

Internet Electronic Journal

Nanociencia et Moletrónica

Mayo 2005, Vol. 3; No. 1, págs. 530-537 (2005)

Caracterización de Heteroestructuras Nanométricas Amorfas de Si/Ge por Difracción de Rayos X

E. L. Zeballos-Velásquez

Facultad de Ciencias Naturales y Matemática, Universidad Nacional del Callao, Callao, Perú

E-mail: elzeve@hotmail.com

recibido: diciembre 2004

revisado: enero 2005

publicado: mayo 2005

Citation of the article:

E. L. Zeballos-Velásquez. Caracterización de Heteroestructuras Nanométricas Amorfas de Si/Ge por Difracción de Rayos X Internet Electrón. J. Nanocs. Moletrón. 2005, 3(1),530-537

<http://www.revista-nanociencia.ece.buap.mx>

Copyright © 2005 BUAP

Caracterización de Heteroestructuras Nanométricas Amorfas de Si/Ge por Difracción de Rayos X

E. L. Zeballos-Velásquez

Facultad de Ciencias Naturales y Matemática, Universidad Nacional del Callao, Callao, Perú
E-mail: elzeve@hotmail.com

recibido: diciembre 2004

revisado: enero 2005

publicado: mayo 2005

Internet Electron. J. Nanocs. Moletrón. 2005, 3(1), pags. 530-537

Resumen

Heteroestructuras de silicio/germanio amorfo hidrogenado (a-Si:H/a-Ge:H), preparadas por la técnica PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition), fueron analizadas por Difracción de Rayos X a Bajo Ángulo. Parámetros estructurales de dimensiones nanométricas como el período, el espesor de las capas individuales y el ancho de la interface, fueron determinados por modelamiento de la reflectividad; también fueron calculadas las constantes ópticas de los materiales. Estos modelos, elaborados según la teoría dinámica de difracción, incluyen una interface formada por la mezcla de materiales, su rugosidad y una variación aleatoria del espesor de las capas. Asimismo fueron evaluados los efectos del haz directo y del background en las intensidades.

Palabras llave: Difracción de rayos X; heteroestructuras; semiconductores amorfos.

1 Introducción

Heteroestructuras semiconductoras preparadas con materiales amorfos por diversas técnicas de deposición, entre ellas PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition), han sido muy investigadas [1-3]. En particular, sistemas de silicio y germanio (a-Si:H/a-Ge:H) son usados en la fabricación de dispositivos opto-electrónicos, celdas solares, entre otras aplicaciones [4-6]. El estudio de la calidad estructural de estos sistemas es importante y la Difracción de Rayos X a Bajo Ángulo (SAXRD) ha sido extensamente usada con este propósito.

En este trabajo presentamos la simulación de la reflectividad experimental de un conjunto de heteroestructuras de a-Si:H/a-Ge:H, aplicando modelos descritos en trabajo anterior [7]. Las simulaciones fueron complementadas con procesos de refinamiento para determinar los parámetros de los componentes amorfos tales como el espesor de las capas y las constantes ópticas de los materiales.

2 Experimental

Los detalles del proceso de deposición de las muestras son descritos en trabajos anteriores [8,9]. Los materiales fueron depositados alternadamente sobre sustrato de vidrio. Para las medidas SAXRD utilizamos un difractómetro de rayos X convencional con geometría θ - 2θ y radiación monocromatizada de Cu K_α ($\lambda = 0.15418$ nm). Usamos el modo de medida por paso, en el rango angular $0.2^\circ - 6.0^\circ$.

3 Resultados y discusión

Presentamos las simulaciones de la reflectividad según los modelos teóricos basados en los coeficientes Fresnel incluyendo absorción, adecuados a los casos reales de nuestros resultados SAXRD. El índice de refracción η de los materiales componentes del sistema está dado por

$$\eta = 1 - \delta - i\beta \quad (1)$$

donde δ y β son, respectivamente, la parte real e imaginaria del índice de refracción, que son calculados por la relación [10-12]:

$$\delta = \frac{Nr_e\lambda^2}{2\pi}(Z + \Delta f') \quad \text{y} \quad \beta = \frac{Nr_e\lambda^2}{2\pi}(\Delta f'') = \frac{\mu\lambda}{4\pi} \quad (2)$$

donde λ es la longitud de onda, μ es el coeficiente de absorción lineal, Z es el número atómico, $\Delta f'$ y $\Delta f''$ son la parte real e imaginaria, respectivamente, de la corrección de dispersión para cada material.

Para una mezcla de materiales, como es el caso de la interface de las muestras estudiadas, las constantes $\bar{\delta}$ y $\bar{\beta}$ son calculadas de las relaciones

$$\bar{\delta} = \frac{\lambda}{4\pi} \bar{\rho} \sum g_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \left(\frac{Z_i + \Delta f'_i}{\Delta f''_i}\right) \quad \text{y} \quad \bar{\beta} = \frac{\lambda}{4\pi} \bar{\rho} \sum g_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \quad (3)$$

donde $\bar{\rho}$ es la densidad de la mezcla y g_i es la fracción en peso de los materiales, cuyo coeficiente de absorción másico es $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$ [13].

El período es obtenido de la relación de Bragg corregida por refracción [2,14,15], para $\beta < \delta \ll 1$:

$$m\lambda = 2d \left[1 - \frac{\delta}{(\sin \theta_{obs})^2} \right] (\sin \theta_{obs}) \quad (4)$$

donde

$$\delta = \frac{\delta_A d_A + \delta_B d_B}{d_A + d_B} \quad (5)$$

δ_A, δ_B son las constants ópticas relativas a los materiales; d_A, d_B los espesores de las capas individuales.

Las intensidades de las reflexiones de Bragg producidas por estas heteroestructuras son afectadas por imperfecciones estructurales que dan lugar a diferencias entre los resultados experimentales y los modelos teóricos de estos sistemas. Variación en el espesor de las capas e interfaces no apruptas y rugosas son las imperfecciones más comunes presentes en las heteroestructuras. La rugosidad del substrato y las condiciones de deposición pueden causar rugosidad en la superficie de las capas, afectando la estructura del sistema; esto provoca dispersión de los rayos X y la consecuente disminución de la intensidad de las reflexiones. El modelamiento de la reflectividad de estos sistemas incluye los efectos antes mencionados, agregándose a esto el efecto producido por las intensidades del haz directo y del "background".

Todos estos efectos son evaluados separadamente para determinar su influencia en la reflectividad. La interface es considerada como una capa compuesta por la mezcla de los materiales, con un espesor d_{int} variable dentro de ciertos límites. En los cálculos, el período es considerado según la secuencia *a-Si:H/interface/ a-Ge:H / interface*; la rugosidad es simulada según una función gaussiana y la variación del espesor de cada capa es aleatoria.

La rugosidad media obtenida varía de 0.9 nm a 1.2 nm en tanto que la variación aleatoria del espesor de las capas oscila entre 0.4 nm y 0.6 nm. Los resultados son presentados en las tablas 1 a 4 y en las figuras 1 a 3.

MUESTRA	$d_{Si} (nm)$	$d_{Ge} (nm)$	$d_{int} (nm)$	$d (nm)$
M1	13.2	9.4	1.6	24.2
M2	11.2	7.0	1.6	19.8
M3	5.8	2.9	1.6	10.3

Tabla 1. Espesor de las capas individuales, interface y período de heteroestructuras de a-Si:H/a-Ge:H.

MUESTRA	$\delta_{Si} (10^{-6})$	$\delta_{Ge} (10^{-6})$	$\delta_{int} (10^{-6})$
M1	7.10	9.66	7.22
M2	7.38	9.87	8.26
M3	5.14	9.82	7.35

Tabla 2. Componente real de las constantes ópticas de los materiales amorfos obtenida del refinamiento de los datos experimentales de rayos X.

MUESTRA	$\beta_{Si} (10^{-7})$	$\beta_{Ge} (10^{-7})$	$\beta_{int} (10^{-7})$
M1	9.50	9.98	9.87
M2	5.78	9.84	6.37
M3	9.75	9.98	9.87

Tabla 3. Componente imaginaria de las constantes ópticas de los materiales amorfos obtenida del refinamiento de los datos experimentales de rayos X.

MUESTRA	r (nm)	$\pm \Delta d$ (nm)
M1	1.1	0.6
M2	1.2	0.4
M3	0.9	0.5

Tabla 4. Valores estimados de la rugosidad media (r) y la variación del período (Δd) obtenidos del refinamiento de los datos experimentales de rayos X.

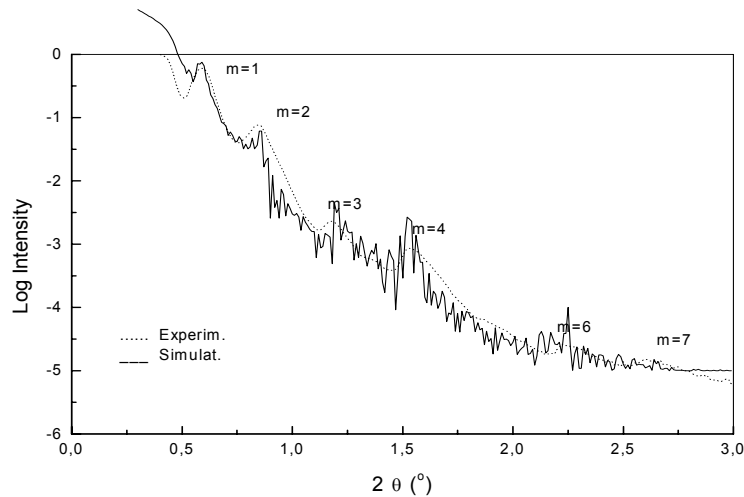


Figura 1. Modelamiento de la reflectividad experimental de la muestra M1.

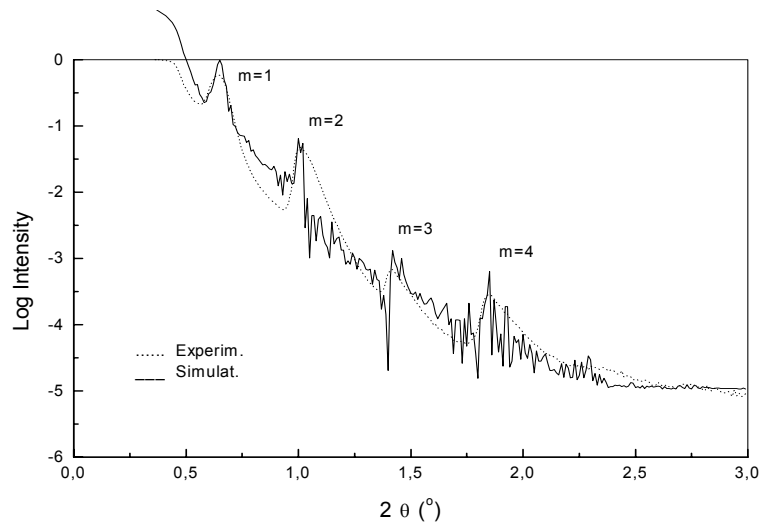


Figura 2. Modelamiento de la reflectividad experimental de la muestra M2.

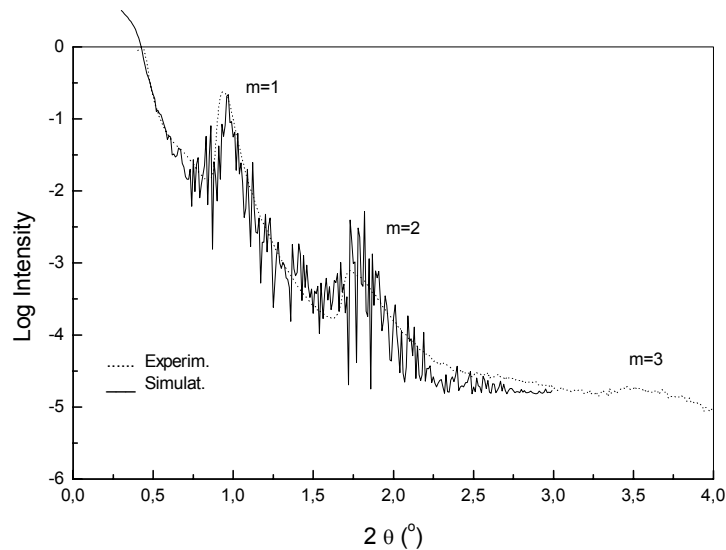


Figura 3. Modelamiento de la reflectividad experimental de la muestra M3.

Luego de la evaluación de los resultados verificamos que la reflectividad experimental es reproducida satisfactoriamente por los modelos propuestos, esto debido a la incorporación de los diversos efectos que contribuyen a la reflectividad. La rugosidad media de las muestras crecidas sobre sustrato de vidrio es mayor que aquella de 0.5 nm de muestras crecidas sobre sustrato de Si cristalino [7], resultado que demuestra una vez más la influencia del sustrato sobre la calidad de la heteroestructura. La interface considerada como una tercera capa en la estructura y formada por la mezcla de materiales influye en la intensidad relativa de los picos de difracción. La variación aleatoria del espesor de las capas individuales produce un aumento en el ancho de pico y disminución de la intensidad. Asimismo, el acuerdo entre los datos experimentales y teóricos es considerablemente mejorado al incluir los efectos del haz directo y del background, así como los valores de las constantes ópticas de los materiales amorfos.

4 Conclusiones

Los resultados de este trabajo confirman la necesidad de considerar diferentes inhomogeneidades estructurales, tales como mezcla de materiales, rugosidad y variaciones en la periodicidad, a fin de describir adecuadamente las heteroestructuras; la rugosidad es independiente del período y produce una disminución de la intensidad. El modelamiento de la reflectividad también evidenció la presencia de efectos causados por el haz directo y el background, tanto como la influencia de los valores de las constantes ópticas de los materiales amorfos.

5 Referencias

- [1] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14** (1970) 61.
- [2] B. Abeles and T. Tiedje, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 2003.
- [3] H. Munekata and H. Kukimoto, Jpn. J. Appl. Phys. **22** (1983) L544.
- [4] J. Kakalios, H. Fritzche, N. Ibaraki and S.R. Ovshinsky, J. Non-Cryst. Solids **66** (1984) 339.
- [5] T. Tiedje, B. Abeles, P.D. Persans, B.G. Brooks and G.S. Cody, J. Non-Cryst. Solids **66** (1984) 345.
- [6] B. Abeles, T. Tiedje, K.S. Liang, H.W. Deckman, H.C. Stasiewski, J.C. Scalon and P.M. Eisenberger, J. Non-Cryst. Solids **66** (1984) 351.
- [7] E. L. Zeballos-Velásquez, Internet Electrón. J. Nanocs. Moletrón. 2004, 2(2), 310-324
- [8] P.V. Santos, M. Hundhausen and L. Ley, Phys. Rev. **B33** (1986) 1516.
- [9] P.D. Persans, A.F. Ruppert, B. Abeles, G. Hughes and K.S. Liang, Mater. Res. Soc. Symp. **149** (1989) 711.
- [10] J.H. Underwood and T.W. Barbee, AIP Conf. Proc. **75**, N.Y. (1981) 170.
- [11] A. Guinier, "X-Ray Diffraction", W.H. Freeman, London, England (1963) 121.
- [12] L.V. Azároff, "Elements of X-Ray Crystallography", McGraw-Hill, NY (1968) 552.
- [13] H.W. Deckman, J.H. Dunsmuir and B. Abeles, Appl. Phys. Lett. **46** (1985) 171.
- [14] P.D. Persans, A.F. Ruppert, B. Abeles and T. Tiedje, Phys. Rev. **B 32** (1985) 5558.
- [15] H.P. Klug and L.E. Alexander, "X-ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials", Ed. John Wiley & Sons, N.Y., (1974).