

де  $\rho$  – густина,  $E$  – константа деформаційного потенціалу,  $v_{\parallel}$  і  $v_{\perp}$  – поздовжня та поперечна компоненти швидкості звуку в кристалі.

Для оптичних фононів:

$$B_0 = 2 \left( \frac{\chi_0}{\chi_x} - 1 \right), \quad (21c)$$

$$F_0 = 1 - 2L + \frac{3}{2}L^2.$$

Для вакансій:

$$B_s = \frac{2ek_F}{3\pi\chi_0 k_0 T}, \quad F_s = \ln(1 + \xi_0) - \xi_0(\xi_0 + 1)^{-1}. \quad (21d)$$

### Висновки

1. Зазначено, що використання наближення часу релаксації до опису явищ переносу в напівпровідниках із непружними механізмами розсіювання є некоректним.

2. Показано, що для вузькощілинних напівпровідників із складними законами дисперсії доцільно застосовувати варіаційні підходи.

3. Подано матричні елементи оператора зіткнень для розрахунку рухливості вироджених напівпровідників.

1. Ленгмюр А. Статистическая физика. – М.: Мир, 1973. – 471 с.
2. Кубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 416 с.
3. Анисим А.И. Введение в теорию полупроводников. – М.: Наука, 1978. – 616 с.
4. Дьячков И.М., Томчук П.М. Явления переноса и флуктуации в полупроводниках. – К.: Наукова думка, 1981. – 320 с.
5. Горюхов П.Н., Шендеровский В.А. Вариационный метод в кинетической теории. – К.: Наукова думка, 1992. – 296 с.
6. Гавришченко Н.П., Горлея П.Н., Паранчич Л.Д. и др. Механизмы рассеяния носителей заряда в твердых растворах Mn, Hg<sub>1-x</sub>Te, Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Se, Zn<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Se. – К.: Препринт Ин-та физики АН УССР, 1982. – 42 с.

*General approach is considered to description of nonequilibrium processes in semiconductors. The analysis of variation approach is done to consideration of the phenomena of transfer on the basis of the kinetic equalization Boltzman. The matrix elements of operator of collisions are resulted for different mechanisms of dispersion.*

**Key words:** *phenomena of transfer, kinetic equalization Boltzman, variation method, mobility of transmitters.*

УДК 538.975, 539.26, 669-17

ББК 22.371.21

*І.П. Яремій, В.І. Кравець, В.М. Пулипів, С.І. Яремій*

### СТРУКТУРНА ДІАГНОСТИКА ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРІВ ІОННО-ІМПЛАНТОВАНИХ МОНОКРИСТАЛІВ ТА ПЛІВОК ЗІ СТРУКТУРОЮ ГРАНАТУ

*Проведено порівняльний аналіз можливостей визначення параметрів порушеного шару на основі різних теоретичних підходів (кінематичної, динамічної та статистичної динамічної теорій розсіювання рентгенівських променів), а також встановлено критерії їх використання. Удосконалена методика обчислення профілів деформації та оцінки ступеня однозначності їх визначення.*

**Ключові слова:** *ферит-гранатові плівки, профілі деформації, розсіювання рентгенівських променів, кінематична та динамічна теорії.*

**Вступ.** Властивості функціональних мікроелектронних пристроїв у значній мірі визначаються тензором напруг, наведених у приповерхневому шарі монокристала чи плівки при легуванні, дифузійному насиченні, іонній імплантації або термообробці, тому дослідження просторового розподілу структурних характеристик у вказаному шарі є однією з важливих проблем фізики твердого тіла.

У даній роботі представлено методику отримання інформації про розподіл змін міжплощинної відстані за глибиною приповерхневого шару іонно-опромінених монокристалічних гетероструктур – магнітних ферит-гранатових плівок (ФГП).

На кривих дифракційного відбивання (КДВ), отриманих від іонно-імплантованих ФГП, спостерігаються осциляції інтенсивності розсіяного рентгенівського проміння у вигляді додаткових піків та напливів, що пояснюється дифракцією рентгенівського пучка на деформованому приповерхневному шарі. Аналіз додаткової осциляційної структури дозволяє отримати інформацію про стан іонно-імплантованого шару плівки і, відповідно, про кількість, фізичні характеристики та глибинний розподіл радіаційних дефектів, що зумовлюють зміни в міжплощинній відстані приповерхневого шару кристала. Хоча структурні зміни в приповерхневному шарі однозначно впливають на вигляд КДВ, вирішення оберненої задачі, тобто визначення структури приповерхневих шарів за даними КДВ, наштовхується на значні труднощі, оскільки для однозначного опису структури приповерхневого шару за КДВ необхідно знати комплексну амплітуду відбивання в усьому кутовому інтервалі, а експериментально вимірюваний коефіцієнт є лише модулем цієї величини.

**Розсіяння рентгенівських променів реальними кристалами.** У випадку достатньо досконалих монокристалів, якими є досліджувані ФГП, для коректного опису дифракції необхідним є застосування динамічної теорії розсіювання рентгенівських променів. У своїх обчисленнях ми використовували одержаний Коном та Ковальчуком розв'язок системи рівнянь Такагі для кристала, в якому спотворення є функцією тільки однієї координати глибини, відрховуваної вздовж внутрішньої нормалі до поверхні [1]. Характеристиками структури кристала є усереднена за площиною, паралельною до поверхні кристала, міжплощинна відстань і фактор Дебая – Валлера  $W$  ( $E = e^{-W}$ ), який характеризує хаотичні зміщення атомів усередині елементарної комірки.

Коли вказані величини є функціями глибини, весь порушений шар ділиться на підшари, у межах кожного з яких вони вважаються сталими. Амплітуда інтенсивності дифрагованої хвилі обчислюється за допомогою рекурентних співвідношень [1]:

$$A_n(z, \theta) = \frac{x_1 - x_2 x_3 e^{-2\sigma(L-z)}}{1 - x_3 e^{-2\sigma(L-z)}},$$

де  $L$  – товщина порушеного шару,  $z$  – глибина від поверхні кристала,

$$x_{1,2} = -\frac{1}{\bar{C}e^{-W}} \left[ b \pm \sqrt{b^2 - \bar{C}^2 e^{-2W}} \right], \quad x_3 = \frac{x_1 - A_{n-1}}{x_2 - A_{n-1}}, \quad \sigma = \frac{1}{iL_{ex}} \sqrt{b^2 - \bar{C}^2 e^{-2W}}, \quad b = y - iy_0 - Y,$$

$$y = -\sqrt{\beta} \frac{\sin 2\theta_B}{|\chi_{hr}|} \Delta\theta, \quad y_0 = \frac{\chi_{ex}}{|\chi_{hr}|} \frac{1+\beta}{2\sqrt{\beta}}, \quad \beta = \frac{\gamma_0}{|\gamma_n|}, \quad Y(z) = \pi \frac{L_{ex}}{d} \frac{\Delta d(z')}{d},$$

$$L_{ex} = \lambda \frac{\sqrt{|\gamma_0 \gamma_n|}}{\pi |\chi_{hr}|} - \text{довжина екстинкції},$$

$\Delta d/d$  – відносна зміна міжплощинної відстані,  $z' = L - z$ ,

$$\bar{C} = C \frac{\sqrt{\chi_h \chi_h}}{|\chi_{hr}|}, \quad C = \begin{cases} 1, & \sigma - \text{поляризація}, \\ |\cos 2\theta_B|, & \pi - \text{поляризація}. \end{cases}$$

При цьому, для кожного наступного підшару використовується амплітуда інтенсивності дифрагованої хвилі від підкладки, плівки та всіх нижчих підшарів. Амплітуду підкладки знаходять із рівняння:

$$A_0(\theta) = -\left[ y - iy_0 \pm \sqrt{(y - iy_0)^2 - \bar{C}^2} \right] / \bar{C}.$$

Одним із напрямків розвитку динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів при одночасній наявності в кристалі різних типів дефектів є статистична динамічна теорія [2,3]. У даній теорії вплив дефектів різного типу статистично усереднюється і в загальному випадку характеризується трьома величинами: зміною міжплощинної відстані, статичним фактором Дебая – Валлера  $E$  та кореляційною довжиною  $\tau$ . Концентрація дефектів (характеризується  $E$ )

головним чином впливає на об'ємну щільність випадкових відхилень, а розміри дефектів (характеризуються  $\tau$ ) – на величину (амплітуду) цих відхилень.

У зв'язку з тим, що обчислення теоретичних КДВ, за динамічною теорією, при використанні деяких методів мінімізації, які потребують багатократного порівняння теоретичної та експериментальної КДВ, вимагає значних затрат часу, для прискорення обчислень можна використовувати напівкінематичне наближення, тобто відбивання від підкладки та ідеальної частини плівки обчислювалося за динамічною теорією, а від порушеного шару – за кінематичною. На основі кінематичної теорії амплітуду інтенсивності дифрагованої від тонкого порушеного шару хвилі  $A(\Delta\theta)$  можна обчислювати як суму амплітуд хвиль, відбитих від кожної з атомних площин:

$$A(\Delta\theta) = C \sum_{m=1}^N \exp(i\Phi_m), \quad \Phi_m = \frac{4\pi}{\lambda} \sum_{m=1}^{m-1} \frac{d_m}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \sin(\theta_B + \Delta\theta),$$

де  $C$  – амплітудний фактор, приймається за постійну величину,  $\Phi_m$  – різниця фаз між хвилями, відбитими від першої та  $m$ -ї атомних площин,  $h, k, l$  – індекси Міллера,  $d_m$  – міжплощинна відстань, яка змінюється з глибиною.

При обчисленнях (як і при використанні рівняння Такагі) увесь порушений шар розділявся на підшари, у кожному з яких міжплощинна відстань уважалася сталою.

Експериментально вимірюваний коефіцієнт відбивання зразка зв'язаний з теоретично обчисленою амплітудою співвідношенням:

$$I(y) = \frac{I^o(\Delta\theta) + I^* (\Delta\theta) |\cos 2\theta_B|}{1 + |\cos 2\theta_B|},$$

$$I^{o,*}(\Delta\theta) = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| |A^{o,*}(\Delta\theta)|^2.$$

Для порівняння експериментальної і теоретичної КДВ, робиться згортка обчисленої теоретичної КДВ з апаратною функцією спектрометра.

Приклади кривих дифракційного відбивання, обчислених за допомогою кінематичної, динамічної та статистичної динамічної теорій для модельних профілів (рис.1), представлені на рис. 2, 3.

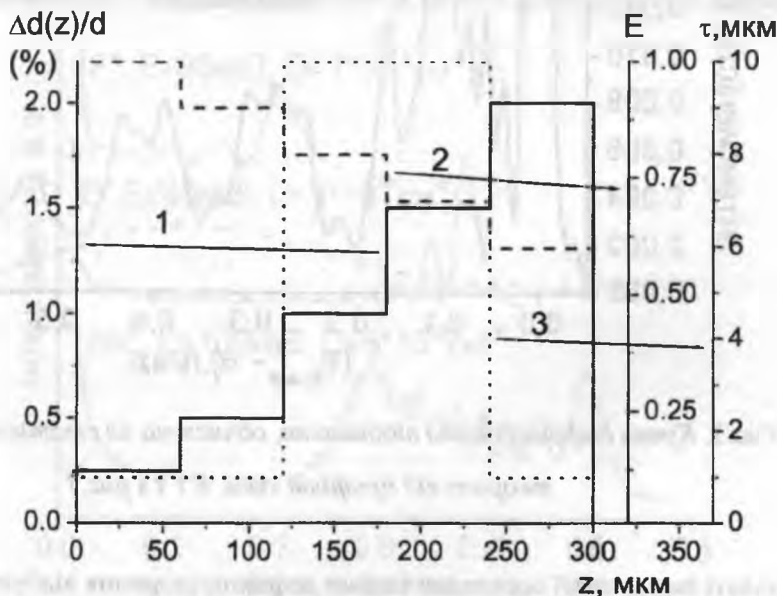


Рис.1. Профілі деформації  $\Delta d/d(z)$  – 1, статичного фактора Дебая – Валлера  $E(z)$  – 2 та кореляційної довжини Като  $\tau(z)$  – 3

Методика обчислення профілів деформації при їх заданні функцією наперед визначеного типу. При імплантації середніми та легкими іонами (наприклад  $Ne^+$ ,  $F^+$ ,  $O^+$ ,  $N^+$ ,  $B^+$ ) при невеликих дозах профіль деформації пропорційний профілю дефектів, який, у свою чергу, пропорційний профілю енергетичних утрат іона-імплантанта [4].

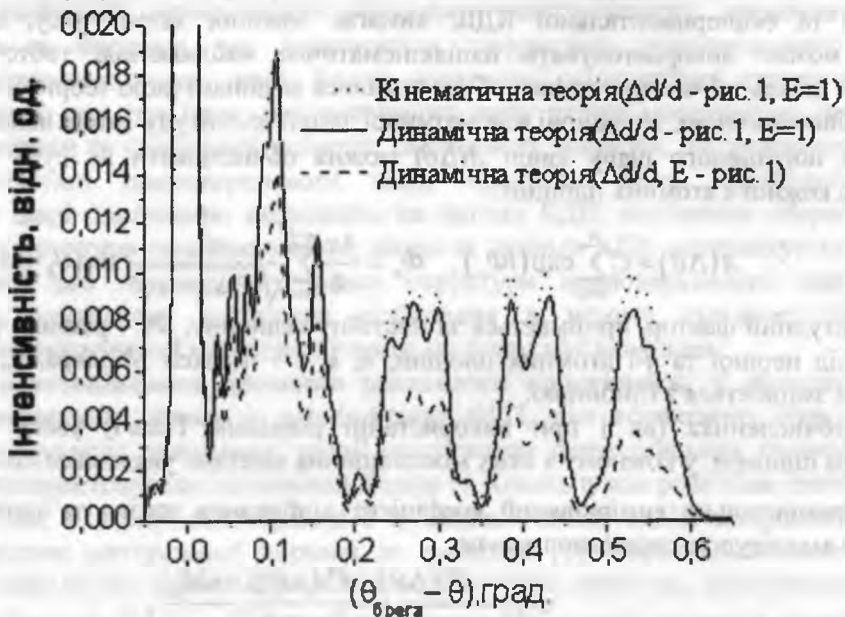


Рис. 2. КДВ, обчислені за різними теоріями

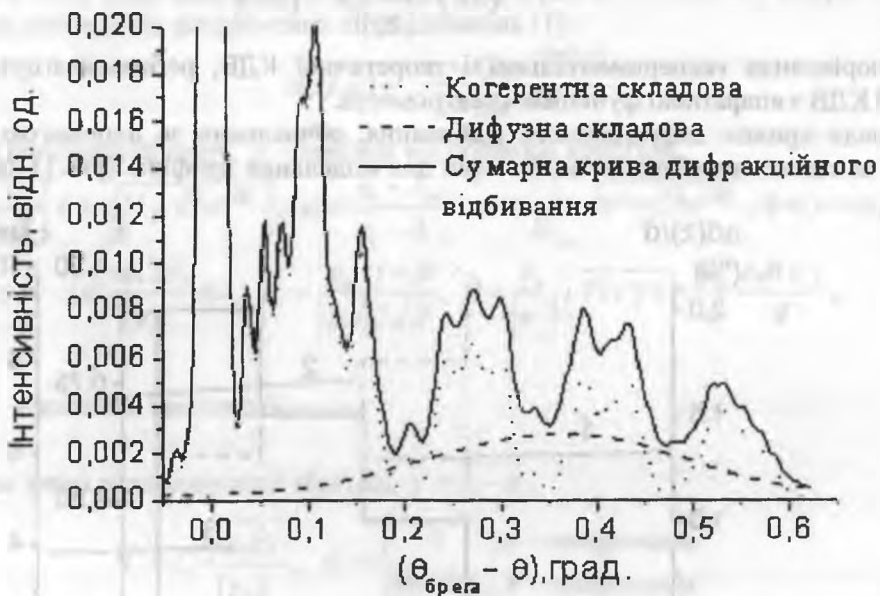


Рис. 3. Крива дифракційного відбивання, обчислена за статистичною динамічною теорією від профілів  $\Delta d/d$ ,  $E$  і  $\tau$  з рис. 1

У результаті імплантації середніми іонами дефектоутворення відбувається в основному за рахунок зіткнень іона-імплантанта чи вибитих іонів з ядрами мішені. Профіль дефектів у цьому випадку можна описати асиметричною гаусіаною, і, відповідно, профіль деформації також можна задавати у вигляді асиметричної гаусіани [4]:

$$D = \begin{cases} D_{\max} \exp[-(z - R_p)^2 / \sigma_1^2], & \text{якщо } z < R_p, \\ D_{\max} \exp[-(z - R_p)^2 / \sigma_2^2], & \text{якщо } z \geq R_p, \end{cases}$$

де  $D = \frac{\Delta d}{d}$ ,  $z$  – відстань, яка відраховується від поверхні в глибину кристала,  $R_p$  – точка зшивки гаусіан,  $\sigma_1$  і  $\sigma_2$  – параметри гаусіан, які характеризують їх ширину на піввисоті.

При імплантації іонами  $B^+$  у [5] показано, що профіль дефектів має дві складові: дефекти, які утворюються внаслідок зіткнень з ядрами мішені та дефекти, що є результатом збудження функціональної підсистеми. Зважаючи на те, що при невеликих дозах профіль деформації пропорційний профілю дефектів, який можна описати сумою асиметричної та спадної гаусіан, профіль деформації також вибирався у вигляді суми асиметричної та спадної гаусіан [6]:

$$D = \begin{cases} D_{\max}^A \exp[-(z - R_p^A)^2 / \sigma_1^{A2}], & \text{якщо } z < R_p^A \\ D_{\max}^E \exp[-(z - R_p^E)^2 / \sigma_2^{E2}], & \text{якщо } z \geq R_p^A \end{cases} + D_{\max}^E e^{-(z - R_p^E)^2 / \sigma_2^{E2}}$$

Перший доданок, асиметрична гаусіана, – складова профілю, пов'язана з ядерними втратами. Другий доданок – складова профілю, пов'язана з електронними втратами, які з глибиною монотонно спадають, тобто  $R_p^E < 0$ . Верхні індекси  $A$  і  $E$  означають, що вказані параметри характеризують складові профілю, пов'язані з ядерними та електронними енергетичними втратами відповідно.

**Оцінка однозначності визначення профілів деформації при їх функціональному заданні.** За результатами огляду публікацій (напр. [7, 8]), в яких аналізується проблема неоднозначності визначення профілів деформації, можна зробити висновок, що однією з головних причин указаної неоднозначності є змінність змінного по товщині порушеного шару ступеня аморфізації.

Для визначення, яким чином розсіяння рентгенівських променів на радіаційних дефектах впливає на інтенсивність додаткової осциляційної структури, яка несе інформацію про приповерхневий імплантований шар, було проведено зйомки на трикристальному дифрактометрі. Як виявилось, на трикристальній дифрактограмі, отриманій від іонно-опроміненого монокристала  $111 (Ne^+, 80 \text{ кеВ}, D = 3 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2})$ , присутні тільки два піки – брегівський головний та перший порядок, які отримуються як згортка функцій монохроматора та досліджуваного кристала, тобто інтенсивного дифузного розсіювання в даній ділянці не спостерігається, що дозволяє не враховувати його при розрахунку профілів деформації за даними двокристальної дифрактометрії.

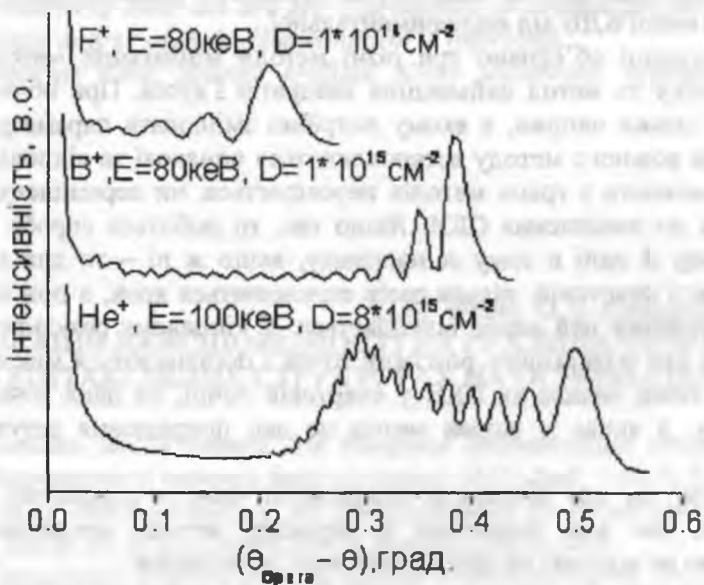


Рис. 4. Фрагменти експериментальних КДВ від приповерхневого шару ФГП, імплантованих іонами  $He^+$ ,  $B^+$  та  $F^+$



Крім того, наявність дефектів, згідно зі статистичною динамічною теорією розсіяння рентгенівських променів [9], приводить до підняття лінії фону додаткової осциляційної структури. У зразках, імплантованих іонами  $B^+$ ,  $N^+$ ,  $Ne^+$ ,  $O^+$ ,  $F^+$ , узказане підняття не спостерігається (рис.4), тому можна використовувати динамічну теорію у формі рівнянь Такагі [1] чи статистичну динамічну теорію при  $\tau=0$ , де  $\tau$  – кореляційна довжина. На відміну від узказаних зразків, підняття лінії фону додаткової осциляційної структури спостерігалось в зразках, імплантованих іонами  $He^+$  (рис.4).

У наших дослідженнях однозначність та точність обчислення профілів деформації при їх заданні у вигляді функції наперед визначеного типу оцінювалися за допомогою методики [10], суть якої полягає в тому, що потрібно розглядати всі локальні мінімуми функції середнього квадратичного відхилення (СКВ). Пошук узказаних мінімумів здійснюється перебором усіх можливих профілів на кожному параметрі функції, якою задається профіль, із подальшою їх перевіркою одним із градієнтних методів. Кожен виявлений таким чином мінімум функції СКВ визначає один з імовірних типів профілів, а конкретний тип профілю треба вибирати з фізичних міркувань, можливості “хорошого” наближення чи додаткового експерименту. Результати модельних обчислень показали, що при максимальних відносних деформаціях, більших 0,3% (для  $SiK_{\alpha 1}$  випромінювання), кількість мінімумів функції СКВ, а отже, і ступінь неоднозначності у визначенні профілів деформації суттєво зменшуються.

З метою економії машинного часу перебір можна робити з використанням напівкінематичного наближення, а остаточне уточнення – за динамічною теорією. Кількість мінімумів, знайдених за кінематичною теорією, є більшою, ніж за динамічною, за рахунок того, що при зміні підшарів місцями результат не міняється, оскільки в даному методі розрахунку обчислюється звичайна сума амплітуд від кожного з підшарів. Коли фактор Дебая – Валлера не рівний нулю, його зміна за глибиною також описується деякою функцією, параметри якої також включаються в перебір.

Методика обчислення профілів деформації при їх нефункціональному заданні. Коли вигляд профілю деформації важко передбачити (за наявності значних ростових напруг чи імплантації важкими іонами, наприклад  $As^+$ ), для обчислення профілів деформації використовувалася методика, яка не передбачає наперед визначеного функціонального задання профілю. Суть узказаної методики полягає в автоматизованій мінімізації нев'язки розрахованої КДВ з експериментальною [11]. Порушений шар розбивається на деяку кількість підшарів товщинами  $L_i$ , у кожному з яких відносна деформація  $D_i$  вважається сталою. Цілеспрямовано змінюючи товщину підшарів та відносну деформацію, мінімізувалося середнє квадратичне відхилення теоретичної КДВ від експериментальної.

У даній методиці об'єднано три різні методи мінімізації: метод конфігурацій, метод найшвидшого спуску та метод найменших квадратів Гауса. При обчисленні кожним із них запам'ятовується тільки напрям, в якому потрібно змінювати параметри  $L_i$  та  $D_i$ , а довжини векторів зміни для кожного методу встановлюються однакові та відповідні до заданого кроку. Після цього для кожного з трьох методів перевіряється, чи переміщення точки на знайдений вектор приводить до зменшення СКВ. Якщо так, то робиться спроба покращити результат, переміщуючи точку й далі в тому ж напрямку, якщо ж ні – то для пошуку точки  $(L_i, D_i)$  з меншим СКВ, ніж у стартовій, кілька разів половиниться крок, а при недосягненні успіху на даному етапі розрахунку цей метод відкидається. У кінцевому результаті знаходяться три або менше придатних для подальшого розгляду точок і порівнюються між собою. Якщо значення СКВ у вибраній точці менше за СКВ у стартовій точці, то дана точка стає стартовою для наступного циклу, а якщо ж жоден метод не дав покращення результату, то обчислення припиняються.

Зважаючи на те, що більшість машинного часу в основному використовується на обчислення СКВ, яке вже визначене в першому методі, введення додаткових методів розрахунку суттєво не впливає на збільшення часу обчислення.

У конкретних випадках на вигляд профілів можна накладати певні умови (спадання, один максимум), що дозволяє мінімізувати неоднозначність, яка може виникати при обчисленні профілів деформації. Однозначність визначення таким чином профілів деформації можна оцінити, запускаючи програму, яка працює за даною методикою, з різних стартових профілів.

За результатами роботи можна зробити певні висновки.

Вибір теорії, за якою обчислюються параметри порушеного шару, залежить від форми даної фону додаткової осциляційної структури. При обчисленні профілів величин, які характеризують порушений шар, потрібно розглядати всі локальні мінімуми функції СКВ, а подальший відбір здійснювати з фізичних міркувань, додаткового експерименту чи можливості “хорошого” наближення експериментальної КДВ теоретичною. Для економії часу отримувати дані мінімумів можна здійснювати за кінематичною теорією, а уточнення проводити за динамічною.

1. Ковальчук М.В., Кон В.Г., Лобанович Э.Ф. Измерение малых деформаций в тонких эпитаксиальных пленках кремния методом фотоэлектронной эмиссии, возбужденной стоячей рентгеновской волной // ФТТ. – 1985. – Т.27. – №11. – С.3379–3387.
2. Kato N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. I. General formalism // Acta crystallogr. A. – 1980. – V.36. – №7. – P.763–769.
3. Лушнев В.А. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах с учетом углового распределения интенсивностей // Кристаллография. – 1989. – Т.34. – Вып.2. – С.279–287.
4. Valentino G., Lagomarsino S., Milani E., Gerard P., Tucciarone A. Reconstruction mechanism in ion implanted yttrium iron garnet films // J. Appl. Phys. – 1988. – V.63. – №8. – P.2751–2755.
5. Сметирійчук Б.К., Федорів В.Д., Кошобинський В.О., Яремій І.П. Механізми дефектоутворення в монокристалічних плівках залізо-ітрієвого гранату при іонній імплантації легкими іонами // Фізика і хімія твердого тіла. – 2003. – Т.4. – №1. – С.112–117.
6. Яремій І.П. Рентгенодифрактометричне дослідження приповерхневих шарів монокристалічних плівок ЗІГ, імплантованих іонами  $B^+$  // Фізика і хімія твердого тіла. – 2003. – Т.4. – №3. – С.451–455.
7. Афиногеев А.М., Фанченко С.С. О восстановлении профилей нарушенных тонких приповерхностных слоев по рентгенодифракционным данным // Доклады Академии наук СССР. – 1986. – Т.287. – №6. – С.1395–1399.
8. Лушнев В.И. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на непрерывно деформированных по толщине приповерхностных слоях монокристаллов с учетом статистики микродефектов // Поверхность. – 1991. – №3. – С.45–49.
9. Лушнев В.И. Длина корреляции в статистической теории рентгеновской дифракции на одномерно искаженных кристаллах с дефектами. Модель дискретно-слоистой структуры // Кристаллография. – 1996. – Т.41. – №1. – С.23–30.
10. Сметирійчук Б.К., Яремій І.П., Кравець В.І. та ін. Про можливість однозначного визначення профілів відносної зміни площинної відстані в приповерхневих шарах монокристалів за даними двокристалльної рентгеновської дифрактометрії // Фізика і хімія твердого тіла. – 2002. – Т.3. – №1. – С.148–153.
11. Кравець В.І., Пилипів В.М. Моделювання профілів деформації поверхневих шарів монокристалів // Вісник Національного університету “Львівська політехніка”. Прикладна математика. – 2000. – №411. – С.192–196.

*The comparative analysis of possibilities of parameters determination of the is conducted on the basis of different theoretical approaches (kinematic, dynamic and statistical dynamic theories of X rays scattering). The criteria of their use are set. The method of strange profiles calculation and estimation of one-valuedness degree of their determination is improved.*

**Key words:** ferrit-garnet films, strange profiles, X-ray scattering, kinematic and dynamic theories.

УДК 621.315.592

ББК 22.371.26

Д.М. Фреїк, О.Л. Соколов, Ю.В. Кланічка

### ВПЛИВ ДИСЛОКАЦІЙ НЕВІДПОВІДНОСТІ НА РУХЛИВІСТЬ НОСІВ ЗАРЯДУ У ДВОШАРОВИХ ЕПІТАКСІЙНИХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК $A^{IV}V^{VI}$

*Розраховано рухливість носіїв заряду для бінарних епітаксієвих структур  $PbTe/PbS$ ,  $PbTe/PbSe$ ,  $PbTe/EuTe$ , вироцнених із парової фази на сколах (111)  $BaF_2$  і (001)  $KCl$ , у притуцненні рухливування на дислокаціях невідповідності, що утворюються на гетеромежах. Досліджено залежність рухливості носіїв від їх концентрації та густини дислокацій.*

**Ключові слова:** двошарова структура, дислокації невідповідності, просторовий заряд, рухливування носіїв.

**Вступ.** Епітаксієні плівки на основі сполук  $A^{IV}V^{VI}$  інтенсивно вивчаються з можливістю їх використання в приладових структурах, що функціонують в інфрачервоній ділянці оптичного спектра [1, 2]. Зауважимо, що параметри тонкопліткових активних елементів у