34** A57 (2001)
26. Godwod K, Żymierska D, Auleytner J J *Phys. D Appl. Phys.* **36** A148 (2003)
27. Nesterets Ya I, Gureyev T E, Wilkins S W J *Phys. D Appl. Phys.* **38** 4259 (2005)
28. Kato N *Acta Cryst. A* **36** 763 (1980)
29. Бушнев В А *Кристаллография* **34** 279 (1989); Bushuev V A *Sov. Phys. Crystallogr.* **34** 163 (1989)
30. Бушнев В А *ФТТ* **31** (11) 70 (1989); Bushuev V A *Sov. Phys. Solid State* **31** 1877 (1989)
31. Пунегов В И *Кристаллография* **35** 576 (1990); Punegov V I *Sov. Phys. Crystallogr.* **35** 336 (1990)
32. Пунегов В И, Petrakov A P, Tikhonov N A *Phys. Status Solidi A* **122** 449 (1990)
33. Punegov V I *Phys. Status Solidi A* **136** 9 (1993)

34. Punegov V I, Vishnjakov Y V *J. Phys. D Appl. Phys.* **28** A184 (1995)
35. Пунегов В И, Харченко А В *Кристаллография* **42** 1078 (1998); Punegov V I, Kharchenko A V *Cryst. Rep.* **43** 1020 (1998)
36. Pavlov K M, Punegov V I *Acta Cryst. A* **54** 214 (1998)
37. Pavlov K M, Punegov V I *Acta Cryst. A* **56** 227 (2000)
38. Nesterets Y I, Punegov V I *Acta Cryst. A* **56** 540 (2000)
39. Punegov V I, Lomov A A, Shcherbachev K D *Phys. Status Solidi A* **204** 2620 (2007)
40. Punegov V I, Nesterets Y I, Roshchupkin D V *J. Appl. Cryst.* **43** 520 (2010)
41. Holý V *Phys. Status Solidi B* **111** 341 (1982)
42. Holý V *Phys. Status Solidi B* **112** 161 (1982)
43. Dederichs P H *Phys. Rev. B* **4** 1041 (1971)
44. Кривоглаз М А *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка, 1983); Krivoglaz M A *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer, 1996)
45. Бушуев В А *ФТТ* **37** 249 (1995); Bushuev V A *Phys. Solid State* **37** 136 (1995)
46. Takagi S *Acta Cryst.* **15** 1311 (1962)
47. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **38** (11) 53 (2012); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **38** 523 (2012)
48. Пунегов В И *Кристаллография* **58** 652 (2013); Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **58** 663 (2013)
49. Бушуев В А "Угловое распределение интенсивностей динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами в геометриях Лауэ и Брэгга", Деп. ВИНТИ № 486-В88 (М.: ВИНТИ, 1988)
50. Пунегов В И *Кристаллография* **54** 423 (2009); Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **54** 391 (2009)
51. Пунегов В И, Сивков Д В, Кладько В П *Письма в ЖТФ* **37** (8) 41 (2011); Punegov V I, Sivkov D V, Klad'ko V P *Tech. Phys. Lett.* **37** 364 (2011)
52. Пунегов В И, Сивков Д В *Письма в ЖТФ* **39** (21) 60 (2013); Punegov V I, Sivkov D V *Tech. Phys. Lett.* **39** 964 (2013)
53. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **35** (1) 41 (2009); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **35** 20 (2009)
54. Гончарский А В, Колпаков А В, Степанов А А *Обратные задачи рентгеновской дифрактометрии* (Рига: Латвийский ун-т, 1992)
55. Подоров С Г, Пунегов В И, Кусиков В А *ФТТ* **36** 827 (1994); Podorov S G, Punegov V I, Kusikov V A *Phys. Solid State* **36** 454 (1994)
56. Подоров С Г, Пунегов В И *ЖТФ* **69** (3) 39 (1999); Podorov S G, Punegov V I *Tech. Phys.* **44** 299 (1999)
57. Красильников А Г, Пунегов В И, Фалеев Н Н *Письма в ЖТФ* **30** (12) 6 (2004); Krasil'nikov A G, Punegov V I, Faleev N N *Tech. Phys. Lett.* **30** 489 (2004)
58. Чуев М А, Ломов А А, Имамов Р М *Кристаллография* **51** 208 (2006); Chuev M A, Lomov A A, Imamov R M *Crystallogr. Rep.* **51** 178 (2006)
59. Сутырин А Г, Имамов Р М *Кристаллография* **56** 61 (2011); Sutyurin A G, Imamov R M *Crystallogr. Rep.* **56** 57 (2011)
60. Волков Ю О и др. *Кристаллография* **58** 146 (2013); Volkov Yu O et al. *Crystallogr. Rep.* **58** 160 (2013)
61. Бушуев В А, Сергеев А А *Письма в ЖТФ* **25** (3) 1 (1999); Bushuev V A, Sergeev A A *Tech. Phys. Lett.* **25** 83 (1999)
62. Holý V, Pietsch U, Waumbach T *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Berlin: Springer, 1999)
63. Darhuber A A et al. *Europhys. Lett.* **32** 131 (1995)
64. Darhuber A A et al. *Physica B* **227** 11 (1996)
65. Holý V et al. *Phys. Rev. B* **52** 8348 (1995)
66. Holý V et al. *Solid-State Electron.* **40** 373 (1996)
67. Darhuber A A et al. *Phys. Rev. B* **58** 4825 (1998)
68. Baribeau J-M *J. Cryst. Growth* **157** 52 (1995)
69. Darhuber A A et al. *Phys. Rev. B* **55** 15652 (1997)
70. Holý V et al. *Phys. Rev. B* **58** 7934 (1998)
71. Darhuber A A et al. *Physica E* **2** 789 (1998)
72. Bauer G, Darhuber A A, Holý V *Cryst. Res. Technol.* **34** 197 (1999)
73. Darhuber A A et al. *Appl. Phys. Lett.* **70** 955 (1997)
74. Darhuber A A et al. *Thin Solid Films* **306** 198 (1997)
75. Faleev N et al. *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** 818 (1999)
76. Фалеев Н Н и др. *ФТП* **33** 1359 (1999); Faleev N N et al. *Semiconductors* **33** 1229 (1999)
77. Фалеев Н Н и др. *ФТП* **35** 969 (2001); Faleev N N et al. *Semiconductors* **35** 932 (2001)
78. Holý V et al. *Physica B* **283** 65 (2000)
79. Springholz G et al. *Appl. Phys. Lett.* **82** 799 (2003)
80. Lechner R T et al. *Appl. Phys. Lett.* **84** 885 (2004)
81. Diaz B et al. *Nanotechnology* **23** 015604 (2012)
82. Oshima R et al. *J. Cryst. Growth* **301** – **302** 776 (2007)
83. Manna U et al. *J. Appl. Phys.* **111** 033516 (2012)
84. Schmidbauer M et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 066108 (2006)
85. Hanke M et al. *Appl. Phys. Lett.* **94** 203105 (2009)
86. Shoji Y et al. *Physica E* **42** 2768 (2010)
87. Kladko V P et al. *Phys. Status Solidi A* **204** 2567 (2007)
88. Kladko V et al. *Phys. Status Solidi A* **206** 1748 (2009)
89. Novák J et al. *J. Appl. Phys.* **98** 073517 (2005)
90. Grützmacher D et al. *Nano Lett.* **7** 3150 (2007)
91. Holý V et al. *Phys. Rev. B* **79** 035324 (2009)
92. Maranganti R, Sharma P, in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* Vol. 1 (Eds M Rieth, W Schommers) (New York: Am. Sci. Publ., 2005) Ch. 118, p. 1
93. Benabbas T, Androussi Y, Lefebvre A *J. Appl. Phys.* **86** 1945 (1999)
94. Daruka I et al. *Phys. Rev. B* **60** R2150 (1999)
95. Yang M, Xu S J, Wang J *Appl. Phys. Lett.* **92** 083112 (2008)
96. Andreev A D et al. *J. Appl. Phys.* **86** 297 (1999)
97. Nenashev A V, Dvurechenskii A V *J. Appl. Phys.* **107** 064322 (2010)
98. Yang M, Sturm J C, Prevost J *Phys. Rev. B* **56** 1973 (1997)
99. Aqua J-N et al. *Phys. Rep.* **522** 59 (2013)
100. Maia A D B et al. *J. Phys. D Appl. Phys.* **45** 225104 (2012)
101. Пунегов В И, Колосов С И, Павлов К М *Письма в ЖТФ* **32** (18) 65 (2006); Punegov V I, Kolosov S I, Pavlov K M *Tech. Phys. Lett.* **32** 809 (2006)
102. Hesse A et al. *Phys. Rev. B* **66** 085321 (2002)
103. Ulloa J M et al. *Phys. Rev. B* **81** 165305 (2010)
104. Ulloa J M, Bozkurt M, Koenraad P *Solid State Commun.* **149** 1410 (2009)
105. Ulloa J M et al. *J. Appl. Phys.* **112** 074311 (2012)
106. Faleev N N, Honsberg C, Punegov V I *J. Appl. Phys.* **113** 163506 (2013)
107. Zernike F, Prins J A Z. *Phys.* **41** 184 (1927)
108. Hosemann R Z. *Phys.* **128** 465 (1950)
109. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **18** (4) 66 (1992); Punegov V I *Sov. Tech. Phys. Lett.* **18** 120 (1992)
110. Пунегов В И *Изв. Коми НЦ УрО РАН* (1) 11 (2010)
111. Pal D, Towe E, Chen S *Appl. Phys. Lett.* **78** 4133 (2001)
112. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **37** (15) 8 (2011); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **37** 696 (2011)
113. Buljan M et al. *Phys. Rev. B* **79** 035310 (2009)
114. Schmidbauer M, Hanke M, Köhler R *Phys. Rev. B* **71** 115323 (2005)
115. Kegel I et al. *Appl. Phys. Lett.* **74** 2978 (1999)
116. Бушуев В А *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* (9) 29 (2007); Bushuev V A *J. Surf. Invest. X-ray Synchrotron Neutron Tech.* **1** 522 (2007)
117. Eads J L, Millane R P *Acta Cryst. A* **57** 507 (2001)
118. Пунегов В И, Ломов А А *Письма в ЖТФ* **34** (6) 30 (2008); Punegov V I, Lomov A A *Tech. Phys. Lett.* **34** 238 (2008)
119. Pukite P R, Lent C S, Cohen P I *Surf. Sci.* **161** 39 (1985)
120. Kegel I et al. *Phys. Rev. B* **60** 2516 (1999)
121. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **39** (10) 54 (2013); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **39** 475 (2013)
122. Steward E G *Fourier Optics: An Introduction* (Chichester: E. Horwood, 1983)
123. Köhler R et al., in *Semiconductor Nanostructures* (Ed. D Bimberg) (Berlin: Springer, 2008) p. 97
124. Пунегов В И, Нестеретс Я И *Письма в ЖТФ* **20** (16) 62 (1994); Punegov V I, Nesterets Ya I *Tech. Phys. Lett.* **20** 674 (1994)
125. Пунегов В И, Фалеев Н Н *Письма в ЖЭТФ* **92** 483 (2010); Punegov V I, Faleev N N *JETP Lett.* **92** 437 (2010)
126. Пунегов В И, Фалеев Н Н *Изв. РАН Сер. физ.* **75** 42 (2011); Punegov V I, Faleev N N *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **75** 36 (2011)
127. Stepanov S, Forrest R *J. Appl. Cryst.* **41** 958 (2008)
128. Ломов А А и др. *Кристаллография* **55** 196 (2010); Lomov A A et al. *Crystallogr. Rep.* **55** 182 (2010)
129. Пунегов В И, Ломов А А *Письма в ЖТФ* **36** (3) 60 (2010); Punegov V I, Lomov A A *Tech. Phys. Lett.* **36** 122 (2010)



130. Boulle A, Conchon F, Guinebretière R *Acta Cryst. A* **62** 11 (2006)
131. Ida T, Ando M, Toraya H *J. Appl. Cryst.* **33** 1311 (2000)
132. Пунегов В И *ЖТФ* **82** (1) 40 (2012); Punegov V I *Tech. Phys.* **57** 37 (2012)
133. Kaganer V M et al. *Phys. Rev. B* **55** 1793 (1997)
134. Kaganer V M, Sabelfeld K K *Acta Cryst. A* **70** 457 (2014)
135. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **34** (20) 8 (2008); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **34** 864 (2008)
136. Springholz G *Comptes Rendus Physique* **6** 89 (2005)
137. Springholz G, Holý V, in *Lateral Alignment of Epitaxial Quantum Dots* (Ed. O Schmidt) (Berlin: Springer, 2007) p. 247
138. Xie Q et al. *Phys. Rev. Lett.* **75** 2542 (1995)
139. Legrand B et al. *Appl. Phys. Lett.* **74** 2608 (1999)
140. Wasilewski Z R, Fafard S, McCaffrey J P *J. Cryst. Growth* **201**–**202** 1131 (1999)
141. Пунегов В И *ФТТ* **32** 2476 (1990); Punegov V I *Sov. Phys. Solid State* **32** 1438 (1990)
142. Пунегов В И, Павлов К М *Кристаллография* **38** (5) 34 (1993); Punegov V I, Pavlov K M *Crystallogr. Rep.* **38** 602 (1993)
143. Holý V et al. *Superlattices Microstruct.* **12** 25 (1992)
144. Пунегов В И *Кристаллография* **41** 246 (1996); Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **41** 196 (1996)
145. Нестерец Я И, Пунегов В И *Кристаллография* **44** 422 (1999); Nesterets Ya I, Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **44** 382 (1999)
146. Нестерец Я И, Пунегов В И *Кристаллография* **44** 980 (1999); Nesterets Ya I, Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **44** 913 (1999)
147. Нестерец Я И и др. *ЖТФ* **69** (2) 44 (1999); Nesterets Ya I et al. *Tech. Phys.* **44** 171 (1999)
148. Пунегов В И *Металлофизика и новейшие технологии* **32** 33 (2010); Punegov V I *Phys. Met. Adv. Technol.* **5** 33 (2010)
149. Leclere C et al. *J. Appl. Phys.* **113** 034311 (2013)
150. Dhomkar S et al. *Appl. Phys. Lett.* **103** 181905 (2013)
151. Dhomkar S et al. *Solar Energy Mater. Solar Cells* **117** 604 (2013)
152. Rawle J L, Howes P B *Surf. Rev. Lett.* **10** 525 (2003)
153. Rawle J L, Howes P B *Eur. Phys. J. Spec. Topics* **167** 47 (2009)
154. Authier A *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (New York: Oxford Univ. Press, 2001)
155. Кладько В П и др. *Металлофизика и новейшие технологии* **26** 1255 (2004)
156. Mazur Yu I et al. *J. Appl. Phys.* **99** 023517 (2006)
157. De Seta M et al. *J. Appl. Phys.* **102** 043518 (2007)
158. Krost A et al. *Appl. Phys. Lett.* **68** 785 (1996)
159. Krost A et al. *Appl. Phys. Lett.* **75** 2957 (1999)
160. Xu S et al. *Appl. Phys. Lett.* **77** 2130 (2000)
161. Pal D et al. *J. Cryst. Growth* **233** 34 (2001)
162. Pal D, Towe E, Chen S J *Appl. Phys. Lett.* **78** 4133 (2001)
163. Wang H et al. *Chin. Phys. Lett.* **18** 810 (2001)
164. Krishna S et al. *Appl. Phys. Lett.* **80** 3898 (2002)
165. Pashaev E M et al. *Phys. Status Solidi A* **195** 204 (2003)
166. Пашаев Э М и др. *Микроэлектроника* **31** 367 (2002); Pashaev E M et al. *Russ. Microelectron.* **31** 310 (2002)
167. Зайцев А А и др. *Микроэлектроника* **33** 35 (2004); Zaitsev A A et al. *Russ. Microelectron.* **33** 27 (2004)
168. Huang X-Q et al. *J. Cryst. Growth* **270** 364 (2004)
169. Tatebayashi J et al. *J. Phys. D Appl. Phys.* **42** 073002 (2009)
170. Bailey C G et al. *Appl. Phys. Lett.* **95** 203110 (2009)
171. Carrington P J et al. *Physica B* **407** 1493 (2012)
172. Holy V et al. *Phys. Rev. B* **63** 205318 (2001)
173. Darhuber A A et al. *J. Phys. D Appl. Phys.* **28** A195 (1995)
174. Vaumbach T, Lubbert D, Gailhanou M *J. Appl. Phys.* **87** 3744 (2000)
175. Пунегов В И *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* (1) 77 (2002)
176. Колосов С И, Пунегов В И *Кристаллография* **50** 401 (2005); Kolosov S I, Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **50** 375 (2005)
177. Пунегов В И и др. *Письма в ЖТФ* **32** (18) 65 (2006); Punegov V I et al. *Tech. Phys. Lett.* **32** 809 (2006)
178. Пунегов В И, Колосов С И *Кристаллография* **52** 215 (2007); Punegov V I, Kolosov S I *Crystallogr. Rep.* **52** 191 (2007)
179. Пунегов В И и др. *Письма в ЖТФ* **33** (3) 64 (2007); Punegov V I et al. *Tech. Phys. Lett.* **33** 125 (2007)
180. Punegov V I, Kolosov S I, Pavlov K M *Acta Cryst. A* **70** 64 (2014)
181. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **30** (1) 3 (2004); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **30** 1 (2004)
182. Li J H et al. *Phys. Rev. B* **66** 115312 (2002)
183. Li J H et al. *J. Appl. Phys.* **107** 123504 (2010)
184. Wintersberger E et al. *Appl. Phys. Lett.* **96** 131905 (2010)
185. Bazzan M et al. *J. Appl. Phys.* **106** 104121 (2009)
186. Roshchupkin D V, Irzhak D V, Antipov V V *J. Appl. Phys.* **105** 024112 (2009)
187. Ломов А А и др. *Кристаллография* **57** 232 (2012); Lomov A A et al. *Crystallogr. Rep.* **57** 185 (2012)
188. Пунегов В И *Письма в ЖТФ* **38** (11) 53 (2012); Punegov V I *Tech. Phys. Lett.* **38** 523 (2012)
189. Пунегов В И *Кристаллография* **58** 652 (2013); Punegov V I *Crystallogr. Rep.* **58** 663 (2013)
190. Lomov A A et al. *J. Appl. Cryst.* **47** 1614 (2014)

## High-resolution X-ray diffraction in crystalline structures with quantum dots

V.I. Punegov

*Komi Scientific Center, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
ul. Kommunisticheskaya 24, 167982 Syktyvkar, Russian Federation  
E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru*

This review presents the current status of nondestructive high-resolution X-ray diffractometry research on semiconductor structures with quantum dots (QDs). The formalism of the statistical theory of diffraction is used to consider the coherent and diffuse X-ray scattering in crystalline systems with nano-inclusions. The effects of shape, elastic deformations and of lateral and vertical QD correlation on the diffuse scattering angular distribution near reciprocal lattice nodes are considered. Using short-period and multi-component superlattices as an example, the efficiency of data-assisted modeling in the quantitative analysis of nanostructured materials is demonstrated.

**Keywords:** high-resolution X-ray diffraction, coherent and diffuse scattering, superlattice, quantum dots

PACS numbers: 61.05.C–, **68.65.–k**

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201505a.0449

Bibliography — 190 references

Received 9 January 2015, revised 8 February 2015

*Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **185** (5) 449–478 (2015)

*Physics–Uspekhi* **58** (5) (2015)