

Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской АН
Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича
Кабардино-Балкарский государственный университет

**Молодкин В.Б., Низкова А.И., Шпак А.П.,
Мачулин В.Ф., Кладько В.П., Прокопенко И.В.,
Кютт Р.Н., Кисловский Е.Н., Олиховский С.И.,
Фодчук И.М., Дышеков А.А., Хапачев Ю.П.**

ДИФРАКТОМЕТРИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ДЕФЕКТОВ И ГЕТЕРОСЛОЕВ КРИСТАЛЛОВ

Киев
"Академперіодика"
2005

УДК 53(01); 539.292; 535.343.2; 535:548; 621.375; 336.826

Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов. – Киев: Академперіодика, 2005. – 361 с., ил. 115., табл.35., библ. 505.

*Монографія описує один із революційних проривів в фізиці
і посвящується всьому світові року фізики.*

Настоящая коллективная монография написана в рамках руководимой академиком НАН Украины А.П. Шпаком программы научных исследований по проблеме "Наноструктурные системы, наноматериалы и нанотехнологии". В монографии анализируются новые уникальные возможности диагностики дефектов и характеристик основных структурных параметров наносистем на основе использования созданных в Институте металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины и имеющих мировой приоритет кинематической (М.А.Кривоглазом) и динамической (В.Б. Молодкиным) теорий диффузного рассеяния дефектами кристаллов. В отличие от этих разработанных и описанных в монографии новых традиционные методы неразрушающей диагностики таких наноразмерных объектов, к примеру рентгеновская топография, не эффективны, так как наноразмеры находятся за пределами чувствительности традиционных неразрушающих методов. Впервые демонстрируются принципиально новые функциональные возможности разработанных методов диагностики, использующих динамические эффекты диффузного рассеяния, в частности такие, как интегральная дифрактометрия быстропротекающих процессов структурных изменений (рентгеновское кино), которая оказывается особенно эффективной для источников синхротронного излучения. Показана качественно новая возможность неразрушающей количественной диагностики характеристик дефектов одновременно нескольких типов (сертификация 21 века). Даются впервые основы неразрушающей селективной по глубине диагностики характеристик дефектов в каждом из слоев гетеросистем. Иллюстрируется при сохранении всех перечисленных новых функциональных возможностей уникальная чувствительность разработанных методов диагностики нового поколения к характеристикам наноразмерных дефектов и наноструктур в монокристаллических объектах со сложной гетероструктурой. К их числу относятся как упруго изогнутые кристаллы, монокристаллы с нарушенными поверхностными слоями, гетероструктуры с наноразмерными слоями и переходными областями, так и сверхрешетки с самоорганизованными решетками квантовых точек.

Данное издание, по мнению авторов, будет полезным для исследователей в области диагностики дефектов в кристаллах и изделиях нанотехнологий, а также аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

Научные редакторы: академик НАНУ Шпак А.П., член-корр. НАНУ Молодкин В.Б., член-корр. НАНУ Мачулин В.Ф.

Рецензенты:

член-корр. НАНУ Булавин Л.А.,

проф. МГУ РАН Бушуев В.А.,

заслуженный деятель науки РФ, проф. Карамурзов Б.С.

*Утверждено к печати
Ученым советом Института металлофизики
им. Г.В. Курдюмова НАН Украины*

ISBN

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	8
Глава 1. Динамическая природа структурной чувствительности полной (суммы брэгговской и диффузной) интегральной отражательной способности монокристаллов (ПИОС)	10
§1. Введение.....	10
§2. Теоретические основы динамической интегральной дифрактометрии в геометрии Лауэ методом ПИОС.....	16
§3. Определение методом ПИОС в геометрии Лауэ величин характеристик случайно распределенных в монокристалле микродефектов одного известного типа.....	19
§4. Нарушение закона сохранения ПИОС несовершенного монокристалла при динамическом рассеянии рентгеновского излучения в геометрии Брэгга.....	26
§5. Энергетические и азимутальные зависимости интегральной отражательной способности реальных монокристаллов в случае Брэгг дифракции рентгеновских лучей.....	27
§6. Выводы.....	34
Глава 2. Экспериментальное обнаружение и установление дифракционной природы в кристаллах с несколькими типами дефектов нового явления – изменения избирательности чувствительности ПИОС и определяющего типа дефектов в результате изменения экспериментальных условий дифракции	35
§1. Введение.....	35
§2. Физическое обоснование принципиальной возможности использования толщенных зависимостей ПИОС, полученных в случаях "тонкого" и "толстого" кристаллов в геометрии Лауэ, для определения величин их структурно чувствительных параметров.....	38
§3. Проблема неоднозначности диагностики как эффект наблюдаемого изменения характеристик дефектов с изменением порядка отражений....	43
§4. Определение методом ПИОС в геометрии Лауэ величин характеристик случайно распределенных в монокристалле микродефектов нескольких известных типов.....	45
§5. Выводы.....	50
Глава 3. Влияние нарушенного поверхностного слоя (НПС) на динамическое рассеяние в кристаллах с дефектами	51
§1. Введение.....	51
§2. Зависимость чувствительности ПИОС к наличию НПС от условий Брэгг-дифракции рентгеновского излучения в идеальных кристаллах.....	53
2.1. Теоретическая модель.....	53

2.2. Сравнение экспериментальных данных с различными теоретическими моделями НПС.....	56
2.3. Исследование поверхности Si (100) при использовании спектральной зависимости ПИОС.....	58
§3. Создание и использование для диагностики модели ПИОС в геометрии Брэгга для НПС кристаллов с СРД.....	59
3.1. Теоретическая часть.....	59
3.2. Экспериментальная реализация метода для диагностики характеристик НПС и СРД одного типа.....	63
3.3. Возможности диагностики наноразмерных НПС и СРД нескольких типов в сильно поглощающих кристаллах.....	66
§4. Выводы.....	69
Глава 4. Интегральная дифрактометрия статистически распределенных наноразмерных дефектов (СРНД) в упруго изогнутом монокристалле.....	71
§1. Введение.....	72
§2. Влияние упругого изгиба (УИ) на диффузное рассеяние и экстинкционные эффекты в монокристаллах с дефектами.....	77
§3. Установление природы возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния УИ и СРНД на величину ПИОС.....	84
§4. Количественное описание влияния на ПИОС упругого изгиба для монокристаллов с разными характеристиками СРНД.....	88
§5. Изучение совместного влияния изгиба и СРНД различных типов и размеров на величину ПИОС.....	93
§6. Использование деформационных зависимостей ПИОС для диагностики СРНД в монокристалле.....	98
§7. Выводы.....	101
Глава 5. Точные аналитические решения задач рентгеновской кристаллооптики для структур с переменным градиентом деформации .	103
§1. Физическая интерпретация типов решений уравнений Такаги согласно теории устойчивости.....	105
§2. Структура с переменным градиентом деформации.....	107
§3. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. Точное аналитическое решение и основные качественные особенности волнового поля.....	110
§4. Динамическая дифракция в случае резкого градиента деформации	115
§5. Расчет равномерно пригодных разложений для вырожденных гипергеометрических функций.....	120
§6. Новые точные аналитические решения рентгеновской динамической дифракции в кристаллах с переменным градиентом деформации.....	125

§7. Рентгенодифрактометрическое исследование двухслойной гетеро- структуры с переходным слоем с учетом изменения электронной плот- ности	130
Глава 6. Рентгеновская дифрактометрия структурных изменений в нанопористом кремнии при ионной имплантации фосфора	136
§1. Введение.....	136
§2. Объект исследований.....	136
§3. Экспериментальная часть.....	137
§4. Теоретическая часть.....	138
§5. Результаты.....	139
5.1. Рентгенодифракционные исследования.....	139
5.2. Фотолюминесценция.....	142
§6. Выводы.....	143
Глава 7. Рентгеноструктурные исследования дефектообразования при имплантации кремния ионами фосфора.....	144
§1. Интегральные параметры структурного совершенства имплантиро- ванных ионами фосфора кристаллов	144
§2. Влияние отжига на процессы дефектообразования в имплантирован- ных ионами фосфора кристаллах кремния.....	151
§3. Моделирование распределения деформаций в поверхностных слоях кремния, имплантированного ионами фосфора.....	156
Глава 8. Высокора разрешающая дифрактометрия многослойных эпи- таксиальных систем	159
§1. Введение.....	159
§2. Использование двухкристалльных кривых отражения.....	159
§3. Моделирование кривых отражения	163
§4. Использование трехкристалльной дифрактометрии.....	168
§5. Определение параметров сверхрешеток CdSe/BeTe	171
§6. Исследование сверхрешеток AlGaIn/Ga	175
§7. Определение параметров дислокационной структуры эпитакси- альных слоев.....	182
Глава 9. Диагностика многослойных наноразмерных систем.....	192
§1. Введение.....	192
§2. Теоретическая часть.....	194
§3. Объект исследований.....	198
§4. Результаты исследований.....	200
4.1. Многослойная структура с квантовой ямой (КЯ) типа $In_xGa_{1-x}As$	201
4.2. Многослойная структура с КЯ типа $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$	205
4.3. Многослойная структура с буферными слоями $GaAs_{1-y}N_y$ и слоем КЯ типа $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$	206

4.4. Многослойная система с двумя квантовыми ямами – $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-x}\text{N}_x$..	208
4.5. Система $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$	209
§5. Выводы.....	210
Глава 10. Эффекты диффузного рассеяния от дефектов в многослойных структурах с квантовой стенкой	212
§1. Введение	212
§2. Дифракционная модель	214
2.1. Когерентное рассеяние	215
2.2. Диффузное рассеяние.....	218
§3. Структурные и дифракционные параметры КЯ и буферных слоев	221
§4. Эксперимент	222
§5. Обработка измеренной КДО и анализ результатов	223
§6. Резюме и выводы.....	228
Глава 11. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия многослойных периодических структур с квантовыми точками и ямами	230
§1. Исследование короткопериодных сверхрешеток GaAs/AlAs с помощью высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии	230
§2. Поведение сателлитных дифракционных максимумов короткопериодных сверхрешеток GaAs–AlAs с различной степенью кристаллического совершенства слоев	237
§3. Формирование кривых отражения для квазизапрещенных отражений в короткопериодных сверхрешетках GaAs–AlGaAs	242
§4. Применение квазизапрещенных рентгеновских рефлексов для исследования многослойных периодических структур	249
§5. Рентгенодифракционные исследования $2D - 3D$ структурных переходов в многослойных периодических структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$	256
§6. Влияние упорядочения в периодических структурах с квантовыми точками на характер брэгговской дифракции	261
§7. Исследование латерального и вертикального упорядочения квантовых точек в многослойных наноструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с помощью двумерных карт рассеяния рентгеновских лучей в обратном пространстве...	271
Заключение.....	277
Список литературы.....	284
Список литературы к главе 1	
Список литературы к главе 2	
Список литературы к главе 3	
Список литературы к главе 4	
Список литературы к главе 5	
Список литературы к главе 6	
Список литературы к главе 7	

Список литературы к главе 8	
Список литературы к главе 9	
Список литературы к главе 10	
Список литературы к главе 11	

ПРЕДИСЛОВИЕ

В последнее время созданы теоретические основы, методы и приборы нового (четвертого) поколения диагностики дефектов в кристаллах, многослойных гетеросистемах и наноструктурах. Эти методы оказались чувствительными и к наноразмерным дефектам, которые не поддаются изучению топографическими методами.

Первое и второе поколения неразрушающей диагностики – это классическая кристаллография идеальной структуры кристаллов на основе брэгговского кинематического (однократного) рассеяния (первое поколение) и динамического (многократного) рассеяния (второе поколение).

Третье и четвертое поколения диагностики – это диагностика дефектов в кристаллах на основе приоритетных теорий диффузного рассеяния, созданных сотрудниками Института металлофизики имени Г.В.Курдюмова Национальной академии наук Украины. Третье – на основе кинематической теории М.А.Кривоглаза и К.П.Рябошапки и четвертое – на основе динамической теории В.Б.Молодкина и Е.А.Тихоновой.

Актуальность третьего и четвертого поколений обусловлена тем, что, как сегодня стало общепризнанным, свойства материалов определяются не столько исходным строением и параметрами их идеальной кристаллической решетки, которые могут быть надежно определены методами классической кристаллографии, сколько характером наведенной в них целенаправленно современными технологиями и прецизионными методами инженерии практически на атомном уровне дефектной структуры или специальной сверхструктуры. Речь идет, например, о таких функциональных материалах, как монокристаллы с профилированными поверхностями и модифицированными поверхностными слоями, макроскопически однородно деформированные (упруго изогнутые) монокристаллы с дефектами, сверхрешетки, многослойные композиционные структуры, в том числе и с квантовыми стенками, и т.п. Диагностический контроль для управления такой дефектной структурой и, следовательно, качеством материалов (их сертификация) является важнейшей и много более сложной задачей, которая, зачастую, когда характерные размеры областей когерентного рассеяния превышают длину экстинкции, уже не может быть решена в рамках классической кристаллографии, а также кинематической теории диффузного рассеяния, так как в этих случаях последние оказываются бессильными.

Это обусловлено тем, что в таких материалах становятся существенными и сильно изменяют характер распределения в обратном пространстве дифрагированной интенсивности процессы многократного рассеяния, и кинематическая теория, являющаяся приближением однократного рассеяния, оказывается неприменимой принципиально. Картина рассеяния перестает быть прямым Фурье-изображением кристалла.

Классификация дефектов кристалла по их влиянию на картину рассеяния, выполненная М.А. Кривоглазом, не работает. Диагностика в этом случае возможна только на основе более общей и строгой, но существенно более

сложной динамической теории рассеяния.

Дополнительным преимуществом диагностики четвертого поколения является то, что она основана на экспериментальном исследовании и использовании уникальной структурной чувствительности принципиально новых идейно и методически измерений параметров предсказанных новых эффектов многократности диффузного рассеяния (экстинкции за счет рассеяния на дефектах, явления не сохранения с ростом искажений в отличие от кинематического случая полной, т.е. суммы брэгговской и диффузной, интегральной отражательной способности и др.). Это позволило существенно повысить такие показатели диагностики разработанными новыми методами, как чувствительность, информативность и экспрессность, и обеспечило новые возможности диагностики, которые не имели аналогов в мировой практике. В частности, эти методы (полных кривых отражения, интегральной и интегрально-дифференциальной трехкристалльных дифрактометрий, полной интегральной отражательной способности (ПИОС) и др.) обеспечили такие принципиально новые функциональные возможности диагностики, как: количественная характеристика целого спектра (нескольких типов) дефектов в кристаллах (сертификация 21 века); селективная по глубине неразрушающая диагностика кристаллов, в том числе и многослойных структур; интегральная дифрактометрия быстропротекающих процессов (рентгеновское кино).

Настоящая коллективная монография посвящена изложению теоретических и экспериментальных основ указанных новых методов дифрактометрии и освещению их диагностических возможностей. Авторы этой монографии являются непосредственными создателями методов четвертого поколения диагностики и представляют коллективы институтов металлофизики имени Г.В. Курдюмова и физики полупроводников имени В.Е. Лашкарева Национальной академии наук Украины, Санкт-Петербургского физико-технического института имени А.Ф.Иоффе Российской академии наук, Черновицкого национального университета имени Ю. Федьковича и Кабардино-Балкарского государственного университета (г. Нальчик), которые внесли определяющий вклад в решение указанной проблемы.

Первая половина монографии (главы 1-4) посвящена интегральным методам динамической дифрактометрии хаотически распределенных дефектов разного типа, в том числе и наноразмерных, содержащихся в идеальных монокристаллах, а также в монокристаллах с макроскопически однородными упругими деформациями и нарушенными поверхностными слоями.

Во второй половине (главы 5-11) рассмотрены высокоразрешающие методы главным образом динамической дифрактометрии дефектов в сложно напряженных гетероструктурах и основных параметров самих этих структур, в том числе и с квантовыми стенками, а также в периодических многослойных структурах с самоорганизованными решетками квантовых точек.

Данное издание, по мнению авторов, будет полезным для исследователей в области диагностики дефектов в кристаллах и изделиях нанотехнологий, а также аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

ГЛАВА 1. ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРИРОДА СТРУКТУРНОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПОЛНОЙ (СУММЫ БРЭГГОВСКОЙ И ДИФFUЗНОЙ) ИНТЕГРАЛЬНОЙ ОТРАЖАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ (ПИОС)

§1. Введение

Настоящий раздел посвящен описанию нового уникально чувствительного к дефектам явления – нарушения при динамической дифракции справедливого в кинематической теории закона сохранения полной интегральной отражательной способности (ПИОС) несовершенного монокристалла. С целью демонстрации появившихся структурных информационных возможностей проанализированы зависимости ПИОС от толщины кристалла и длины волны рентгеновских лучей, полученные на двухкристальном дифрактометре (ДКД) в геометриях Лауэ и Брэгга в интервалах толщин кристалла и длин волн, соответствующих приближениям "тонкого" и "толстого" кристаллов.

Традиционно рентгенодифракционные исследования несовершенств в монокристаллах осуществляются путем измерения коэффициента отражения (кривой качания) при больших углах Брэгга на ДКД с широко открытым окном детектора. Информация о дефектах извлекается, как правило, только из хвостов кривой качания, на которых главным образом распределена диффузно рассеянная интенсивность. Соответствующий метод "интегрального" диффузного рассеяния [1–4] основан на кинематической теории диффузного рассеяния рентгеновских лучей точечными дефектами и их кластерами [5–10]. Он оперирует с интенсивностью диффузного рассеяния, проинтегрированной по углам выхода, т.е., в терминах импульсного пространства, по сфере Эвальда, рассматриваемой вблизи узла обратной решетки. Это один из наиболее информативных методов рентгеновской дифрактометрии, позволяющий определить природу, размер и концентрацию дефектов, также как распределение размеров дефектов и профили изменения концентрации дефектов с глубиной в кристаллах [11–19].

Согласно кинематической теории когерентная (R_{iB}) и диффузная (R_{iD}) составляющие ПИОС описываются выражениями $R_{iB}=R_{iP}E^2$, $R_{iD}=R_{iP}(1-E^2)$. Здесь $R_{iP}=C^2Q t/\gamma_0$ – ПИОС совершенного кристалла, где C – поляризационный множитель, $Q=(\pi |\chi_{Hr}|)^2/(\lambda \sin 2\theta)$ – отражательная способность на единицу длины пути, χ_{Hr} – вещественная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла. λ – длина волны излучения, θ – угол Брэгга, t – толщина кристалла, γ_0 – направляющий косинус волнового вектора падающей на кристалл плоской волны, наклоненного относительно внутренней нормали к входной поверхности кристалла, $E^2=\exp(-2L)$ – статический фактор Дебая-Валлера – единственный структурно чувствительный параметр кинематической теории интегральных интенсивностей, характеризующий степень статических искажений кристаллической решетки.

Измерения ПИОС R_i , состоящей из когерентной и диффузной компо-

нент, согласно кинематической теории, не должны давать никакой информации о структурных искажениях, поскольку сумма компонент $R_i=R_{iB}+R_{iD}=R_{iP}$ в кристалле с дефектами сохраняется такой же, как и в идеальном кристалле.

Независимость ПИОС $R_i=R_{iP}$ от искажений для любой толщины кристалла является прямым следствием принятого в кинематической теории линейного (борновского) приближения теории возмущений по поляризуемости при решении волнового уравнения в импульсном пространстве. Это приближение соответствует учету процессов лишь однократного рассеяния.

Однако, как было предсказано теоретически [20–26] и подтверждено экспериментальными наблюдениями профилей диффузной интенсивности, измеренных на ДКД [1] и трехкристальном дифрактометре (ТКД) [27–30] в диффузном рассеянии вблизи брэгговских отражений от несовершенных монокристаллов наблюдаются динамические эффекты. В случае дифракции рентгеновских лучей по Брэггу эти эффекты приводят к заметному подавлению интенсивности диффузного рассеяния в области полного отражения (эффект экстинкции) и ее перераспределению вблизи Брэгговского пика (эффект аномального поглощения) [20–23]. Следовательно, чисто кинематическое рассмотрение интенсивности диффузного рассеяния может рассматриваться как недостаток обычно используемой теоретической модели.

С другой стороны, при малых отклонениях от узла обратной решетки, т.е. в непосредственной близости от отражения Брэгга, дальнедействующие корреляции статических полей смещений от ограниченных дефектов проявляются сильнее, и аналитические выражения для функций корреляции, полученные после статистического усреднения, являются наиболее строгими [2,5–10]. Но как раз в этой информативно очень важной области пространства обратной решетки имеют место динамические эффекты диффузного рассеяния от дефектов. Характерные изменения в дифференциальных распределениях диффузного рассеяния Хуаня, которые обусловлены этими эффектами, описаны при использовании различных теоретических подходов для случаев дифракции по Брэггу [20–22] и по Лауэ [24–26] и наблюдались при измерениях с помощью ТКД [27–30].

При описании схем измерения ДКД требуется интегрирование интенсивности диффузного рассеяния в двух измерениях по углам выхода (по сфере Эвальда). В этом случае теоретический анализ в рамках динамического рассмотрения полного коэффициента отражения, состоящего из когерентной и диффузной компонент, был выполнен для случаев как Брэгг [21] так и Лауэ [26,37,38] дифракции. Использованные подходы, а именно, формализм когерентной оптики [39] и дифференциальная форма статистической динамической теории [26] позволили учесть частично влияние диффузного рассеяния и динамических эффектов в интенсивности диффузного рассеяния на форму кривой качания. Однако адекватная количественная обработка измеренной полной кривой качания особенно в случае больших дефектов, сравнимых с длиной экстинкции, не может быть успешно выполнена при использовании таких подходов.

Одним из источников таких трудностей в упомянутых выше теориях [39,26], так же как и в статистической динамической теории Като [40,41] и ее исправленных и улучшенных модификациях [42–47], является то, что все эти подходы основаны на уравнениях Такаги [48], которые были выведены из волновых уравнений в пренебрежении вторыми производными от амплитуд волнового поля в кристаллах (так называемое приближение Такаги–Топена [49,50]). Это приближение тесно связано с понятием единственного (моно) оптического пути в плоскости рассеяния и не позволяет соответствующим образом описать процессы многократного диффузного рассеяния в окрестности брэгговского отражения, которые включают также те волны, векторы дифракции (импульсы) которых выходят из плоскости когерентного рассеяния. Этот недостаток был отмечен Поляковым с соавторами [45], который в своих расчетах, основанных на методе функций Грина в реальном пространстве, учел вторую производную по пространственной координате, соответствующей вертикальной расходимости. Эта проблема также была отмечена Като в работе [51], где его прежнее приближение [40,41] было переформулировано без использования приближения Такаги–Топена.

Другая трудность в существующих статистических динамических теориях заключается в том, что они нацелены на решение проблемы вторичной экстинкции и основаны на модели несовершенного кристалла, который состоит из мозаичных блоков. Вследствие этого полученные формулы для (интегральной, как правило) интенсивности дифракции включают в качестве параметров несовершенства статический фактор Дебая–Валлера и набор длин корреляции, которые связаны, в частности, с размерами блоков. Однако последние параметры не могут быть связаны с характеристиками микродефектов (концентрация, радиус, мощность и т.д.) при рассмотрении соответствующих несовершенных монокристаллов и, следовательно, в этом случае должна решаться совсем другая проблема и совершенно другими методами.

Эти недостатки отсутствуют в методе, который был развит существенно раньше в первых работах, касающихся проблемы динамического диффузного рассеяния в кристаллах с дефектами [20,23,25,52-55], и который представляет обобщение динамической теории рассеяния Эвальда [56], Бете [57] и Лауэ [58] для случая несовершенных монокристаллов, содержащих случайно распределенные дефекты. В этом методе, который использует по существу понятия дисперсионного уравнения и дисперсионной поверхности, решение проблемы рассеяния упрощено благодаря рассмотрению в импульсном пространстве. Неупругие процессы рассеяния рентгеновских лучей (фотоэлектрическое поглощение, рассеяние Комптона и термодиффузное рассеяние) учтены в этом методе путем введения комплексной диэлектрической восприимчивости или поляризуемости. Это так называемый метод оптического потенциала, квантово-механическое рассмотрение которого и обобщение с целью применения для случая дифракции рентгеновских лучей в кристаллах дано Келером [59] и Мольером [60], см. также [61] и обзоры [32,62,63]. Здесь следует отметить, что применение метода оптического по-

тенциала, известного в ядерной физике, к рассеянию частиц и рентгеновских лучей монокристаллами с дефектами, которое было осуществлено Дедерихсом [31,32], дает корректное описание когерентной компоненты рассеянной интенсивности и ее ослабления из-за диффузного рассеяния, но не позволяет точно описать саму диффузную компоненту рассеянной интенсивности. Более общий подход [20,23,25,52–55], который был предложен в [52], раньше, чем метод Дедерихса [31], свободен также и от такого недостатка и позволяет точно описать динамические эффекты как когерентного, так и диффузного рассеяния. Обобщение метода Эвальда–Бете–Лауэ для несовершенных монокристаллов с хаотически распределенными микродефектами реализовано путем представления поляризуемости в виде суммы среднего и флуктуационного слагаемых при использовании метода флуктуационных волн Кривоглаза [5], и путем использования теории возмущений при решении волнового уравнения в импульсном пространстве. Обобщенная динамическая теория дает единое и последовательное описание когерентного и диффузного рассеяния рентгеновских лучей несовершенными монокристаллами в геометриях Брэгга и Лауэ с любой асимметрией. При этом преобладающим количеством атомов, которые вносят заметный вклад как в когерентную, так и в диффузную составляющие распределения интенсивности вблизи брэгговского пика, являются смещенные имеющимися дефектами атомы матрицы, а не атомы самих дефектов или атомы матрицы из ближайшего окружения дефектов. Объемная атомов матрицы из ближайшего окружения дефектов много меньше и, кроме того, они дают основной вклад только в хвосты распределения интенсивности. Очевидно, что волновое поле в кристалле также можно записать в виде суммы среднего и флуктуационного слагаемых, которые представляют когерентно и диффузно рассеянные волны соответственно.

С учетом изложенного детальное рассмотрение в [52–55,67] проведено для двухволнового случая дифракции. В таком приближении строится комбинированная теория возмущений в дискретном спектре по средней поляризуемости и в непрерывном по ее флуктуационной части. При этом в двухволновом случае теория возмущений со (средней) поляризуемостью в качестве малого параметра тождественна теории возмущений в квантовой механике для дискретного спектра с дважды вырожденными состояниями (в случае дифракции электронов малым параметром является отношение потенциала к кинетической энергии электрона [32,57]). В двухволновом случае дифракции в кристалле возбуждаются только две так называемые "сильные" брэгговские (когерентные) волны.

Когерентное рассеяние рентгеновских лучей периодической частью потенциала кристалла в несовершенном монокристалле, содержащем случайно распределенные ограниченные дефекты (микродефекты), сопровождается и модифицируется упругим диффузным рассеянием на флуктуациях поля статических смещений атомов матрицы, т.е. на флуктуационной части поляризуемости (потенциала) кристалла. Влияние диффузного рассеяния на ослабление когерентных волн заметно возрастает при увеличении размеров и кон-

центрации дефектов. Кроме того, увеличение радиусов дефектов приводит к сгущению интенсивности диффузного рассеяния вблизи узлов обратной решетки, т.е. вблизи направлений, точно удовлетворяющих условиям Брэгга. Следовательно, учет динамических эффектов диффузного рассеяния, проведенный в [67], становится необходимым для корректного количественного описания распределения когерентной дифракции. В [67] амплитуда и интенсивность когерентного рассеяния выведены для любой геометрии дифракции по Брэггу с учетом соответствующих поправок. Эти поправки обусловлены процессами многократного перерассеяния брэгговских и диффузных волн, приводящими к их взаимному воздействию.

Совместное влияние статического фактора Дебая–Валлера и указанных дополнительных поправок, описывающих эффективное поглощение (экстинкцию) при рассеянии на дефектах, приводит к сужению и уменьшению когерентной компоненты кривой качания по сравнению с кривой для совершенного кристалла.

Классическая динамическая теория рассеяния, развитая Эвальдом, Бете и Лауэ [56–58] для совершенного кристалла и Молодкиным с соавторами [52,54,55] для несовершенных монокристаллов, содержащих случайно распределенные дефекты, обобщена в [67] для случая таких несовершенных монокристаллов с крупными микродефектами. Система основных уравнений, полученных в импульсном пространстве для амплитуд плоских когерентных и диффузно рассеянных волн, решена путем использования теории возмущений. При этом Фурье компоненты содержат среднее и флуктуационное слагаемые поляризуемости кристалла в качестве малых параметров. Полученные [67] выражения для дисперсионных поправок к волновым векторам впервые принимают во внимание процессы многократного рассеяния диффузно рассеянных волн как от среднего, так и от флуктуационного слагаемого поляризуемости кристалла, т.е. принимают во внимание динамические эффекты диффузного рассеяния на периодической части поляризуемости и сами процессы многократного диффузного рассеяния на отклонениях от периодичности. Это предоставляет возможность осуществить корректную количественную интерпретацию дифракционного распределения также и в области полного отражения, особенно от кристаллов с большими микродефектами, которые обуславливают узкие и высокие диффузные пики, соразмерные с когерентными пиками.

В асимметричном случае дифракции рентгеновских лучей по Брэггу в приближении полубесконечного кристалла получено [67] аналитическое выражение для когерентной компоненты дифференциального коэффициента отражения для монокристаллов со случайно распределенными микродефектами. Это выражение включает в качестве параметров статический фактор Дебая–Валлера и параметры эффективного поглощения за счет диффузного рассеяния, которые зависят от угла падения. Благодаря учету процессов многократного диффузного рассеяния, полученные выражения для указанных коэффициентов поглощения справедливы при любых радиусах дефектов

(вплоть до экстинкционной длины и больше) и во всем угловом интервале, включая область полного отражения. Ясно, что развитая теория может быть легко распространена на асимметричный случай Лауэ-дифракции путем соответствующего изменения граничных условий.

Следует отметить, что, по сравнению с многочисленными статистическими теориями дифракции в несовершенных кристаллах, метод [67], также как и [52,54,55] ближе всего к развитому Дедерихсом в работах [31,32]. В работах Дедерихса использован формализм оптического потенциала квантово-механической теории рассеяния для описания симметричного случая Лауэ-дифракции электронов, нейтронов и рентгеновских лучей несовершенными монокристаллами, содержащими точечные дефекты и их кластеры. Результаты обоих методов очень близки в описании интенсивности когерентного рассеяния и ослабления указанной интенсивности за счет диффузного рассеяния. Однако, в отличие от [31,32,52–55], в работе [67] было учтено влияние процессов любого порядка многократного диффузного рассеяния как на когерентную, так и на диффузную интенсивности рассеяния, и установлены зависимости соответствующих дисперсионных поправок, рассчитанных в двухлучевом приближении, от угла падения при любой асимметричной геометрии дифракции. Но наиболее важной отличительной от [31,32] чертой подхода [67], так же как и [52,54,55], является реализация возможности расчета в явном виде самой интенсивности динамического диффузного рассеяния.

Диффузно рассеянные волны образуются из-за рассеяния как сильных брэгговских (когерентных), так и диффузно рассеянных волн на флуктуационном поле статических смещений атомов кристалла, которые обусловлены хаотически распределенными дефектами, и подобно когерентным волнам, тоже формируют в кристалле динамическое волновое поле. В двухволновом случае дифракции амплитуды диффузно рассеянных плоских волн D_q и D_{Hq} , которые формируют диффузные квазиблоховские волны, удовлетворяют системе неоднородных уравнений. Эти уравнения описывают процессы рассеяния трех типов. Первый тип — многократное перерассеяние диффузно рассеянных волн D_q и D_{Hq} периодической частью поляризуемости кристалла. Второй тип — однократное диффузное рассеяние сильных брэгговских волн (с амплитудами D_0 и D_H). Третий тип — диффузное рассеяние на флуктуационной части поляризуемости кристалла волн с амплитудами $D_{q'}$ и $D_{H+q'}$, где $q' \neq q$, в диффузно рассеянные волны с амплитудами D_q и D_{H+q} . Решение этой системы уравнений методом итераций дает возможность учесть все процессы многократного диффузного рассеяния флуктуационной частью поляризуемости кристалла.

Учет процессов многократного рассеяния, осуществляемый в динамической теории дифракции излучений реальными монокристаллами [55], позволяет описать возникновение в кристалле когерентных волновых полей. Эти поля, благодаря выходу за рамки борновского приближения теории воз-

мущений, проявляют эффекты нелинейности зависимостей наблюдаемых интенсивностей рассеяния от потенциала взаимодействия, т.е. демонстрируют эффекты экстинкции и аномального прохождения, а также экстинкции за счет рассеяния на дефектах, как в когерентной, так и в диффузной компонентах интенсивности. Эти эффекты проявляются также в существенно нелинейном поведении толщинных зависимостей как ПИОС R_i , так и ее когерентной (R_{iB}) и диффузной (R_{iD}) компонент. При этом, благодаря резкому различию в интенсивностях процессов когерентного и диффузного рассеяния, зависимости R_{iB} и R_{iD} от толщины t оказываются качественно не однотипными в единой толщинной области, так как имеют существенно различные характерные размеры областей проявления нелинейностей для этих толщинных зависимостей, и вклады в эти составляющие ПИОС от искажений не могут быть взаимно скомпенсированными принципиально для всех толщин кристалла в отличие от кинематического рассмотрения. Это и приводит к нарушению закона сохранения ПИОС. Сильная зависимость ПИОС от искажений за счет эффектов многократности, в существенно различной мере проявляемых для когерентного и для диффузного рассеяний, раскрывает сугубо динамическую природу этого нового явления.

Таким образом, все упомянутые выше особенности динамической дифракции в несовершенных монокристаллах, более подробное описание которых приведено ниже, делают ПИОС уникально чувствительной к структурным искажениям в отличие от кинематической теории и обеспечивают принципиально новые возможности рентгенодифракционной диагностики дефектных кристаллических структур [55, 69–71].

§2. Теоретические основы динамической интегральной дифрактометрии в геометрии Лауэ методом ПИОС

При динамическом рассеянии излучений в кристаллах с дефектами, как и в случае динамической теории рассеяния в идеальных кристаллах, существенное влияние на характер распределения и величину дифрагированной интенсивности оказывают, в отличие от кинематической теории, граничные условия и, следовательно, геометрия дифракции на исследуемом кристалле. В динамической теории различают геометрию дифракции по Лауэ (на просвет) и по Брэггу (на отражение) [55, 64, 69–71]. Кроме того, на характер особенностей поведения дифрагированных интенсивностей как в совершенных, так и в дефектных кристаллах существенным образом влияют толщина кристалла и энергия излучения. В этом отношении различают два предельных режима динамической дифракции. Они соответствуют так называемым приближениям тонкого ($\mu_0 t < 1$) и толстого ($\mu_0 t \gg 1$) кристаллов [55], где μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения, t – толщина кристалла.

Во всех упомянутых случаях наблюдаемые динамические эффекты различным образом зависят от характеристик дефектов, создающих статические искажения кристаллической структуры. Аналитические выражения для

ПИОС реальных монокристаллов с однородно распределенными дефектами, связывающие наблюдаемые интегральные интенсивности динамической дифракции в указанных случаях с характеристиками дефектов, получены в работах [55,64,69–72].

В случае симметричной дифракции по Лауэ выражение для ПИОС $R_i = R_{iB} + R_{iD}$, усредненной по толщинным осцилляциям в приближении тонкого кристалла ($\mu_0 l < 1$, $l = t/\gamma_0$), имеет вид [55,70]:

$$R_i = \exp(-\mu_0 l) [B_0 E I_0(h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l) + (1-E^2) R_{iP} \exp(-\mu^* l)], \quad (1.1)$$

где $B_0 = C \cdot \pi \cdot |\chi_{Hr}| / (2 \sin 2\theta)$, χ_{Hr} – вещественная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла, $h_s = \mu_H l C E$, μ_H – динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения, I_0 – функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента, μ_{ds}^0 – интегральный коэффициент эффективного поглощения (экстинкции) когерентной составляющей ПИОС за счет диффузного рассеяния когерентных волн на флуктуациях статических смещений атомов, вызванных дефектами; μ^* – интегральный коэффициент эффективного поглощения диффузной составляющей ПИОС за счет диффузного рассеяния когерентных волн и перерассеяния диффузных волн на указанных флуктуациях смещений.

При измерениях толщинных зависимостей ПИОС методом наклона (см., например, [73]) при вращении кристалла вокруг вектора дифракции \vec{H} изменяются как эффективная толщина кристалла (длина пути излучения в кристалле) $t = t_0 / \cos \alpha$, где α – угол поворота, так и направляющие косинусы падающего (γ_0) и дифрагированного (γ_H) лучей

$$\gamma_0 = \cos \theta \cdot \cos \psi \cdot \cos \alpha + \sin \psi \cdot \sin \theta, \quad \gamma_H = \cos \theta \cdot \cos \psi \cdot \cos \alpha + \sin \psi \cdot \sin \theta,$$

где ψ – угол между нормалью к поверхности кристалла и отражающими плоскостями. В симметричном случае $\psi = 0$.

В противоположность кинематической теории толщинные зависимости ПИОС (1.1) имеют нелинейный характер. Причем этот характер различен для когерентной ($I_0 \sim 1 + h_s^2/4 + h_s^4/64 + \dots$) и диффузной ($R_{iP} \sim t$) компонент ПИОС.

Следует также обратить внимание на возможность значительного возрастания вплоть до существенно преобладающих значений (даже в случае $L \ll 1$) относительного вклада диффузной компоненты в ПИОС по сравнению с когерентной. Указанное возрастание происходит за счет увеличения как толщины t , так и множителя $(1-E^2)$. Оно пропорционально, с одной стороны, приблизительно среднеквадратичным смещениям атомов для большинства случаев слабых искажений (что объясняет один из наиболее важных механизмов влияния искажений на рассеяние), а с другой стороны, – и модулю вектора дифракции \vec{H} в степени 2 или 3/2 (что имеет большое значение для информативной диагностики дефектов [5]).

В отличие от кинематической теории, как следует из (1.1), кроме статического фактора Дебая-Валлера E^2 , в динамической теории появляются еще

два (в ряде случаев существенно более информативных, чем E^2) структурно чувствительных параметра – это интегральные коэффициенты экстинкции когерентной (μ_{ds}^0) и диффузной (μ^*) компонент ПИОС. Это предоставляет уникальную возможность, отсутствующую в кинематическом случае, используя измерения ПИОС, однозначно определять параметры дефектов и даже, как будет показано ниже, сразу нескольких типов.

В случае однородного распределения ограниченных дефектов с радиусом R_0 и концентрацией с справедливо выражение (см.[70,71]):

$$\begin{aligned} \mu_{ds}^0 &= c \cdot E^2 \cdot C^2 \cdot m_0 \cdot B; m_0 = \pi \cdot v_c \cdot H^2 \cdot |\chi_{Hr}|^2 / (2\lambda^2), \\ B &= b_1 + b_2 \ln(e/r_0^2), \quad b_1 = B_1 + B_2/3, \\ b_2 &= B_1 + \cos^2 \theta_B \cdot B_2/2, \end{aligned} \quad (1.2)$$

где $r_0 = R_0/\Lambda$, $\Lambda = \lambda \cdot (\gamma_0 \gamma_H)^{1/2} / (C|\chi_{Hr}|)$ – экстинкционная длина, H – модуль вектора дифракции, e – основание натурального логарифма, и предполагается, что $r_0 < 1$.

Для сферических кластеров $B_1 = 0$, $B_2 = (4\pi A_{cl}/v_c)^2$; $A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_0^3$ – мощность кластера, ε – относительная деформация на границе кластера, $\Gamma = (1+\nu)/[3(1-\nu)]$.

Для хаотически распределенных дислокационных петель $B_1 = 4(\pi b R_0^2/v_c)^2/15$; $B_2 = \beta \cdot B_1$; $\beta = (3\nu^2 + 6\nu + 1)/[4(1-\nu^2)]$; v_c – объем элементарной ячейки; ν – коэффициент Пуассона; b – модуль вектора Бюргерса.

Если $\mu_{ds}^0 \ll \mu_0$ и $r_0 \ll 1$, то справедливо приближенное соотношение [71]:

$$\mu^* \approx \mu_{ds}^0 f_\mu(r_0); \quad (1.3)$$

$$f_\mu(r_0) = \left(\frac{5 + 2r_0 \ln r_0 - (3/8)r_0}{3(1 - \ln r_0)} \right) \text{ для дислокационных петель};$$

$$f_\mu(r_0) = \left(\frac{4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0}{5 - 6 \ln r_0} \right) \text{ для кластеров.}$$

Связь показателя статического фактора Дебая–Валлера $L_H = -\ln E$ с характеристиками дефектов описывается выражениями [5]:

$$L_H \approx 0,5 c v_c^{-1} R_0^3 (Hb)^{3/2}, \text{ дислокационные петли};$$

$$L_H \approx 0,5 c n_0 \eta^2 (1 - \eta^2/100), \text{ сферические кластеры } (\eta^2 \ll 10); \quad (1.4)$$

$$L_H \approx c n_0 \eta^{3/2}, \text{ сферические кластеры } (\eta^2 \gg 10),$$

где $n_0 = (4/3)\pi R_0^3/v_c$ – количество элементарных ячеек матрицы, замещаемых кластером, $\eta = \alpha_0 n_0^{1/3} h$, $\alpha_0 = \Gamma \varepsilon (6\pi^2/v_0)^{1/3}$, v_0 – количество атомов в кубической ячейке матрицы, $h = Na/2\pi$, a – постоянная решетки.

Тем самым, через параметры E , μ_{ds}^0 и μ^* величина ПИОС R_i оказывается связанной с характеристиками дефектов (c , R_0 , ε , b).

При симметричной геометрии дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла ($\mu_0 l \gg 1$) ПИОС описывается выражением [64,70]:

$$\begin{aligned}
R_i = (2\pi)^{1/2} CE |\chi_{Hr}| / (4 \sin 2\theta) \cdot \exp[-(\mu_0 - \mu_h CE)l] / (\mu_h l CE)^{1/2} \times \\
\times [i_0(h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l) + \alpha / \sin 2\theta \cdot \mu_{ds}^0 / \mu_h CE]; \\
i_0(x) = 1 + 1/8x + 9/128x^2 + \dots, \\
\alpha = (3/2) \cdot [\exp(-\mu_{ds}^0 l) - \exp(-\mu_h l CE)] / (1 - \mu_{ds}^0 / \mu_h CE).
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Формула (1.5) описывает эффект аномального прохождения как когерентных, так и диффузно рассеянных волн. Помимо сильно выраженного нелинейного характера зависимости $R_i(t)$ следует отметить возможность преобладающего вклада диффузной компоненты в ПИОС при $\mu_{ds}^0 \sim \mu_H (\sim \mu_0)$.

§3. Определение методом ПИОС в геометрии Лауэ величин характеристик случайно распределенных в монокристалле микродефектов одного известного типа

Известно [55,70,31,74], что, сравнивая величины ПИОС или ее брэгговской составляющей исследуемого нарушенного и совершенного монокристаллов, можно определить значения структурно чувствительных параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения исследуемым образцом: L , μ_{ds} и μ^* . Формулы, связывающие L , μ_{ds} и μ^* с характеристиками дефектной структуры кристалла, и вид зависимостей L , μ_{ds} и μ^* от величины вектора дифракции H позволяют в принципе [55] определить тип дефектов, преобладающих в образце (кластеры или дислокационные петли), их средний радиус и концентрацию. Естественно, что однозначность, надежность и точность результатов таких исследований существенно зависят как от погрешности измерений, так и от адекватности используемых физических представлений и теоретических моделей. При этом определяющим, как показано в работе [75], оказывается именно последнее.

Так, Иида [74] на трехкристальном дифрактометре определил величины брэгговской составляющей ПИОС для легированных медью образцов, вырезанных из слитков бездислокационного Si, выращенных методом бестигельной зонной плавки. Применение высокоразрешающего прибора позволило ему получить значения величин брэгговской составляющей ПИОС с точностью до 1%. Предположив, что вкладом диффузной составляющей в интегральную интенсивность кристалла с дефектами можно пренебречь, автор работы [74] по величине отношения брэгговской составляющей исследуемого кристалла к рассчитанной величине интегральной интенсивности совершенного кристалла кремния определял долю нарушенного объема кристалла. При этом высокая точность измерений позволила даже самое малое из наблюдаемых им значений доли нарушенного объема (0,07) определить с малой погрешностью. Затем, предположив, что поле напряжений вокруг преципитата сферично, Иида вычислил соотношение между средним радиусом R и концентрацией дефектов N , изображенное им в работе [74] графически. Из графика следует, что данному значению доли нарушенного объема соответствует ряд пар различных значений величин среднего радиуса и концентрации дефектов в пре-

делах, соответственно: $R \approx 0,5 \div 50 \text{ мкм}$, $N \approx 5 \cdot 10^{10} \div 5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$. Т.е. определенная в данном случае степень искаженности кристаллической структуры может быть обусловлена наличием в образце крупных дефектов с низкой концентрацией или, наоборот, мелких дефектов с высокой концентрацией.

Таким образом, высокая точность измерения брэгговской составляющей ПИОС, достигнутая при измерениях на трехкристальном спектрометре, не обеспечила однозначного определения значения среднего радиуса и концентрации дефектов в образце. Причина такого результата становится понятной из анализа развитых в [55,70] физических представлений об особенностях ПИОС рентгеновских лучей в монокристаллах. Из этих представлений следует, что пренебрежение автором [74] на основе полукинематических представлений динамическими эффектами в диффузной (наиболее информативной) составляющей ПИОС являются слишком сильным огрублением физической модели, которое и привело к существенной потере информативности такого упрощенного метода анализа. Динамическая теория [55,70] диффузной составляющей ПИОС предсказывает определяющую роль этой составляющей в монокристаллах, обнаруживает обусловленное этим физическое явление – нарушение закона сохранения ПИОС, справедливого в рамках кинематической теории и отражающего ее полную независимость от степени искажений кристаллической решетки. Наиболее важным практически следствием обнаруженных явлений и закономерностей, установленных развитой динамической теорией, является предсказание уникально высокой чувствительности ПИОС к типу и характеристикам дефектов в монокристаллах. В результате новые физические представления о ПИОС рентгеновских лучей в монокристаллах [55] и наличие в приближениях тонкого ($\mu_0 t < 1$) и толстого ($\mu_0 t > 5$) кристаллов соответствующих аналитических формул (1.1–1.5) для ПИОС, полученных на основе динамической теории рассеяния излучения нарушенным кристаллом [70] с учетом вклада диффузной составляющей, открыли возможность определения параметров динамического рассеяния $L_1 \mu_{ds}$ и μ^* . Они определяются путем сравнения экспериментально определенных толщинных или спектральных зависимостей ПИОС с зависимостями ПИОС, рассчитанными для нарушенного кристалла.

Методом наименьших квадратов, путем подгонки экспериментальных толщинных зависимостей ПИОС к рассчитанным при использовании формул (1.1, 1.5) находятся значения величин $L_1 \mu_{ds}$ и μ^* .

Выражения (1.2–1.4) связывают величины параметров $L_1 \mu_{ds}$ и μ^* с величинами среднего радиуса и концентрации дефектов кулоновского типа, равномерно распределенных в кристалле. Целью работы [75] было установление и физическое обоснование возможности на основе использования указанных новых физических представлений [55,70] однозначного определения среднего радиуса и концентрации дефектов кулоновского типа методом толщинных или спектральных (неразрушающий метод) зависимостей ПИОС, которые получены наиболее грубым методом однокристалльных измерений (погрешность $\sim 5\%$).

Образцы для исследования были вырезаны из слитков бездислокационного Si, выращенных по методу Чохральского. Ориентация образцов, состав примесей в них и режимы термообработки указаны в таблице 1.1.

Таблица 1.1. Состав примесей и режимы термообработки образцов бездислокационного кремния

№ образца	Ориентация большой поверхности образца	Состав примесей	Режим термообработки
1	Плоскость (110), параллельная направлению выращивания слитка 001	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $Ge - 10^{20} \text{ см}^{-3}$	Отжиг в течение 2 часов при 1523 К в атмосфере Ar
2	"	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $Ge - 10^{19} \text{ см}^{-3}$	Отжиг в течение 2 часов при 1523 К в атмосфере Ar
3	"	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $Ge - 10^{20} \text{ см}^{-3}$	Отжиг в течение 2 часов при 1523 К в атмосфере Ar, диффузия Cu в течении 1 часа при 1173 К в атмосфере N ₂
4	"	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $Ge - 10^{19} \text{ см}^{-3}$	"
5	"	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $Ge - 10^{20} \text{ см}^{-3}$	Диффузия Cu в течении 1 часа при 1173 К в атмосфере N ₂
6	"	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $Ge - 10^{19} \text{ см}^{-3}$	"
7	Плоскость (111), перпендикулярная направлению выращивания слитка 111	$O_2 - 8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	Диффузия Cu в течении 3 часов при 1173 К в атмосфере N ₂

Величины ПИОС определялись с помощью однокристалльного спектрометра для симметричных Лауэ-рефлексов $220FeK\alpha$ -, $220CuK\alpha$ - и $220MoK\alpha$ -излучений. Толщина образцов изменялась послойным стравливанием от 1000 до 300 мкм. Для FeK α - и CuK α - излучений реализовывалось приближение толстого, а для MoK α -излучения – приближение тонкого кристаллов.

На рис. 1.1 маркерами изображены толщинные зависимости ПИОС для образцов, описанных в таблице 1.1.

Рис. 1.1 наглядно демонстрирует результат экспериментального подтверждения предсказанного теоретически нарушения закона сохранения ПИОС рентгеновских лучей в монокристаллах. Согласно кинематической теории отношение ρ должно быть константой, равной единице во всем интервале $\mu_0 t$, независимо от степени искажений кристаллической решетки. Как видно, отклонения кривых реальных экспериментальных зависимостей от кинематической прямой ($\rho = 1$) на порядок величины превышают ошибку эксперимента ($\sim 10\%$) даже для слабо нарушенных монокристаллов и резко

возрастают с ростом степени искажений кристаллов, демонстрируя уникальную чувствительность предложенного метода.

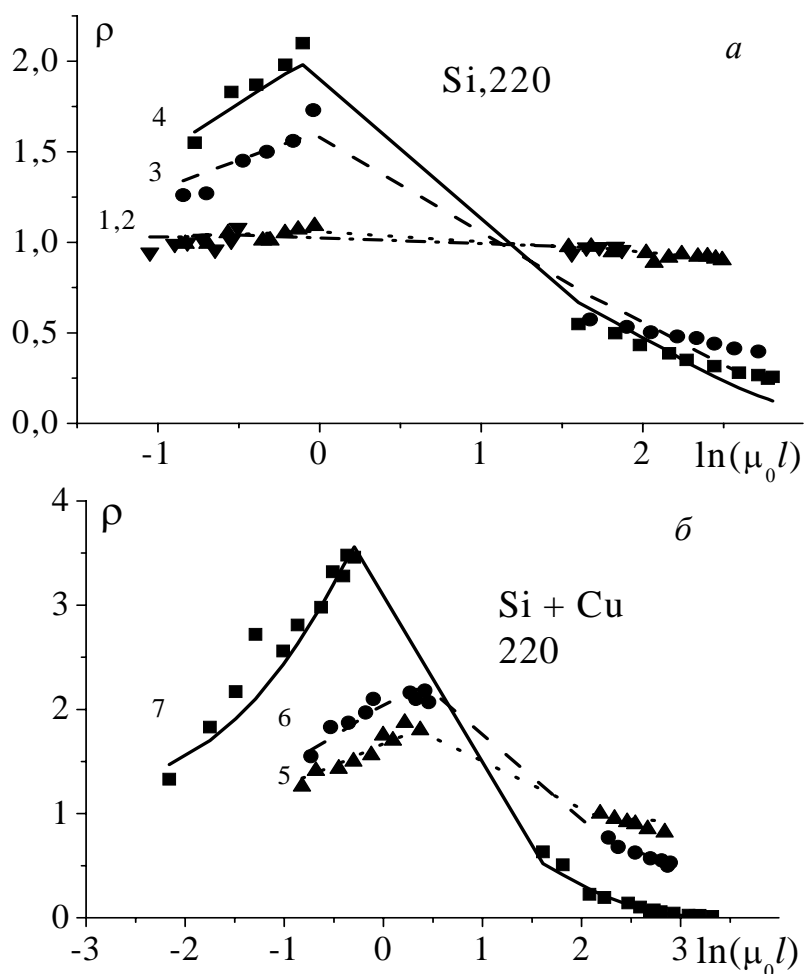


Рис. 1.1. Экспериментальные (маркеры) и рассчитанные (линии) зависимости интегральных интенсивностей ($\rho = R_j / R_j^{\text{идеал.}}$) Лауэ-дифракции от $\ln(\mu_0 l)$ при симметричном 220 отражении (μ_0 – нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения, $l = t / \cos\theta$) для образцов кремния 1–4 (а) и образцов 5–6 (б). Режимы термообработок в таблице 1.1

Следует отметить, что в полном соответствии с развитыми физическими представлениями [55,70] полученные кривые отклоняются от кинематической прямой в противоположные стороны в приближениях тонкого и толстого кристаллов.

В приближении тонкого кристалла оказывается, что для каждого образца можно найти целый ряд подходящих значений величин параметров L_1 , μ_{ds} и μ^* , обеспечивающих наилучшее совпадение рассчитанных зависимостей с экспериментальными. В приближении толстого кристалла тоже существует не одна пара, а целый ряд значений L и μ_{ds} . В тонком кристалле ход толщинной зависимости задается в основном значениями параметров L и μ^* , в толстом – значениями параметров L и μ^* .

Теоретический анализ формул (1.1–1.5) показывает, что с ростом степени структурного несовершенства кристалла увеличиваются значения параметров динамического рассеяния L_1 , μ_{ds} и μ^* . Величины когерентной и диф-

фузной составляющих ПИОС убывают с ростом μ_{ds} и μ^* , однако качественно по-разному изменяются с увеличением значений показателя статического фактора Дебая-Валлера. Когерентная составляющая ПИОС убывает с ростом значения L , а диффузная – растет. $\mu^* \sim \mu_{ds}$ и может быть выражено через μ_{ds} [70], при фиксированном значении брэгговской составляющей $L = 1/\mu_{ds}$, а при фиксированном значении диффузной составляющей $L \sim \mu_{ds}$. Для пары конкретных значений когерентной и диффузной составляющих ПИОС можно построить пересекающиеся зависимости $L(\mu_{ds})$. Точка пересечения должна соответствовать истинным значениям L , μ_{ds} и μ^* .

Если совместно обработать результаты измерений ПИОС в приближениях тонкого и толстого кристаллов, можно найти аналогичную вышеописанной точку пересечения. В приближении тонкого кристалла определяющий вклад в ПИОС в наиболее чувствительной для нее области значений $\mu_0 t$ вносит диффузная составляющая, а в приближении толстого кристалла – брэгговская. Поэтому, обрабатывая методом наименьших квадратов совместно толщинные зависимости, полученные экспериментально в двух приближениях, можно найти однозначно истинные значения трех параметров L , μ_{ds} и μ^* . В случае, когда в монокристалле присутствуют случайно распределенные микродефекты одного известного типа, значения величин характеристик микродефектов могут быть вычислены из величин параметров L , μ_{ds} и μ^* .

Согласно литературным данным [76], растворимость меди в Si при температуре 1123К составляет $3 \cdot 10^{16}$ ат./см³. При указанной температуре был проведен диффузионный отжиг пяти образцов Si (образцы 3–7), характеристики которых приведены в таблице 1.1.

В результате изучения дифракции электронов установлено [77], что преципитаты Cu в Si представляют собой низкотемпературную полиморфную фазу Cu_3Si (η'' – Cu_3Si). Преципитация Cu в Si сопровождается расширением объема приблизительно на 150%, которое может быть скомпенсировано путем испускания одного собственного атома внедрения Si на два соединяющихся с кремнием атома Cu, следовательно, относительная деформация на границе кластеров Cu_3Si , $\epsilon = 0,13$ [78]. Предварительные расчеты показали, что образовавшиеся в течение диффузионного отжига преципитаты SiO_2 , выдавленные ими петли и петли, образовавшиеся из собственных внедренных атомов Si, появившихся в результате преципитации кислорода, не оказывают ощутимого влияния на величину ПИОС. Поэтому единственным определяющим типом дефектов во всех пяти образцах являются преципитаты Cu_3Si . Совместное фитирование толщинных зависимостей, полученных для каждого из образцов в приближениях тонкого и толстого кристаллов, позволило для двух моделей преципитатов Cu_3Si (сферических и плоских с толщиной, равной вектору Бюргерса b) однозначно определить для каждого из пяти образцов средний размер и концентрацию кластеров Cu_3Si . Результаты определения представлены в таблице 1.2.

Таблица 1.2. Величины характеристик дефектов, полученные путем фитирования толщинных зависимостей ПИОС для образцов 3–7

№ обр.	R_{cl} , мкм (Cu_3Si , сферических, $\varepsilon=0,13$)	c_{cl} (Cu_3Si , сферических)	R_{cl} , мкм (Cu_3Si , плоских, $\varepsilon=0,13$)	c_{cl} (Cu_3Si , плоских)
3	$0,038 \pm 0,002$	$(7 \pm 3) \cdot 10^{-13}$	$0,85 \pm 0,10$	$(1 \pm 0,5) \cdot 10^{-13}$
4	$0,042 \pm 0,002$	$(5,4 \pm 2,1) \cdot 10^{-13}$	$0,85 \pm 0,10$	$(1,2 \pm 0,6) \cdot 10^{-13}$
5	$0,008 \pm 0,002$	$(4 \pm 5) \cdot 10^{-10}$	$0,05 \pm 0,02$	$(3 \pm 4) \cdot 10^{-10}$
6	$0,019 \pm 0,001$	$(1,6 \pm 0,8) \cdot 10^{-11}$	$0,23 \pm 0,03$	$(5 \pm 2,5) \cdot 10^{-12}$
7	$0,034 \pm 0,002$	$(4,2 \pm 1,2) \cdot 10^{-12}$	$0,63 \pm 0,05$	$(9 \pm 2) \cdot 10^{-13}$

Из таблицы 1.2 видно, что полученные для обеих моделей величины концентрации кластеров Cu_3Si – одного порядка, что соответствует представлению об образовании указанных преципитатов на других микродефектах.

В таблице 1.3 приведены рассчитанные для каждого образца концентрации атомов меди, соответствующие двум рассматриваемым моделям кластеров Cu_3Si . Из таблицы 1.3 видно, что для образцов 5, 6 и 7 концентрация вошедших в образец атомов меди одного порядка с концентрацией атомов меди, образовавших кластеры Cu_3Si , а для образцов 3 и 4 0,2 или 0,1 вошедших в образец атомов меди участвуют в образовании кластеров Cu_3Si . Это можно объяснить тем, что характер диффузии меди в образец зависит от дефектной структуры образца, образование кластеров Cu_3Si происходит внутри дислокационных петель.

Таблица 1.3. Концентрация меди C_{Cu} , ат/см³ в кластерах Cu_3Si , характеристики которых приведены в таблице 1.2; отношение концентрации меди к ее растворимости при 1123 К ($C_{\text{Cu}} / (3 \cdot 10^{16})$)

№ обр.	C_{Cu} сферических кластеров Cu_3Si , ат./см ³	C_{Cu} плоских кластеров Cu_3Si , ат./см ³
3	$(1,2 \pm 0,1) \cdot 10^{16}$ [0,4±0,05]	$(6 \pm 1) \cdot 10^{15}$ [0,21±0,04]
4	$(1,2 \pm 0,1) \cdot 10^{16}$ [0,4±0,05]	$(7 \pm 1) \cdot 10^{15}$ [0,25±0,04]
5	$(7 \pm 2) \cdot 10^{16}$ [2,3±0,6]	$(6 \pm 2,5) \cdot 10^{16}$ [2±0,7]
6	$(3,3 \pm 0,3) \cdot 10^{16}$ [1,1±0,1]	$(2,2 \pm 0,6) \cdot 10^{16}$ [0,8±0,2]
7	$(5 \pm 0,6) \cdot 10^{16}$ [1,7±0,2]	$(3 \pm 0,4) \cdot 10^{16}$ [1±0,13]

Модель создания колоний преципитатов Cu путем повторяющейся преципитации на переползающей краевой дислокации была предложена в работах [79,80]. Преципитация Cu в Si состоит, по крайней мере, из трех основных процессов: (1) зарождения преципитата Cu на какой-нибудь существовавшей до этого дислокации, (2) роста преципитата, приводящего к испусканию внедренных атомов Si, которые заставляют дислокацию переползать, (3) отрыва дислокации, сопровождающегося зарождением новых преципитатов Cu. В образцах 5, 6 и 7 в течение диффузионного отжига происходит образование преципитатов SiO_2 , выдавленных ими дислокационных петель и дислокационных петель из внедренных атомов Si. Размеры и концентрации этих дефектов малы настолько, что они остаются за пределами чувствительности

метода ПИОС. Однако на дислокационных петлях из внедренных атомов Si образуются преципитаты Cu_3Si . В образцах 5 и 6 в течение диффузионного отжига дислокационные петли образуются также из внедренных атомов Ge, поэтому преципитатов Cu_3Si в этих образцах образуется на порядки больше, чем в образце 7. Как видно из таблицы 1.1, в образце 5 концентрация внедренного Ge на порядок выше, чем в образце 6, поэтому преципитатов Cu_3Si в нем образуется на порядок больше. Однако, поскольку количество меди, вошедшей во все образцы приблизительно одинаково, преципитаты Cu_3Si в образцах 5, 6 и 7, как видно из таблицы 1.2, тем крупнее, чем меньше их концентрация в образце.

В образцах 3 и 4, подвергнутых перед диффузией высокотемпературному отжигу, до диффузии образовались преципитаты SiO_2 , выдавленные ими дислокационные петли, дислокационные петли из внедренных атомов Si и дислокационные петли из внедренных атомов Ge, причем концентрация всех этих дефектов, согласно литературным данным [81], должна быть тем ниже, чем выше температура отжига. Расчеты и экспериментальные измерения показывают, что вследствие малой концентрации все образовавшиеся при высокотемпературном отжиге дефекты находятся за пределами чувствительности метода ПИОС. При последующем диффузионном отжиге в образцах 3 и 4 не образуются новые дефекты указанных четырех типов, а только растут уже образовавшиеся, и преципитация меди происходит на образовавшихся при предварительном отжиге дефектах. При этом оказывается, как видно из таблицы 1.3, что концентрация меди, образовавшей преципитаты Cu_3Si , намного меньше концентрации меди, продиффундировавшей в образец. Расчеты показывают, что остальные атомы меди или образованные ими молекулы Cu_3Si , вошедшие в образцы 3 ($R_{cl}=0,001\text{мкм}$, $c_{cl}=6,6\cdot 10^{-8}$) и 4 ($R_{cl}=0,001\text{мкм}$, $c_{cl}=6,7\cdot 10^{-8}$), но не принявшие участие в формировании кластеров Cu_3Si , декорирующих ранее существующие дефекты, находятся за пределами чувствительности метода ПИОС.

Анализ полученных для декорированных медью образцов кремния концентраций кластеров Cu_3Si позволил сделать вывод, что диффузия меди в образец незначительно искажает его кристаллическую структуру, поскольку сами молекулы Cu_3Si не скапливаются в кластеры или петли, достаточно крупные, чтобы вызвать заметные искажения кристаллической структуры. Но отжиг монокристалла, необходимый для осуществления диффузии, является причиной преципитации в нем кислорода и образования петель из избыточных атомов легирующей примеси (Ge) а, значит, образования дефектов структуры, которые сами по себе не обнаруживаются ни методом рентгеновской топографии, ни методом ПИОС. Крупные кластеры Cu_3Si , которые являются причиной нарушения закона сохранения ПИОС, и концентрации которых приведены в таблице 1.2 образуются именно на этих "невидимых" дефектах структуры, декорируя их.

Из таблицы 1.3 видно, что для образца 7 рассчитанная величина объемной доли меди, вошедшей в каждый из образцов, зависит от использованной для расчетов модели. Для образца 7 концентрация атомов меди, рассчитанная

для модели сферических кластеров Cu_3Si , значительно превышает предел растворимости, а концентрация атомов меди, рассчитанная для модели плоских кластеров Cu_3Si несколько меньше предела растворимости. Это позволяет для образца 7 определить форму кластеров Cu_3Si .

§4. Нарушение закона сохранения ПИОС несовершенного монокристалла при динамическом рассеянии рентгеновского излучения в геометрии Брэгга

С точки зрения кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей реальными монокристаллами [5], измерение ПИОС кристаллов, содержащих случайно распределенные дефекты, не целесообразно при исследовании структурного совершенства. При выполнении условия кинематической дифракции для таких кристаллов справедлив "закон сохранения" ПИОС, т.е. сумма интегральных интенсивностей когерентного и диффузного рассеяния не зависит от степени нарушенности структуры кристалла и равна ПИОС идеального кристалла.

Ситуация кардинально изменяется для случая достаточно больших монокристаллов, размеры которых и характерные длины когерентности рассеяния достигают длин экстинкции. Здесь имеет место динамическая дифракция, и в поведении дифрагированной интенсивности появляются различные динамические эффекты. В частности, вследствие принципиального изменения природы дифракции излучения ПИОС таких кристаллов становится чувствительной к дефектам структуры [55].

Детальные теоретические и экспериментальные исследования чувствительности ПИОС к искажениям кристаллической решетки были выполнены ранее для случая Лауэ дифракции [55]. Однако случай дифракции Брэгга представляет не меньший научный и практический интерес. Последовательное теоретическое рассмотрение интегральных интенсивностей Брэгг дифракции в монокристаллах со случайно распределенными микродефектами было выполнено в работах [71, 82, 83,84,86]. В настоящем разделе описаны результаты экспериментальной проверки упомянутых теоретических работ на реальных монокристаллах кремния при использовании достаточно широкого набора отражений и длин волн характеристического рентгеновского излучения.

В случае произвольной (асимметричной) геометрии дифракции по Брэггу выражение для ПИОС, объединяющее предельные случаи тонкого ($\mu_0 l \ll 1$) и толстого ($\mu_0 l \gg 1$) кристаллов, имеет вид [71,82-85]:

$$R_i = R_i^{dyn} \cdot P \cdot E + R_{iP} \cdot \Pi (1 - E^2), \quad (1.6)$$

$R_i^{dyn} = (16/3\pi) C Q \Lambda / \gamma_0$, $R_{iP} = C^2 Q t / \gamma_0$ – ПИОС идеально мозаичного кристалла,

$$\Pi(\mu^* t) \cong \begin{cases} \left(2(\mu_0 + \mu^*) t / \gamma\right)^{-1}, & \text{при } \mu_0 t \gg 1, \\ \left(1 + (\mu_0 + \mu^*) t / \gamma\right)^{-1}, & \text{при } \mu_0 t < 1, t \gg \Lambda_B, \end{cases}$$

$1/\gamma = (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_h|)/2$; $\Lambda_B = \lambda(\gamma_0|\gamma_h|)^{1/2}/(2\pi C|\chi_{hr}|) = \Lambda/2\pi$; $P \cong 1 - 3\pi s/4$ при $s \ll 1$; $s = (\mu_0 + \mu_{ds}^0)\Lambda E/\gamma C$; C – поляризационный множитель, $Q = (\pi|\chi_{hr}|)^2/[\lambda \sin(2\theta)]$ – отражательная способность на единицу длины пути, χ_{hr} – вещественная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла, t – толщина кристалла, γ_0, γ_h – направляющие косинусы волновых векторов падающей на кристалл плоской волны относительно внутренней нормали к входной поверхности кристалла и дифрагированной волны соответственно, μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения.

Здесь интегральные коэффициенты эффективного поглощения μ_{ds}^0 и μ^* описываются приближенными выражениями (1.2), (1.3) и (1.4) при выполнении условий $\mu_{ds}^0 \ll \mu_0$ и $R_0 \ll \Lambda$.

Физические условия Брэгг-дифракции не позволяют измерять толщинные зависимости ПИОС, как это делается в случае Лауэ-дифракции (метод наклона). Однако, их аналогом могут служить спектральные зависимости $R_i(\lambda)$ или азимутальные зависимости $R_i(\varphi)$ в условиях асимметричной ($|\gamma_h| \neq \gamma_0$) Брэгг-дифракции [85]. Изменяющиеся при азимутальном вращении кристалла направляющие косинусы:

$$\gamma_0 = -\cos\theta_B \cdot \sin\psi \cdot \cos\varphi + \sin\theta_B \cdot \cos\psi, \quad \gamma_h = -\cos\theta_B \cdot \sin\psi \cdot \cos\varphi - \sin\theta_B \cdot \cos\psi,$$

где ψ – угол между отражающими плоскостями и поверхностью кристалла, φ – азимутальный угол, обуславливают изменение эффективных глубин проникновения в кристалл когерентных и диффузно рассеянных волн. При этом относительные вклады когерентной и диффузной компонент в ПИОС и сама ПИОС зависят как от азимута φ , так и от характеристик дефектов. В результате получаются азимутальные зависимости ПИОС с различным поведением ее когерентной и диффузной компонент (см. (1.6)).

Следует также отметить, что условия брэгговской дифракции могут выполняться во всем угловом интервале от 0 до 360° только при $\psi < \theta_B$. Когда имеет место неравенство $\psi > \theta_B$ появляется разрешенный интервал изменения φ , а именно, $\pi/2 - \varphi_{кр} < \varphi < \varphi_{кр} + \pi/2$ и второй интервал, сдвинутый на π , где угол $\varphi_{кр} = \arccos(\text{tg}\theta_B \cdot \text{tg}\psi)$ получен из условия $\gamma_0 = 0$.

§5. Энергетические и азимутальные зависимости интегральной отражательной способности реальных монокристаллов в случае Брэгг дифракции рентгеновских лучей

В данном разделе описано экспериментальное обнаружение в работе [85] нарушения известного из кинематической теории "закона сохранения" полной интегральной отражательной способности (ПИОС) дефектных монокристаллов и продемонстрирована обусловленная этим нарушением уникальная чувствительность ПИОС к искажениям кристаллов. В работе [85] ПИОС были измерены для набора длин волн и рефлексов бездислокационных монокристаллов Si разной степени структурного совершенства, содержащих однородно распределенные ограниченные дефекты. Показано существенное влияние экстинкции диффузной составляющей за счет рассеяния на

дефектах на величину измеряемой ПИОС. В условиях асимметричной Брэгг дифракции измерены азимутальные зависимости ПИОС и продемонстрирована их высокая информативность, обусловленная отличием между азимутальными зависимостями когерентной и диффузной составляющих ПИОС.

Экспериментальные измерения зависимостей ПИОС от длины волны излучения, вектора дифракции или азимутального угла вращения вокруг вектора рассеяния были выполнены при использовании четырехклучного двухкристального дифрактометра, сконструированного на базе дифрактометра ДРОН-3М. Длительность измерения интенсивности, угловой интервал и скорость сканирования выбирались таким образом, чтобы ПИОС могла быть зарегистрирована с точностью не менее 1%. Пучок рентгеновского излучения от рентгеновской трубки БСВ-29 коллимировался монохроматором, изготовленным из высокосовершенного монокристалла кремния, и системой щелей. Падающий пучок характеристического излучения, содержащий только одну компоненту дублета, имел размеры $0,25 \cdot 2$ мм и интенсивность $5 \cdot 10^4$ имп./сек. Энергетические зависимости ПИОС были измерены с использованием рентгеновских трубок с различными анодами.

Образцы бездислокационных монокристаллов кремния, были вырезаны из выращенного по методу Чохральского слитка (*p*-тип проводимости, $\rho \sim 10$ Ом/см, ось роста была направлена вдоль оси $\langle 111 \rangle$, концентрации кислорода и углерода были равны $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и 10^{16} см^{-3} соответственно). Образцы были приготовлены в форме пластин, параллельных плоскости (111), которая составляла угол $\psi = (2,0 \pm 0,1)^\circ$ с поверхностью. Нарушения структуры поверхности, возникающие при механической обработке, были удалены путем химико-механической полировки [87] с последующим химическим травлением до глубины ~ 10 мкм. Для создания дефектной структуры образцы №1 и №2 были отожжены на воздухе, а образец №3 был отожжен в атмосфере азота в течение 4, 6 и 7 часов при 1000, 1080 и 1250°C соответственно. Толщины образцов контролировались с точностью до 1 мкм и были равны 490, 488 и 487 мкм для образцов №1, 2 и 3 соответственно.

Для обработки экспериментальных данных было использовано аналитическое выражение для ПИОС R_i в зависимости от дифракционных параметров структурного совершенства монокристалла. А именно, показателя статического фактора Дебая-Валлера L и интегральных коэффициентов эффективного поглощения для когерентной и диффузной компонент ПИОС μ_{ds}^0 и μ^* соответственно, полученные в [71,83,84,86]. Также использовались установленные соотношения между этими параметрами и их выражения через характеристики дефектов, а именно, средний радиус R_0 и концентрацию c .

Анализ экспериментальных данных позволил выделить чувствительные и информативные зависимости ПИОС от длин волн и отражений и осуществить их статистическую обработку, используя теоретические результаты работы [84] (см. формулы (1.2, 1.3, 1.4, 1.6) и таблицу 1.4).

Рис. 1.2 демонстрирует новое физическое явление, т.е. нарушение известного из кинематической теории "закона сохранения" ПИОС монокристаллов в случае Брэгг дифракции.

Таблица 1.4. Дифракционные параметры структурного совершенства отожженных образцов Si

№ образца	hkl	$L \cdot 10^3$	μ^* / μ_0
1	333	14 ± 1	–
2	333	38 ± 4	$0,23 \pm 0,12$
3	333	170 ± 20	$1,1 \pm 0,3$

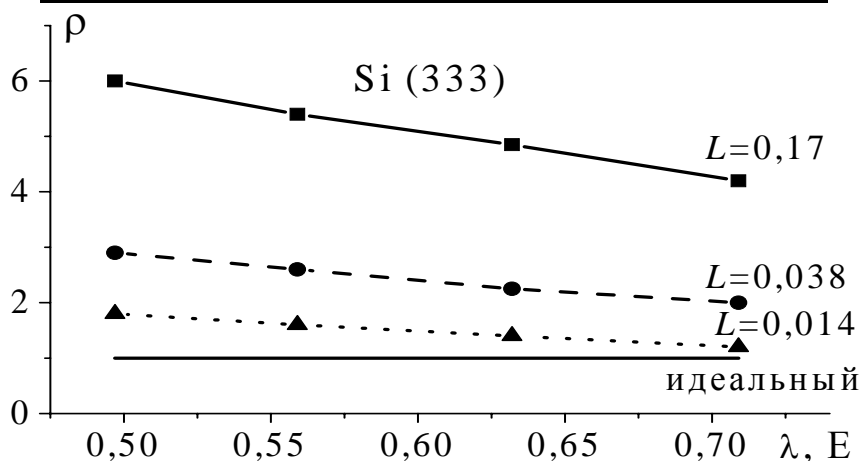


Рис. 1.2. Энергетические зависимости отношения ПИОС $\rho = R_i / R_{ip}$ для отожженных образцов Si №№1-3

На рис. 1.3 изображены абсолютные азимутальные зависимости ПИОС для реального и идеального кристаллов. Маркеры на рис. 1.2 и 1.3 представляют экспериментальные данные, а линии рассчитаны теоретически. Согласно упомянутому закону отношение ρ ПИОС R_i реальных монокристаллов с дефектами к ПИОС R_{ip} совершенного кристалла в зависимости от длины волны должно было бы равняться единице. Однако, рис. 1.2 показывает значительное отклонение ρ от единицы (на сотни процентов) даже для чрезвычайно малых искажений, значительно меньших, чем тепловые смещения атомов (как можно видеть из значений L , приведенных в таблице 1.4). Это явление обеспечивает уникальную чувствительность и информативность измерений ПИОС.

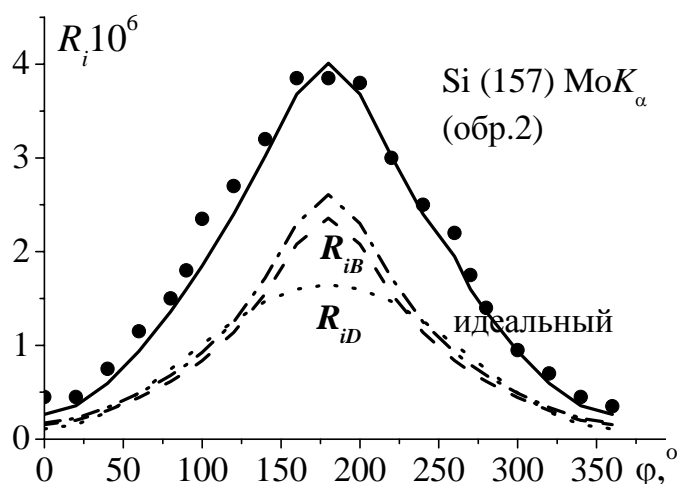


Рис. 1.3. Азимутальные зависимости полной ПИОС образца №2 (сплошная линия), её когерентной (штрих) и диффузной (пунктир) составляющих и ПИОС идеального кристалла (штрих-пунктир)

Из таблицы 1.4 видно, что значения показателя статического фактора Дебая–Валлера определяются с точностью до 10%, а относительная погрешность определения интегрального коэффициента эффективного поглощения диффузного фона μ^* уменьшается с увеличением степени нарушенности структуры образца. Определение L в случае пренебрежения μ^* фактически означает, что два существующих структурно чувствительных параметра заменяются одним эффективным параметром. Такое упрощение приводит к ошибке в определении L , которая значительно возрастает с увеличением длины волны излучения и достигает 30% для MoK_α -излучения, 50% для AgK_α -излучения для образца №3 и 20% для AgK_β -излучения для образца №2, т.е. увеличивается в три, пять и два раза соответственно. Этот результат подтверждает значительную роль эффекта экстинкции из-за рассеяния диффузной компоненты ПИОС на дефектах. Следовательно, это явление должно приниматься во внимание и, значит, новый параметр μ^* должен быть введен не только для улучшения информативности диагностики, но также для правильного количественного определения самого параметра L .

Таким образом, в работе [85] предложен принципиально новый подход, в котором вместо традиционных сложных измерений распределения интенсивности, формы линии, и т.д. измеряется только одно число (ПИОС), но в зависимости от длины волны излучения (рис. 1.2) или от азимутального угла вращения вокруг вектора рассеяния (рис. 1.3). Эти подходы более простые, более информативные, значительно более экспрессные, чем традиционные. Они особенно эффективны при использовании источников синхротронного излучения.

Следует также упомянуть, что кинематический "закон сохранения" ПИОС, т.е. независимость ПИОС от степени кристаллического совершенства, является следствием приближения однократного рассеяния, положенного в основу кинематической теории. В этом приближении ПИОС определяется числом атомов, а не их положениями. Когда степень нарушенности и смещений атомов из их идеальных положений увеличивается, диффузная компонента ПИОС растет, но для любой толщины кристалла ее вклад полностью компенсируется соответствующим уменьшением когерентной компоненты ПИОС, которое определяется статическим фактором Дебая–Валлера e^{-L} .

В строгой динамической теории рассеяния для кристаллов со случайно распределенными дефектами произвольного типа при описании диффузной и когерентной компонент ПИОС принимаются во внимание различные процессы многократного рассеяния и соответствующие когерентные эффекты экстинкции и аномального прохождения. Различия приводят к разному нелинейному поведению толщинных зависимостей этих компонент и невозможности полной взаимной компенсации при всех толщинах, т.е. к нарушению "закона сохранения" ПИОС.

Установленное значительное увеличение (как результат упомянутых особенностей динамических когерентных эффектов) относительного вклада диффузной компоненты ПИОС с увеличением толщины кристалла обеспечи-

вает уникальную чувствительность ПИОС к искажениям. Однако в случае динамической дифракции имеет место частичная компенсация влияния на саму ПИОС, поскольку искажения оказывают влияние разного знака на составляющие ПИОС, т.е. они уменьшают когерентную и увеличивают диффузную составляющие (см. рис. 1.2). Следовательно, чувствительность ПИОС к искажениям уменьшается по сравнению с чувствительностью к ее составляющим. Однако использование азимутальных зависимостей ПИОС, как показывают результаты расчетов, приведенные и описанные ниже, помогает частично разделить составляющие ПИОС и тем самым повысить ее чувствительность к СРД.

В §3 критерием правильности определения формы и размеров преципитатов Cu_3Si в образце 7 является равенство содержания меди в указанных преципитатах пределу ее растворимости при температуре отжига образца. На рис. 1.4 приведены зависимости от толщины $\rho(t)$, рассчитанные при $C_{\text{Cu}}=3 \cdot 10^{16}$ ат./см³ для плоских (сплошная линия) и сферических (штриховая линия) преципитатов Cu_3Si .

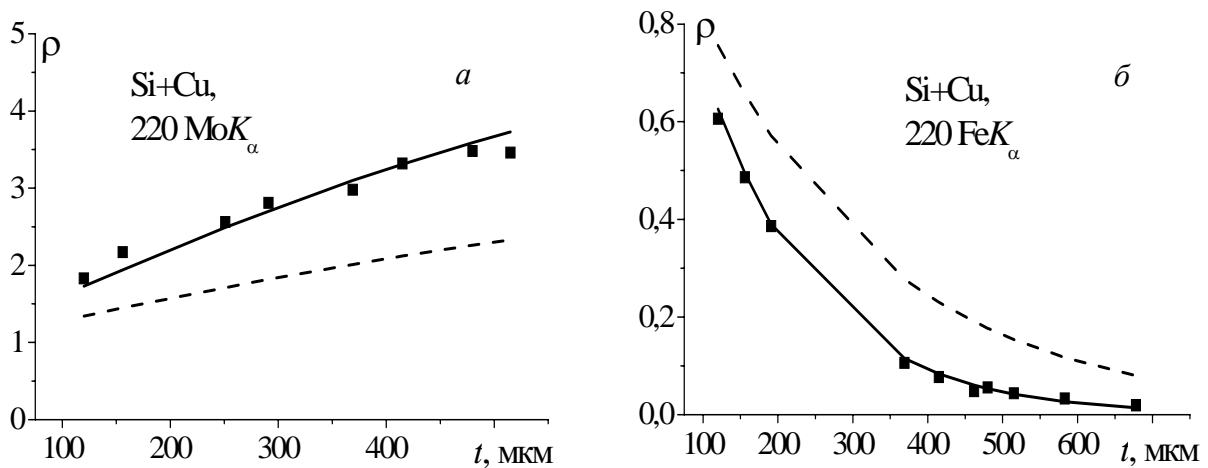


Рис. 1.4. Экспериментальные (маркеры) и рассчитанные (линии) толщинные зависимости интегральных интенсивностей ($\rho = R_j / R_j^{\text{идеал.}}$) Лауэ-дифракции излучений $\text{MoK}\alpha$ (а) и $\text{FeK}\alpha$ (б) при симметричном 220 отражении. Кроме рассчитанных при $C_{\text{Cu}}=3 \cdot 10^{16}$ ат./см³ кривых наилучшего фитирования, соответствующих плоским преципитатам Cu_3Si (сплошные линии) представлены кривые рассчитанные для сферических преципитатов Cu_3Si (штриховые линии)

Таблица 1.5. Величины показателя статического фактора Дебая-Валлера L и отношений интегральных коэффициентов эффективного поглощения за счет рассеяния на дефектах к коэффициенту нормального фотоэлектрического поглощения (μ_{ds}^0/μ_0 —для брэгговской составляющей, μ^*/μ_0 —для диффузной составляющей) для образца 7

Характеристики кластеров Cu_3Si	L	μ_{ds}^0/μ_0 ($\text{MoK}\alpha$)	μ^*/μ_0	μ_{ds}^0/μ_0 ($\text{FeK}\alpha$)
Сферические, $R_{cl}=0,034$ мкм $c_{cl}=2,49 \cdot 10^{-12}$	0,013	0,432	0,0366	0,113
Плоские, $R_{cl}=0,63$ мкм, $c_{cl}=8,59 \cdot 10^{-13}$	0,022	0,796	0,104	0,192

Из рис. 1.5 видно, что при использовании 333 Брэгг-отражения FeK_{α} -излучения различие между рассчитанными значениями ρ для плоских и сферических кластеров составляет 11,45%, а при использовании 333 Брэгг-отражения AgK_{α} -излучения – 40,76%. При использовании 111 Брэгг-отражения FeK_{α} -излучения различие между рассчитанными значениями ρ для плоских и сферических кластеров составляет 17,42%, а при использовании 111 Брэгг-отражения AgK_{α} -излучения – 43,75%.

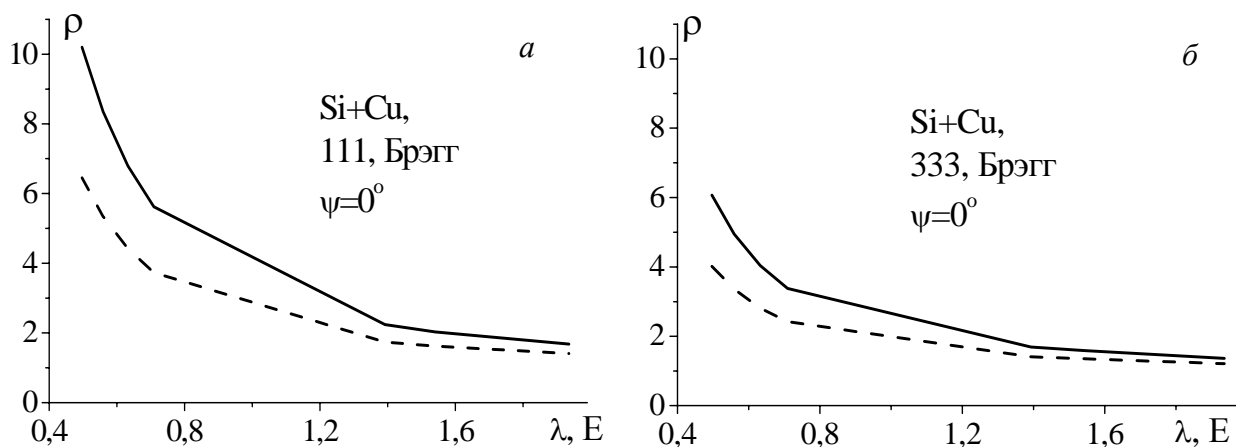


Рис. 1.5. Спектральные зависимости интегральных интенсивностей ($\rho = R_j / R_j^{\text{идеал.}}$) Брэгг-дифракции при симметричных 111 и 333 отражениях. Представлены рассчитанные при $C_{Cu} = 3 \cdot 10^{16}$ ат./см³ кривые, соответствующие плоским преципитатам Cu_3Si (сплошные линии) и кривые, соответствующие сферическим преципитатам Cu_3Si (штриховые линии)

Из рис. 1.6,а видно, что азимутальная зависимость ρ , рассчитанная для 157 MoK_{α} -рефлекса для плоских кластеров (сплошная линия), отличается от рассчитанной для сферических кластеров (штриховая линия) на 35,5% при кососимметричном отражении. Из рис. 1.6,б видно, что азимутальная зависимость ρ , рассчитанная для 880 AgK_{α} -рефлекса для плоских кластеров (сплошная линия), отличается от рассчитанной зависимости для сферических кластеров (штриховая линия) на 40% при кососимметричном отражении.

Из рис. 1.6,в видно, что азимутальная зависимость ρ , рассчитанная для 660 AgK_{α} -рефлекса для плоских кластеров (сплошная линия), отличается от рассчитанной для сферических кластеров (штриховая линия) на 50% при кососимметричном отражении. Это доказывает высокие чувствительность и информативность метода ПИОС и, следовательно, возможность однозначного определения характеристик СРД в геометрии Брэгга.

Из рис. 1.5 и 1.6 видно, что чувствительность ПИОС к наличию СРД при использовании жесткого излучения в геометрии Брэгга не меньше, чем в геометрии Лауэ в приближении "тонкого" кристалла (рис. 1.1). Это значительно расширяет круг материалов, подлежащих исследованию методом ПИОС, включая в него сильно поглощающие монокристаллы.

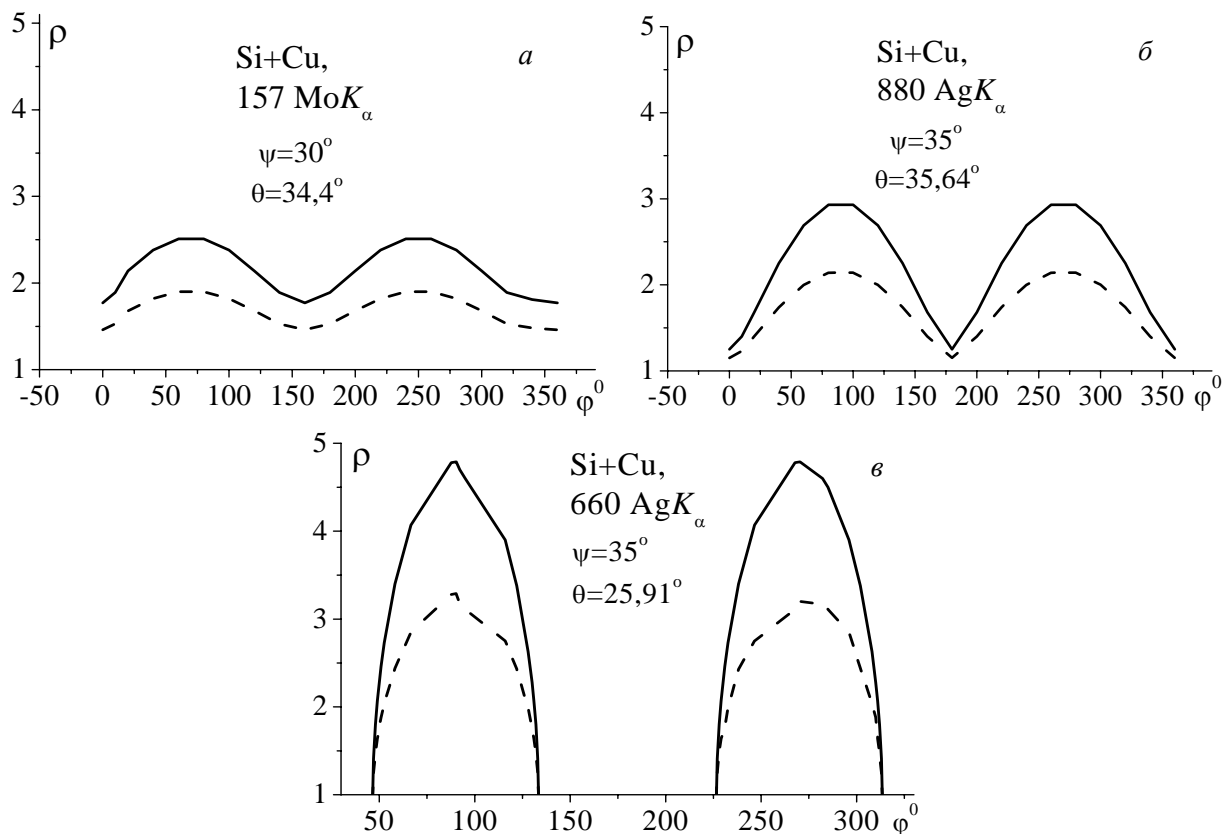


Рис. 1.6. Азимутальные зависимости интегральных интенсивностей ($\rho = R_j / R_j^{\text{идеал.}}$) Брэгг-дифракции при асимметричных $157\text{Mo}K_\alpha$ (а), $880\text{Ag}K_\alpha$ (б) и $660\text{Ag}K_\alpha$ (в) отражениях. Представлены рассчитанные при $C_{\text{Cu}} = 3 \cdot 10^{16} \text{ ат./см}^3$ кривые, соответствующие плоским преципитатам Cu_3Si (сплошные линии) и сферическим преципитатам Cu_3Si (штриховые линии)

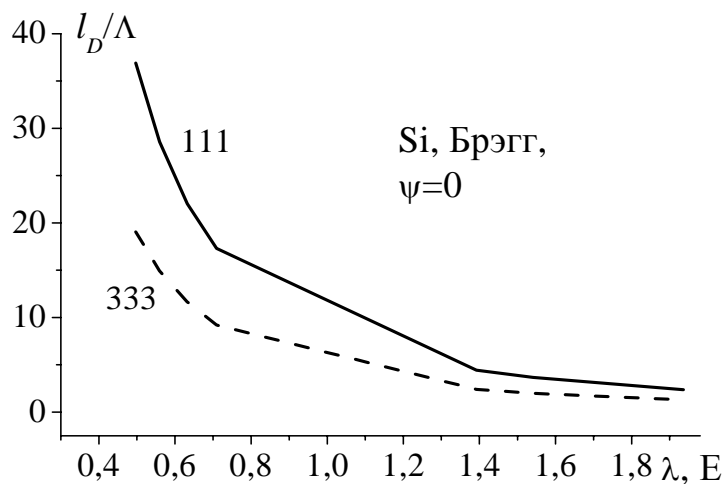


Рис. 1.7. Спектральные зависимости отношения глубины формирования диффузной составляющей ПИОС к глубине формирования когерентной составляющей ПИОС (l_D/Λ) при симметричных 111 и 333 Брэгг-отражениях

При использовании отражений по Брэггу информацию о дефектах несет практически только диффузная составляющая ПИОС. Вклад ее максимален при использовании оптимальных рефлексов, жесткого излучения и кососимметричных отражений по Брэггу. На рис. 1.7 и 1.8 приведены результаты расчетов энергетических и азимутальных зависимостей отношения глубины

монокристалла l_D , в которой формируется диффузная составляющая ПИОС R_D к глубине экстинкции Λ , в которой формируется брэгговская составляющая ПИОС R_c .

Из рис. 1.7 и 1.8 видно, что оптимальными для диагностики СРД являются Брэгг-рефлексы, при использовании которых глубина формирования диффузной составляющей значительно превышает глубину формирования брэгговской составляющей.

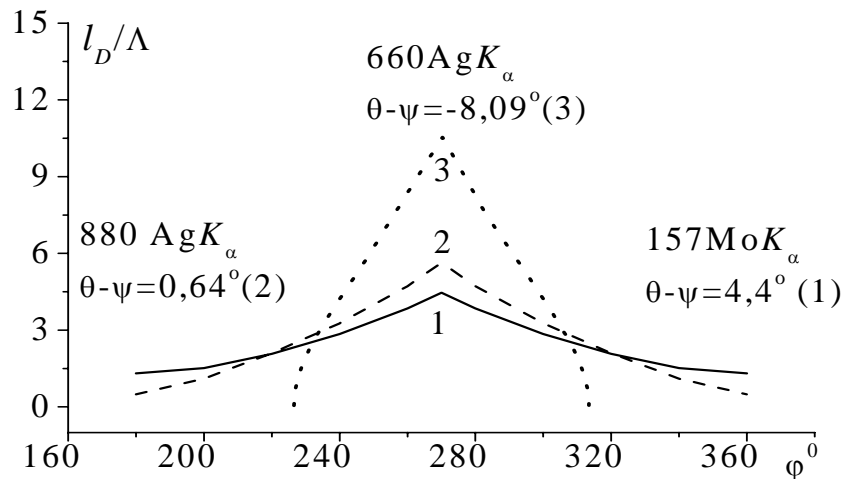


Рис. 1.8. Азимутальные зависимости отношения глубины формирования диффузной составляющей ПИОС к глубине формирования когерентной составляющей ПИОС (l_D/Λ) при асимметричных $157\text{Mo}K_\alpha$ (1), $880\text{Ag}K_\alpha$ (2) и $660\text{Ag}K_\alpha$ (3) Брэгг-отражениях

§6. Выводы

Экспериментально получено подтверждение нового явления – нарушения при динамической дифракции закона сохранения (независимости от величины искажений) полной интегральной отражательной способности (ПИОС) монокристаллов в геометриях дифракции как по Лауэ, так и по Брэггу. Установлена уникальная чувствительность к характеристикам дефектов этого явления. Показано, что при динамической дифракции в случае Брэгга нормализованная на ПИОС идеального кристалла ПИОС кристалла с дефектами существенно (в несколько раз) превышает единицу даже для слабых искажений (для которых показатель статического фактора Дебая–Валлера $L < 0,1$). Это становится возможным за счет аномально большого роста вклада диффузной составляющей, преобладающего над уменьшением когерентной составляющей ПИОС с ростом концентрации и мощности дефектов. Показано, что при дифракции по Лауэ наблюдается динамический эффект изменения знака влияния дефектов на нормализованную ПИОС кристалла с дефектами при переходе от приближения "толстого" к приближению "тонкого" кристаллов. В "толстом" кристалле – резкое уменьшение до десятых – сотых частей единицы за счет определяющей роли эффекта аномального прохождения и в "тонком" кристалле, как и в случае Брэгга – существенное превышение единицы в несколько раз за счет преобладающего увеличения диффузной составляющей ПИОС.

ГЛАВА 2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ И УСТАНОВЛЕНИЕ ДИФРАКЦИОННОЙ ПРИРОДЫ В КРИСТАЛЛАХ С НЕСКОЛЬКИМИ ТИПАМИ ДЕФЕКТОВ НОВОГО ЯВЛЕНИЯ – ИЗМЕНЕНИЯ ИЗБИРАТЕЛЬНОСТИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПИОС И ОПРЕДЕЛЯЮЩЕГО ТИПА ДЕФЕКТОВ В РЕЗУЛЬТАТЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ

§1. Введение

Для плодотворного взаимодействия между экспериментом и дальнейшим развитием статистической динамической теории эксперименты целесообразно выполнять на образцах с однородно распределенными дефектами, характеристики которых хорошо известны.

Из-за своей технологической важности дефектная структура, создаваемая при отжигах в монокристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского, и отожженных при температурах между 873 и 1573 К, широко изучалась различными методами, такими как инфракрасная спектроскопия и химическое травление в сочетании с использованием оптической микроскопии [1], электронная микроскопия [2], малоугловое рассеяние нейтронов [3], рентгеновская топография [4,5], аномальное прохождение рентгеновских лучей [6], дифрактометрия γ -излучения [7], обратное рассеяние нейтронов [8], диффузное рассеяние рентгеновских лучей [9-11] и дифракция высокоэнергетического синхротронного излучения [12].

В растворенном состоянии атомы кислорода локализованы в местах внедрений в матрице кремния, занимая положения разорванных центральных связей. При термообработке при температурах выше 823К атомы кислорода диффундируют сквозь решетку, чтобы образовать мелкие агломераты, которые вырастают в частицы преципитата SiO_2 . Тенденция образования преципитатов SiO_2 сильно зависит от концентрации кислорода, но также и от концентрации других примесей, таких, как углерод. Преципитация кислорода в бездислокационном кремнии при 1023К была систематически изучена методом малоуглового рассеяния нейтронов [13,14].

Для получения информации о дефектной структуре реальных кристаллов и проверки статистических динамических теорий было осуществлено много экспериментов. Впервые осцилляции интегральной отражательной способности (маятниковое решение – *Pendellösung*) изучались при использовании рентгеновских лучей Като и Лангом [15] на клинообразных бездефектных монокристаллах кремния. Используя тепловые нейтроны, авторы работы [16] измерили в геометрии Лауэ интегральную отражательную способность как функцию от толщины плоскопараллельных кристаллических пластинок. От начальной толщины 204 мкм пластинка была последовательно стравлена до толщины 6 мкм, и наблюдались теоретически предсказанные осцилляции маятникового решения. Осцилляции интегральной отражательной способности легче измерять, наклоняя образец таким образом, чтобы сохранялось направление вектора диф-

рации, но изменялась эффективная толщина образца. Этот метод был предложен авторами работы [17] и назван методом наклона. Он был впервые применен при использовании дифракции нейтронов [18], когда таким способом наблюдались осцилляции маятникового решения на достаточно совершенных монокристаллах Ge. Подобные измерения были осуществлены на пластинках монокристаллического кремния с плотностью дислокаций до 100 на мм^2 и на пластинках с плотностью дислокаций выше 5000 на мм^2 [19]. Результаты, полученные этим методом для пластин с малой плотностью дислокаций, Олехновичу с соавторами удалось интерпретировать при использовании статистической динамической теории Като [20]. Однако при этом между экспериментальными данными и наилучшей подгонкой наблюдалось заметное расхождение. Результаты, полученные Олехновичем с соавторами для пластин с высокой плотностью дислокаций, не удалось интерпретировать даже качественно при использовании статистической динамической теории Като [21,22].

Осцилляции интегральной интенсивности при изменении толщины образца и аномальное прохождение плоско поляризованного MoK_α -излучения изучены для бездислокационных содержащих кислород монокристаллов кремния Олехновичем и Карпеем [23]. Из измерений при использовании различных порядков отражений они оценили тип и размер дефектов. Теория Като применялась для определения концентрации и среднего размера микродефектов в монокристаллах кремния из осцилляций маятникового решения, измеренных при использовании σ -поляризованного MoK_α -излучения (фактор поляризации $C=1$) и метода наклона для образцов после выращивания с концентрациями кислорода в интервале 10^{16} - 10^{18} атомов кислорода в одном см^3 [24]. Из анализа полученных ими данных Воронков с соавторами [25] установили наличие микродефектов со средним радиусом порядка 70 Å и концентрацией около 10^{13} см^{-3} в монокристаллах кремния после выращивания, содержащих 10^{18} атомов кислорода на см^3 . Наблюдаемое изменение длины корреляции τ с углом наклона авторы объяснили проявлением анизотропии поля смещений вокруг дефектов.

Как впервые было показано при изучении дифракции нейтронов на высоко совершенных монокристаллах кремния, осцилляции маятникового решения могут быть измерены с большой точностью путем изменения длины волны дифрагированного излучения [26,27]. Авторы работы [28] измерили биения интенсивности маятникового решения, используя белое рентгеновское излучение ($0,15 < \lambda < 0,8 \text{ Å}$) на плоскопараллельных пластинах кремния, выращенных по методу Чохральского и подвергнутых термической обработке, при использовании твердотельного детектора. Дефекты были образованы путем отжига пластин толщиной 0,5 мм в атмосфере аргона в течение времени от 24 часов до 100 часов при температурах в интервале от 1123 до 1273К. Экспериментальные данные, измеренные для отражений разных порядков, не удалось количественно описать с помощью статистической динамической теории Като.

В работе [29] экспериментальная апробация статистических динамиче-

ских теорий Като [21,22], а также Беккера и Аль Хаддада [30] проводилась на выращенных по методу Чохральского образцах Si, отожженных при 770°C (II.2 – с начальным содержанием $7,7 \cdot 10^{17}$ атомов кислорода на см^3) и 750°C (VII.1-VII.3 – с начальным содержанием $1,8 \cdot 10^{18}$ атомов кислорода на см^3). Измерения интегральных отражательных способностей проводились с использованием γ -излучения с энергией 316кэв. Выражение для интегральной отражательной способности, полученное в рамках статистической динамической теории Беккером и Аль Хаддадом [30], хорошо описало экспериментальные данные, полученные авторами работы [29]. Авторами [29] рассмотрены две модели кластерирования. В образце II.2 молекулы SiO_2 образуют большие пластинчатые преципитаты с размерами $280 \times 280 \times 22 \text{ \AA}^3$ (модель 1). Эти преципитаты создают достаточно сильное дальнедействующее поле напряжений, чтобы вызвать концентрацию заметного количества диффузного рассеяния вокруг узла обратной решетки. В образцах VII.1-VII.3 преципитаты являются сферическими с диаметрами порядка только 40 \AA (модель 2). Подгонка полной формулы показала, что параметр τ (длина корреляции) для образцов, исследованных в [29], очень мал. Это означает, что несовершенства в образцах могут быть охарактеризованы одним статическим фактором Дебая-Валлера. Отношение значений статического фактора Дебая-Валлера, определенных для отражений 220 и 440, дали возможность определить произведение параметра напряжения ϵ и радиуса R_0 преципитатов SiO_2 , которые предполагались сферическими, согласно данным малоуглового рассеяния нейтронов. Значения R_0 , определенные прямо из малоуглового рассеяния нейтронов, совпали с размерами преципитатов SiO_2 , полученными для образцов VII.1-VII.3 из отношения L_{220}/L_{440} , что является подтверждением теории [30].

Величины теплового и статического факторов Дебая-Валлера одного порядка, и, следовательно, полная интенсивность рассеяния на дефектах должна быть сравнимой с интенсивностью термодиффузного рассеяния. Тот факт, что интенсивность рассеяния на дефектах может быть измерена с применением дифрактометрии γ -излучения, подтверждает, что рассеяние на дефектах сильно локализовано в k -пространстве вокруг вектора обратной решетки, что было проиллюстрировано авторами работы [29] путем картографирования диффузного рассеяния вокруг \vec{H}_{220} для случая дифракции Лауэ для образца VII.2 с помощью высоко разрешающего трехкристального дифрактометра, использующего синхротронное излучение с энергией 150 Кэв. В работе [29] утверждалось, что, вследствие этого только молекулы SiO_2 , сгруппировавшиеся в кластеры, дают вклад в интегральную отражательную способность, измеренную с применением дифрактометрии γ -излучения, а вклад мелких дефектов наиболее вероятно должен исчезнуть в фоне измеренной кривой качания. Это должно было бы привести к более слабому диффузному рассеянию, шире распространенному в k -пространстве, и вклад от диффузного рассеяния в измеренную интегральную отражательную способность должен был бы быть меньше, чем в случае образца II.2.

Однако наблюдалось обратное. Диффузное рассеяние от образцов VII.1-VII.3 оказалось намного сильнее, чем от образца II.2. Авторам [29] пришлось предположить, что относительно малые преципитаты SiO_2 слабо связаны внутри больших кластеров, которые создают дальнедействующие поля напряжений, обуславливающие сосредоточение большого количества рассеяния дефектами вокруг узлов обратной решетки.

Авторы [29] отмечали, что распределение преципитатов в не содержащем других дефектов монокристалле является, возможно, самым простым видом дефектной структуры для изучения с помощью статистической динамической теории. При использованных в [29] коротких длинах волн брэгговский пик, сформированный когерентным рассеянием, сильно локализован в k -пространстве, и его перекрытие с диффузным рассеянием несмотря на то, что оно ограничено в области размерами всего 10^{-3} \AA^{-1} , очень мало. Исследования монокристаллов кремния, отожженных при температурах выше 1173K по мнению авторов [29] представили бы более весомые, убедительные доказательства справедливости динамической статистической теории, поскольку в таких кристаллах на дифракцию должна оказывать решающее влияние близко действующая корреляция, т. к. при таких температурах в дополнение к большим преципитатам SiO_2 образуются дислокации и/или дефекты упаковки. В настоящей главе описана апробация на таких монокристаллах обобщенной Молодкиным с соавторами в работах [31-34,35] для случая несовершенных монокристаллов, содержащих случайно распределенные дефекты, динамической теории рассеяния Эвальда [36], Бете [37] и Лауэ [38].

§2. Физическое обоснование принципиальной возможности использования толщинных зависимостей ПИОС, полученных в случаях "тонкого" и "толстого" кристаллов в геометрии Лауэ, для определения величин их структурно чувствительных параметров

В работах [31-34,35] получены аналитические выражения, описывающие спектральные и азимутальные зависимости ПИОС динамически рассеивающего монокристалла с дефектами. Наличие этих выражений для случаев дифракции Лауэ и Брэгга, а также для жесткого и мягкого рентгеновских излучений (1.1)-(1.6) открывает принципиальную возможность определения характеристик дефектов одного и того же образца в различных условиях дифракции. Как правило, как будет показано ниже, однозначно и с достаточной точностью определить по одной из указанных зависимостей три структурно чувствительных параметра L , μ_{ds}^0 и μ^* невозможно, так как эти зависимости мало отличаются от линейных. Но наличие аналитических выражений и экспериментальных данных для ПИОС, измеренных в различных физических условиях, могло бы позволить решить поставленную задачу. Кроме того, совпадение типа и величин характеристик дефектов структуры одного и того же реального монокристалла при определении их в различных условиях эксперимента явилось бы критерием правильности диагностики. Однако при пе-

переходе от одного из экспериментальных случаев к другому изменяются и значения искомых параметров, т.е. число их растет. С помощью формул (1.2)-(1.4), L , μ_{ds}^0 и μ^* различным образом выражаются через характеристики разного типа дефектов, а также зависят от условий дифракции (длины волны, угла Брэгга, азимутального угла и т. д.). Это позволяет, в принципе, выразить L , μ_{ds}^0 и μ^* для разных условий дифракции друг через друга и, таким образом, уменьшить число искомых неизвестных параметров.

Однако, заранее тип дефектов в объеме образца неизвестен. По этой причине в общем случае дефектов все искомые параметры должны формально считаться строго независимыми и, следовательно, сформулированная задача диагностики представляется принципиально неразрешимой. Однако изложенные ниже физические представления и созданная авторами [44] модель позволили решить поставленную проблему.

Так, более детальный анализ формул для интегральных коэффициентов экстинкции μ_{ds}^0 и μ^* показывает, что зависимости этих величин от дифракционных параметров, инструментальных факторов и условий эксперимента, с одной стороны, и от типа и характеристик дефектов, с другой, не факторизируются. Т.е. формулы для этих коэффициентов μ_{ds}^0 и μ^* не могут быть представлены в виде двух независимых друг от друга сомножителей, каждый из которых зависит только от параметров одной из двух указанных групп. Всегда присутствует отличный от единицы третий сомножитель, который зависит неразделимым образом и от условий эксперимента, и от характеристик дефектов, и определить зависимость μ_{ds}^0 и μ^* от дифракционных параметров, не задавая тип и характеристики дефектов, невозможно.

Однако, как будет показано ниже при анализе экспериментальных данных путем моделирования их с использованием приведенных в работе формул (1.1), (1.5), (1.6), в каждом конкретном экспериментальном случае кривая ПИОС оказывается избирательно чувствительной, главным образом, только к одному из трех указанных параметров. Значительные изменения остальных могут приводить к незначительным (в пределах разброса экспериментальных данных) изменениям кривых ПИОС. Это позволило предложить модель, в которой искомые параметры делятся на две группы. Первая группа – это параметры, которые слабо влияют на кривые ПИОС, и поэтому для них правомерно пренебрежение третьим (смешанным) из указанных выше сомножителей, т.к. замена его единицей не приводит к изменениям кривых ПИОС, превышающим экспериментальный разброс. Следовательно, в пределах ошибки эксперимента их зависимости от дифракционных параметров могут быть установлены без конкретизации типа и характеристик дефектов, которые должны быть только фиксированы, что всегда может быть справедливо для заданного образца. Это позволяет исключить такие параметры как зависимые, выразив их как функции λ , θ , α и т.д. по приближенным модифицированным, как указано выше, формулам через остальные параметры, к которым кривые ПИОС чувствительны. Эти последние параметры составляют другую группу –

группу независимых варьируемых параметров, к числу которых отнесены параметры наиболее существенно влияющие на кривые ПИОС, т.е. к которым эти кривые избирательно чувствительны. Последнее (разделение на две группы и установление принадлежности к ним параметров) осуществляется путем моделирования и анализа экспериментальных данных на первом этапе диагностики.

Такое установление зависимых и независимых параметров для каждого исследуемого образца и для каждой экспериментальной ситуации отдельно проводится на основе теоретического анализа экспериментальных данных, которые представлены маркерами на рис.2.1-2.3, без конкретизации типа и характеристик дефектов.

Апробация предложенного способа определения структурно чувствительных параметров динамического рассеяния была выполнена в работе [44] на бездислокационном образце Si толщиной $t_0=490$ мкм, вырезанном по плоскости (111) из слитка, выращенного по методу Чохральского в направлении [111] и имеющем концентрацию кислорода $1,1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и концентрацию углерода $<1,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Образец был отожжен в течение 6 ч. при температуре 1080°C .

Измерение ПИОС образца проводилось на ДКД в геометриях Лауэ и Брэгга с использованием MoK_α , AgK_α и CuK_α -излучений от обычных рентгеновских трубок. При всех измерениях был использован монохроматор с Si 220-отражением. При измерениях в геометрии Лауэ методом наклона изменялась толщина кристалла. При измерениях в геометрии Брэгга – длина экстинкции.

На рис. 2.1-2.3 маркерами показаны результаты измерений ПИОС R_i от толщины кристалла в геометрии Лауэ (рис.2.1, 2.3) для рефлексов 220CuK_α , 440CuK_α , 220MoK_α , 440MoK_α , 220AgK_α , 440AgK_α , и азимутальных в геометрии Брэгга (рис.2.2) зависимостей ПИОС для рефлексов 220CuK_α , 220AgK_α , 440CuK_α и 440AgK_α .

Значения показателя статического фактора Дебая-Валлера L и интегральных коэффициентов экстинкции когерентной (μ_{ds}^0) и диффузной (μ^*) компонент ПИОС определялись путем сравнения экспериментальных азимутальных зависимостей ПИОС и зависимостей ПИОС от толщины кристалла с соответствующими зависимостями, рассчитанными по формулам динамической теории для ПИОС монокристалла, содержащего равномерно распределенные в объеме дефекты. При этом L , μ_{ds}^0 и μ^* считаются независимыми варьируемыми параметрами.

Кроме того, для демонстрации на этих рисунках чувствительности полученной расчетной зависимости к величинам параметров динамического рассеяния, последовательно каждый из параметров, найденных на втором этапе диагностики, увеличен, к примеру, на 50%, без изменения при этом значений других параметров. В случае Брэгг-дифракции (рис.2.2) рассчитанные при $1,5\mu_{ds}^0$ и $1,5\mu^*$ зависимости ρ сливаются с рассчитанной зависимостью, соответствующей минимальному значению коэффициента добротности

подгонки (для L , μ_{ds} , μ^*).

Как видно из рис. 2.1-2.3, в каждом из рассмотренных случаев дифракции зависимости проявляют наибольшую чувствительность к разным параметрам. В каждом из этих случаев один из таких параметров динамического рассеяния оказывается независимым в принятом нами смысле, т.е. варьируется, а остальные (зависимые) пересчитываются друг через друга по огрубленным указанным выше способом формулам и таким способом исключаются.

При этом на втором этапе независимые параметры определялись путем совместного фитирования различных экспериментальных зависимостей методом наименьших квадратов. В результате получены следующие значения параметров:

$$\begin{aligned}\mu_{ds220}^0 &= (12,5 \pm 0,2) \text{ см}^{-1}, \quad \mu_{ds440}^0 = (14 \pm 0,6) \text{ см}^{-1}, \\ L_{220} &= 0,013 \pm 0,001, \quad L_{440} = 0,033 \pm 0,001, \\ \mu_{220\text{Mo}K_\alpha}^* &= (6,8 \pm 0,4) \text{ см}^{-1}; \quad \mu_{440\text{Mo}K_\alpha}^* = (5,5 \pm 0,5) \text{ см}^{-1}.\end{aligned}$$

В целом физическая причина целесообразности совмещения экспериментальных данных, полученных в разных экспериментальных условиях (геометрии дифракции Лауэ и Брэгга, случаи толстого и тонкого кристаллов, различные отражения и т.д.), с целью повышения информативности диагностики методом ПИОС состоит в следующем.

Результаты теоретического и экспериментального анализов представлены на рис.2.1-2.3.

Из рис. 2.1-2.3 видно, что физические механизмы влияния дефектов кристалла на зависимости ПИОС, измеренные в различных указанных выше экспериментальных условиях, принципиально различны. В результате различен даже знак и тем более величина влияния одних и тех же дефектов в этих разных случаях на величину отклонения ПИОС от ее значения в идеальном кристалле. Это также, в конечном счете, и обусловило избирательную чувствительность различных экспериментов к различным параметрам динамического рассеяния и позволило исключить "приблизительно зависимые" параметры предложенным здесь способом.

Следует отметить, что при определении величин параметров динамического рассеяния рентгеновских лучей методом ПИОС в геометрии Лауэ, если толщина образца изменяется путем его наклона, необходимо учитывать зависимость μ_{ds} и μ^* от угла поворота образца α вокруг вектора \vec{H} . Характер изменения μ_{ds} и μ^* с изменением величины угла α зависит от типа и характеристик дефектов, хаотически распределенных в объеме образца, которые на данном этапе диагностики не должны быть конкретизированными. Однако экспериментальная проверка показала, что для Лауэ-рефлексов $220\text{Cu}K_\alpha$, $440\text{Cu}K_\alpha$, $220\text{Mo}K_\alpha$, $440\text{Mo}K_\alpha$, $220\text{Ag}K_\alpha$ и $440\text{Ag}K_\alpha$, во всем интервале изменения углов поворота α $\mu_{ds}^0(\alpha) = \mu_{ds}^0(0)$; $\mu^*(\alpha) = \mu^*(0)$ в пределах погрешности определения μ_{ds}^0 и μ^* .

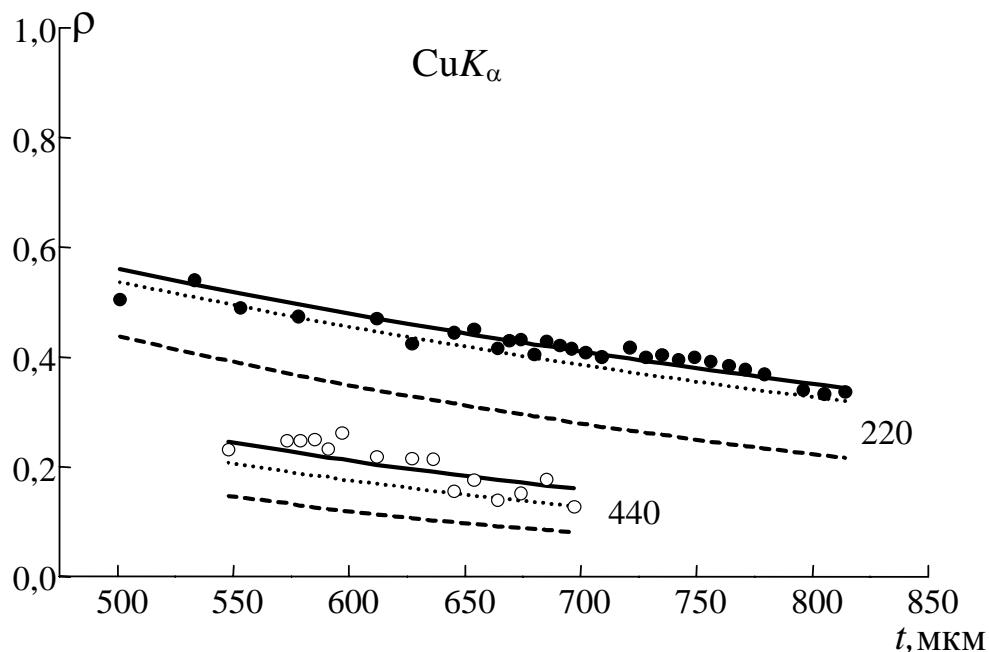


Рис. 2.1. Толщинные зависимости интегральных интенсивностей ($\rho=R_i/R_{\text{идельного кристалла}}$) Лауэ дифракции излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$ при симметричных 220 и 440 отражениях. Кроме расчетных кривых наилучшего фитирования (сплошные линии), представлены теоретические кривые для увеличенных на 50% значений параметра L_H (пунктирные линии) и параметра μ_{ds}^0 (штриховые линии)

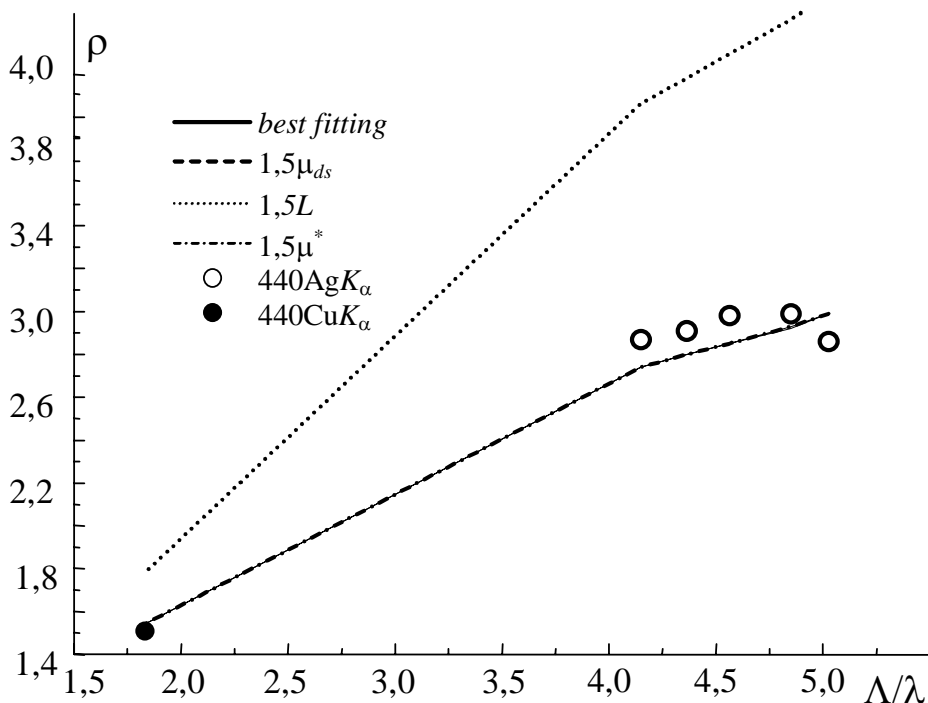


Рис. 2.2. Спектрально-азимутальная зависимость интегральных интенсивностей ($\rho=R_i/R_{\text{совершенного кристалла}}$) Брэгг-дифракции излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$ и $\text{AgK}_{\alpha 1}$ при асимметричном 440 отражении

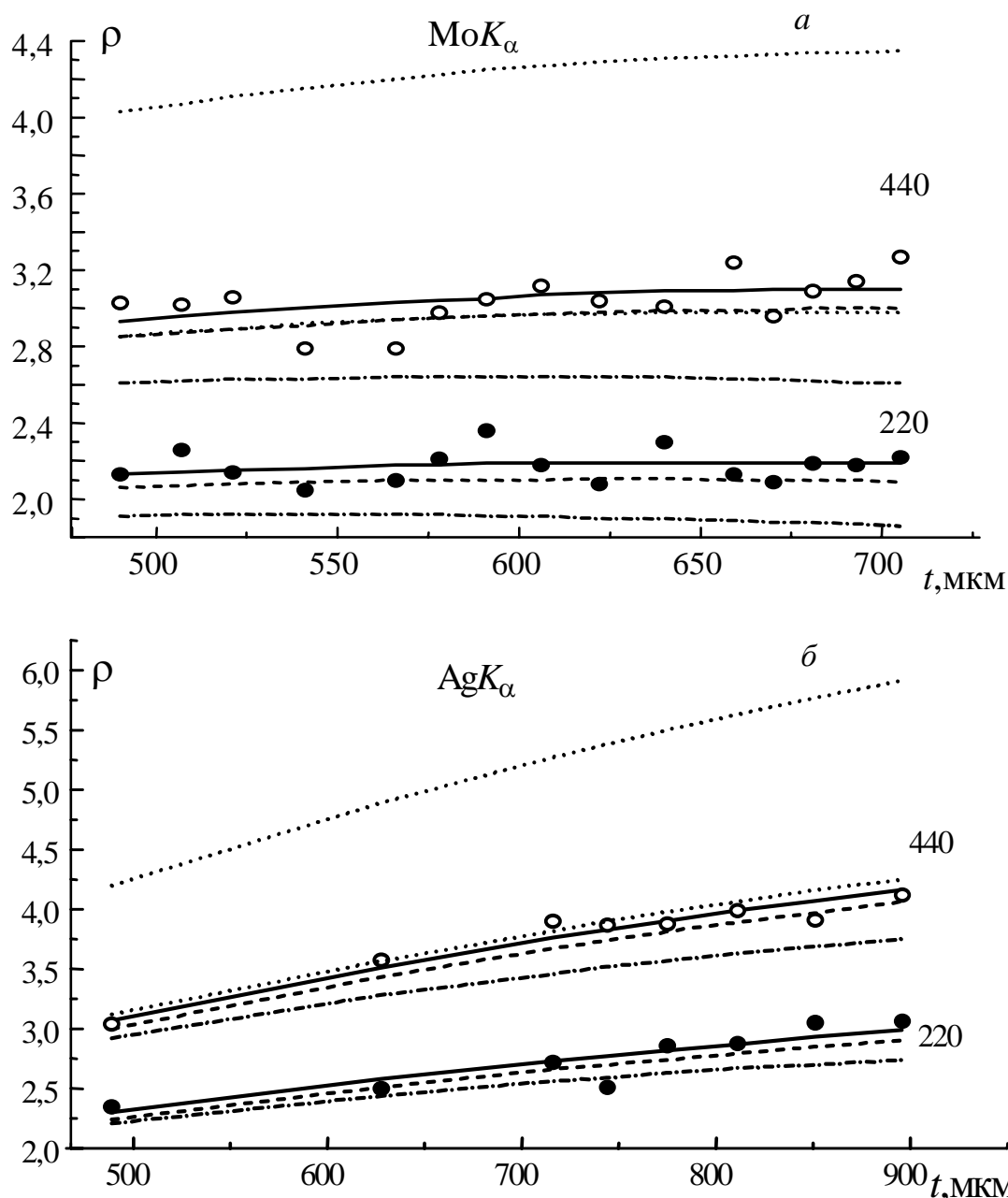


Рис. 2.3. Толщинные зависимости интегральных интенсивностей ($\rho=R_i/R_{\text{идеального кристалла}}$) Лауэ-дифракции излучения $\text{MoK}_{\alpha 1}$ (а) и $\text{AgK}_{\alpha 1}$ (б) при симметричных 220 и 440 отражениях. Кроме расчетных кривых наилучшего фитирования (сплошные линии) демонстрируются теоретические кривые при увеличенных на 50% величинах параметра μ_{ds} (штриховые линии), параметра L (пунктирные линии) и параметра μ^* (штрих-пунктирные линии)

§3. Проблема неоднозначности диагностики как эффект наблюдаемого изменения характеристик дефектов с изменением порядка отражений

Величина отношения определенных нами значений показателей статистических факторов Дебая-Валлера $L_{440}/L_{220}=2,6\pm 0,5\approx (H_{440}/H_{220})^{3/2}=2,83$ свидетельствует о том, что преобладающим типом дефектов в исследуемом образце могут быть дислокационные петли или крупные кластеры.

На основе найденных значений структурно чувствительных параметров возможно непосредственное отыскание характеристик дефектов в кристалле.

Диагностику, т.е. поиск типа и характеристик дефектов путем моделирования полученных из эксперимента наборов параметров L , μ_{ds} , μ^* , начинают с предположения о самом простом случае дефектов только одного какого-либо типа. Для поиска двух параметров, радиуса и концентрации, только одного типа дефектов необходимо и достаточно использовать не менее двух каких-либо из имеющихся структурно чувствительных дифракционных параметров. Так, используя выражения (1.2) и (1.4) для модели дислокационных петель и соответствующие им найденные дифракционные параметры, авторы [44] вычислили значения среднего радиуса R_{Π} и концентрации c_{Π} дислокационных петель в исследуемом образце, а также рассчитали их объемную долю. Объемная доля точечных дефектов в исходном образце составляла, как следует из данных о содержании в образце примесей, $\rho_{обр}=2,4 \cdot 10^{-5}$.

Поскольку отжиг не приводит к появлению в образце новых точечных дефектов, а лишь вызывает их перераспределение с образованием дислокационных петель и кластеров, объемная доля дефектов в результате отжига не должна измениться. И если модель дефектной структуры выбрана правильно, должно выполняться соотношение $\rho_{расч}=\rho_{обр}$, которое может служить дополнительным, независимым критерием корректности результатов диагностики. При использовании величин параметров динамического рассеяния L и μ_{ds} , определенных для рефлекса 220 CuK_{α} , были получены значения $R_{\Pi}=0,17 \pm 0,02$ мкм, $c_{\Pi}=(2,4 \pm 1) \cdot 10^{-12}$, $\rho_{\Pi} \sim 2 \cdot 10^{-6}=0,08\rho_{обр}$; при использовании величин L_{440} и μ_{ds440}^0 получены значения $R_{\Pi}=(0,12 \pm 0,01)$ мкм, $c_{\Pi}=(6 \pm 1) \cdot 10^{-12}$, $\rho_{\Pi} \sim 2,5 \cdot 10^{-6}=0,1\rho_{обр}$.

Аналогично, используя выражения (1.2)-(1.4) для модели кластеров, вычислялись значения среднего радиуса $R_{кл}$ и концентрации $c_{кл}$ кластеров в исследуемом образце. При использовании величин параметров динамического рассеяния, определенных для рефлекса 220CuK_{α} , были получены значения $R_{кл}=(0,039 \pm 0,003)$ мкм ($\eta=19$), $c_{кл}=(1,3 \pm 0,7) \cdot 10^{-11}$, $\rho_{кл} \sim 1,6 \cdot 10^{-4}=6,7\rho_{обр}$; при использовании величин L_{440} и μ_{ds440}^0 получены значения $R_{кл}=(0,055 \pm 0,003)$ мкм ($\eta=56$), $c_{кл}=(2,3 \pm 0,6) \cdot 10^{-12}$, $\rho_{кл} \sim 8 \cdot 10^{-5}=3,37\rho_{обр}$.

Согласно критерию, указанному в (1.4), кластеры таких размеров в данном случае дифракции являются крупными. Таким образом, результаты диагностики с привлечением значений L и μ_{ds} также как и отдельный анализ значений L_{hkl} для разных hkl формально допускают на первый взгляд возможность преобладания в образце как дислокационных петель, так и крупных кластеров. С одной стороны, такая неоднозначность результатов диагностики свидетельствует о необходимости привлечения дополнительных экспериментальных данных, однако, с другой стороны, более детальный анализ показывает, что разброс значений параметров R и c (как в случае петель, так и в случае кластеров), полученных для разных отражений, более, чем в 4 раза превышающий погрешность их определения, а также отличие рассчитанной объемной доли дефектов от $\rho_{обр}$ уже фактически свидетельствуют о некорректности модели дефектов только одного типа и о необходимости усложне-

ния модели наряду с дальнейшим привлечением дополнительных данных. Другими словами, никакой один тип дефектов не позволяет достичь согласия теоретических и экспериментальных данных с точностью до ошибки эксперимента одновременно для нескольких разных (как правило, более чем двух) экспериментальных условий, для данного образца.

Моделирование имеющихся экспериментальных данных однозначно показывает необходимость введения одновременно трех или более типов дефектов, дающих определяющий вклад в различные экспериментально найденные структурно чувствительные дифракционные параметры.

Действительно, как видно из формул (1.2)-(1.4), параметры L , μ_{ds} и μ^* имеют различные (как друг от друга для фиксированного типа дефектов, так и для дефектов различного типа при фиксированном параметре) зависимости от λ , θ , φ , c и R . Это является основой того, что относительный вклад в эти параметры дефектов разного типа должен изменяться при изменении условий эксперимента (λ, θ, φ). В результате, в одних условиях эксперимента определяющий вклад в какие-то из искомым параметров могут давать дефекты одного типа, а в других – другого. Это позволяет отличать кристаллы с дефектами нескольких типов от кристаллов с одним типом дефектов. Единственный тип дефектов во всех условиях дифракции является определяющим для всех параметров динамической дифракции. Поэтому рассчитанные для заданных характеристик дефектов такого одного типа параметры L , μ_{ds} и μ^* , совпадающие с экспериментальными их значениями в одних условиях эксперимента, при пересчете их для других экспериментальных условий также должны совпадать с соответствующими экспериментальными значениями. Если этого не происходит, то следовательно, в кристалле присутствуют дефекты не только одного типа.

§4. Определение методом ПИОС в геометрии Лауэ величин характеристик случайно распределенных в монокристалле микродефектов нескольких известных типов

В аналогичных описываемому в настоящем разделе монокристаллах кремния, содержащих $1,1 \cdot 10^{18}$ атомов кислорода на см^3 и подвергнутых отжигу при 1080°C , согласно результатам исследований методами избирательного травления, поглощения инфракрасного излучения и малоуглового рассеяния нейтронов [1], концентрация преципитатов аморфного SiO_2 должна составить $1,12 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, а равновесная концентрация кислорода в этих преципитатах – $1,585 \cdot 10^{17}$ атомов на см^3 .

В работе [39] показано, что энергетически оптимальной формой преципитата в собственной решетке является диск с толщиной, которая увеличивается приблизительно пропорционально квадратному корню от радиуса диска. Из этого соотношения выведен закон роста преципитата $r \propto t^{2/3}$, где r – радиус преципитата, а t – время отжига образца. Автором [39] действие этого закона проанализировано для случая роста преципитатов кислорода в кремнии. При

этом снятие напряжений решетки, обусловленных кластерами, может сопровождаться выдавливанием призматических петель и/или образованием петель внедрения. Согласно прямым наблюдениям [40] независимо от длительности отжига и степени пересыщения кислородом полная площадь дислокационных петель пропорциональна суммарному объему преципитатов, так что 1 см^3 преципитатов генерирует дислокационные петли площадью $2 \cdot 10^5 \text{ см}^2$. Призматические петли, лежащие в плоскости $\{100\}$, содержат около 10^{15} атомов/см². При этом количество избыточных атомов кремния, содержащихся в призматических петлях, составляет приблизительно $2 \cdot 10^{20}$ атомов на 1 см^3 преципитата. В соответствии с результатами работы [40] эти петли содержат только сотую долю избыточных атомов Si, присутствующих в образце после замещения некоторого объема кремния равным объемом аморфного SiO₂. По-видимому, согласно [41-43], кроме обсужденных выше преципитатов-кластеров и петель, размеры которых равны размерам преципитатов или превышают их и могут считаться порожденными этими выросшими преципитатами, для которых выполняется указанное выше соотношение Патрика, в образце присутствуют дислокационные петли намного меньшего размера, содержащие вытесненные при преципитации атомы кремния.

При этом

$$L = L_{cl} + L_{bl} + L_{sm.l} + L_{sup.bl},$$

$$\mu_{ds}^0 = \mu_{ds.cl}^0 + \mu_{ds.bl}^0 + \mu_{ds.sm.l}^0 + \mu_{ds.sup.bl}^0,$$

$$\mu^* = \mu_{cl}^* + \mu_{bl}^* + \mu_{sm.l}^* + \mu_{sup.bl}^*.$$

Для такой модели в работе [44] произведено фитирование трех толщинных зависимостей ПИОС. Результат фитирования проиллюстрирован рис. 2.4.

Рассчитанным толщинным зависимостям, построенным для различных значений размеров дискообразных кластеров и различных значений параметров связанных с кластерами малых и больших дислокационных петель, соответствуют следующие значения коэффициента добротности фитирования экспериментальных данных (*GOF*) и фактора согласия *R*:

1. $R_{cl}=0,45$ мкм, $GOF=1,41$, $R=9,84\%$;
2. $R_{cl}=0,4$ мкм, $GOF=2,29$, $R=15,9\%$;
3. $R_{cl}=0,35$ мкм, $GOF=3,39$, $R=23,6\%$;
4. $R_{cl}=0,16$ мкм, $GOF=12,1$, $R=84,5\%$;
5. $R_{cl}=0,5$ мкм, $GOF=3,22$, $R=22,4\%$;
6. $R_{cl}=0,1$ мкм, $GOF=31,5$, $R=219\%$;
7. $R_{cl}=0,8$ мкм, $GOF=164$, $R=1140\%$.

При использовании литературных данных [40] задача количественного определения параметров дефектов сводится к определению только радиусов кластеров и радиусов больших и малых петель. Для наилучшего фитирования значение фактора согласия составило $GOF=1,41$ при $R=9,84\%$: $c_{cl}=2,24 \cdot 10^{-14}$, $R_{cl}=0,45$ мкм, $h_{cl}=116 \text{ \AA}$, $R_{big loops}=0,93$ мкм, $c_{big loops}=1,22 \cdot 10^{-15}$, $R_{small loops}=280 \text{ \AA}$, $c_{small loops}=1,79 \cdot 10^{-10}$.

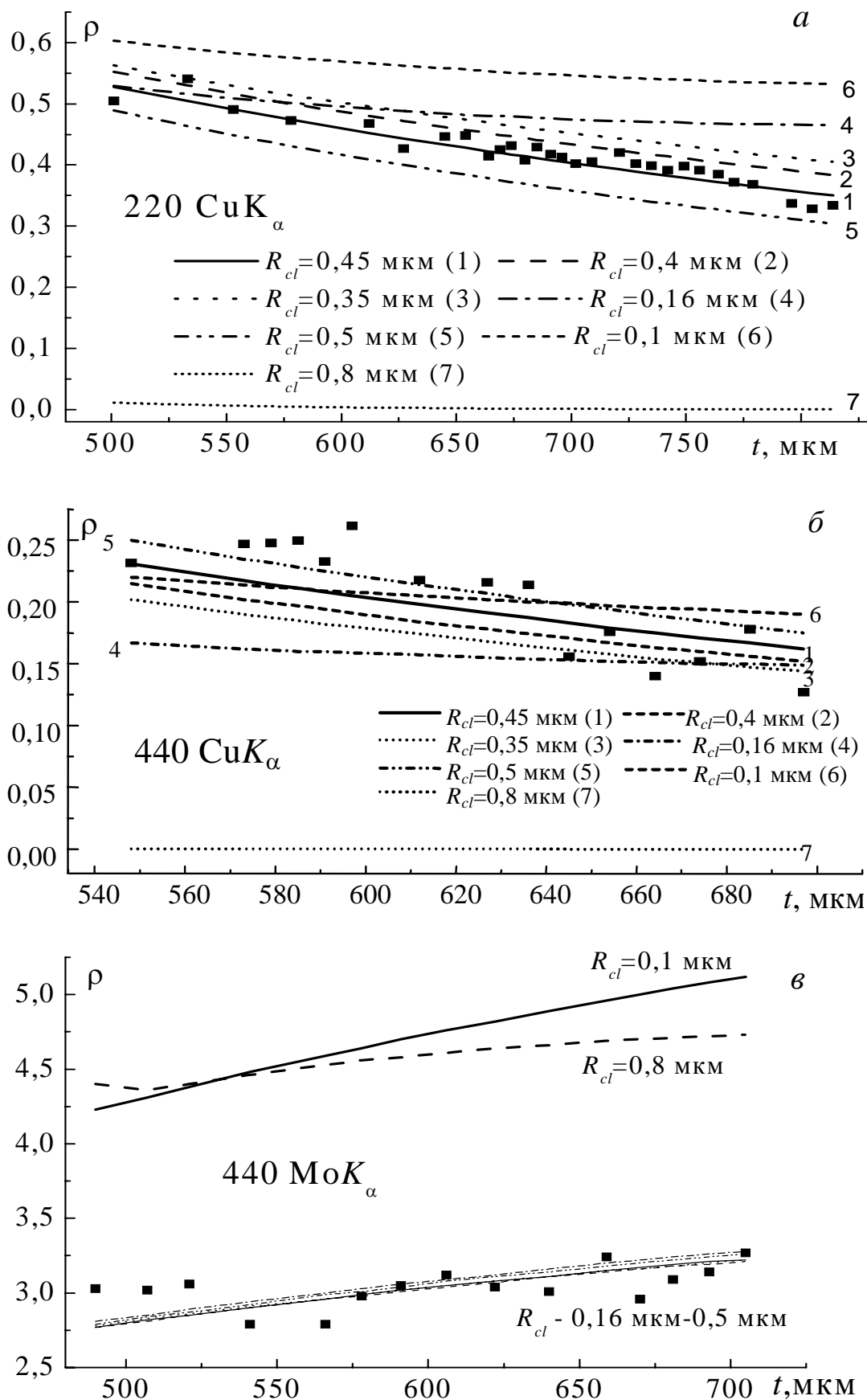


Рис. 2.4. Экспериментальные (маркеры) и рассчитанные (линии) толщинные зависимости $\rho = R_i(\text{исследуемого образца})/R_i(\text{идеального кристалла})$ для 220CuK_α- (а), 440CuK_α- (б) и 440MoK_α-отражений (в)

Следует отметить, что выбранное фитированием значение радиуса кластеров соответствует рассчитанному по закону Ху [39] – при значении коэффициента диффузии атомов кислорода в кремнии $D=4,92 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{сек}$ и времени отжига 6 часов размеры дискообразных преципитатов SiO_2 в Si должны составить: $R=0,47 \text{ мкм}$, $h=118 \text{ \AA}$.

Поскольку в литературных данных [45], а также в работе [46] существует информация о возможности присутствия в подобных исследуемому образцах еще и сверхбольших петель, в работе [44] изучен и случай, когда кроме дефектов уже рассмотренных четырех типов в образце еще присутствуют дислокационные петли с радиусом 10 мкм . Подбираемый при минимизации GOF радиус больших петель уменьшается с увеличением концентрации сверхбольших петель, принимая значение, равное значению радиуса породившего петлю преципитата при значении концентрации сверхбольших петель – $c=2,4 \cdot 10^{-19}$.

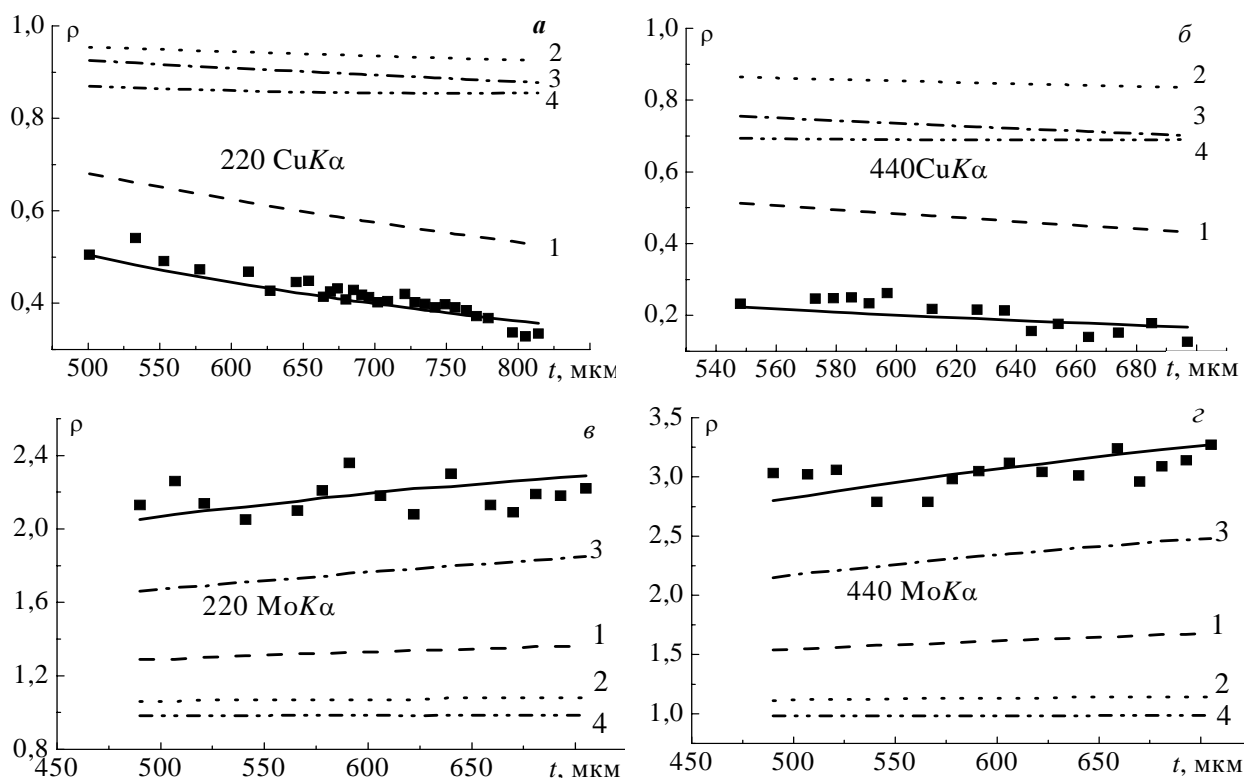


Рис. 2.5. Экспериментальные (маркеры) и рассчитанные (линии) толщинные (a - $г$), зависимости $\rho = R_i \text{ исслед. обр.} / R_i \text{ идеал. крист.}$. Зависимости рассчитаны также отдельно для вкладов от каждого из типов дефектов, присутствующих в образце:

1. Дискообразные кластеры $R_{cl}=0,45 \text{ мкм}$, $h=116 \text{ \AA}$, $c_{cl}=2,24 \cdot 10^{-14}$ ($c_{cl}/v_c=1,12 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$).
2. Крупные дислокационные петли $c|\vec{b}|=a/\sqrt{2}$ (\vec{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки) $R_{big\ loops}=0,45 \text{ мкм}$, $c_{big\ loops}=5,2 \cdot 10^{-15}$ ($c_{big\ loops}/v_c=2,6 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$).
3. Мелкие дислокационные петли $c|\vec{b}|=a/\sqrt{2}$ $R_{small\ loops}=300 \text{ \AA}$, $c_{small\ loops}=1,56 \cdot 10^{-10}$ ($c_{small\ loops}/v_c=7,8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$).
4. Сверхкрупные дислокационные петли $c|\vec{b}|=a/\sqrt{2}$, $R_{super\ big\ loops}=10 \text{ мкм}$, $c_{super\ big\ loops}=2,4 \cdot 10^{-19}$, ($c_{super\ big\ loops}/v_c=1,2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$).

На рис.2.5 представлены результаты моделирования экспериментальных данных в случае описанной здесь наиболее общей модели четырех типов дефектов и наглядно продемонстрирован отдельно вклад в ПИОС каждого из них. При этом следует отметить, что из рассмотренных четырех типов дефектов определяющий вклад в рассмотренные зависимости ПИОС дают только три типа дефектов. Связанный с большими петлями (№2) четвертый тип дефектов и возможно присутствующие в образце дополнительно к уже рассмотренным дефекты других типов не дают определяющего вклада в исследуемые зависимости ПИОС.

Сравнительный анализ рис. 2.5,а, 2.5,б и рис.2.5,г демонстрирует, в полном соответствии с теоретическими предсказаниями работы и описанными теоретически разными механизмами влияния дефектов на динамическую дифракцию в разных предельных случаях, изменение не только величины, но даже и знака влияния дефектов. Существенное (в несколько раз) уменьшение ПИОС в случаях Лауэ-дифракции в толстом кристалле (рис.2.5,а и 2.5,б), при переходе к случаю Лауэ в тонком кристалле (рис.2.5,г), сменяется существенным (в несколько раз) возрастанием ПИОС.

Следует заметить, что эти существенные увеличение или уменьшение ПИОС наблюдаются при чрезвычайно слабых уровнях искажений в кристалле. Это следует из чрезвычайно низких значений концентраций и других приведенных выше параметров четырех типов дефектов и тем самым демонстрирует уникальную чувствительность ПИОС к характеристикам дефектов. Кроме того, приведенные рисунки демонстрируют установленный в работе и важный для понимания и решения проблемы однозначности диагностики эффект изменения определяющего типа дефектов при переходе от одних условий дифракции к другим. Этот эффект обусловлен соответствующим изменением определяющих механизмов дифракции, но может ошибочно восприниматься, как противоречие или неоднозначность разных методов или условий диагностических исследований. Так в первом случае дифракции (рис.2.5,а) определяющим типом дефектов являются кластеры. Во втором случае (рис.2.5,б) при переходе от рефлекса (220) к рефлексу (440), из-за роста чувствительности к μ_{ds} , существенно ощутимыми становятся также вклады от сверхбольших дислокационных петель. А в третьем случае (рис.2.5,г) происходит принципиальное изменение ситуации, роль наиболее чувствительного параметра начинает играть L , и поэтому определяющим типом дефектов становятся уже мелкие дислокационные петли. Все это обосновывает необходимость в сложных случаях нескольких типов дефектов в кристаллах совместной обработки всех приведенных экспериментальных кривых ПИОС для повышения информативности диагностики. Эти результаты представляют собой основу понимания и решения проблемы неоднозначности диагностики нескольких типов дефектов методами рентгеновской дифрактометрии.

§5. Выводы

Экспериментально подтверждены выводы динамической теории об основных закономерностях и особенностях проявления в различных условиях дифракции нарушения закона сохранения ПИОС.

Доказана правильность выводов динамической теории на основе совпадения с экспериментом теоретических зависимостей ПИОС от толщины кристалла, длины волны используемого излучения или угла азимута используемого отражения, рассчитанных для заранее известных типов и характеристик дефектов для любого возможного набора экспериментальных случаев дифракции.

Экспериментально установлено, что зависимости от условий дифракции величин показателя статического фактора Дебая-Валлера L и интегральных коэффициентов экстинкции за счет их рассеяния на дефектах брэгговской (μ_{ds}) и диффузной (μ^*) составляющих ПИОС, а также влияния этих параметров на величину ПИОС, кардинально различны.

Изучена разная избирательность чувствительности различных азимутальных, спектральных и толщинных зависимостей ПИОС к L , μ_{ds} и μ^* .

Экспериментально обнаружено в кристаллах с несколькими типами дефектов, вклад каждого из которых в ПИОС превышает ошибку эксперимента, новое явление – изменение избирательности чувствительности ПИОС и определяющего типа дефектов, дающих основной вклад в ПИОС, в результате изменения экспериментальных условий дифракции и доказано, что указанное явление имеет дифракционную природу и обуславливает избирательность чувствительности ПИОС к дефектам разных типов в разных условиях дифракции.

Предложен метод ПИОС, который обобщает, путем совместного использования жесткого и мягкого излучений в геометрии Лауэ высокочувствительный метод полной интегральной отражательной способности (ПИОС). В результате существенно повышены достоверность решения обратной задачи динамической теории рассеяния и информативность диагностики дефектной структуры монокристаллов.

Впервые продемонстрирована возможность экспериментального определения всех трех структурно чувствительных параметров динамической дифракции L , μ_{ds} и μ^* . Это оказалось возможным выполнить на основе обнаруженного, экспериментально проявляемого и теоретически обусловленного принципиального различия в чувствительности кривых ПИОС к каждому из этих параметров. Зависимость избирательности чувствительности от условий дифракции обусловлена различными в разных случаях и описанными особенностями физических механизмов конкурирующих процессов рассеяния. Избирательная чувствительность связана с преобладанием одного из указанных процессов. Избирательность чувствительности существенно изменяется при переходе к различным предельным случаям дифракции, так как при этом изменяется преобладающий механизм рассеяния.

Предложенный метод наиболее эффективен при использовании источников синхротронного излучения, позволяющих осуществлять необходимое варьирование длины волны излучения.

ГЛАВА 3. ВЛИЯНИЕ НАРУШЕННОГО ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ (НПС) НА ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЙЯНИЕ В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ

В настоящей главе предложена и описана в рамках динамической теории полных интегральных отражательных способностей в геометрии дифракции Брэгга модель рассеяния для кристалла с нарушенным поверхностным слоем (НПС) и случайно распределенными дефектами (СРД). В этой модели кристалл делится по толщине на три слоя. Первый слой – сильно нарушенный пластической деформацией слой, в котором дифракция полностью отсутствует. Этот слой проявляется только процессами поглощения в нем рентгеновских лучей. Второй – слой, упруго деформированный первым слоем, в котором длина когерентности рассеяния меньше длины экстинкции и, следовательно, рассеяние в нем носит кинематический характер. Третий – динамически рассеивающий слой, содержащий СРД. На основе этой модели установлены новые физические эффекты при Брэгг-дифракции в таких кристаллах и в результате предложены способы уникальной неразрушающей количественной диагностики, в том числе и наноразмерных характеристик как НПС, так и СРД.

§1. Введение

Структурное совершенство монокристаллических материалов, идущих на изготовление твердотельных приборов, играет существенную роль в обеспечении необходимых параметров и долговечности их работы.

Производство твердотельных приборов различных типов связано как с механической обработкой поверхности пластин (резка, шлифовка, полировка), так и с другими, более тонкими, обработками поверхности в процессе последующих технологических операций, которые обуславливают поверхностные электрофизические характеристики твердотельных приборов [1]. Поверхностный слой с нарушенной структурой – один из наиболее распространенных типов искажений кристаллической структуры монокристаллов.

Определение толщины нарушенного поверхностного слоя (НПС) монокристаллов после этапов изготовления подложек из них, т.е. после резки, шлифовки, травления и химико-механической полировки позволяет, во-первых, оптимизировать режимы механической обработки кристаллов, а во-вторых – разработать критерии отбраковки пластин на начальных этапах изготовления подложек с целью экономии этих, как правило, дорогостоящих материалов. Для решения этой задачи требуется разработка неразрушающих экспрессных методов контроля глубины нарушенного слоя.

Из неразрушающих методов достаточное развитие получили методы трехкристальной рентгеновской дифрактометрии (особенно в скользящей геометрии), основанные на дифракции рентгеновских лучей в условиях полного внешнего отражения, асимптотической брэгговской дифракции, а также на изучении вторичных излучений при рентгеновской дифракции (все эти

методы достаточно полно описаны в [2]). Эти методы обладают высокой чувствительностью, точностью, однако они требуют наличия нестандартного оборудования и достаточно большого времени на юстировку прибора и запись соответствующих кривых. Главное же – они применимы к исследованию очень тонких нарушенных слоев (вплоть до нескольких атомных слоев) и не могут быть использованы для исследования пластин на начальных этапах изготовления подложек (после механической обработки). Кроме того они не учитывают и не используют для диагностики существенное в этих случаях диффузное рассеяние от имеющихся микро- и наноразмерных дефектов в объеме и в поверхностном слое кристаллов.

Особенно перспективны методы определения толщины нарушенных поверхностных слоев, основанные на измерениях интегральных интенсивностей дифрагированных пучков, характеризующиеся более высокой чувствительностью по сравнению с дифференциальными дифрактометрическими методами. Между сильно нарушенным поверхностным слоем и динамически рассеивающим кристаллом существует напряженный переходной слой. Указанное повышение чувствительности предопределяется тем обстоятельством, что интенсивность кинематического рассеяния от него формируется, как и диффузное рассеяние от дефектов, при больших угловых отклонениях падающего волнового вектора от точного брэгговского направления, чем это нужно для возбуждения волновых полей динамически когерентно рассеянных волн в основном объеме кристалла. Дифференциальные значения интенсивности диффузного рассеяния волн или кинематического рассеяния от нарушенного слоя слишком малы по сравнению с брэгговскими для их надежного измерения методами многокристальной дифрактометрии. В то же время величины интегральных интенсивностей широких пиков диффузного рассеяния или рассеяния от НПС могут оказаться существенно более значительными по отношению к интегральным интенсивностям узких брэгговских пиков.

Среди интегральных методов известен метод *K*-скачков поглощения, представленный в работах [3-6]. Из этих работ следует, что в приближении толстого кристалла ($\mu_0 t > 10$, где μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения, t – толщина кристалла) наличие НПС влияет не только на интегральные интенсивности, но и на величину их скачков $S = i_2/i_1$, измеряемых вблизи *K*-края поглощения (λ_K) германия (i_1 и i_2 – интегральные интенсивности Лауэ-дифрагированных пучков, измеренные соответственно в коротковолновой и длинноволновой областях вблизи λ_K). В работе [7] был предложен метод определения толщин НПС путем использования разности интенсивностей, измеренных для длин волн λ_1 и λ_2 вблизи λ_K .

Подходы, основанные на измерениях толщинных зависимостей интегральных интенсивностей Лауэ-дифрагированных пучков и использующие представления динамической теории рассеяния кристаллами со случайно распределенными дефектами (СРД) [8], были предложены в работах [9-11]. Однако они дают информацию о сумме НПС, образовавшихся с двух сторон монокристаллической пластины. При этом предполагается их равенство. Раз-

витие аналогичного подхода в случае Брэгг-дифракции снимает это ограничение и, тем самым, расширяет функциональные возможности метода (появляется возможность обеспечивать контроль слитков и, если речь идет о пластинах, каждой из ее поверхностей) и круг анализируемых материалов (включая технически важные сильно поглощающие монокристаллы). При этом следует отметить, что в случаях Лауэ-дифракции интенсивность, формируемая тонким нарушенным слоем с толщиной t ($t \ll \Lambda$, где Λ – длина экстинкции) существенно ослабляется поглощением ее во всем объеме кристалла. В отличие от этого в случае Брэгг-дифракции указанная интенсивность поглощается только в самом этом слое с малой толщиной t . Это обуславливает важное преимущество Брэгг-дифракции, которое существенно повышает ее чувствительность к тонким нарушенным поверхностным слоям. Следует отметить, что указанное преимущество существенно в случаях тонких слоев, однако предложенные ниже модели (3.1) и (3.2) не имеют ограничений на толщину слоя в отличие от модели, предложенной в [12].

Настоящая глава посвящена теоретическому обоснованию обобщенной модели НПС (3.1) и (3.2). Кроме того, в ней описана экспериментальная апробация созданного на основе указанной модели уникального экспрессного метода рентгено-дифрактометрического контроля толщин НПС и характеристик СРД, одновременно содержащихся в монокристаллах, по интегральным интенсивностям рентгеновского излучения именно в случаях геометрии дифракции по Брэггу.

§2. Зависимость чувствительности ПИОС к наличию НПС от условий Брэгг-дифракции рентгеновского излучения в идеальных кристаллах

2.1. Теоретическая модель

Структура монокристалла с механически нарушенным поверхностным слоем имеет сложное строение и согласно модели, предложенной в работе [13], может быть разделена по толщине на три различные зоны. Первая зона представляет собой систему разориентированных локальных участков, содержащую царапины и трещины, представляющие собой конечную стадию локального хрупкого разрушения кристаллических пластин. Ее можно рассматривать как недифрагирующий поглощающий поверхностный слой (ППС), условно "аморфный" слой толщиной t_{am} . Трещины содержат частицы абразива и матричного материала и окружены системой дислокаций [14, 15]. Вследствие этого, в кристаллической матрице, особенно в окрестности трещин, появляются напряженные области, простирающиеся на значительные расстояния, и вторая зона толщиной t_{ksl} представляет собой монокристалл без механических повреждений, имеющий упругие деформации [14, 16]. Вторая зона нарушенного поверхностного слоя рассеивает рентгеновское излучение как идеально мозаичный кристалл – это кинематически рассеивающий слой (КРС). Вторая зона рассеивает кинематически, потому, что упругие деформации в ней настолько велики, что характерные размеры областей когерент-

ного рассеяния намного меньше длины экстинкции. Другими словами набег разности фаз за счет деформации на длине экстинкции (изменение вектора рассеяния) превышает расстояние между ветвями дисперсионной поверхности, в то время как при динамическом рассеянии (в третьей зоне – в основном объеме практически идеального кристалла) оно намного меньше этого расстояния и предполагается пренебрежимо малым, т.е. равным нулю. В КРС также происходит поглощение излучения. Выражение для ПИОС имеет вид (см. [13], а также [12]):

$$R_i^0 = (R_{i\text{ perf. cr.}} + R_{i\text{ ksc}}) \cdot \exp[-\mu_0 \{t_{am} + k\Lambda(a/d)\} (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|)],$$

$$R_{i\text{ perf. cr.}} = 8/3 C |\chi_{Hr}| / \sin(2\theta_B) \sqrt{\gamma_H / \gamma_0},$$

$$R_{i\text{ ksc}} = C^2 (Q/\gamma_0) t_{ksl} = C^2 (Q/\gamma_0) k\Lambda(a/d). \quad (3.1)$$

Здесь χ_{Hr} – вещественная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла, C – поляризационный множитель, θ_B – угол Брэгга, a – параметр решетки, d – межплоскостное расстояние, $Q = (\pi |\chi_{Hr}|)^2 / [\lambda \sin(2\theta_B)]$ отражательная способность на единицу длины пути, λ – длина волны излучения, $\Lambda = \lambda (\gamma_0 |\gamma_H|)^{1/2} / (C |\chi_{Hr}|)$ – длина экстинкции, γ_0, γ_H – изменяющиеся при азимутальном вращении направляющие косинусы: $\gamma_0 = -\cos\theta_B \sin\psi \cos\varphi + \sin\theta_B \cos\psi$,

$$\gamma_H = -\cos\theta_B \sin\psi \cos\varphi - \sin\theta_B \cos\psi,$$

где ψ – угол между отражающими плоскостями и поверхностью кристалла, φ – азимутальный угол.

Более удобной для изучения дефектной структуры представляется не сама величина ПИОС образца с НПС R_i^0 , а ее отношение к соответствующей ПИОС, рассчитанной для идеального кристалла $R_{i\text{ perf.}}$: $\rho^0 = R_i^0 / R_{i\text{ perf.}}$. Из выражения (3.1) видно, что наличие ППС толщиной t_{am} должно приводить к уменьшению ρ^0 . Чувствительность ПИОС к наличию на поверхности поглощающего слоя возрастает пропорционально $t_{am} \mu_0 (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|)$, т.е. произведению μ_0 на эффективную (суммарную) длину путей проходящего и дифрагированного лучей в этом слое. В то же время наличие КРС толщиной t_{ksl} должно приводить к увеличению ρ^0 , которое частично подавляется экспоненциальным убыванием, обусловленным поглощением рентгеновских лучей в этом слое.

Для определения толщин двух указанных частей НПС целесообразно сочетать измерения ПИОС в условиях дифракции, в которых она избирательно чувствительна отдельно к КРС или к ППС. С целью выяснения природы и зависимости от условий дифракции чувствительности ПИОС к ППС в работе [31] проведены вычисления спектральных, азимутальных и угловых зависимостей нормированной ПИОС монокристалла при $t_{am} = 3$ мкм, $k = 0$. Результаты расчетов представлены на рис. 3.1 и 3.2.

Минимальная чувствительность ПИОС, как видно из рис. 3.1 и 3.2, наблюдается при минимальном значении величины $t_{am} \mu_0 (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|)$ при кососимметричном отражении с использованием жесткого излучения MoK_α ($\rho \sim 1$).

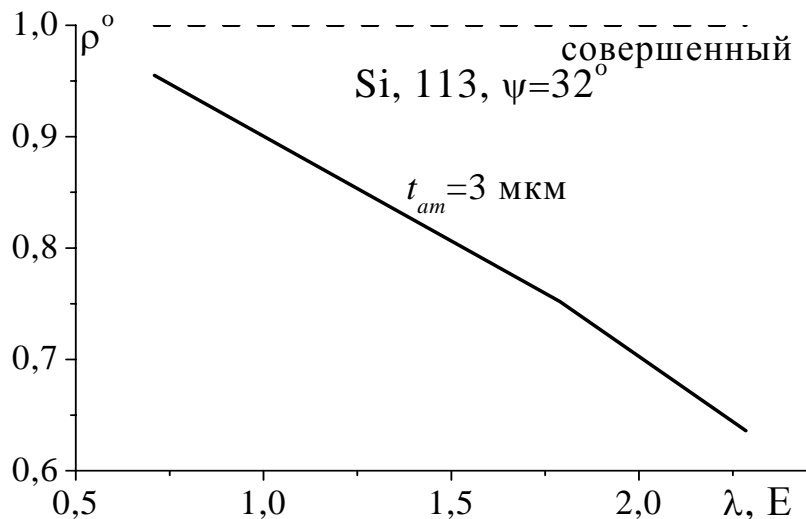


Рис. 3.1. Рассчитанная с использованием выражения (3.1) при $k=0$, $t_{am}=3$ мкм спектральная зависимость нормированной ПИОС ($\rho^0=R_i^0/R_i$ совершенного кристалла) при кососимметричных Брэгг-отражениях 113

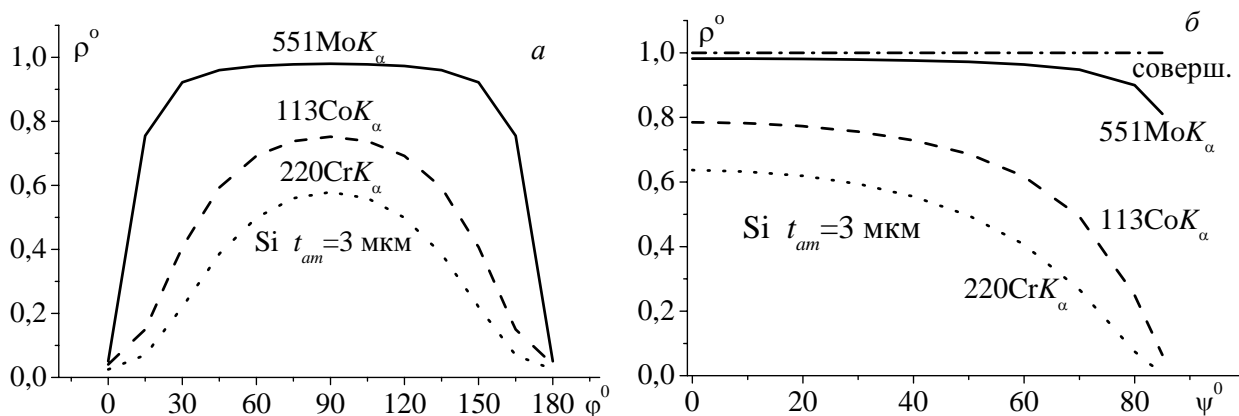


Рис. 3.2. Рассчитанные с использованием выражения (3.1) при $k=0$, $t_{am}=3$ мкм азимутальные зависимости (а) и зависимости от угла отклонения отражающей плоскости от поверхности ψ (б) нормированной ПИОС ($\rho^0=R_i^0/R_i$ совершенного кристалла) для рефлекса $551\text{Mo}K_\alpha$ (сплошная линия), для рефлекса $113\text{Co}K_\alpha$ (штрих), для рефлекса $220\text{Cr}K_\alpha$ (пунктир)

С целью выяснения природы и зависимости от условий дифракции чувствительности ПИОС к КРС проведены вычисления спектральных, азимутальных и угловых зависимостей нормированной ПИОС монокристалла при двух заданных значениях коэффициента толщины КРС: $k_{\max}=3,3$ и $k_{\min}=0,05$ (при $t_{am}=0$). Результаты расчетов представлены на рис.3.3. Пропорциональный длине экстинкции вклад КРС в нормированную ПИОС не должен зависеть ни от азимута, ни от длины волны используемого излучения. Однако поглощение в КРС увеличивается при увеличении его эффективной толщины, что приводит к появлению спектральных и азимутальных зависимостей вклада КРС, изображенных на рис. 3.3.

Результаты расчетов, представленных на рис. 3.1-3.4, свидетельствуют о том, что сочетание измерений ПИОС в условиях симметричной и асимметричной дифракций позволит обнаружить НПС, характеризующийся предельно малыми толщинами ППС и КРС. Это обусловлено тем, что, как видно из

анализа рис.3.1-3.4, влияния ППС и КРС на ρ^0 имеют противоположный характер, t_{am} всегда уменьшает, а t_{ksl} как правило увеличивает ρ^0 . При этом с ростом длины волны и степени асимметрии отражений чувствительность к t_{am} растет, а к t_{ksl} уменьшается.

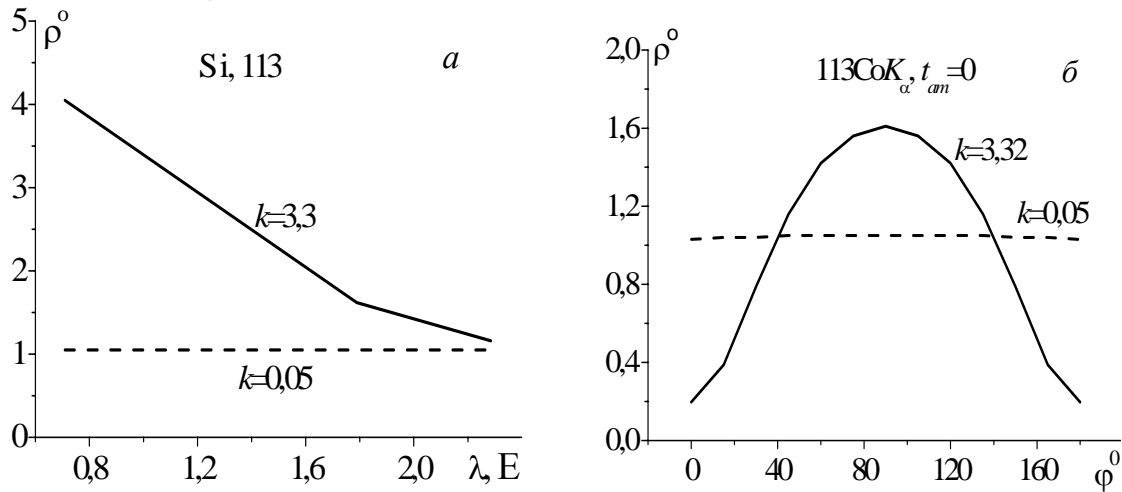


Рис. 3.3. Рассчитанные с использованием выражения (3.1) спектральные зависимости (при кососимметричной дифракции, $\psi=32^\circ$) (а) и азимутальные зависимости (б) нормированной ПИОС ($\rho^0=R_i^0/R_i$ совершенного кристалла) при $k=3,3$, $t_{am}=0$ (сплошная линия); при $k=0,05$, $t_{am}=0$ (штрих)

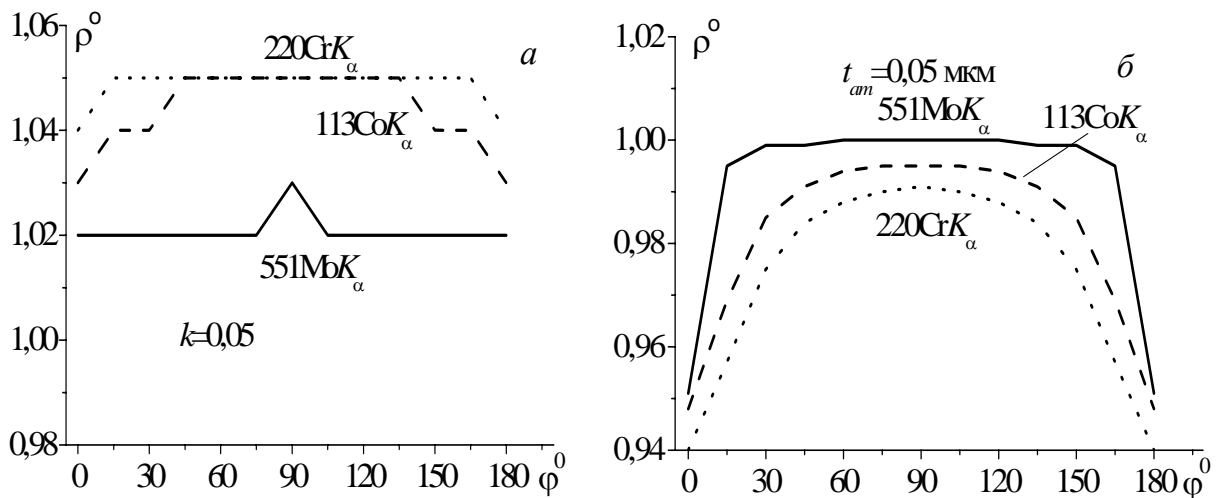


Рис. 3.4. Рассчитанные с использованием выражения (3.1) азимутальные зависимости нормированной ПИОС ($\rho^0=R_i^0/R_i$ совершенного кристалла) при $k=0,05$, $t_{am}=0$ (а) и при $k=0$, $t_{am}=0,05$ мкм (б) для рефлекса $551MoK_\alpha$ (сплошная линия), для рефлекса $113CoK_\alpha$ (штрих), для рефлекса $220CrK_\alpha$ (пунктир).

2.2. Сравнение экспериментальных данных с различными теоретическими моделями НПС

В работе [17] экспериментально измерены и исследованы ПИОС рентгеновских лучей от плоских монокристаллических подложек Si в зависимости от азимутального угла ϕ . Брэгговские отражения и длины волн рентгеновских лучей были выбраны таким образом, чтобы использовать весь возможный интервал асимметрии. Представленные в [17] данные были получе-

ны с использованием различных длин волн рентгеновских лучей, что обеспечило большие изменения в поглощении для данного вещества при сопутствующем изменении длины пути рентгеновских лучей и глубины проникновения в кристалл (когда поглощение играет важную роль наряду с экстинкцией). Авторы [17] построили расчетные азимутальные зависимости, хорошо описывающие эксперимент, используя две модели, основанные на кинематической теории дифракции. В рамках первой модели наблюдаемое уменьшение экспериментальных величин ПИОС по сравнению с рассчитанными для идеально-мозаичного кристалла объяснялось наличием на поверхности кристалла ППС, в котором не происходит дифракция, толщиной t_0 , величина которой при этом оказывалась сильно различающейся в различных экспериментальных случаях, хотя фактически должна оставаться константой. В рамках второй модели уменьшение объяснялось влиянием экстинкции, которая учитывалась умножением расчетных ПИОС на уменьшающий, формально введенный, феноменологический параметр ε . Никак не связанный явно со степенью структурного совершенства кристалла подгоночный параметр ε также оказался сильно различающимся в различных случаях дифракции.

В работе [13] для интерпретации вышеуказанных экспериментальных данных использована описанная выше (3.1) модель НПС. В таблице 3.1 приведены значения параметров, характеризующих структурное совершенство кристалла Si в рамках трех вышеописанных моделей, полученные авторами [17] (столбцы 3,4) и [13] (столбцы 5-8) для разных условий дифракции.

Таблица 3.1. Параметры, описывающие структурное совершенство образца монокристаллического Si в рамках различных моделей дефектной структуры

hkl	λ	t_0 , МКМ	ε	t_{am} , МКМ	$\Lambda/(a/d)$, МКМ	k	t_{ksl} , МКМ
551	MoK $_{\alpha}$	1,83	0,434	0,08±0,02	1,3÷5,7	0,14±0,02	0,18±0,03÷0,8±0,1
113	CoK $_{\alpha}$	0,27	0,720	0,1±0,04	2,2÷3,4	0,13±0,01	0,29±0,02÷0,44±0,03
220	CrK $_{\alpha}$	0,08	0,781	0,09±0,02	1,4÷2,1	0,12±0,01	0,17±0,01÷0,25±0,02

Величины параметров, полученных при обработке экспериментальных данных с использованием моделей [17] (столбцы 3,4), как видно из таблицы 3.1, значительно изменяются при изменении условий дифракции, что противоречит ожидаемым результатам, которые должны следовать из физического смысла этих параметров.

При использовании модели НПС, предложенной в работе [13] (столбцы 5-8), получен для величин t_{am} и k практически единый результат, одинаково удовлетворяющий всем трем наборам экспериментальных данных (см. рис.3.5). Из таблицы видно, что значения толщин ППС и обусловленного упругими деформациями коэффициента k , характеризующего толщину КРС и выражающего ее в длинах экстинкции, определенные в разных условиях дифракции, в пределах погрешностей их определения совпадают. Это свидетельствует об адекватности модели, предложенной в работе [13] (см.(3.1)) .

Полученный результат фитирования с использованием модели (3.1) вы-

глядит более значительным, если учесть, что единая модель адекватно описывает различные случаи, для которых имеет место 30-кратное изменение коэффициента линейного поглощения от $14,2\text{см}^{-1}$ для MoK_α до $472,3\text{см}^{-1}$ для CrK_α .

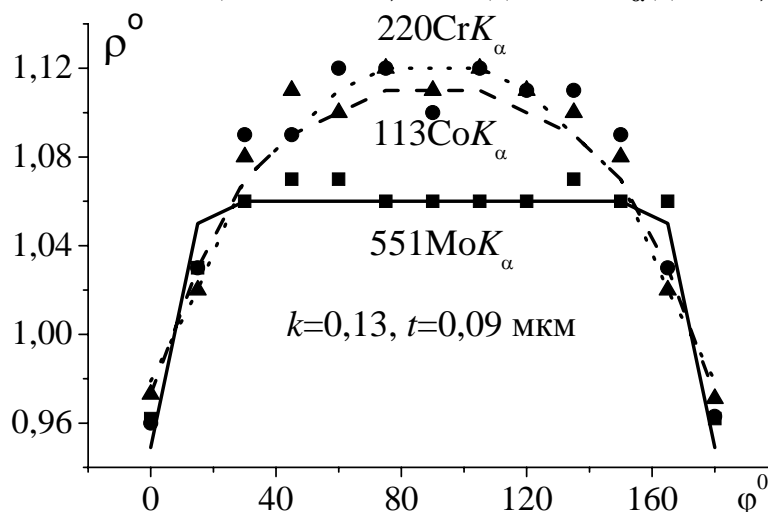


Рис. 3.5. Рассчитанные кривые наилучшего фитирования при $k=0,13$, $t_{abs}=0,09$ мкм (линии) и экспериментальные (маркеры) азимутальные зависимости нормированной ПИОС ($\rho^0 = R_i^0 / R_i$ совершенного кристалла) при асимметричных Брэгг-отражениях 551MoK_α (сплошная линия, ■), 113CoK_α (штрих, ▲), 220CrK_α (пунктир, ●)

В каждом из трех рассматриваемых случаев дифракции фитирование азимутальной зависимости ПИОС с использованием модели (3.1) позволяет получить значения толщин НПС и КРС с достаточной точностью (см. таблицу 3.1).

2.3. Исследование поверхности Si (100) при использовании спектральной зависимости ПИОС

Авторами работы [13] исследовались монокристаллические пластины Si марки КДБ-10, вырезанные параллельно плоскости (100), с НПС. НПС получались в результате резки, шлифовки и химико-механической полировки (ХМП). Измерения ПИОС проводились в двукристалльной схеме с использованием MoK_α -излучения с монохроматором Si(220) и FeK_α -излучения с монохроматором Si(004). Совместный обсчет экспериментальных данных для отражений 004 MoK_α и 004 FeK_α в рамках вышеописанной модели позволил получить значения параметров НПС, приведенные в таблице 3.2.

На рис. 3.6 сплошной линией изображены результаты расчета нормированной ПИОС для идеального кристалла с НПС, созданным резкой; штриховой – шлифовкой; пунктирной – ХМП.

Из рис. 3.6 видно, что рассчитанные спектральные зависимости ПИОС хорошо совпадают с экспериментальными зависимостями во всех трех случаях НПС. Из таблиц 3.1, 3.2 видно, что даже наноразмерные толщины НПС, остающихся на поверхности монокристаллов после ХМП определяются методом ПИОС с хорошей точностью.

Таблица 3.2. Значения толщин ППС (t_{am}) и КРС (t_{ksl}) для поверхностей монокристалла Si, обработанных различным способом. Получены путем совместной обработки в рамках предложенной в работе [13] модели методом наименьших квадратов величин ПИОС для отражений $004FeK_{\alpha}$, и $004MoK_{\alpha}$ ($\Lambda/(a/d)=2,93$ мкм)

Вид технологической обработки	t_{am} , мкм	k	t_{ksl} , мкм
Резка	$0,55 \pm 0,05$	$2,5 \pm 0,03$	$7,3 \pm 0,1$
Шлифовка	$3 \pm 0,06$	$2,3 \pm 0,06$	$6,7 \pm 0,1$
ХМП	$0,09 \pm 0,03$	$0,08 \pm 0,02$	$0,23 \pm 0,06$

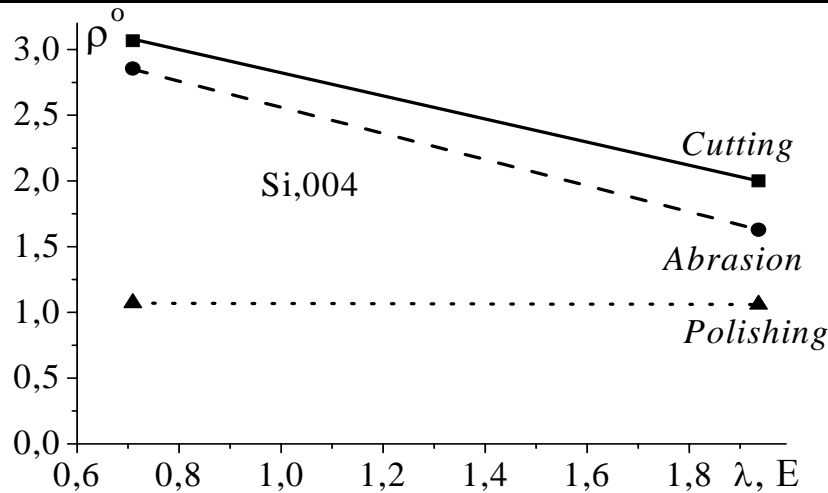


Рис. 3.6. Экспериментальные (маркеры) и рассчитанные (линии) спектральные зависимости нормированной ПИОС ($\rho^0 = R_i^0 / R_i$ совершенного кристалла) для симметричного 004 Брэгг-отражения от монокристаллической пластины Si после резки (сплошная линия, ■), шлифовки (штрих, ●) и после ХМП (пунктир, ▲)

§3. Создание и использование для диагностики модели ПИОС в геометрии Брэгга для НПС кристаллов с СРД

3.1. Теоретическая часть

Модифицированное выражение для ПИОС монокристалла с НПС и СРД в случае дифракции по Брэггу имеет вид [18]:

$$R_i = (R_i^{CPD} + R_{i\,ksc}) \cdot \exp[-\mu_0 \{t_{am} + k\Lambda(a/d)\} (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|)], \quad (3.2)$$

где $R_{i\,ksc} = C^2(Q/\gamma_0)t_{ksl} = C^2(Q/\gamma_0)k\Lambda(a/d)$, а R_i^{CPD} определяется по формуле (1.6).

Как видно из (3.2) модель предполагает кристалл состоящим из трех слоев: первый – сильно нарушенный слой с толщиной t_{am} , в котором дифракция отсутствует, второй, с толщиной t_{ksl} , – кинематически и третий – динамически рассеивающие слои. Однако в отличие от модели (3.1) здесь в последнем слое содержатся статистически распределенные дефекты

Как уже отмечалось, величина ПИОС, измеряемая в геометрии Брэгга, более чувствительна к наличию нарушенного поверхностного слоя. В геометрии Лауэ в случае тонких нарушенных слоев слабое излучение, дифрагированное поверхностным слоем толщиной $t \ll \Lambda$ подвержено поглощению во

всем объеме кристалла, а в геометрии Брэгга – только на малой глубине, равной t , т.е. поглощение пренебрежимо мало. По этой причине, в отличие от случая дифракции Лауэ, отношение t/Λ с учетом поправок на геометрию съемки в случае дифракции Брэгга сразу дает оценку чувствительности этой геометрии к нарушенному слою и определяет пути управления этой чувствительностью.

Следует отметить, что глубина проникновения волнового поля в кристалл (эффективная рабочая глубина) в геометрии Брэгга различна для разных составляющих ПИОС. Эффективная рабочая глубина для брэгговской составляющей ПИОС определяется длиной экстинкции Λ . При косонесимметричной геометрии Брэгга, ее даже при фиксированных θ и λ можно изменять от 100 мкм до 100Å, используя зависимость Λ от азимута. Рассеяние на дефектах, в результате которого образуется диффузная составляющая ПИОС, имеет интегральный поперечник сечения при однократном рассеянии, т.е. интегральную интенсивность на единицу длины пути меньше брэгговской в $2L$ раз, где характерное значение $L \sim 0,01$. Поэтому обусловленная диффузной составляющей экстинкция на два порядка слабее, чем обусловленная брэгговской составляющей, а эффективная рабочая глубина для диффузной составляющей на два порядка больше, чем для брэгговской составляющей. Однако в поглощающих кристаллах эта глубина может ограничиваться глубиной абсорбции $\sim 1/\mu_0$.

При косонесимметричных съемках дополнительную роль играют различные ($\gamma_0 \neq \gamma_H$) направляющие косинусы входа и выхода лучей в кристалле, которые изменяют рабочую глубину. При фиксированном $1/\mu_0$ γ_0 определяет глубину, до которой возможно образование диффузного рассеяния на дефектах, а γ_H – глубину, из которой это излучение может выйти на поверхность. Эффективная рабочая глубина лимитируется меньшей из величин γ_0 и γ_H , точнее величиной γ .

Следует также отметить, что в случае тонкого нарушенного слоя приповерхностный напряженный слой справедливо считать кинематически рассеивающим еще и вследствие его малости, как в работе [12]. Кроме того следует иметь в виду, что когерентное рассеяние от монокристалла и рассеяние от напряженного приповерхностного слоя когерентны, и не учитывать, как в предложенной модели (3.1) и (3.2) интерференционное слагаемое при вычислении ПИОС можно только в том случае, когда приповерхностный напряженный слой достаточно тонкий и, следовательно, угловой интервал его формирования мало перекрывается с брэгговским пиком образца. Для более толстых КРС в моделях (3.1) и (3.2) легко учесть интерференционное слагаемое.

Из результатов, полученных методами прямого наблюдения дефектов известно, что размеры изображений одних и тех же дефектов различны на рентгеновских топограммах и микрофотографиях, полученных с помощью электронного микроскопа. Это объясняется тем, что наблюдается контраст, обусловленный кинематическим характером рассеяния вблизи дефекта на поле напряжений вокруг дефекта и динамическим характером вдали от де-

фекта. Чем уже полуширина ($\sim 1/\Lambda$) кривой отражения излучения, используемого для наблюдения искажений решетки вокруг дефекта, тем более слабые искажения будут заметны. Тем дальше от дефекта будет граница между кинематическим и динамическим рассеянием и, следовательно, тем большим будет размер изображения дефекта, т.е. размер изображения $\sim \Lambda$. Именно эти известные соображения использованы авторами при создании моделей нарушенного поверхностного слоя (3.1) и (3.2). При этом снимается имеющееся в [12] ограничение случаями только малых толщин НПС.

Согласно модели (3.2) экспериментально наблюдаемая ПИОС в случае одновременного присутствия в монокристалле НПС и СРД состоит из брэгговской и диффузной компонент с дополнительным вкладом от КРС и от обусловленного наличием сильных нарушений ППС. Брэгговская компонента формируется в третьем слое в объеме до глубины экстинкции, дополнительный вклад от упруго напряженного слоя формируется на длине пути луча в слое, т.е. до глубины, пропорциональной длине экстинкции $\Lambda = \Lambda_{sim} \frac{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_H|}}{\sin \theta}$, а диффузная компонента формируется в объеме до глубины проникновения: $t_{pen} = l_{abs} / (1/\gamma_0 + |1/\gamma_H|)$. Этим глубинам оказываются пропорциональными вклады соответствующих составляющих ПИОС.

По этой причине путем изменения условий дифракции можно целенаправленно изменять указанные рабочие глубины и, следовательно, вклады в ПИОС от подслоев НПС и СРД, т.е. управлять изменением избирательности чувствительности ПИОС к различным типам дефектов и составляющим НПС и на этой основе осуществлять их диагностику.

С целью выяснения указанных возможностей диагностики одновременно присутствующих в монокристалле СРД и НПС методом ПИОС были проведены вычисления азимутальных, спектральных и угловых зависимостей величин отношения глубины проникновения t_{pen} к глубине экстинкции, т.е. t_{pen}/Λ , результаты которых представлены на рис. 3.7 и 3.8.

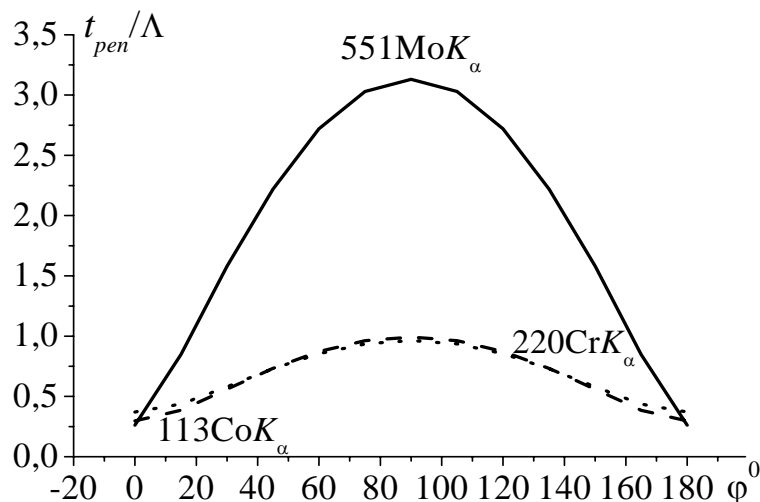


Рис. 3.7. Рассчитанные азимутальные зависимости величины отношения глубины проникновения t_{pen} к глубине экстинкции для рефлексов $551MoK_\alpha$ (сплошная линия), для рефлексов $113CoK_\alpha$ (штрих) и для рефлексов $220CrK_\alpha$ (пунктир)

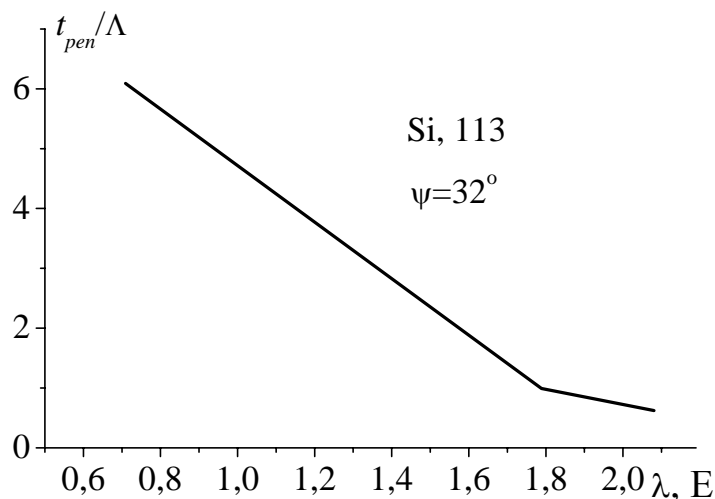


Рис. 3.8. Рассчитанная спектральная зависимость величины отношения глубины проникновения t_{pen} к глубине экстинкции Λ для кососимметричных рефлексов 113

Из результатов расчетов, представленных на рис. 3.7 и 3.8, следует, что ПИОС должна быть избирательно чувствительна к СРД в условиях симметричной или кососимметричной дифракции и при использовании жесткого излучения. Эти же условия дифракции предпочтительны для определения толщины КРС, поскольку при симметричной дифракции жесткого излучения вклад КРС, увеличивающий ПИОС меньше всего компенсируется поглощением как в ППС, так и в самом КРС. Однако, как следует из результатов расчетов, представленных на рис. 3.3, для тонких КРС практически отсутствуют азимутальные и спектральные зависимости вкладов в нормированную ПИОС вследствие практического отсутствия поглощения в КРС. Возможность разделения вкладов в ПИОС от СРД и КРС определяется резкой спектральной зависимостью величины отношения глубины проникновения t_{pen} к глубине экстинкции Λ , показанной на рис. 3.7 и 3.8.

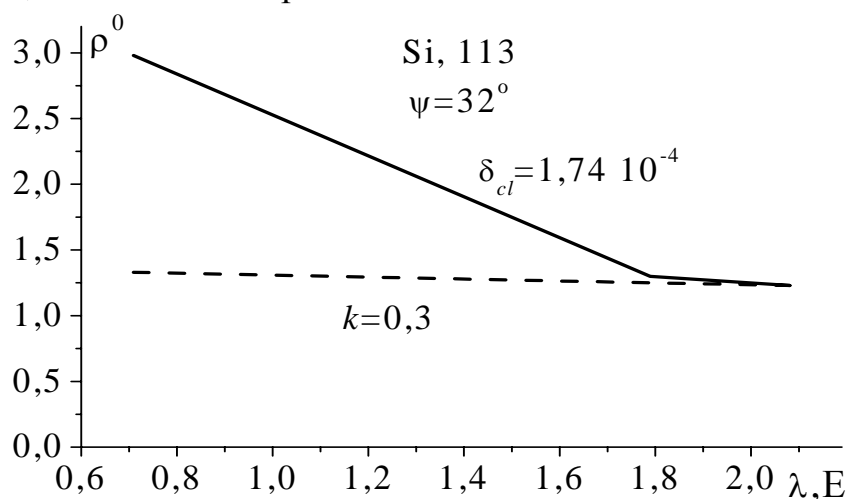


Рис. 3.9. Рассчитанные спектральные (при кососимметричной дифракции) зависимости нормированной ПИОС для случайно распределенных в объеме монокристалла Si без НПС сферических преципитатов Cu_3Si с $R_{cl}=0,013$ мкм, $\varepsilon=0,13$, $c_{cl}=6,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, объемная доля $\delta_{cl}=1,74 \cdot 10^{-4}$ (сплошная линия), и с использованием выражения (3.1) при $k=0,3$, $t_{am}=0$ (штрих)

Результаты расчетов вкладов в нормированную ПИОС диффузного рассеяния от СРД и рассеяния от КРС представлены на рис. 3.9. Из рис. 3.9 видно, что величина вклада диффузной компоненты резко возрастает с уменьшением длины волны за счет резкого увеличения эффективной глубины выхода из кристалла диффузной составляющей ПИОС, а величина вклада от КРС практически от длины волны не зависит из-за слабой спектральной зависимости эффективной длины экстинкции.

3.2. Экспериментальная реализация метода для диагностики характеристик НПС и СРД одного типа

Для апробации способа сепарирования вкладов в ПИОС от СРД и НПС в работе [18] был выбран образец, характеризующийся относительно простой дефектной структурой – НПС и СРД одного определяющего типа. Образец был вырезан по плоскости (110) из бездислокационного слитка Si, выращенного по методу Чохральского в направлении [001]. Концентрация кислорода в слитке составляла $8,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, концентрация углерода – $< 1,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Образец был подвергнут диффузионному отжигу с введением меди в течение 1 часа при 1173 К в атмосфере азота с охлаждением на воздухе. При охлаждении образца вокруг выделений SiO_2 образовались колонии выделений низкотемпературной фазы η "- Cu_3Si [19-23], ограниченные дислокационными петлями [24]. Из данных предварительного анализа дефектной структуры исследуемого образца, проведенного в работе [18], следует, что для него единственным определяющим типом СРД могут быть сферические кластеры Cu_3Si .

В случае СРД с радиусом R_0 и концентрацией c справедливы выражения динамической теории (3.2), (1.2), (1.3), (1.4), (1.6) для ПИОС, а также для статического фактора Дебая-Валлера E и интегральных коэффициентов экстинкции когерентной (μ_{ds}^0) и диффузной (μ^*) компонент ПИОС [25].

При равноценном влиянии на величину ПИОС двух типов дефектов получение их характеристик путем фитирования зависимостей ПИОС значительно затруднено. Однако, как будет показано ниже, вследствие возможной [25,18] избирательности чувствительности ПИОС к вышеуказанным типам дефектов, необходимо разделение всех используемых условий дифракции на три группы, в первой из которых определяющим типом дефектов является только один из них, во второй – другой, а в третьей – оба. Если удастся выделить хотя бы одну из первых двух групп условий дифракции, то задача разделения вкладов дефектов разных типов в ПИОС, а значит, и определения их характеристик может быть решена. Дальнейший анализ показывает причину такой возможности.

В случае симметричной дифракции по Брэггу все используемые условия дифракции относятся к третьей группе: при использовании жесткого излучения трудно разделить вклады в ПИОС от КРС и СРД, а с увеличением длины волны рост чувствительности ПИОС к НПС может быть скрыт противоположным по знаку вкладом в ПИОС, обусловленным СРД. Поэтому для

получения характеристик ППС необходимо проводить сравнительный анализ величин ПИОС в условиях дифракций, обеспечивающих резкий рост чувствительности ПИОС к ППС на фоне хотя и значительного, но практически неизменного вклада в ПИОС от КРС и СРД. Это осуществляется за счет измерения величин ПИОС для рефлексов от плоскостей с одинаковыми значениями модулей вектора дифракции, но наклоненными к поверхности образца под разными углами для изменения длины пути хода лучей в ППС, а именно: 331 ($\psi=15^\circ$) и 133 ($\psi=70^\circ$).

Сравнивая расчетную зависимость от толщины ППС отношения приростов ПИОС при разных углах наклона плоскости дифракции к поверхности монокристалла с величиной отношения, полученной экспериментально, можно определить толщину ППС: $t_{ам.}=(0,46\pm 0,23)$ мкм (см. рис.3.10).

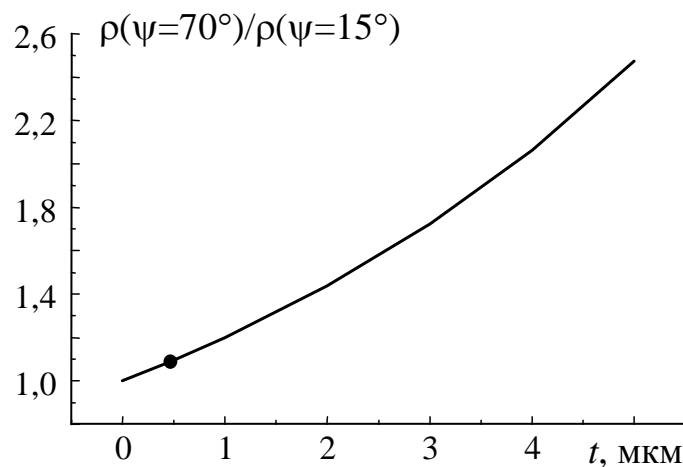


Рис. 3.10. Рассчитанная зависимость от толщины ППС (сплошная линия) отношения приростов ПИОС при разных углах наклона плоскости дифракции к поверхности монокристалла Si, содержащего СРД и НПС, и полученная экспериментально величина указанного отношения (маркер)

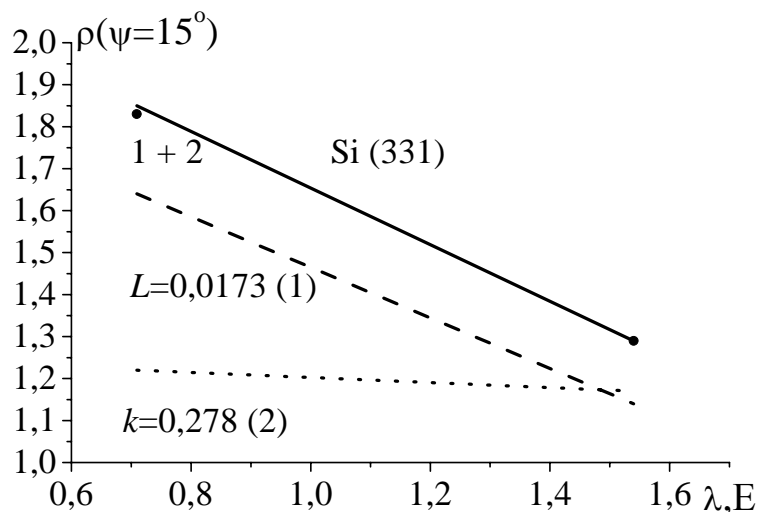


Рис. 3.11. Экспериментальная (маркеры) и рассчитанные (линии) спектральные зависимости интегральных интенсивностей ($\rho=R_i/R_{i\text{perf.cr.}}$) Брэгг-дифракции при симметричном 331CuK $_{\alpha}$ -отражении от образца Si, содержащего НПС и СРД. Кроме рассчитанной кривой наилучшего фитирования (сплошная линия), демонстрируются теоретические кривые при наличии только СРД (штриховая линия) или только НПС (пунктирная линия)

При известной толщине ППС для определения толщины КРС и значения статического фактора Дебая-Валлера достаточно измерить ПИОС симметричного Брэгг-отражения, используя излучение с двумя длинами волн (жесткое MoK_{α} и мягкое CuK_{α}). На рис. 3.11 показано изменение хода спектральной зависимости ПИОС рефлекса 331 и отдельно для ее составляющих вкладов при найденных значениях толщины КРС и величины показателя статического фактора Дебая-Валлера соответственно.

При постоянном значении толщины ППС $t_{ам.}=0,465$ мкм и заданном значении $\mu_B^*=0$ методом наименьших квадратов определяют значения величин $k=0,28\pm 0,02$ и $L=0,0173\pm 0,0006$. При этом следует отметить, что выбор такого значения $\mu_B^*=0$ оправдан предварительными данными о малости R_0 и c . Полученным значениям величин k и L соответствует расчетная спектральная зависимость наилучшего фитирования, изображенная на рис.3.11 сплошной линией.

По формулам динамической теории рассеяния излучения реальными монокристаллами (3.2), (1.2)-(1.4), (1.6) в [18] рассчитаны величины характеристик СРД для двух случаев:

- 1) в предположении, что СРД являются дислокационными петлями – получено: $R_l=0,288$ мкм, $c_l=1,18\cdot 10^{10}$ см⁻³;
- 2) в предположении, что СРД являются сферическими мелкими кластерами с $\epsilon=0,13$, получено: $R_{cl}=0,0128$ мкм, $c_{cl}=6,6\cdot 10^{12}$ см⁻³.

Затем для указанных двух случаев дефектной структуры в объеме образца с учетом наличия НПС, характеристики которого определены выше, рассчитаны значения ПИОС для ряда Брэгг-отражений жесткого излучения. Результаты расчета, а также экспериментально определенные для исследуемого образца нормализованные значения ПИОС представлены на рис. 3.12.

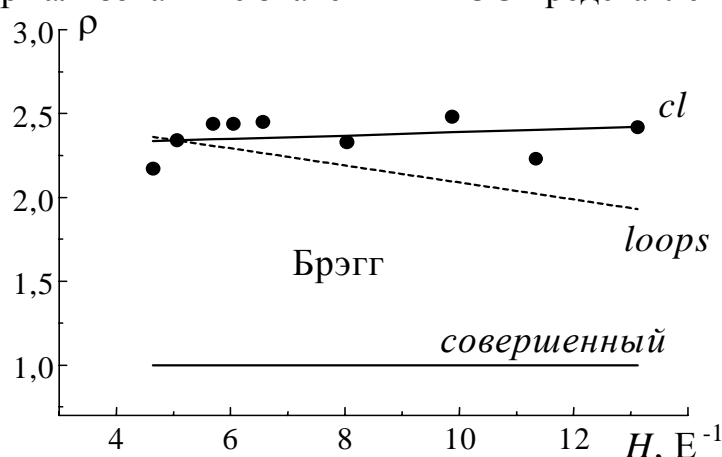


Рис. 3.12. Нормированные к рассчитанным для совершенного кристалла экспериментальная (маркеры) и рассчитанные (линии) угловые зависимости интегральных интенсивностей Брэгг-дифракции при симметричных $400MoK_{\alpha}$ -, $331MoK_{\alpha}$ -, $224MoK_{\alpha}$ -, $333MoK_{\alpha}$ -, $440MoK_{\alpha}$ -, $444MoK_{\alpha}$ -, $555MoK_{\alpha}$ -, $448MoK_{\alpha}$ - и $880MoK_{\alpha}$ -отражениях от образца Si, содержащего НПС и СРД. Демонстрируются теоретические кривые для случайно распределенных в объеме призматических дислокационных петель $R_l=0,288$ мкм, $c_l=1,18\cdot 10^{10}$ см⁻³ (штриховая линия) или сферических кластеров Cu_3Si с характеристиками $R_{cl}=0,0128$ мкм, $\epsilon=0,13$, $c_{cl}=6,6\cdot 10^{12}$ см⁻³ (сплошная линия)

В случае 3.2, когда предполагается, что в объеме исследуемого образца присутствуют случайно распределенные мелкие кластеры с характеристиками $R_{cl}=0,0128$ мкм, $\varepsilon=0,13$, $c_{cl}=6,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, все рассчитанные значения ПИОС для Брэгг-рефлексов совпали с наблюдаемыми значениями ПИОС.

Наблюдающееся для данного образца совпадение значений величин характеристик СРД, полученных методом ПИОС во всех рассмотренных предельных случаях дифракции, является признаком того, что в кристалле присутствуют дефекты одного определяющего типа. В этом частном случае дефектной структуры такое совпадение значений характеристик случайно распределенных в объеме дефектов одного определяющего типа, полученных при изучении образца в разных предельных случаях дифракции, является критерием правильности диагностики структурного совершенства данного монокристалла методом ПИОС.

Таким образом, в настоящей работе задача разделения вкладов в ПИОС от КРС и СРД и определения параметров НПС независимо от степени сложности дефектной структуры в объеме образца, т.е. независимо от типа дефекта и числа этих типов, полностью решена. Это означает, что завершено решение и более общей задачи по определению как параметров НПС, так и характеристик нескольких типов дефектов. Последнее обеспечивается тем, что реализованное в настоящей работе нахождение параметров НПС сводит задачу к нахождению только характеристик СРД, которая уже решена авторами ранее в работе [25] (см. главы 1 и 2). Следует отметить, что предложенные в [25,18] новые методы являются уникальными, так как обеспечивают, как видно из полученных результатов, количественную диагностику наноразмерных характеристик как НПС, так и СРД.

3.3. Возможности диагностики наноразмерных НПС и СРД нескольких типов в сильно поглощающих кристаллах

Остановимся подробнее на наиболее сложных для диагностики случаях, таких как сильно поглощающие кристаллы и предельно слабые искажения от НПС и СРД. В случае сильно поглощающих кристаллов применение описанного выше метода требует дополнительного развития. Это связано с тем, что нельзя производить разделение вкладов в ПИОС от СРД и КРС, как предложено в работе [18], используя различие их зависимостей от длины волны, обусловленное тем, что величина вклада в ПИОС от СРД пропорциональна глубине проникновения излучения, а от упруго напряженного слоя – длине экстинкции. Для сильно поглощающих монокристаллов, например для Ge, как видно из рис. 3.13, эффективная глубина проникновения слабо зависит от длины волны используемого излучения. Разделение вкладов в ПИОС от СРД и КРС путем использования зависимостей от модуля вектора дифракции в этом случае оказывается единственно возможным.

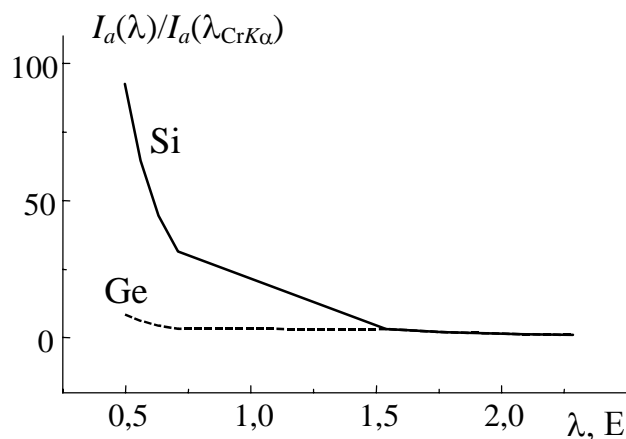


Рис. 3.13. Рассчитанные зависимости нормированной длины абсорбции для монокристаллов Si и Ge от длины волны рентгеновского излучения

В работе [26] физически обоснована и апробирована на образце монокристалла германия применимость комбинированного метода ПИОС с использованием толщинных зависимостей ПИОС в геометрии Лауэ в сочетании со спектральными зависимостями в геометрии Брэгга для диагностики сильно поглощающих монокристаллических образцов, в которых присутствуют как одновременно два определяющих типа СРД, так и НПС, для диагностики которого из-за сильного поглощения основанные на дифракции Лауэ методы перестают быть применимыми. С другой стороны, привлечение толщинных зависимостей ПИОС в геометрии дифракции по Лауэ как дополнительных позволяет разделить вклады и определить характеристики СРД нескольких типов.

В работе [26] комбинированным (Брэгг-Лауэ) методом ПИОС исследован образец монокристалла Ge, легированного Li в процессе его выращивания, что обеспечило достижение максимально возможной концентрации Li в образце: $c_{Li}=3 \cdot 10^{-2}$ ($1,3 \cdot 10^{20}$ ат/см³), содержание кислорода от 10^{14} до 10^{15} ат/см³ [27]. После закалки до комнатной температуры преципитаты лития формируют частицы (возможно сферические) Li_3Ge [28]. Согласно модели, предложенной в [28], преципитаты равномерно распределены в объеме с концентрацией $c(Li_3Ge)=c_{Li}v/(c_0 4\pi r_0^3/3)$, где $v=a^3/8$, $a=5,66 \text{ \AA}$, $c_0 \approx 3/4$, r_0 – средний радиус преципитатов. Согласно данным электронномикроскопических исследований подобных образцов [29] $r_0 \approx 170 \text{ \AA} = 31,3a$.

Кроме преципитатов Li_3Ge путем измерения электропроводности на поверхности образцов установлено наличие в них единичных внедрений Li с концентрацией $c_{Li}=2 \cdot 10^{-3}$ [27]. Эти дефекты не оказывают заметного влияния на величины интегральных интенсивностей в условиях дифракции Лауэ [28]. Однако в условиях дифракции Брэгга эти мелкие дефекты тоже могут оказаться определяющими, т.е. вызывающими заметное (>10%) изменение величины ПИОС по сравнению с величиной интегральной отражательной способности, рассчитанной для идеального кристалла.

Для проверки предположения о содержании в образце случайно распределенных кластеров Li_3Ge и единичных включений Li были определены

значения ПИОС для симметричных 004 Лауэ- и ряда Брэгг-рефлексов MoK_{α} -излучения. Проведено совместное фитирование экспериментальных угловых зависимостей ПИОС в геометрии Брэгга (для симметричных рефлексов 220, 004, 224, 440), полученных для образца с использованием MoK_{α} -излучения и значения ПИОС для симметричного Лауэ-рефлекса 004. В результате при фиксированном значении среднего радиуса кластеров $r_0/a=31,3$ [29] получены следующие значения величин концентраций кластеров $c(Li_3Ge)=1 \cdot 10^{-8}$ и единичных включений лития $c_{Li}=2,75 \cdot 10^{-3}$. Видно, что значение величины концентрации единичных включений Li на 40% больше значения, полученного в работе [27] путем измерения электропроводности.

Для устранения указанного расхождения авторами [26] по методу, апробированному в работе [13], был учтен вклад слабого НПС. Путем сравнения расчетной зависимости от толщины ППС отношения приростов ПИОС при разных углах наклона плоскости дифракции к поверхности монокристалла (242 ($\psi=33^\circ$) и 242 ($\psi=74,5^\circ$)) с величиной отношения, полученной экспериментально, определена толщина ППС на поверхности образца: $t_{am.}=(0,27 \pm 0,1)$ мкм.

Поскольку величины вкладов в ПИОС от СРД и КРС по-разному изменяются при изменении модуля вектора дифракции, то для повышения точности определения параметров НПС и СРД необходимо анализ спектральной зависимости ПИОС при использовании одного рефлекса дополнять анализом зависимости ПИОС от модуля вектора дифракции. Вклады в ПИОС от СРД и КРС пропорциональны соответственно L (показателю степени статического фактора Дебая-Валлера) и t_{ksl} (толщине кинематически рассеивающего слоя). Известно [30], что для случайно распределенных в объеме мелких кластеров $L \sim H^2$ или $L \sim H^{3/2}$ (для крупных кластеров). Увеличение же с ростом H толщины упруго напряженного слоя вызвано сужением углового интервала когерентного отражения и ростом чувствительности к слабым изгибам отражающих плоскостей: $t_{ksc} \sim H^{0,75}$. Поэтому вклад в ПИОС от КРС растет с увеличением H значительно медленнее, чем вклад от СРД, но при малых значениях H первый может быть больше последнего. В данном случае это позволило определить величины L и k : $L_{111}=0,012 \pm 0,004$, $L_{220}=0,028 \pm 0,006$, $L_{004}=0,051 \pm 0,006$, $L_{224}=0,092 \pm 0,004$, $L_{660}=0,19 \pm 0,01$; $k=0,22 \pm 0,04$. Причина снижения точности определения L при использовании отражений малых порядков заключается в малости L для малых \vec{H} .

В случаях, когда величина $\mu_B^* \ll \mu_0$ как для мелких, так и для крупных дефектов, величины ПИОС, измеряемые в геометрии Брэгга, не зависят от размеров СРД, как видно из рис. 3.14 для значений ПИОС, соответствующих изменению Λ в интервале от 4 мкм до 10 мкм.

Этот результат связан с малостью преципитатов, для которых $L \sim H^2$, и $\mu^* \sim 0$, как и для точечных дефектов. Однако, из рис. 3.14 видно, что в данном случае величина ПИОС, измеренная в геометрии Лауэ ($\Lambda=19$ мкм), чрезвычайно чувствительна не только к величине объемной доли дефектов, но и к

их размерам. Видно, что для однозначного определения величин средних радиусов и концентраций СРД двух типов необходимо совместное исследование величин ПИОС в геометриях Брэгга и Лауэ.

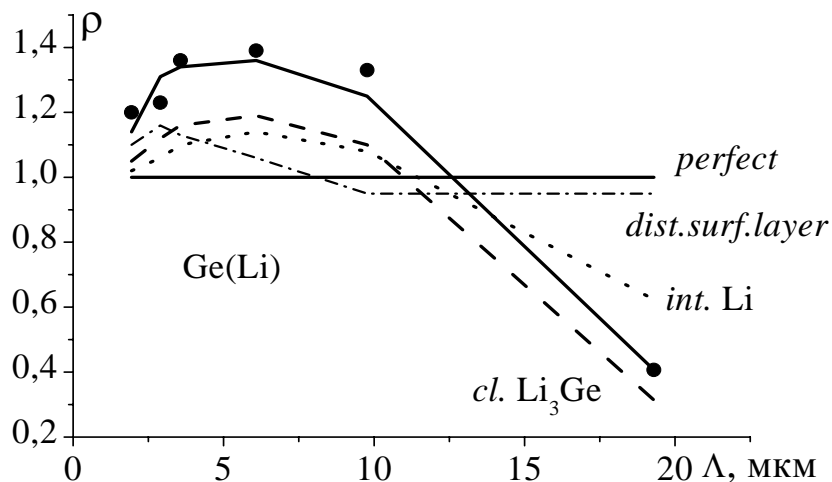


Рис. 3.14. Рассчитанные (линии) и экспериментальные (маркеры) зависимости от длины экстинкции величин ПИОС, нормированных к рассчитанным значениям ПИОС для идеально-го монокристалла Ge. Сплошная линия (линия наилучшего фитирования) – зависимость, рассчитанная в предположении, что в объеме образца при наличии НПС с $t_{am}=0,27$ мкм, $k=0,22$ содержится 2 типа СРД: единичные внедрения Li ($c_{Li}=1,06 \cdot 10^{-3}$) и преципитаты Li_3Ge ($r_0=0,04$ мкм, $c=8,9 \cdot 10^{-11}$). Штриховая линия – зависимость, рассчитанная в предположении, что единственным типом СРД в объеме образца являются преципитаты Li_3Ge . Пунктирная линия – зависимость, рассчитанная в предположении, что единственным типом СРД в объеме образца являются единичные внедрения Li. Штрих-пунктирная линия – зависимость, рассчитанная для идеального кристалла при наличии НПС с $t_{am}=0,27$ мкм, $k=0,22$

Рис. 3.14 иллюстрирует возможность при известных характеристиках НПС однозначного определения характеристик СРД двух определяющих типов при использовании симметричной Брэгг- и Лауэ-дифракции.

§4. Выводы

В настоящей главе проведено обобщение для случая кристаллов с СРД и НПС комбинированного метода ПИОС, предложенного в [25] для кристаллов с СРД и основанного на развитой в [25] идее изменения избирательности чувствительности ПИОС к разным типам дефектов при изменении условий дифракции (см. главы 1 и 2). При этом используются преимущества интегральной дифрактометрии в случае дифракции Брэгга для диагностики НПС, который рассматривается как дополнительный тип дефектов. В результате комбинированный метод дополнен выявленными в работе физическими причинами и предложенными способами использования избирательности чувствительности дифракции Брэгга именно к параметрам НПС, которая отсутствует в случае Лауэ. Дополнительным преимуществом разработанных модели и метода является учет в них вклада диффузной составляющей ПИОС от СРД, отсутствующий в других методах изучения НПС.

Таким образом, установлена и проанализирована различная для разных условий дифракции избирательность чувствительности полной интегральной

отражательной способности (ПИОС) в геометрии Брэгга к нарушенным поверхностным слоям (НПС) и к дефектам, случайно распределенным в объеме (СРД). На этой основе дано физическое обоснование и предложены способы расширения путем совместного использования различных условий Брэгг и Лауэ-дифракции диагностических возможностей однозначного количественного определения характеристик даже наноразмерных как НПС, так и СРД нескольких определяющих типов.

Созданы физические модели влияния нарушенного поверхностного слоя (НПС) на динамическую дифракцию в идеальных кристаллах и в кристаллах, содержащих случайно распределенные дефекты (СРД). На основе этих моделей разработаны новые принципы разделения вкладов НПС и СРД в ПИОС.

Установлен существенно разный характер зависимости от длины волны, вектора дифракции, азимутального угла и асимметрии дифракции вкладов в ПИОС как от разных составляющих НПС, так и от СРД. В частности удалось достичь, с одной стороны, существенного увеличения чувствительности ПИОС к разным параметрам НПС за счет увеличения соответственно длины экстинкции рефлекса, или коэффициента поглощения и длины пути луча в сильно нарушенном пластической деформацией слое, а с другой стороны, увеличения чувствительности к СРД за счет увеличения вектора дифракции, или длины абсорбции.

На основе предложенных моделей и указанных новых принципов разработан метод ПИОС, совмещающий изучение спектральных и азимутальных зависимостей ПИОС, и на его основе предложена и осуществлена адекватная структурная диагностика монокристаллов, содержащих одновременно как дефекты, случайно распределенные в объеме, так и нарушенный поверхностный слой.

ГЛАВА 4. ИНТЕГРАЛЬНАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ СТАТИСТИЧЕСКИ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ДЕФЕКТОВ (СРНД) В УПРУГО ИЗОГНУТОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ

В этой главе описано проведенное впервые теоретическое и экспериментальное доказательство зависимости от однородной упругой макроскопической деформации интегральной интенсивности диффузного рассеяния и эффективного статического фактора Дебая-Валлера, показатель которого считается пропорциональным интегральной интенсивности диффузного рассеяния. Было доказано также, что от упругой деформации зависят интегральные экстинкционные факторы или коэффициенты экстинкции, обусловленные рассеянием на дефектах как когерентной (μ_{ds}), так и диффузной (μ^*) составляющих полной интегральной отражательной способности (ПИОС). В результате впервые установлено полное количественное соответствие теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС кристалла со случайно распределенными наноразмерными дефектами (СРНД), что дало возможность существенно повысить информативность указанного метода диагностики СРНД.

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

Доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД путем факторизации выражений, описывающих его, на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. В частности, деформационные поправки к интегральным факторам экстинкции деформационных зависимостей брэгговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с дефектами также факторизованы на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. Зависимость указанных поправок от характеристик СРНД найдена в явном виде. Это впервые обеспечило возможность адекватного количественного определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС.

§1. Введение

Значительный практический интерес для рентгенодифракционной диагностики кристаллов представляет решение задачи динамической дифракции рентгеновских лучей в макроскопически деформированных монокристаллах, содержащих хаотически распределенные дефекты. Результаты экспериментальных исследований свидетельствуют о существенном влиянии полей смещений дислокаций [1-3] или микродефектов [4-9], имеющих флуктуационную природу из-за случайного характера их распределения, на дифракционные эффекты в упруго изогнутых кристаллах. В частности, полученные результаты указывают на неаддитивность вкладов в интенсивность рассеяния от макроскопически однородных и флуктуационных полей смещений. Последнее обстоятельство не позволяет в общем случае выполнить простое сложение интенсивностей дифракции, полученных теоретически для совершенных изогнутых кристаллов [10-15] и для неизогнутых кристаллов с дефектами [16]. Существующие попытки феноменологического обобщения соответствующих формул на случай изогнутого кристалла [17,18] подтверждают необходимость развития последовательной динамической теории дифракции в изогнутых кристаллах с дефектами. Относительная простота динамической теории дифракции в реальных кристаллах [16,19] обусловлена тем, что использование метода флуктуационных волн Кривоглаза [20], позволяющего уравнения Максвелла (уравнение Шредингера, если речь идет о дифракции заряженных частиц или нейтронов) в импульсном пространстве свести к конечной системе алгебраических уравнений для амплитуд сильных брэгговских и диффузно рассеянных волн. При этом в поляризуемости (потенциале) кристалла выделяют периодическую и флуктуационную составляющие. В развиваемой затем теории возмущений по этим двум частям малого параметра динамической теории, которым в случае дифракции рентгеновских лучей является Фурье-компонента χ_H поляризуемости кристалла (\vec{H} – вектор дифракции), а в случае дифракции частиц – отношение V_H / E_K (E_K – кинетическая энергия частицы, V_H – Фурье-компонента ее потенциальной энергии в кристалле), дополнительную роль играют статистические усреднения и малость отношения средних квадратов Фурье-компонент флуктуационной и периодической составляющих, которая имеет место, к примеру, при малых концентрациях микродефектов $c \ll 1$ [16,20].

Основная трудность применения развитого в работах [16,19] подхода к решению задачи динамической дифракции в упруго изогнутом кристалле с дефектами обусловлена отсутствием периодичности нефлуктуационной части поляризуемости (потенциала) кристалла. Это делает практически невозможным использование метода флуктуационных волн, в рамках которого используется равенство усредненной по всем узлам кристалла наблюдаемой величины значению этой величины в любом узле кристаллической решетки, усредненному по конфигурациям дефектов. Тем не менее, эта трудность представляется преодолимой, если аналогично работе [21], где рассматривалась дина-

мическая дифракция в кристаллах с дислокациями, произвести корректирующую замену координат, "устраняющую" изгиб кристалла. Это может позволить и для случая изогнутого монокристалла с микродефектами выделить в новой системе координат периодическую часть поляризуемости (потенциала) и корректно выполнить все необходимые статистические усреднения. Такой подход предоставляет возможность использовать в значительной мере результаты развитой ранее динамической теории дифракции в монокристаллах с дефектами [16] и, следовательно, получить аналитические выражения, описывающие динамические особенности рентгеновской оптики, то есть динамические дифференциальную и интегральную интенсивности дифракции в реальных упруго деформированных кристаллах. Действительно, произведенная в [22-24] замена координат с использованием функции $\vec{u}(\vec{r})$, которая описывает макроскопическое поле статических смещений в изогнутом кристалле (\vec{r} – пространственная координата), позволила перенести рассмотрение задачи в "недеформированное в среднем" пространство $\vec{r}^0 = \vec{r} - \vec{u}(\vec{r})$. В указанном пространстве усредненная по случайному распределению дефектов поляризуемость кристалла теперь имеет трансляционную инвариантность и может быть разложена в ряд Фурье. Благодаря этому, после перехода в импульсное пространство, можно использовать аналогично [16] метод флуктуационных волн, теорию возмущений, и получить системы линейных алгебраических уравнений для амплитуд сильных брэгговских и диффузно рассеянных волн. Эти системы решаются известным образом [16] в двухволновом случае дифракции. Ценой такого упрощения в нахождении амплитуд волн внутри кристалла является усложнение граничных условий – в недеформированном \vec{r}^0 -пространстве: как падающая, так и рассеянные плоские волны \vec{r}^0 -пространства, которые выходят в вакуум (дифрагированная и проходящая), превращаются в \vec{r} -пространстве в волновые пакеты. В результате дифференциальные коэффициенты отражения (и прохождения) приобретают вид свертки амплитуды отражения (прохождения) в кристалле с однородно распределенными дефектами и весовой функции, которая зависит от параметров макродеформации и описывает распределение вкладов разных точек возбуждения на дисперсионной поверхности в результирующую интенсивность рассеяния вследствие макроскопического изгиба отражающих плоскостей. Таким образом, на языке дисперсионной поверхности, падающая на кристалл плоская волна с фиксированной ориентацией волнового вектора возбуждает не две, как в теории Пеннинга-Полдера-Като, мигрирующие точки, а сразу все точки возбуждения на дисперсионной поверхности. Результирующая амплитуда рассеянной волны состоит из вкладов этих точек с различными "весами", описываемыми весовой функцией ρ , зависящей от характеристик макродеформации кристалла. В отсутствие изгиба функция ρ стремится к δ -функции, и выражения для отражательной способности и коэффициента прохождения принимают известный вид. Выражение для дифференциальной отражательной способности упруго изогнутого монокристалла с микродефектами является суммой

когерентной и диффузной составляющих. Когерентная составляющая получена в результате сложения амплитуд сильных брэгговских и, так называемых "квазидиффузных" волн, которые образуются после рассеяния сильных брэгговских волн, соответствующих неизогнутому кристаллу, на зависящей от координат добавке к кинетической энергии, обусловленной переходом к координатам, устраняющим изгиб кристалла, и амплитуда которых пропорциональна тензору дисторсии. Собственно диффузная составляющая является результатом рассеяния сильных брэгговских полей на флуктуациях статических полей смещений, создаваемых хаотически распределенными микродефектами. Когерентная и диффузная составляющие коэффициента отражения отличаются от аналогичного выражения для плоского кристалла наличием двухкратных сверток этих составляющих с весовой функцией, задаваемой характеристиками макроскопической деформации. Следует подчеркнуть также, что как когерентная, так и диффузная составляющие интенсивности дифракции не могут быть разделены на части, зависящие только от характеристик дефектов и параметров изгиба. Эти зависимости имеют более сложный неаддитивный характер. В двухволновом приближении найдены и исследованы дисперсионные поправки к волновым векторам, которые описывают уменьшения амплитуд сильных брэгговских волн за счет процессов как диффузного, так и впервые квазидиффузного рассеяния.

В результате эти поправки имеют соответственно две составляющие, первая из которых, обусловленная квазидиффузным рассеянием, зависит лишь от макроскопического изгиба, а вторая обусловлена диффузным рассеянием и зависит только от характеристик микродефектов.

Показано, что зависимость поправок к коэффициентам экстинкции как для когерентной, так и для диффузной составляющих ПИОС, которые обусловлены квазидиффузным рассеянием, от обратного радиуса кривизны упругого цилиндрического изгиба является квадратичной. При этом показано, что обусловленные упругим цилиндрическим изгибом поправки к диффузной составляющей коэффициента отражения имеют линейную зависимость от обратного радиуса кривизны изгиба.

Созданная в описанном цикле работ обобщенная динамическая теория не только предоставила возможность альтернативного описания эффектов рентгеновской оптики в изогнутых как идеальных монокристаллах, так и кристаллах с дефектами, но также стала основой разработки новых методов диагностики, в том числе и наноразмерных дефектов в монокристаллах. Так, в частности, с целью создания новых высокоинформативных методов диагностики случайно распределенных наноразмерных дефектов (СРНД), разработаны физические основы метода деформационных зависимостей ПИОС, который оказался уникально чувствительным к СРНД. Следует отметить, что для традиционных неразрушающих методов, таких, как рентгеновская топография, такие наноразмерные дефекты оказываются за пределами чувствительности метода.

Известно, что для образцов с дефектами характер поведения зависимо-

стей ПИОС от радиуса кривизны (ρ) упругого цилиндрического изгиба $R_i(1/\rho)$, присущий упруго изогнутым совершенным кристаллам [25], качественно сохраняется во всем рассмотренном интервале изменения деформации (кривизны $1/\rho$), т.е. как и в случае совершенных кристаллов, кривые являются немонотонными с минимумом при отрицательных деформациях (вектор дифракции направлен от центра кривизны дифракционной плоскости). С ростом величины упругой деформации по обе стороны от этого минимума происходят сначала параболическое, а затем линейное изменения значений R_i . Однако "скорость" возрастания зависимости $R_i(1/\rho)$ до и после минимума резко уменьшается с ростом степени искажений, обусловленных дефектами, по сравнению с совершенным (без дефектов) кристаллом. Чувствительность зависимостей $R_i(1/\rho)$ к дефектам кристаллической решетки (по мере роста уровня искажений кристаллов кривые $R_i(1/\rho)$ проявляют тенденцию к распрямлению) позволяет использовать указанные зависимости для получения характеристик СРНД.

С точки зрения получения наиболее общих сведений об одновременном влиянии макроскопически однородного упругого изгиба и флуктуационных полей смещений атомов, обусловленных микродефектами, на рассеяние РЛ наибольший интерес представляет изучение наиболее детально описанного приближения тонкого ($\mu_0 t \leq 1$, μ_0 – коэффициент фотоэлектрического поглощения, t – толщина кристалла) кристалла. Анализ литературных данных, полученных в таком приближении, показывает, что зависимость ПИОС от градиента деформации B в идеальных кристаллах можно условно разбить на три области, а именно, слабую, промежуточную ($B \leq 1$) и сильную ($B > 1$). В приближении геометрической оптики [26], при учете главного члена разложения в ряд точного решения [27], зависимость ИОС $R_i(B)$ описывается последовательно параболическим и линейным законами соответственно для слабого и промежуточного уровней деформации [28,29]. При больших же градиентах деформации экспериментальные зависимости могут быть количественно описаны (естественно, и в двух предыдущих случаях также) соответствующими формулами точного решения, предусматривающими приближение ИОС с ростом B к кинематическому ее пределу [27].

При рассмотрении тонких реальных (с микродефектами) упруго изогнутых кристаллов [30-32] экспериментально впервые обнаружен на качественном уровне эффект частичной потери чувствительности зависимости к присутствию упругой деформации.

Наблюдающиеся закономерности поведения зависимостей $R_i(1/\rho)$ в "тонких" совершенном и реальном кристаллах могут быть объяснены при использовании результатов динамической теории рассеяния РЛ кристаллами с однородно [16] и неоднородно [33,34] распределенными дефектами. Для идеальных изогнутых кристаллов известно [26-28], что с ростом деформации изменяются дифракционные условия с глубиной в непоглощающем кристалле для каждой из двух волновых мод (происходит искривление лучей этих мод). В частности, в [28,29] показано, что это обстоятельство приводит к воз-

никновению линейной зависимости $R_i(1/\rho)$ для промежуточных значений деформации. Учет же поглощения и конкурирующее влияние изменения дифракционных условий, сопровождающееся миграцией точек возбуждения по дисперсионной поверхности, обеспечивают наблюдающуюся немонотонность хода рассматриваемых кривых при отрицательных деформациях. Эффект потери чувствительности $R_i(1/\rho)$ к деформации реального кристалла обусловлен конкурирующим характером влияния на дифракцию двух исследуемых типов искажений решетки. С одной стороны – уменьшением экстинкционной длины в деформированном кристалле, по сравнению с идеальным, и дополнительным вкладом диффузного рассеяния, а с другой стороны – уменьшением величины структурного фактора ($F_{rh}^{Re} \rightarrow F_{rh}^P e^{-L}$) и, главное, дополнительными потерями энергии волновых полей за счет диффузного рассеяния, учитываемых коэффициентом μ_{ds} [16]. Оказалось, что при слабых и промежуточных уровнях деформации эти механизмы могут быть использованы для количественного описания экспериментальных величин ИОС в рамках следующей модели.

ПООС R_i реального упруго изогнутого кристалла может быть представлена в виде суммы когерентной R_i^C и диффузной R_i^D составляющих, где

$$R_i^C = C |\chi_{rh}^*| / (2 \sin 2\theta) \exp(-\mu_0^*) \left[1 - \exp(-\pi C^2 / 2 |B|) \right] \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \times \\ \times \frac{\text{ch}(M_\beta^* \xi) \text{ch} \left[\left(\frac{M^* C^2}{D} + 2 \right) \ln \left(\sqrt{1 + (D/C)^2 (1-\xi^2)} + (D/C)(1-\xi^2) \right) \right]}{\sqrt{1 + (D/C)^2 (1-\xi^2)}}, \quad (4.1)$$

$$R_i^D = \frac{\pi^2 (\chi_{rh}^2)}{\lambda \sin 2\theta} \times \quad (4.2)$$

$$\times C^2 (t/\gamma_1) \exp(-\mu_0) (1 - \exp(-2L)) \text{sh}(M_\beta) / M_\beta \exp(-\mu^* t) (\gamma_1 / \gamma_0).$$

Здесь μ_0^* – показатель фактора нормального поглощения; M_β^* описывает влияние поглощения в асимметричной геометрии Лауэ, $B = (\partial^2 / \partial z^2 - \partial^2 / \partial x^2) (\vec{H} \vec{u})$ – нормализованный градиент деформации, $D = Bt$ – эффективная деформация, t – толщина кристалла в единицах Λ^* / π , Λ^* – экстинкционная длина для σ -поляризации, M^* – коэффициент аномального поглощения, C – поляризационный фактор, равный 1 или $\cos 2\theta$. Остальные обозначения соответствуют [27]. Однако основное отличие формулы (3.1) от результатов и обозначений [27] состоит в перенормировке согласно [33–35] констант динамического рассеяния $\chi_{ih}^* \rightarrow \chi_{ih} e^{-L}$, $\chi_{rh}^* \rightarrow \chi_{rh} e^{-L}$, $\mu_0^* \rightarrow \mu_0 + \mu_{ds}$ для когерентной составляющей, $\mu_0^* \rightarrow \mu_0 + \mu_{ds}^*$ для диффузной составляющей. Для диффузной составляющей использовано выражение, полученное в [35].

Экспериментально наблюдается чрезвычайно высокая чувствительность

величины ПИОС как к наличию малых концентраций СРНД, так и к слабым УД [16]. Целью настоящей главы является изложение в соответствии с [36] результатов разработки физических основ и апробации метода определения характеристик СРНД путем использования деформационных зависимостей ПИОС.

§2. Влияние упругого изгиба (УИ) на диффузное рассеяние и экстинкционные эффекты в монокристаллах с дефектами

В работах [17,18,33,34] в основу модели рассеяния рентгеновских лучей упруго изогнутым монокристаллом с СРНД (4.1) было положено предположение о том, что упругая деформация не влияет на диффузное рассеяние и коэффициенты экстинкции, обусловленные рассеянием на дефектах. Измерения значений ПИОС (с точностью 3%) проводились на двухкристальном спектрометре с использованием $MoK_{\alpha 1}$ -излучения в бездисперсионной схеме. Использовалось 220-отражение от плоскостей, составляющих угол ψ с нормалью к поверхности кристалла. Величины углов для образцов 1, 2 и 3 составляли соответственно $\psi=2,13^\circ$, $\psi=2,05^\circ$ и $\psi=0,38^\circ$.

В таблице 4.1 приведены значения структурно чувствительных параметров ПИОС для динамического рассеяния, полученные фитированием зависимостей ПИОС от деформации [18] на основе указанной модели [17,18,34]. Соответствующие зависимости представлены на рис. 4.1.

Таблица 4.1. Значения структурно чувствительных параметров ПИОС для динамического рассеяния, полученные фитированием в рамках указанной модели [34,37,38] зависимостей ПИОС от деформации (маркеры на рис.4.1) [38] и рассчитанные из литературных данных о дефектной структуре образцов (в круглых скобках)

№ образца	$L \cdot 10^3$	$\mu_{ds}, \text{см}^{-1}$	$\mu^*, \text{см}^{-1}$	<i>GOF</i>
1	4±0,2 (4,24)	1,7±0,2 (1,31)	0 (0,274)	0,94 (1,66)
2	10±0,1 (8,56)	12±1 (3,77)	0 (0,704)	1 (30)
3	13±3 (16,3)	20±2 (17,9)	0 (2,67)	0,73 (1,19)

Дефектная структура образцов 1-3 сформировалась в результате преципитации кислорода в кремнии, широко изученной экспериментально и теоретически [37]. Известно, что при отжиге в объеме монокристалла Si, выращенного по методу Чохральского, образуются дискообразные выделения SiO_2 , концентрация и размер которых зависят от концентрации кислорода после выращивания, длительности и температуры отжига. Для образцов, изучаемых в работе [36], концентрация кислорода составляла $1,1 \cdot 10^{18}$ атомов/см³. Отжигались они 4 часа, 6 часов и 10 часов соответственно при температуре $T=1080^\circ\text{C}$. Известно, что при температурах отжига выше 1173К напряжения, создаваемые в кристалле вокруг преципитатов SiO_2 , частично релаксируют за счет образования дислокационных петель. Влияние упомянутых СРНД разных типов на величины ПИОС характеризуется структурно чувствительными

параметрами динамического рассеяния рентгеновского излучения, причем дефекты разного типа вносят аддитивный вклад в эти параметры, т.е. $L = L_{cl} + L_{b.l.} + L_{s.l.}$, $\mu_{ds} = \mu_{dscl} + \mu_{ds\ b.l.} + \mu_{ds\ s.l.}$, $\mu = \mu_{cl}^* + \mu_{b.l.}^* + \mu_{s.l.}^*$. Определенные с использованием комбинированного метода ПИОС [38] и литературных данных [37] значения указанных параметров динамического рассеяния для образцов 1, 2 и 3 приведены в таблице 4.1 в круглых скобках.

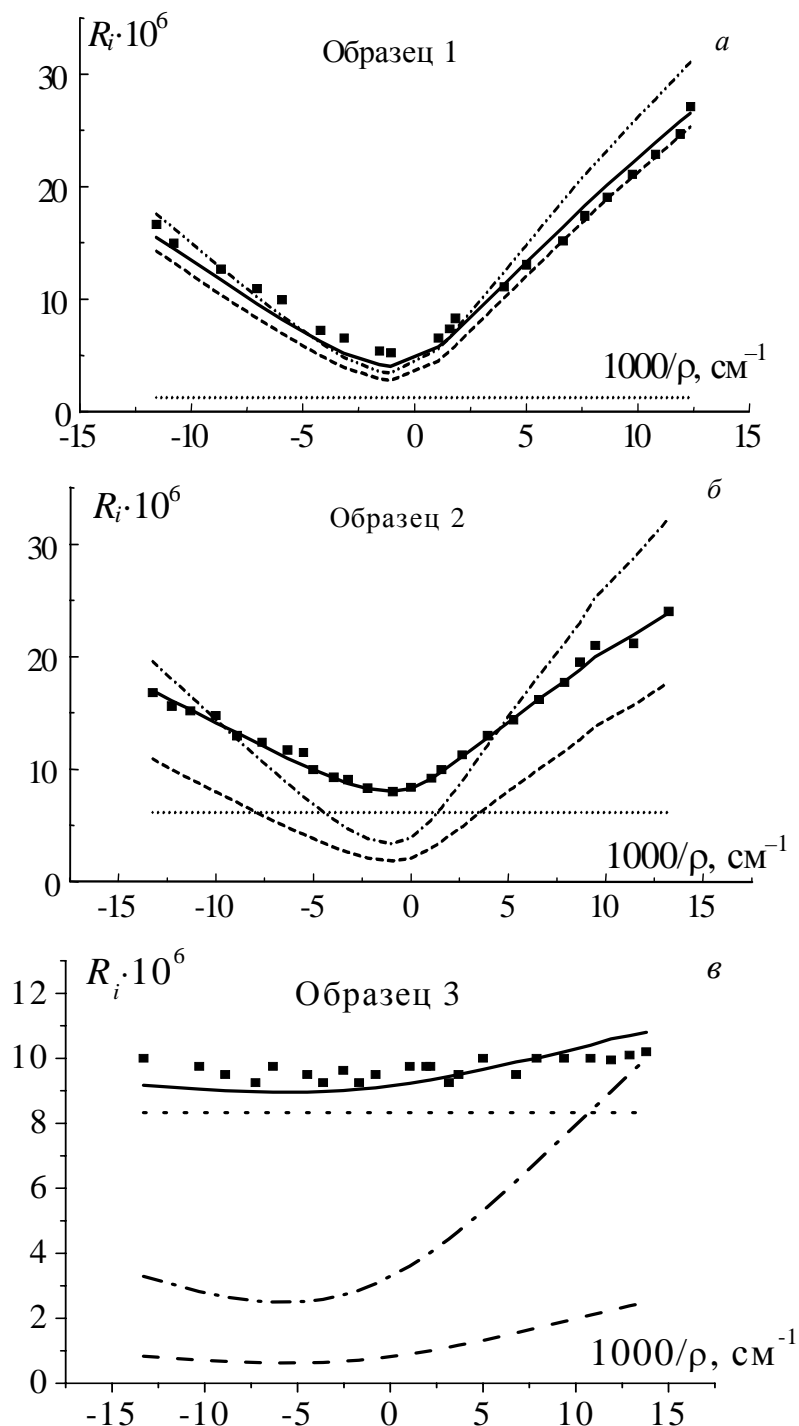


Рис. 4.1. Рассчитанные значения зависимостей ПИОС от кривизны монокристаллов Si, прошедших термообработку: при 1080°C в течение 4 ч. (а), при 1080°C в течение 6 ч. (б), при 1080°C в течение 10 ч. (в) (сплошная линия). Соответствующие экспериментальные значения (маркеры); штрих и пунктир – когерентная и диффузная составляющие ПИОС соответственно, штрих-пунктир – ПИОС кристалла без СРНД [18]

На рис. 4.2 линиями изображены рассчитанные зависимости ПИОС от радиуса упругого изгиба при значениях параметров динамического рассеяния MoK_α -излучения, рассчитанных из литературных данных о дефектной структуре образцов [37,38] и приведенных в круглых скобках в таблице 4.1. Из этих данных следует, что различия рассчитанных и экспериментальных зависимостей ПИОС существенно превышают ошибку экспериментальных измерений.

Для образца 1 со слабо развитой дефектной структурой наблюдается наименьшее расхождение с экспериментом расчетов, проведенных в рамках модели, предполагающей независимость диффузного рассеяния и экстинкционных эффектов от упругой деформации. При этом, как видно из таблицы 4.1, значения величин параметров динамического рассеяния L , μ_{ds} и μ^* , определенные из оптимально возможных результатов фитирования деформационной зависимости [18] в рамках указанной модели, в пределах погрешности определения практически совпадают с рассчитанными из литературных данных о дефектной структуре образца 1. Это обусловлено низкой чувствительностью ПИОС к СРНД из-за малых значений этих параметров.

Для образца 3 с сильно развитой дефектной структурой значения величин параметров динамического рассеяния L , μ_{ds} и μ^* , определенные путем аналогичного фитирования деформационной зависимости [18], значительно меньше значений, рассчитанных из литературных данных о дефектной структуре образца 3. Однако, хотя вклад диффузной составляющей в данном случае определяет величину ПИОС, из-за малой степени асимметрии использованного в данном случае рефлекса эти данные не позволяют сделать вывод о наличии и характере зависимости диффузной составляющей от степени упругой деформации.

Действительно, из рис. 4.2,в видно, что в этом случае зависимость от деформации даже когерентной составляющей ПИОС проявляется слабо (штриховая линия).

Уже обсужденные кривые на рис. 4.2,а и рис. 4.2,в, и особенно кривые на рис.4.2,б, где наблюдается наиболее существенное расхождение рассчитанных и экспериментальных данных для реальных значений параметров L , μ_{ds} и μ^* , требуют более корректного описания. Модель, предполагающая независимость от деформации величин факторов динамического рассеяния и величины вклада диффузной составляющей в ПИОС, по-видимому, нуждается в уточнении. Неадекватность модели подтверждается значениями показателя добротности фитирования, приведенными в круглых скобках в таблице 4.1, и особенно ярко иллюстрируется рис. 4.2,б, на котором рассчитанные в ее рамках зависимости ПИОС от радиуса деформации (линии) не совпадают наиболее существенно с зависимостями, полученными экспериментально (маркеры) для образца 2. Таким образом, для образца 1 наблюдается недостаточное влияние (вклад) микродефектов, а для образца 3 – деформации. В образце 2 эти вклады сравнимы и достаточно заметны.

В соответствии с [23,24,39] влияние упругой деформации на величины ПИОС и ее компонент при наличии в кристалле микродефектов структуры

можно описать, вводя поправки к величинам параметров динамического рассеяния, зависящие от степени деформации.

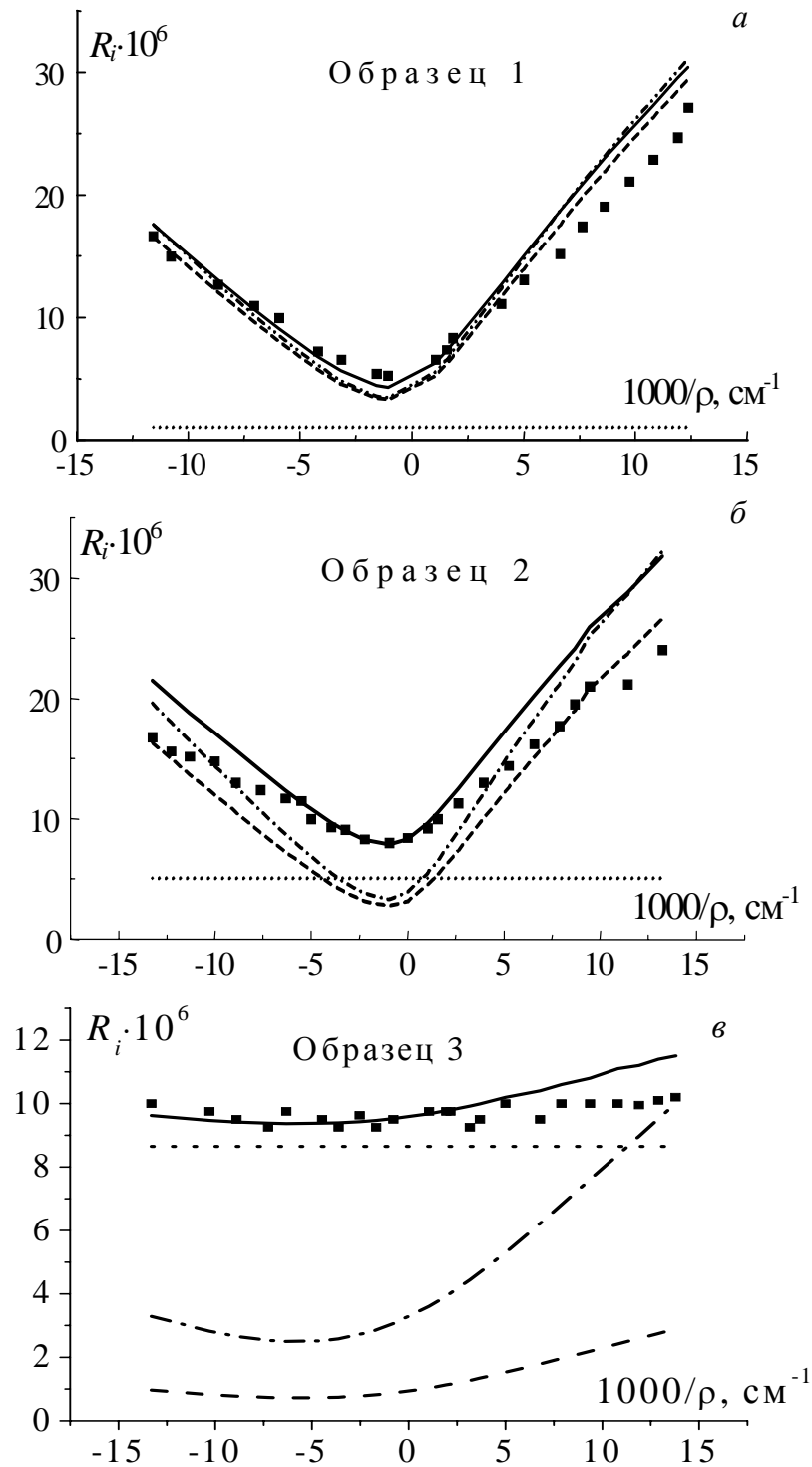


Рис. 4.2. Рассчитанные с использованием выражений согласно [17,18,34] зависимости ПИОС от кривизны монокристаллов Si, содержащих СРНД, характеризующиеся значениями параметров динамического рассеяния: $L=0,00424$, $\mu_{ds}=1,31 \text{ см}^{-1}$, $\mu^*=0,274 \text{ см}^{-1}$ (а), $L=0,00856$, $\mu_{ds}=3,77 \text{ см}^{-1}$, $\mu^*=0,704 \text{ см}^{-1}$ (б), $L=0,0283$, $\mu_{ds}=22 \text{ см}^{-1}$, $\mu^*=9,89 \text{ см}^{-1}$ (в) (сплошные линии). Соответствующие экспериментальные значения ПИОС (маркеры) для монокристаллов Si, подвергнутых отжигам при 1080°C в течение 4 ч. (а), в течение 6 ч. (б), в течение 10 ч. (в); штрих и пунктир – когерентная и диффузная составляющие ПИОС соответственно, штрих-пунктир – ПИОС кристалла без СРНД [18]

По определению все величины L , μ_{ds} и μ^* являются интегральными [16]:

$$\begin{aligned} L &\sim R_D \sim \int \mu_{ds}(\theta) d\theta; \\ \mu_{ds} &\sim \int \mu_{ds}(\theta) R_B(\theta) d\theta / \int R_B(\theta) d\theta; \\ \mu^* &\sim \int \mu_{ds}(\theta) \mu_{ds}(\theta) d\theta / \int \mu_{ds}(\theta) d\theta. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Здесь $\mu_{ds}(\theta) \sim R_D(\theta)$, где $R_D(\theta)$ и $R_B(\theta)$ – диффузная и брэгговская кривые отражения. Если рассматривать более строго, то находить интегральные значения необходимо не для $\mu_{ds}(\theta)$, а для всего фактора экстинкции, и, следовательно, интегрировать следует не коэффициент экстинкции $\mu_{ds}(\theta)$, а сам фактор экстинкции $\exp(-\mu_{ds}(\theta)t)$ (случай Лауэ) или $1/(\mu_0 + \mu_{ds}(\theta))$ (случай Брэгга). Используемое здесь упрощение справедливо при условии $\mu_{ds}(\theta)t \ll 1$, т.е. $\mu_{ds}(\theta) \ll \mu_0$, которое, как следует из данных таблицы 4.1, выполняется для образца 2.

Как видно из формул (4.3) все три величины по определению должны в общем случае различным образом зависеть от деформации, т.к. сами кривые отражения под интегралом и их полуширины различным образом чувствительны к деформации изгибом. Имеется в виду эффект различного относительного изменения их ширин при деформации. Так, если распределение диффузного фона много шире брэгговского, то более чувствительной к изгибу будет брэгговская кривая отражения. При малых изгибах кристалла, происходит уширение и, следовательно, увеличение отражательной способности когерентного пучка и аналогичное увеличение за счет уширения, а также, по видимому, конкурирующее уменьшение интенсивности диффузного рассеяния вследствие дополнительного расширения экстинкционного провала в диффузной кривой отражения. При этом величина μ_{ds} на фоне роста μ_{ds} и μ^* за счет квазидиффузного рассеяния может изменяться даже в сторону уменьшения, что видно из анализа формул (4.3). Это будет происходить до тех пор, пока полуширина $R_B(\theta)$ с ростом изгиба не станет порядка полуширины $R_D(\theta)$ или $\mu_{ds}(\theta)$, что есть практически одно и то же. При этом $\mu_{ds} \rightarrow \mu^*$, после чего изменение μ_{ds} с деформацией станет равным изменению μ^* как по величине, так и по знаку, т.е. оно уже станет положительным, как и изменение μ^* , которое не меняет знак и положительно при любом изгибе. Таким образом, изгиб сначала устраняет причину, по которой μ_{ds} всегда существенно больше μ^* , а далее и μ_{ds} и μ^* растут одинаково. Указанный рост обусловлен уширением диффузной кривой отражения. Однако этот рост может стать скомпенсированным для R_D соответствующим ростом μ^* в факторе экстинкции, что сначала стабилизирует соответствующую величину R_D при некотором значении изгиба $1/\rho_k$, а затем уменьшает ее. Для параметра L такая стабилизация возможно отсутствует, т.к. по определению $L \sim R_D$ без учета экстинкционного фактора и, следовательно, коэффициента экстинкции μ^* . Аналогично продолжают расти μ_{ds} и μ^* . Когда они станут приблизительно равными μ_0 , их необходимо заменить экстинкционными факторами.

Чем уже пик диффузного рассеяния, тем раньше с ростом изгиба устанавливается описанный режим одинакового увеличения μ_{ds} и μ^* , что видимо и имеет место в нашем случае узкого диффузного пика. Если дефектов несколько типов, то сначала выравниваются вклады в μ_{ds} и μ^* для самых крупных дефектов, затем менее крупных и в конце для самых мелких и, следовательно, для суммарных вкладов. То есть μ_{ds} и μ^* будут сближаться по мере выхода на указанный режим дефектов разных типов, пока не станут равными.

Убедившись в невозможности однозначного подбора независимых коэффициентов деформационных зависимостей для R_D , μ_{ds} , μ^* и L , используем обоснованные выше утверждения о характере изменения L , R_D , коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds} и μ^* при деформации. Допустим, что при какой-то степени деформации $1/\rho_k$ величины μ_{ds} и μ^* становятся равными, а затем продолжают расти с одинаковой скоростью. R_D при деформации $1/\rho_k$ выйдет на режим стабилизации, а затем станет уменьшаться за счет преобладающего влияния фактора экстинкции, а зависимость ПИОС от деформации будет определяться когерентной составляющей и ее кинематическим пределом. Из общих физических соображений, приведенных выше и анализа экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС, приведенного ниже, в работе [36] предложена описанная ниже модель зависимостей параметров динамического рассеяния от деформации. Так, поскольку из рис. 4.1 и 4.2 видно, что величины ПИОС слабо зависят от знака деформации, то определяющая зависимость величин поправок для L , R_D и интегральных коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds} и μ^* от обратного радиуса деформации квадратична ($\sim 1/\rho^2$, ρ – радиус упругого изгиба), т.е. является симметричной. Данная модель коррелирует с общими теоретическими результатами работ [23,24,39].

В то же время из рис. 4.3 видно, что при отрицательных деформациях вклад СРНД в ПИОС значительно больше, чем при положительных деформациях.

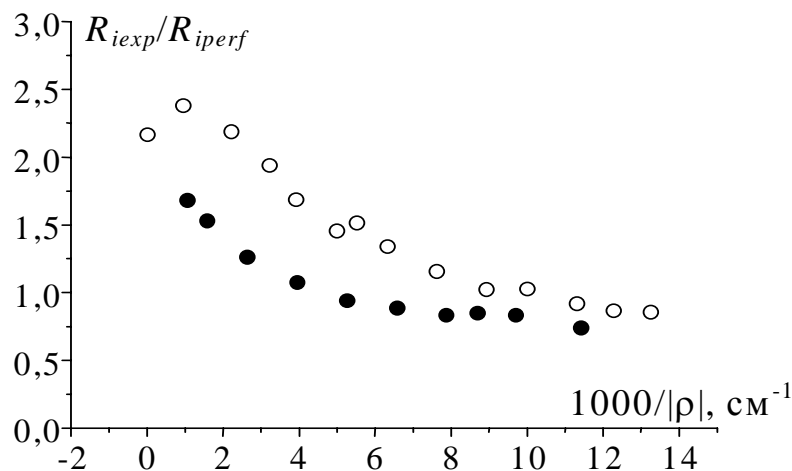


Рис. 4.3. Зависимости от модуля радиуса деформации отношений экспериментальных значений ПИОС образца 2 к рассчитанным для деформированного кристалла, не содержащего случайно распределенных в объеме дефектов: (°) – для отрицательной деформации, (●) – для положительной деформации

Это позволяет предположить также наличие существенно более малых поправок к величинам L и R_D , зависимость которых от обратного радиуса деформации линейна ($\sim 1/\rho$), т.е. асимметрична. Эта незначительная дополнительная асимметрия ПИОС может быть обусловлена эффектом Бормана для диффузной составляющей.

Тогда при $|1/\rho| < |1/\rho_k|$

$$L=L_0+\Delta L_1+\Delta L_2=L_0(1+\alpha/\rho^2)+\alpha_1/\rho \quad (4.4)$$

$$\exp(-\mu_{ds}t)=\exp(-\mu_{ds0}t)+\Delta\exp(-\mu_{ds}t)=\exp(-\mu_{ds0}t)+\beta/\rho^2, \quad (4.5)$$

$$\exp(-\mu^*t)=\exp(-\mu^*_{0}t)+\Delta\exp(-\mu^*t)=\exp(-\mu^*_{0}t)+\delta/\rho^2. \quad (4.6)$$

При $|1/\rho| > |1/\rho_k|$

$$L=L_0\alpha_1/\rho, \quad (4.7)$$

$$\exp(-\mu_{ds}t)=\exp(-\mu^*t)=\exp(-\mu^*_{0}t)+\delta/\rho^2. \quad (4.8)$$

Здесь $1/\rho_k$ соответствует изгибу, при котором брэгговский пик уже уширился до ширины диффузного. ρ_k для каждого типа дефектов свое, но здесь введено одно эффективное, на основе анализа экспериментальной зависимости ПИОС от изгиба. ρ_k определяется из условия $\mu_{ds}=\mu^*$.

В результате фитирования для образца 2 получено: при $\alpha=-10^{12}$ мкм², $\beta=3,1\cdot 10^{10}$ мкм², $\alpha_1=-2,01\cdot 10^5$ мкм, $\delta=-10^{11}$ мкм², КДФ=0,9, $\rho_k=10^6$ мкм.

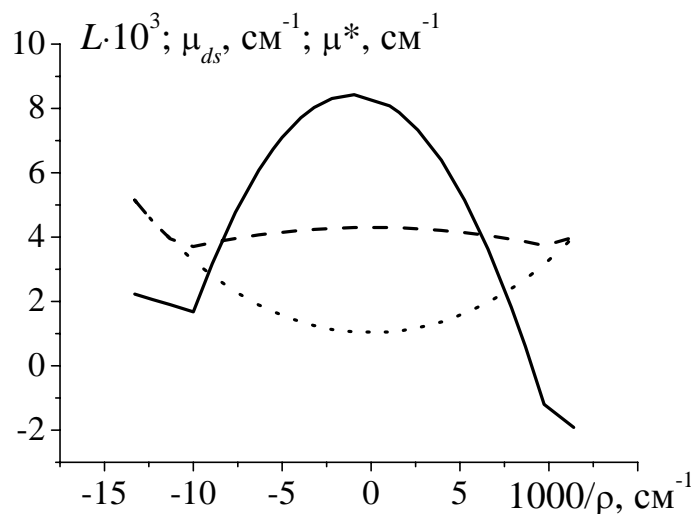


Рис. 4.4. Рассчитанные зависимости величины эффективного показателя статического фактора Дебая-Валлера L (сплошная линия) и величин интегральных коэффициентов эффективного поглощения когерентной μ_{ds} (штрих) и диффузной μ^* (пунктир) компонент ПИОС от степени упругой деформации (образец 2)

Соответствующие расчетные зависимости ПИОС и ее составляющих от деформации приведены на рис. 4.5.

Таким образом, в [36] настоящей работе впервые экспериментально доказано, что интегральная интенсивность диффузного рассеяния, интегральные экстинкционные факторы, обусловленные рассеянием на дефектах, как для когерентной (μ_{ds}) так и диффузной (μ^*) составляющих полной интегральной отражательной способности и эффективный статический фактор Дебая-Валлера зависят от деформации. Эмпирически установлены параметры и характерные особенности указанных зависимостей.

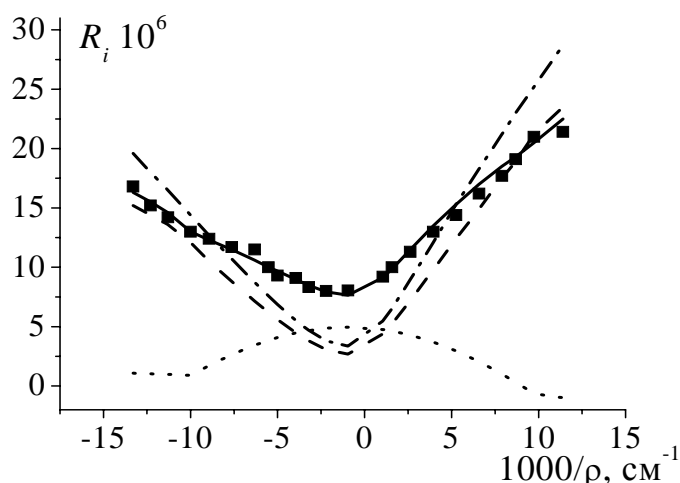


Рис. 4.5. Зависимости ПИОС образца 2 от обратного радиуса кривизны деформации, рассчитанная в рамках модели, предполагающей влияние деформации на коэффициенты экстинкции и на диффузное рассеяние (сплошная линия) и полученная экспериментально (маркеры). Штриховая линия – рассчитанная зависимость когерентной компоненты ПИОС от деформации, пунктирная линия – рассчитанная зависимость диффузной компоненты ПИОС от деформации, штрих-пунктир – ПИОС кристалла без СРНД

§3. Установление природы возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния УИ и СРНД на величину ПИОС

Задача определения количественных характеристик СРНД усложняется вследствие того, что совместное влияние СРНД и УД на ПИОС не всегда аддитивно [18]. Из рис. 4.1, 4.2 и 4.5 видно, что при определенных степенях положительного или отрицательного упругих изгибов полностью исчезает чувствительность ПИОС к СРНД. Деформационная зависимость ПИОС, полученная экспериментально в работе [18] для содержащего СРНД монокристалла Si, пересекается с рассчитанной деформационной зависимостью для монокристалла Si, не содержащего СРНД.

С другой стороны, авторы работы [31] наблюдали и возможное аддитивное влияние УД и СРНД на величину интегральной интенсивности (ИИ) (рис. 4.6,а), и исчезновение чувствительности ИИ упруго изогнутого кристалла к СРНД при сильной степени асимметричности используемого Лауэ-рефлекса (рис. 4.6,б).

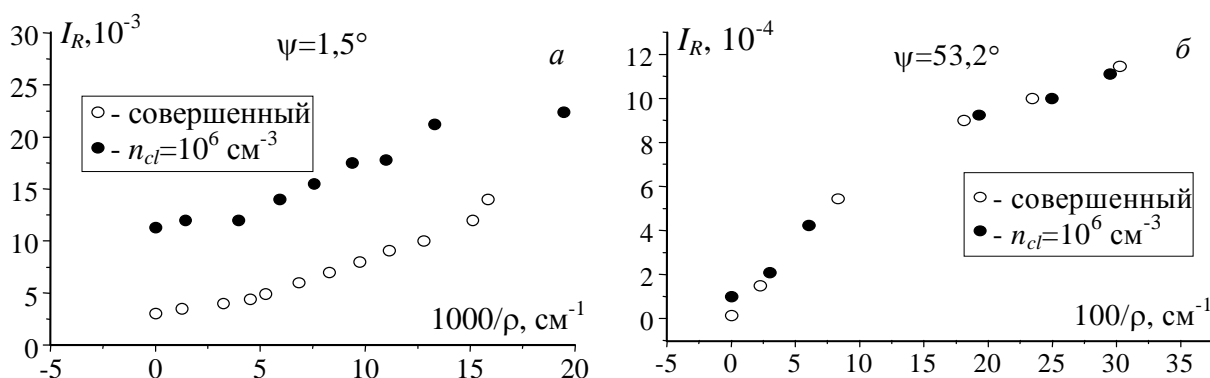


Рис. 4.6. Зависимости абсолютных значений интегральных интенсивностей Лауэ-дифрагированных пучков от кривизны образцов \circ – совершенный кристалл, \bullet – образец с дефектами типа кластеров ($\psi=1,5^\circ$) (а); ($\psi=53,2^\circ$) (б) [31]

В настоящем параграфе изложены результаты изучения в [36] путем вычислений с использованием формул динамической теории рассеяния РЛ реальными монокристаллами, подвергнутыми контролируемому упругому изгибу, характера влияния СРНД различных размеров и концентраций на ход деформационной зависимости ПИОС при варьировании степени асимметрии используемого Лауэ-рефлекса. Результаты вычислений представлены на рис. 4.7-4.9.

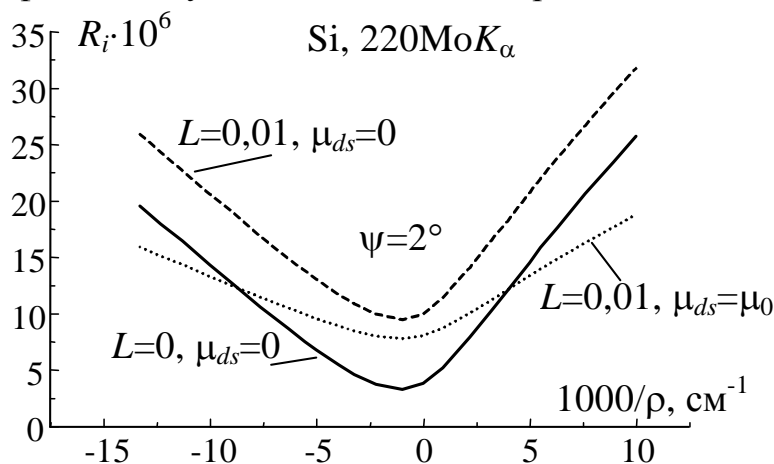


Рис. 4.7. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам работ [33,34,38], описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНМ: сплошная линия – деформационная зависимость ПИОС при отсутствии СРНД, штриховая линия – деформационная зависимость при наличии очень мелких СРНД (при $\mu_{ds} \approx 0$), пунктир – деформационная зависимость при наличии крупных дефектов

Из рис. 4.7 видно, что рост величины показателя статического фактора Дебая-Валлера приводит к увеличению ПИОС, одинаковому при любых значениях упругого изгиба – наблюдается аддитивное влияние на величину ПИОС дефектов и упругой деформации. В то же время рост величины интегрального коэффициента экстинкции, т.е. эффективного поглощения за счет ухода части дифрагированных лучей в диффузный фон из-за рассеяния на СРНД (μ_{ds}) приводит к уменьшению ПИОС, причем разному при разных значениях упругого изгиба. Следовательно, неаддитивность влияния на ПИОС СРНД и упругой деформации, приводящая к снижению чувствительности величины ПИОС к упругой деформации и к появлению вышеупомянутой точки потери чувствительности ПИОС к СРНД является следствием указанной экстинкции (эффективного поглощения) как когерентной, так и диффузной составляющих ПИОС из-за их диффузного рассеяния на СРНД. Из рис. 4.7 для больших СРНД видно, что пока деформации малы, ярко проявляется увеличение ПИОС. Оно происходит за счет вклада порожденной их наличием диффузной составляющей ПИОС R_D , несмотря на уменьшение из-за L и μ_{ds} когерентной составляющей ПИОС R_C . При больших деформациях, когда когерентная составляющая резко возрастает, абсолютная величина ее уменьшения за счет коэффициента экстинкции (μ_{ds}) начинает все более преобладать над непосредственным вкладом в ПИОС R_D , что возможно только в случае наличия достаточно крупных СРНД, дающих определяющий вклад в μ_{ds} .

Преобладание воздействия на величину ПИОС УД или СРНД зависит

также от степени асимметричности используемого Лауэ-рефлекса, что иллюстрируют результаты расчетов, представленные на рис. 4.8. На рис. 4.8 представлены деформационные зависимости, рассчитанные для монокристаллов Si, содержащих высокую концентрацию СРНД малых размеров, при использовании Лауэ-рефлексов с различной степенью асимметрии.

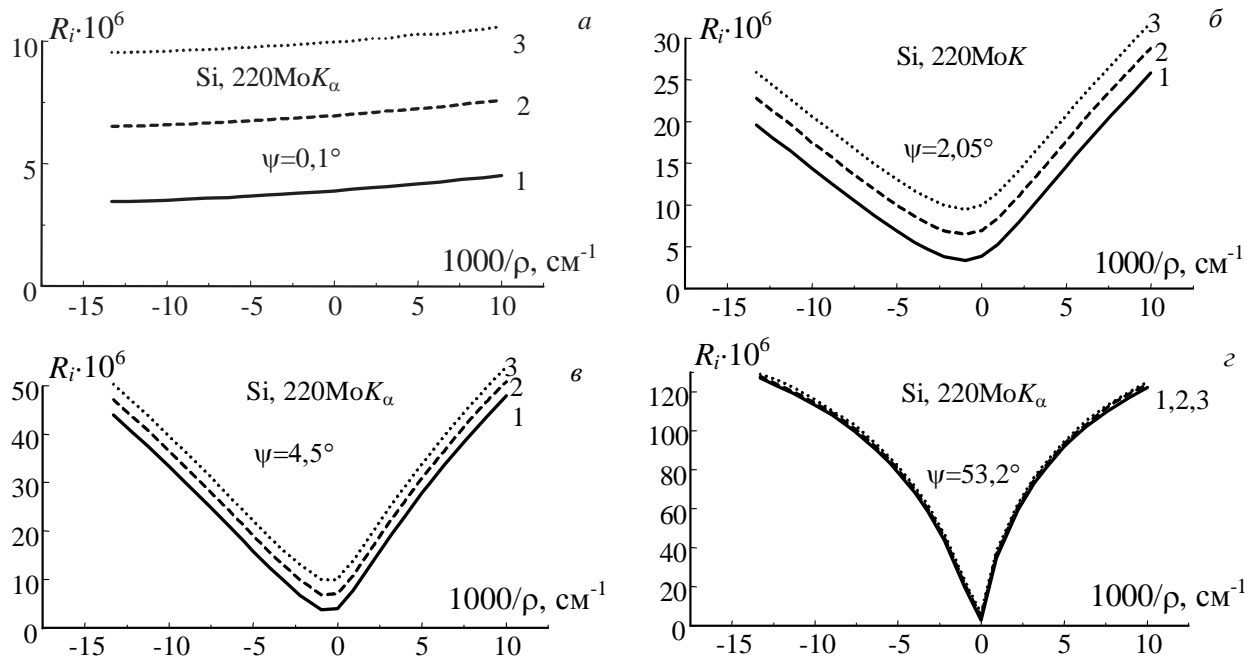


Рис. 4.8. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам, описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД для разных значений характеризующих СРНД параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения: (1) $L=0$, $\mu_{ds}=0$, $\mu^*=0$; (2) $L=0,005$, $\mu_{ds}=0$, $\mu^*=0$; (3) $L=0,01$, $\mu_{ds}=0$, $\mu^*=0$ и при различных углах наклона отражающей плоскости 011 к нормали к поверхности образца: $\psi=0,1^\circ$ (а), $\psi=2,05^\circ$ (б), $\psi=4,5^\circ$ (в), $\psi=53,2^\circ$ (г)

Из рис. 4.8,а видно, что при использовании слабо асимметричного рефлекса величина ПИОС практически не зависит от степени деформации. В то же время наличие СРНД в этом случае большой концентрации мелких дефектов увеличивает ее в 2-3 раза, благодаря вкладу диффузной составляющей ПИОС R_D , причем увеличение ПИОС практически не компенсируется уменьшением брэгговской составляющей R_B из-за рассеяния на СРНД.

При умеренной асимметрии используемого рефлекса (рис. 4.8,б и рис. 4.8,в) вследствие резкого возрастания вклада когерентной составляющей преобладает влияние на величину ПИОС упругой деформации. При сильной степени асимметрии используемого рефлекса (рис. 4.8,г) влияние СРНД на величину ПИОС становится практически не заметным по сравнению с влиянием УД.

При неаддитивном совместном влиянии на величину ПИОС упругой деформации и крупных СРНД с увеличением степени асимметрии Лауэ-отражения сужается область степени упругого изгиба, в которой СРНД увеличивают ПИОС, и несколько уменьшается относительная степень их воздействия на ПИОС в этой области. В то же время в области преобладания ко-

герентной составляющей чувствительность к дефектам резко возрастает. На рис. 4.9 представлены деформационные зависимости, рассчитанные для монокристалла Si, содержащего низкую концентрацию СРНД больших размеров, при использовании Лауэ-рефлексов с различной степенью асимметрии.

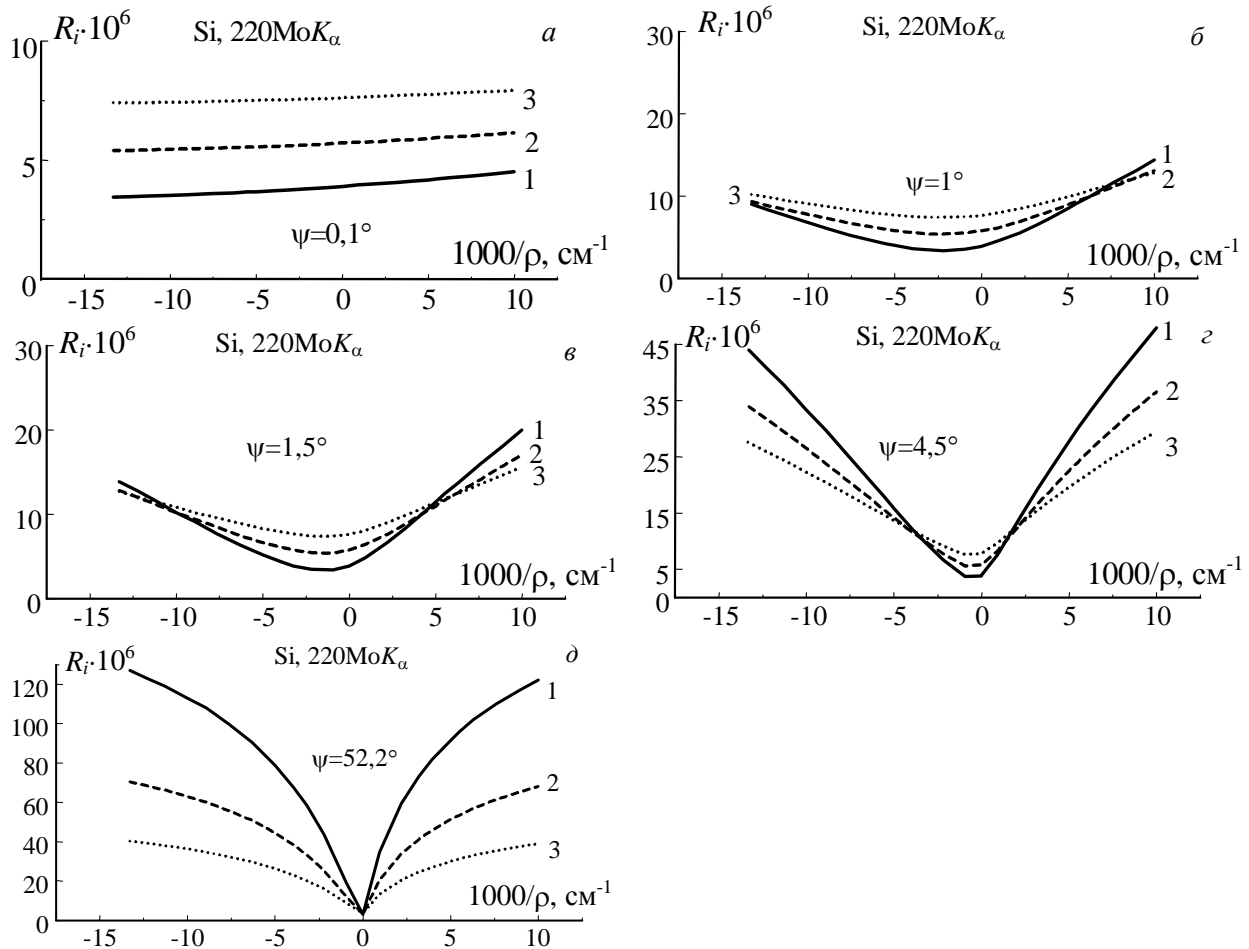


Рис. 4.9. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (4.1) и(4.2), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД для разных значений характеризующих СРНД параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения: (1) $L=0$, $\mu_{ds}=0$, $\mu^*=0$; (2) $L=0,005$, $\mu_{ds}=7,1 \text{ см}^{-1}$, $\mu^*=0,71 \text{ см}^{-1}$; (3) $L=0,01$, $\mu_{ds}=14,2 \text{ см}^{-1}$, $\mu^*=1,42 \text{ см}^{-1}$ и при различных углах наклона отражающей плоскости 011 к нормали к поверхности образца: $\psi=0,1^\circ$ (а), $\psi=2,05^\circ$ (б), $\psi=4,5^\circ$ (в), $\psi=53,2^\circ$ (г)

Из рис. 4.9 видно, что степень деформации, определяющая точку потери чувствительности к СРНД, уменьшается с увеличением степени асимметрии используемого Лауэ-отражения. При симметричном отражении (рис. 4.9,а) наблюдается только тот участок деформационной зависимости, на котором СРНД увеличивают ПИОС упруго деформированного кристалла. При значительной степени асимметрии отражения (рис. 4.9,д) практически наблюдается только тот участок деформационной зависимости, на котором преобладает вклад в ПИОС когерентного рассеяния, и наличие СРНД вызывает уменьшение ПИОС упруго деформированного кристалла.

Таким образом, в настоящем параграфе на основе предложенной модели (4.1) и (4.2) теоретически и экспериментально изучены особенности дифракции в геометрии Лауэ когерентно и диффузно рассеянного рентгенов-

ского излучения в тонких упруго изогнутых кристаллах кремния, содержащих дефекты кулоновского типа. Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияний УД и СРНД на ПИОС при различной степени асимметрии отражений, которая позволяет существенно усиливать эффект влияния УД на ПИОС.

§4. Количественное описание влияния на ПИОС упругого изгиба для монокристаллов с разными характеристиками СРНД.

На основе модели, предложенной в работе [42], экспериментально подтвердившей соответствующие теоретические предсказания [23,24,39], установлены природа и основные особенности характера зависимости от деформации факторов экстинкции. В соответствии с [23,24,39,40], он существенно зависит от степени нарушения структуры этого образца вследствие наличия в нем СРНД, и, следовательно, очень чувствителен к характеристикам СРНД. Однако для определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС при использовании разработанной в [40] теоретической модели необходимо разделить в этой модели влияние на ПИОС УД и наноразмерных дефектов. Целью настоящего параграфа является получение в соответствии с [36] такой факторизованной модели путем выделения универсальных коэффициентов в деформационных поправках к факторам экстинкции, которые не зависят от микродефектов и от СРНД, а зависят только от УД. Сначала это осуществлялось в [36] для примера в случае дифракции рентгеновского излучения в монокристаллах Si с уже известными характеристиками СРНД. Затем найденные универсальные коэффициенты использовались для диагностики неизвестной дефектной структуры СРНД других монокристаллов путем фитирования на основе такой факторизованной теоретической модели экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС, полученных в тех же условиях дифракции.

С целью развития новых методов диагностики микродефектов и СРНД для выяснения характера влияния нарушений, вызванных микродефектами и СРНД, и исключения путем выделения факторов собственно деформационных зависимостей, общих для всех случаев дефектов, в работе [36] проанализированы деформационные зависимости факторов экстинкции, полученные для трех образцов с разными дефектными структурами. Образцы были вырезаны по плоскости (111) из слитка, выращенного по методу Чохральского в направлении [111] и имеющего концентрацию кислорода $1,1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и концентрацию углерода $< 1,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Образцы были отожжены при температуре 1080°C . Средний размер и концентрация микродефектов трех типов, присутствующих в указанных образцах, определены комбинированным методом ПИОС, описанным в работе [38] (см. главы 1 и 2). Толщины образцов, длительность их термообработки и характеристики микродефектов трех типов, присутствующих в образцах, приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2. Толщины образцов (t_0 , мкм), длительность (t , ч), средние размеры и концентрации: кластеров SiO_2 в форме дисков R_{cl} , мкм; h_{cl} , мкм; c_{cl} ; больших дислокационных петель $c|\vec{b}|=a/\sqrt{2}$ (\vec{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки) R_{bl} , мкм; c_{bl} ; и мелких дислокационных петель $c|\vec{b}|=a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l}$, мкм; $c_{sm.l}$.

№ обр.	t_0 , мкм	t , ч.	R_{cl} , мкм	h_{cl} , мкм	R_{bl} , мкм	$c_{bl} \cdot 10^{15}$	$R_{sm.l}$, мкм	$c_{sm.l} \cdot 10^{10}$
1	470	4	0,35	0,01	0,35	4,7	0,02	2,11
2	488	6	0,45	0,012	0,45	5,2	0,03	1,43
3	675	10	0,67	0,014	0,67	6,2	0,006	111

Деформационные зависимости ПИОС для этих образцов измерены в работе [18] с использованием 220-отражения MoK_α -излучения от плоскостей, составляющих с нормалью к поверхности кристалла угол $\psi=2,13^\circ$ (для образца 1); $\psi=2,05^\circ$ (для образца 2); $\psi=0,38^\circ$ (для образца 3).

Согласно модели, предложенной в работе [40], деформационная зависимость интегральной интенсивности диффузного рассеяния или эффективного статического фактора Дебая-Валлера L описывается выражением (4.4).

Согласно той же модели, деформационные зависимости интегральных факторов эффективного поглощения из-за квазидиффузного рассеяния и диффузного рассеяния на микродефектах описываются выражениями (4.5) для $\exp(-\mu_{ds}t)$ и выражением (4.6) для $\exp(-\mu^*t)$.

Путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей при использовании для упруго изогнутого монокристалла разработанной в [40] модели и формул динамической теории для монокристалла с микродефектами [18] подбираются такие значения величин поправок к L_0 , $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_0^*t)$, при которых значение коэффициента добротности фитирования минимально.

Таким способом для образцов 1, 2 и 3 были определены значения критического радиуса деформации (ρ_k), при которых $\exp(-\mu_{ds}t)=\exp(-\mu^*t)$. Полученные значения величин ρ_k , а также величины отношений μ_{ds0}/μ_0^* и значения величин радиусов упругого изгиба (УИ), при которых исчезает чувствительность ПИОС к микродефектам (ρ_0), приведены в таблице 4.3.

Таблица 4.3. Значения критического радиуса кривизны УИ (ρ_k), радиуса кривизны УИ, при котором исчезает чувствительность ПИОС к СРНД (ρ_0), и коэффициентов к экстинкционным деформационным поправкам α_1 и δ , полученные при фитировании деформационных зависимостей ПИОС для образцов 1, 2 и 3, и значения отношений коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds0}/μ_0^* в отсутствие УИ

№ обр.	$\rho_0(-) \cdot 10^{-6}$, мкм	$\rho_0(+) \cdot 10^{-6}$, мкм	$\rho_k \cdot 10^{-6}$, мкм	$(\alpha_1 \cdot 10^{-3})$, мкм	$(\delta \cdot 10^{-10})$, мкм ²	μ_{ds0}/μ_0^*
1	-1,46	2,68	1,5	-(1,4±0,4)	-(8±2)	7,01
2	-1,12	2,22	1	-(1,7±0,4)	-(10±2)	4,18
3		0,725	0,245	-(1,5±0,4)	-(10±2)	6,70

Затем для участков деформационных зависимостей ПИОС, соответствующих интервалам $|\rho| < \rho_k$ при $\exp(-\mu_{ds}t)=\exp(-\mu^*t)$ подбирались значения ве-

личин поправок α_1/ρ и δ/ρ^2 . Полученные значения α_1 и δ также представлены в таблице 4.3. Анализ данных таблицы 4.3 позволил феноменологически установить формулу

$$\rho_k \approx 0,4 \rho_0(+). \quad (4.9)$$

На втором этапе для интервала $|\rho| > \rho_k$ подбирались значения величин поправок к ΔL_1 и $\exp(-\mu_{ds0}t)$. Подобранные значения коэффициентов поправок к L_0 и к интегральному фактору экстинкции приведены в таблице 4.4.

Таблица 4.4. Коэффициенты зависящих от радиуса кривизны УИ ρ поправок к L_0 и к интегральному фактору экстинкции: α/ρ^2 и β/ρ^2

№ обр.	α , мкм ²	β , мкм ²
1	$-(1,5 \pm 0,4) \cdot 10^{12}$	$(2,5 \pm 0,2) \cdot 10^9$
2	$-(1 \pm 0,4) \cdot 10^{12}$	$(3 \pm 0,2) \cdot 10^{10}$
3	$-(6 \pm 0,3) \cdot 10^{10}$	$(9 \pm 1) \cdot 10^{10}$

Из таблицы 4.4 видно, что значения коэффициентов α для образцов 1 ($\eta=0,08$) и 2 ($\eta=0,077$) одного порядка, а для образца 3 ($\eta=0,014$) значение указанного коэффициента на порядок меньше. Здесь $\eta = \sin\psi[1 + \cos(\theta + \psi)\cos(\theta - \psi)(1 + \nu)]$ – множитель, учитывающий изменение степени асимметрии используемого отражения в теории Петрашеня-Чуховского (см. [31]). Видно, что коэффициенты α сильно зависят от степени асимметрии используемого отражения. Для коэффициентов β наблюдается зависимость от характеристик микродефектов и СРНД.

На рис. 4.10 представлены деформационные зависимости поправок к интегральным факторам экстинкции для образцов 1, 2 и 3 в интервале деформаций $|\rho| > \rho_k$.

Из рис. 4.10,а и 4.10,б видно, что деформационные зависимости поправок к факторам экстинкции чрезвычайно чувствительны к изменению от образца к образцу характеристик СРНД и степени асимметрии используемого отражения.

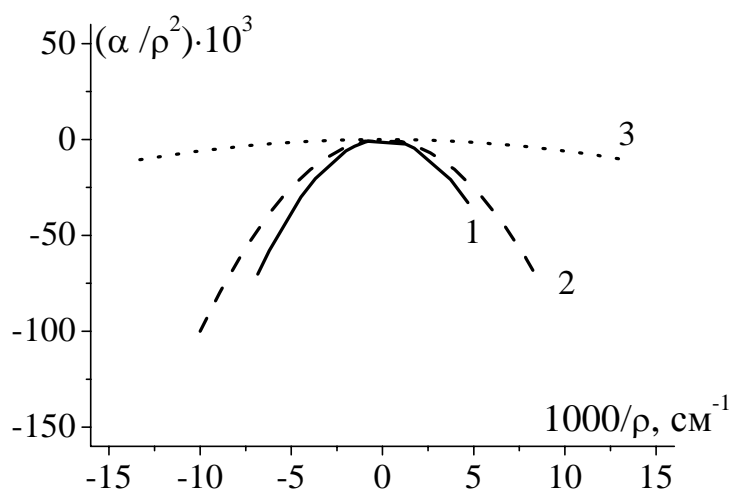


Рис. 4.10,а. Деформационные зависимости поправок α/ρ^2 к эффективному статическому фактору Дебая-Валлера для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [27,31] при $|\rho| > \rho_k$ с учетом (4.1)-(4.3)

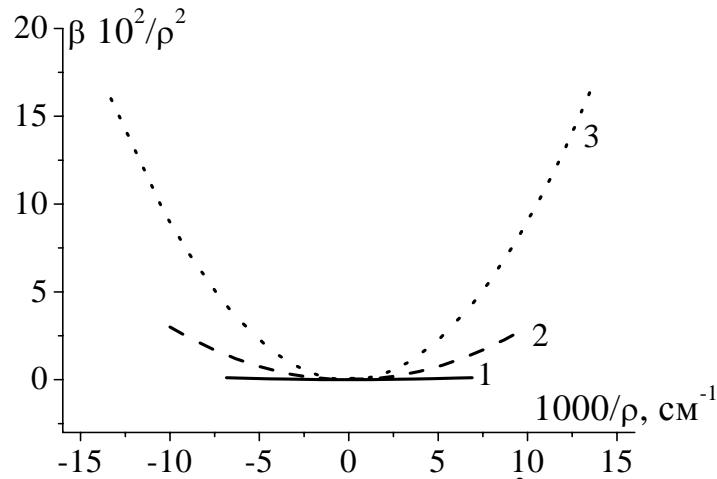


Рис. 4.10,б. Деформационные зависимости поправок β/ρ^2 к интегральному фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds0}t)$ для образцов 1 (сплошная линия) и 2 (штриховая линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [27,31] при $|\rho| > \rho_k$ с учетом (4.1)-(4.3)

Авторами работы [36] феноменологически подобраны нормирующие множители для поправок к интегральным факторам экстинкции. На рис. 4.11 представлены деформационные зависимости нормированных на эти множители поправок к интегральным факторам экстинкции для образцов 1, 2 и 3 в интервале деформаций $|\rho| > \rho_k$.

Из рис. 4.11 видно, что нормированные значения величин поправок к интегральным факторам экстинкции одинаковы для всех образцов, т.е. не зависят от характеристик микродефектов, СРНД и от степени асимметрии используемого отражения.

Анализ результатов расчетов, представленных на рис. 4.10 и 4.11, при использовании соотношения (4.7) показывает, что для любого упруго изогнутого образца, содержащего микродефекты и СРНД, значения величин поправок к интегральным факторам экстинкции можно определить из следующих выражений:

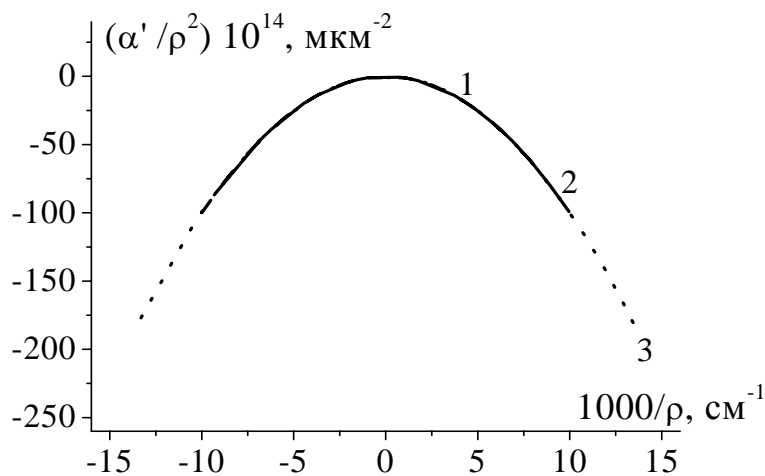


Рис. 4.11,а. Деформационные зависимости поправок α/ρ^2 к эффективному статическому фактору Дебая-Валлера для образцов 1(сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [27,31] с учетом (4.1)-(4.3) при $|\rho| > \rho_k$, нормированные на ρ_k^2

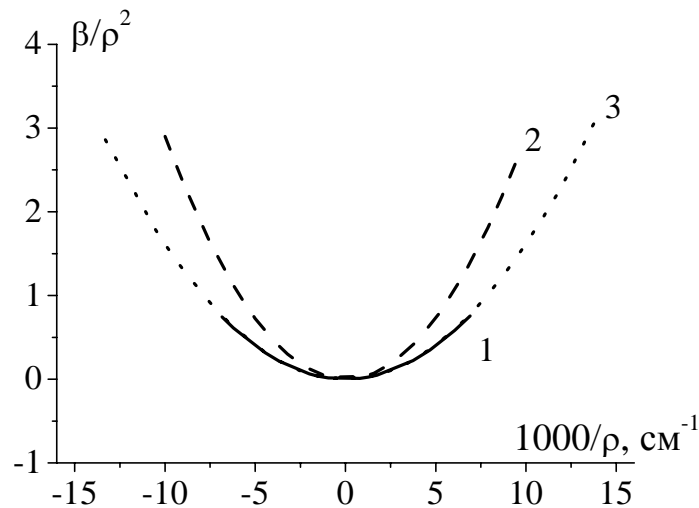


Рис. 4.11,б. Деформационные зависимости поправок β/ρ^2 к интегральному фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds0}t)$ для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [27,31] с учетом (4.1)-(4.3) при $|\rho| > \rho_k$, нормированные на $L_0/\exp(-\mu_{ds0}t)$

$$\alpha = \alpha' (0,4 \rho_0)^2, \quad \alpha_1 = \alpha_1'; \quad (4.10)$$

$$\beta = \beta' L_0 / \exp(-\mu_{ds0}t); \quad (4.11)$$

$$\delta = \delta'. \quad (4.12)$$

В таблице 4.5 приведены не зависящие от характеристик СРНМ и степени асимметрии универсальные коэффициенты деформационных поправок к L_0 и к интегральным факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, полученные при использовании 220 симметричных Лауэ-отражений MoK_α -излучения

Таблица 4.5. Нормированные коэффициенты поправок α'/ρ^2 , α_1'/ρ , β'/ρ^2 и δ'/ρ^2 к L_0 и к интегральным факторам экстинкции, $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, полученные при использовании 220 симметричных Лауэ-отражений MoK_α -излучения

α'	α_1' , мкм	β' , мкм ²	δ' , мкм ²
-1	$-1,4 \cdot 10^3$	$(1,8 \pm 0,7) \cdot 10^{12}$	$-(1 \pm 0,1) \cdot 10^{11}$

Таким образом, доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД и получены не зависящие от характеристик СРНД универсальные коэффициенты деформационных поправок к L_0 и к интегральным факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, при использовании 220 Лауэ-отражений MoK_α -излучения. Следует отметить, что в работе [36] эмпирически установлен вид зависимостей множителей к универсальным поправкам от факторов динамического рассеяния в неизогнутом монокристалле с СРНД L_0 , $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_{0}^*t)$, которые, в свою очередь, зависят от типа, размера и концентрации СРНД. Однако, как известно [38], L_0 , μ_{ds0} и μ_{0}^* в образцах с несколькими определяющими типами СРНД представляют собой суммы соответствующих факторов для дефектов всех определяющих типов. Поэтому полученные в настоя-

шем разделе количественные характеристики совместного влияния изгиба и СРНД являются средними для различных содержащихся в монокристаллах СРНД. Исследованию зависимости указанных характеристик от типа, размера и концентрации СРНД посвящен следующий раздел.

§5. Изучение совместного влияния изгиба и СРНД различных типов и размеров на величину ПИОС

На рис. 4.12 для образцов 1, 2 и 3 представлены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные отдельно для каждого из трех определяющих типов СРНД при использовании выражений (4.1)-(4.10). Из рис. 4.12 видно, что для образцов 1 и 2 ближе всего к экспериментальной деформационной зависимости ПИОС проходит рассчитанная деформационная зависимость для мелких петель. Для образца 3 – рассчитанная деформационная зависимость для дискообразных кластеров. Влияние на величину ПИОС больших дислокационных петель относительно невелико.

Для образцов 1 и 2 установлено, что при отрицательных деформациях экспериментальное значение $\rho_0(\text{эксп.})$ равно теоретически рассчитанному значению для малых петель $\rho_0(\text{теор. м.п.})$, самому малому из теоретических значений ρ_0 , рассчитанных для каждого типа дефектов: $\rho_0(\text{теор. б.п.})$, $\rho_0(\text{теор. м.п.})$, $\rho_0(\text{теор. кл.})$ и $\rho_0(\text{теор. с.б.п.})$. При положительных деформациях экспериментальное значение $\rho_0(\text{эксп.})$ равно среднему от теоретических значений ρ_0 , рассчитанных для каждого типа дефектов: $\rho_0(\text{теор. б.п.})$, $\rho_0(\text{теор. м.п.})$, $\rho_0(\text{теор. кл.})$ и $\rho_0(\text{теор. с.б.п.})$.

Видно, что рассчитанная для малых петель деформационная зависимость при отрицательных деформациях практически совпадает с экспериментальной деформационной зависимостью. При положительных деформациях наблюдается заметное расхождение рассчитанной для мелких петель и экспериментальной зависимостей, что свидетельствует о более сильном влиянии на ПИОС в этом случае также и более крупных кластеров и дислокационных петель. Из рис. 4.12 видно, что наноразмерные петли вносят определяющий вклад в ПИОС.

Для образца 3 установлено, что при отрицательных деформациях влияние на величину ПИОС наноразмерных случайно распределенных в объеме дефектов всех трех типов и упругой деформации практически аддитивно. При положительных деформациях экспериментальное значение $\rho_0(\text{эксп.})$ меньше теоретически рассчитанного значения для малых петель $\rho_0(\text{теор. м.п.})$, самого малого из теоретических значений ρ_0 , рассчитанных для каждого типа дефектов: $\rho_0(\text{теор. б.п.})$, $\rho_0(\text{теор. м.п.})$, $\rho_0(\text{теор. кл.})$ и $\rho_0(\text{теор. с.б.п.})$.

Видно, что рассчитанная для кластеров деформационная зависимость ближе всего к экспериментальной деформационной зависимости. При сильных положительных деформациях увеличение ПИОС из-за присутствия в образце кластеров уменьшается и становится сравнимым с увеличением ПИОС из-за присутствия в образце крупных и мелких петель.

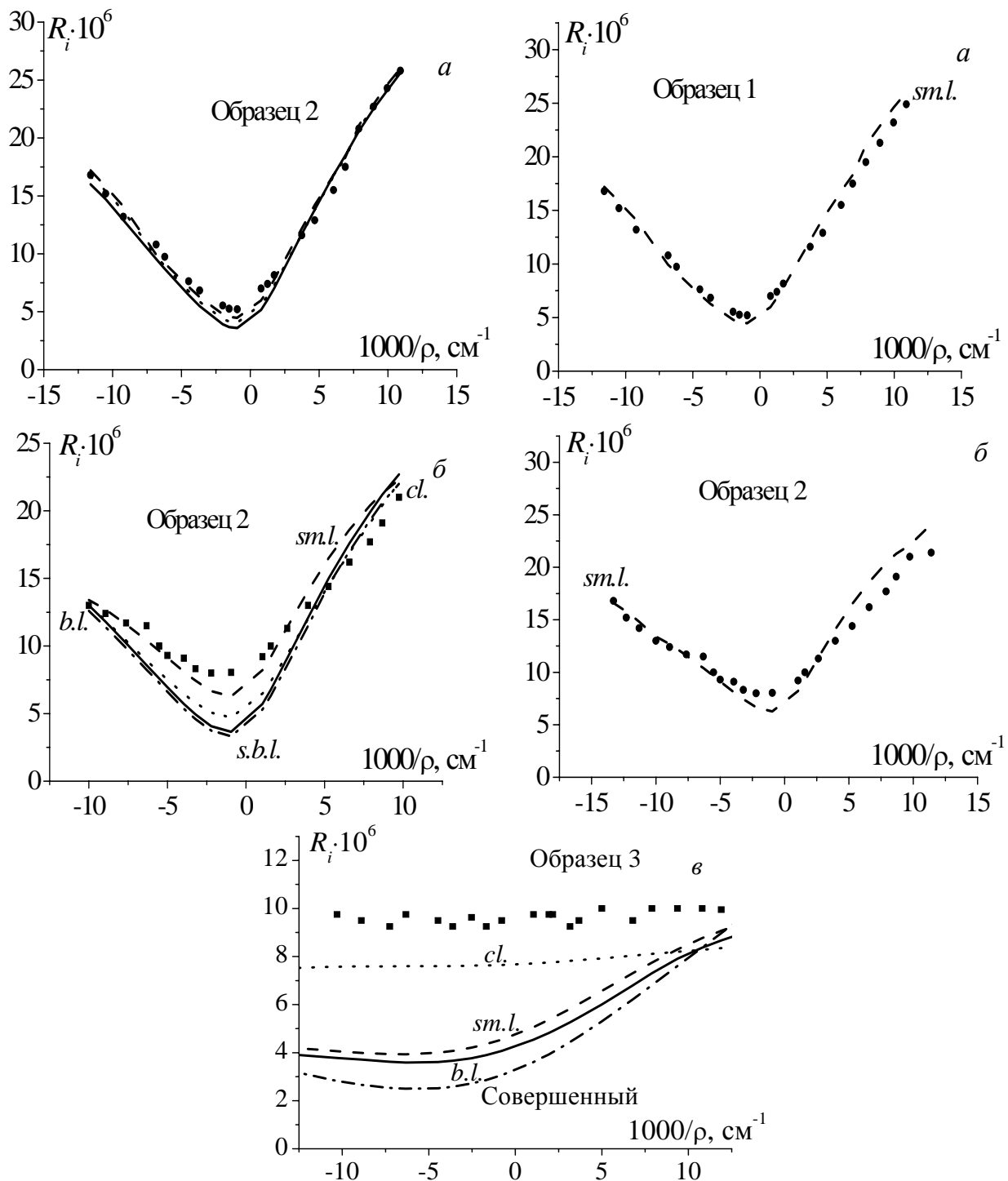


Рис. 4.12. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (4.1) и (4.2), влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД разных типов: больших петель (сплошная линия), малых петель (штрих), кластеров (пунктир) и в отсутствие СРНД (штрих-пунктир)

На рис. 4.13-4.15 показаны деформационные зависимости отношения ПИОС изогнутого реального монокристалла к ПИОС изогнутого монокристалла без СРНД.

Из рис. 4.13 и 4.14 видно, что, независимо от того, какой вклад в ПИОС вносят наноразмерные петли, изменение знака их влияния на величину ПИОС происходит при более сильном упругом изгибе, чем изменение знака влияния более крупных дефектов (кластеры, большие петли). Кроме того, из

рис. 4.5 видно, что изгиб, соответствующий изменению знака влияния на ПИОС мелких петель, может быть больше, чем изгиб, соответствующий ρ_0 . Количественная оценка отношения $\rho_{\text{изв}}/\rho_0$, где $\rho_{\text{изв}}$ – радиус изгиба, соответствующего изменению знака влияния на ПИОС СРНД, позволила выразить его величину через величины параметров динамического рассеяния на дефектах:

для образца 3

$$\begin{aligned} \rho_0/\rho_{\text{изв}} &= 0,48 \cdot 10^3 [L \exp(-\mu_{ds}t) \exp(-\mu_{ds}t)/\exp(-\mu^*t)]_{\text{изв}} \approx \\ &\approx 0,42 \cdot 10^3 L_0 \exp(-\mu_{ds0}t) \exp(-\mu_{ds0}t)/\exp(-\mu_0^*t), \end{aligned} \quad (4.13)$$

для образца 2

$$\rho_0/\rho_{\text{изв}} \approx 0,36 \cdot 10^3 L_0 \exp(-\mu_{ds0}t) \exp(-\mu_{ds0}t)/\exp(-\mu_0^*t).$$

Из выражения (4.13) следует, что для очень мелких дефектов

$$\rho_0/\rho_{\text{изв}} \approx 0,4 \cdot 10^3 L_0. \quad (4.14)$$

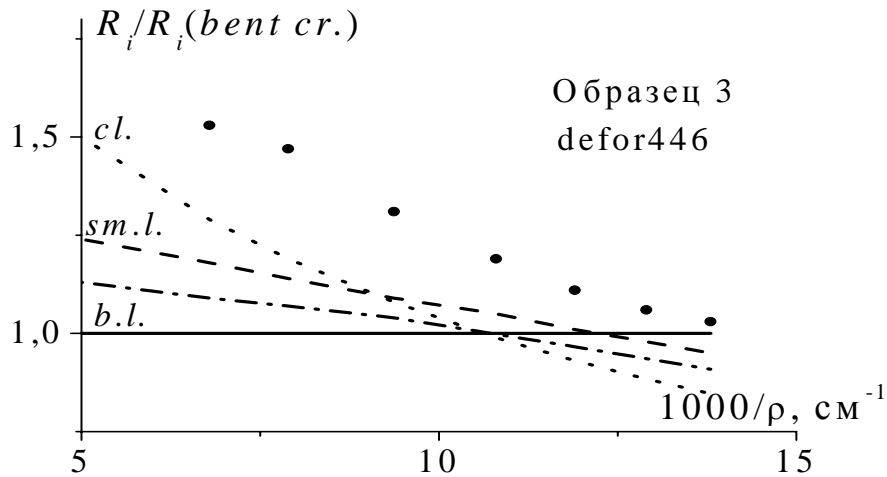


Рис. 4.13. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (4.1) и (4.2), влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД разных типов: больших петель (сплошная линия), малых петель (штрих), кластеров (пунктир) и в отсутствие СРНД (штрих-пунктир)

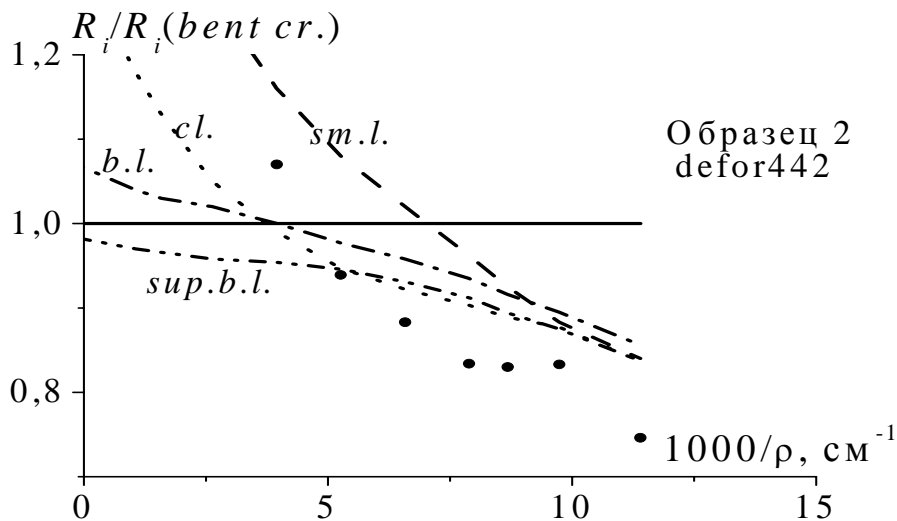


Рис. 4.14. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (4.1) и (4.2), влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД разных типов: больших петель (сплошная линия), малых петель (штрих), кластеров (пунктир) и в отсутствие СРНД (штрих-пунктир)

При $L_0 \ll 1$ отношение (4.12) может достигнуть 100, изменение знака влияния может наблюдаться при высокой степени упругого изгиба, т.е. практически может наблюдаться аддитивность влияния на ПИОС СРНД и УД.

Для крупных дефектов $\exp(-\mu_{ds0}t) \exp(-\mu_{ds0}t)/\exp(-\mu_0^*t) \ll 1$. При $L_0 \ll 1$ отношение (4.11) может достигнуть 0,1, изменение знака влияния может наблюдаться при малой степени упругого изгиба, неаддитивность влияния на ПИОС СРНД и УД будет проявляться еще сильнее, чем для образцов 2 и 3.

Рассмотрение деформационных зависимостей ПИОС для образцов 2 и 3, полученных при использовании 220 Лауэ-рефлексов $\text{MoK}_{\alpha 1}$ -излучения от плоскостей, составляющих угол ψ с нормалью к поверхности кристалла (величины углов для образцов 2 и 3 составляли соответственно $\psi=2,05^\circ$ и $\psi=0,38^\circ$) позволило получить зависимость величины ρ_0 от степени асимметрии используемого отражения:

$$\rho_0(2) t_0(2) / \sqrt{\eta(2)} \approx \rho_0(3) t_0(3) / \sqrt{\eta(3)}, \quad (4.15)$$

где t_0 – толщина образца, $\eta = \sin\psi [1 + \cos(\theta + \psi)\cos(\theta - \psi)(1 + \nu)]$ – множитель, учитывающий изменение степени асимметрии используемого отражения в теории Петрашеня-Чуховского (см. 27,31]). Из выражения (4.13) следует, что с увеличением степени асимметрии используемого отражения должны расти величины ρ_0 и $\rho_{\text{изв}}$.

Из рис. 4.15 видно, что при слабом упругом изгибе, при $\rho > \rho_{\text{изв}}$ преобладает влияние на величину ПИОС мелких дефектов, а при сильном упругом

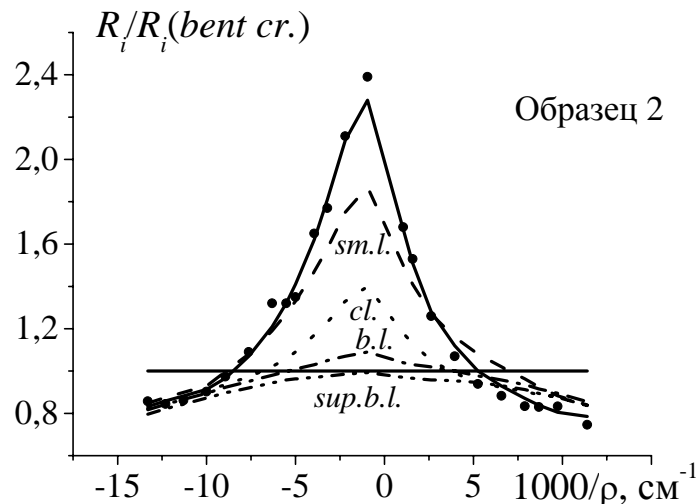


Рис. 4.15. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (4.1)-(4.12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанному ИОС кристалла без СРНД (R_i/R_{perf}): для больших дислокационных петель $c|\vec{b}| = a/\sqrt{2}$ (\vec{b} – вектор Бюргерса, a – параметр решетки) $R_{bl}=0,45$ мкм, $c_{bl}=5,2 \cdot 10^{-15}$ (штрих-пунктир); мелких дислокационных петель $c|\vec{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.}=0,031$ мкм, $c_{sm.l.}=1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl}=0,45$ мкм, $h_{cl}=0,0116$ мкм, $c_{cl}=2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир), сверхбольших дислокационных петель $c|\vec{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{s.b.l.}=10$ мкм, $c_{s.b.l.}=2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрих – двойной пунктир); для кристалла без СРНД (сплошная линия) и экспериментальная деформационная зависимость отношений ПИОС к рассчитанному ИОС кристалла без СРНД (маркеры)

изгибе, при $\rho < \rho_{\text{изв}}$ преобладает влияние на величину ПИОС крупных дефектов. Поэтому для получения характеристик крупных дефектов необходимо исследование хода деформационных зависимостей образцов при упругих изгибах, соответствующих $\rho < \rho_{\text{изв}}$. Анализ выражения (4.13) показывает, что для выполнения указанного условия можно не увеличивая степени изгиба использовать рефлекс с большей степенью асимметрии. Ниже в соответствии с [36] будет показано, что анализ деформационных зависимостей ПИОС, полученных для одного и того же образца при использовании двух 220 Лауэ-рефлексов $\text{MoK}_{\alpha 1}$ -излучения от плоскостей, составляющих резко различные углы ψ с нормалью к поверхности кристалла позволяет получить величины характеристик мелких и крупных наноразмерных дефектов, случайно распределенных в объеме образца. Такую же неразрушающую количественную диагностику дефектной структуры динамически рассеивающего реального монокристалла можно осуществить комбинированным методом толщинных и азимутальных зависимостей ПИОС [38]. Но метод деформационных зависимостей ПИОС, как будет показано ниже, более чувствителен к типу СРНД. Причина повышенной чувствительности к типу дефектов обусловлена описанным выше влиянием упругой деформации на интегральные коэффициенты экстинкции.

Из рис. 4.16 видно, что изменение знака влияния больших петель и кластеров, имеющих одинаковый радиус, на величину ПИОС происходит при одинаково сильном положительном изгибе.

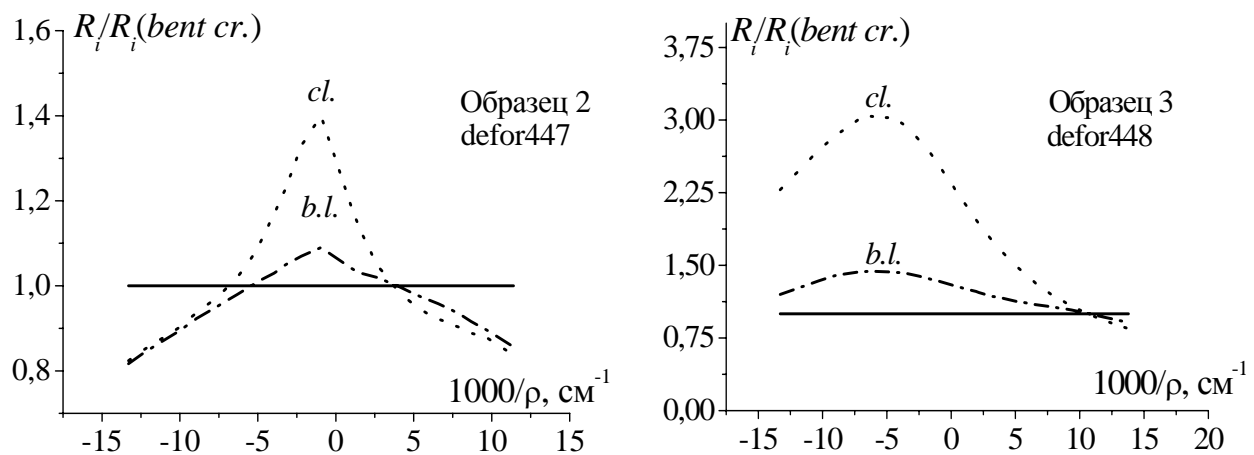


Рис. 4.16. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (4.1) и (4.2), влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД разных типов: больших петель (сплошная линия), малых петель (штрих), кластеров (пунктир) и в отсутствие СРНД (штрих-пунктир)

Кроме того, видно, что для двух данных образцов, независимо от степени асимметрии используемого отражения, наблюдается намного большее относительное увеличение ПИОС за счет присутствия кластеров по сравнению с большими дислокационными петлями. Однако при сильном изгибе, вызвавшем изменение знака влияния СРНД (при $\rho < \rho_{\text{изв}}$), уменьшение величины ПИОС за счет наличия кластеров и дислокационных петель становится практически одинаковым. Это позволяет путем анализа двух деформационных зависимостей с резко различными значениями ψ однозначно определить тип и величины характеристик СРНД.

§6. Использование деформационных зависимостей ПИОС для диагностики СРНД в монокристалле

Образец №4, толщиной 500 мкм, был вырезан [36] из монокристалла Si, выращенного по Чохральскому с начальным содержанием кислорода $n_0=10^{18}$ см⁻³. В результате отжига в образце произошел распад твердого раствора кислорода с образованием кластеров, концентрация которых, согласно данным избирательного травления, составила $n=10^6$ см⁻² [31]. О дефектной структуре образца в отсутствие УИ известно, что она должна соответствовать одной из двух моделей, предложенных автором работы [41]. Первая модель предполагает наличие случайно распределенных в объеме образца дискообразных кластеров SiO₂, радиус и толщина которых увеличиваются с увеличением времени отжига по установленному в работе [41] закону, а также дислокационных петель, образованных в результате конденсации собственных междоузельных атомов избыточного кремния в образце. Вторая модель предполагала наличие случайно распределенных в объеме образца сферических кластеров SiO₂ и дислокационных петель, образованных в результате конденсации собственных междоузельных атомов избыточного кремния в образце.

Авторами работы [31] для образца №4 были получены деформационные зависимости ПИОС при использовании 220 Лауэ-отражений MoK_α-излучения от двух плоскостей, образующих разные углы с нормалью к поверхности кристалла: $\psi_1=1,5^\circ$ и $\psi_2=53,2^\circ$.

Путем сравнения указанных экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС с рассчитанными деформационными зависимостями для упруго изогнутого кристалла, не содержащего СРНД, авторами работы [36] для образца 4 получены значения ρ_0 , а затем из выражений (4.8)-(4.10) вычислены значения ρ_k , представленные в таблице 4.6.

Таблица 4.6. Значения критического радиуса кривизны УИ (ρ_k), радиуса кривизны УИ, при котором исчезает чувствительность ПИОС к СРНМ (ρ_0), полученные при фитировании деформационных зависимостей ПИОС для образца 4

$\psi, ^\circ$	$\rho_0(+), \text{мкм}$	$\rho_k, \text{мкм}$
1,5	$2,193 \cdot 10^5$	$8,77 \cdot 10^4$
53,2	$4,89 \cdot 10^6$	$1,96 \cdot 10^6$

Из данных таблицы 4.6 видно, что значения величин критического радиуса кривизны изгиба ρ_k для использованных рефлексов различаются больше, чем на порядок. При слабой степени асимметрии используемого отражения ($\psi=1,5^\circ$) вся экспериментальная деформационная зависимость ПИОС соответствует интервалу $|\rho| > \rho_k$, а при сильной степени асимметрии используемого отражения ($\psi=53,2^\circ$) вся экспериментальная деформационная зависимость ПИОС соответствует интервалу $|\rho| < \rho_k$. В работе [42] расчеты деформационных зависимостей без учета влияния УИ на диффузное рассеяние показали, что при сильной асимметрии используемого отражения чувствительность ПИОС к микродефектам растет при усилении упругого изгиба и проявляется

в заметном уменьшении когерентной составляющей ПИОС пропорционально $\exp(-\mu_{ds}t)$. Однако экспериментальная деформационная зависимость ПИОС, полученная авторами работы [31] при $\psi_2=53,2^\circ$, практически совпадает с рассчитанной для идеального кристалла. Это объясняется тем, что, при учете влияния УД согласно модели, предложенной в работе [40], при $|\rho| < \rho_k$ интегральный фактор эффективного поглощения для когерентной составляющей ПИОС становится равным интегральному фактору эффективного поглощения для диффузной составляющей ПИОС: $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^* t)$. Сравнительно малое максимальное при $\delta = -1,3 \cdot 10^{10}$ значение величины поправки $(1 - \delta/\rho^2) = (1 - 0,036) = 0,964$ указывает на то, что реальное уменьшение ПИОС по сравнению с идеальным кристаллом должно быть на самом деле гораздо менее заметным, т.е. предполагаемое в [42] повышение чувствительности к СР микродефектам и к СРНД нивелируется.

Однако, фитирование теоретической и экспериментальной деформационных зависимостей ПИОС для образца №4, полученных при $\psi_1=1,5^\circ$, было осуществлено [36] при использовании взятых из таблицы 4.5 значений коэффициентов поправок к факторам экстинкции (α_1/ρ и δ/ρ^2) и значений нормированных коэффициентов поправок α'/ρ^2 и β'/ρ^2 . На рис. 4.17 сплошной линией изображены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные в рамках первой и второй моделей дефектной структуры с учетом влияния деформации на диффузное рассеяние.

Из рис. 4.17 видно, что фитирование деформационных зависимостей ПИОС, полученных при использовании только отражения со слабой степенью асимметрии ($\psi_1=1,5^\circ$), не позволяет установить тип СРНД, присутствующих в исследуемом образце. Однако совместное фитирование деформационных зависимостей, полученных при использовании рефлексов с различной степенью асимметрии, позволило однозначно определить, что наноразмерными являются дислокационные петли.

Из рис. 4.17 видно, что экспериментальные деформационные зависимости ПИОС совпадают с рассчитанными с учетом зависимости диффузного рассеяния от деформации только для первой модели при $\mu_{ds}/\mu_0^* = 6,26$ (рис. 4.17,а). В этом случае в рамках модели 1 для образца 4 определены следующие значения средних радиусов и концентраций дискообразных кластеров, больших петель и наноразмерных петель:

$$R_{cl} = 0,22 \text{ мкм}, h_{cl} = 8,4 \text{ нм}, c_{cl} = 8 \cdot 10^{-13}, R_{sl} = 32 \text{ нм}, c_{sl} = 8,5 \cdot 10^{-10}.$$

Полученное значение величины концентрации кластеров согласно выводам работы [43] соответствует температуре отжига 896°C . Известно, что при температуре отжига ниже 900°C не происходит образование больших дислокационных петель, радиус которых превышает радиус выдавливающих их кластеров. Таким образом, полученные в рамках модели 1 размеры кластеров согласуются с тем фактом, что они наблюдались в данном образце методом избирательного травления авторами работы [31].

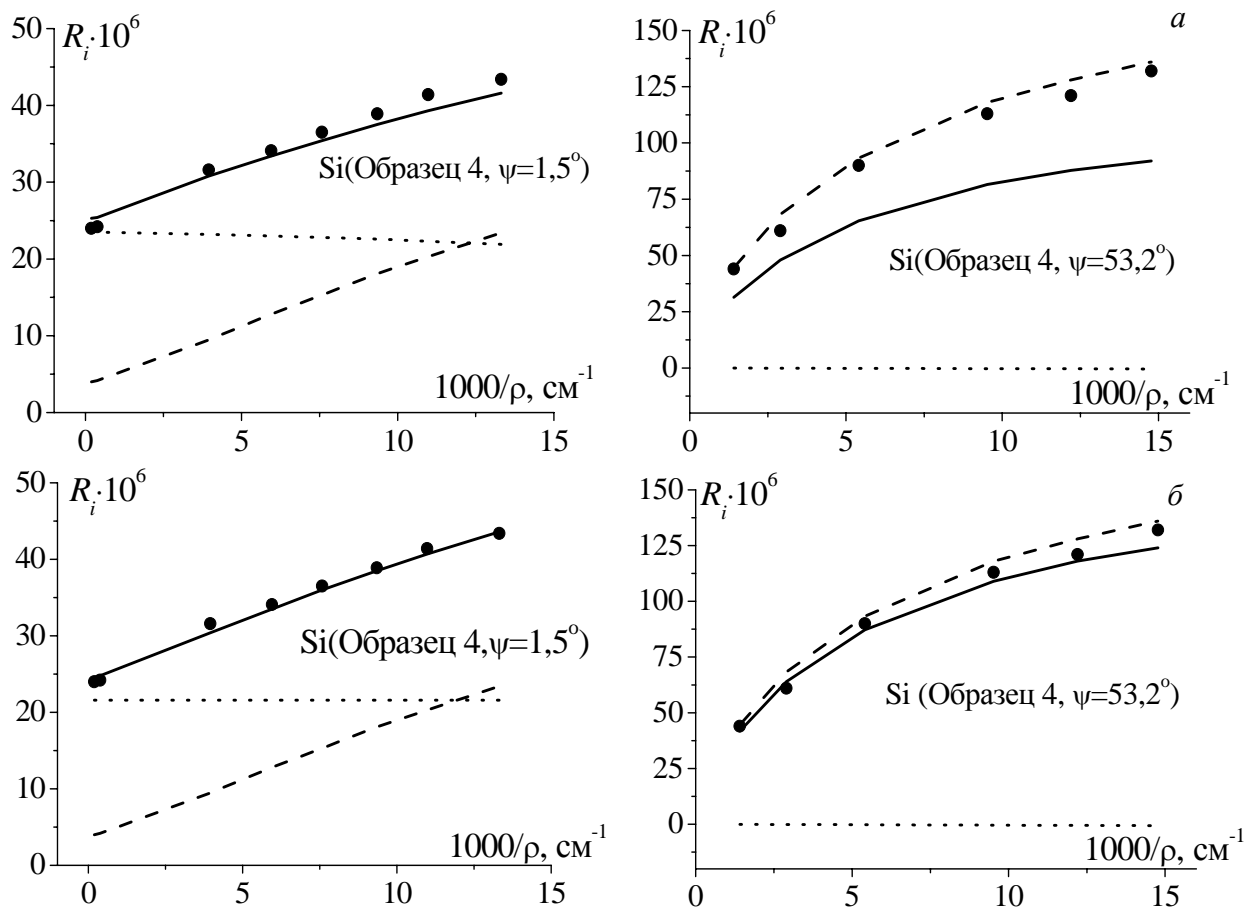


Рис. 4.17. Экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные с учетом влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 1, предполагающей наличие в исследуемом образце дискообразных кластеров $R_{cl}=0,22$ мкм, $h_{cl}=8,4$ нм, $c_{cl}=8 \cdot 10^{-13}$ и наноразмерных петель $R_{sl}=32$ нм, $c_{sl}=8,5 \cdot 10^{-10}$, при $\mu_{ds0}/\mu_0^*=6,26$ (а) и в рамках модели 2. Модель 2 предполагает наличие в исследуемом образце сферических кластеров $R_{cl}=72$ нм и призматических дислокационных петель $R_l=0,22$ мкм, $c_l=1,5 \cdot 10^{-13}$, при $\mu_{ds0}/\mu_0^*=3,43$ (б); зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир)

Наличие в исследуемом образце наноразмерных петель, размеры и концентрация которых определены в работе [36], не могло быть зафиксировано методом избирательного травления. При отсутствии влияния УД на диффузное рассеяние наличие в образце кластеров с указанными характеристиками должно было бы приводить к заметному уменьшению ПИОС по сравнению с идеальным кристаллом при использовании резко асимметричного отражения.

На рис. 4.18 сплошной линией изображены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные в рамках первой модели дефектной структуры без учета влияния деформации на диффузное рассеяние при следующих значениях средних радиусов и концентраций дискообразных кластеров, и малых петель:

$$R_{cl}=0,22 \text{ мкм}, R_{cl}/h_{cl}=26,05, c_{cl}=8,7 \cdot 10^{-13}, R_{sl}=0,032 \text{ мкм}, c_{sl}=9,24 \cdot 10^{-10}.$$

Следует отметить, что расхождение расчета с экспериментом, показанное на рис. 4.18, наблюдается для деформационных зависимостей, рассчитанных

без учета зависимости диффузного рассеяния от деформации в рамках обеих моделей дефектной структуры, что экспериментально подтверждает необходимость учета деформационных поправок, найденных в работе [36].

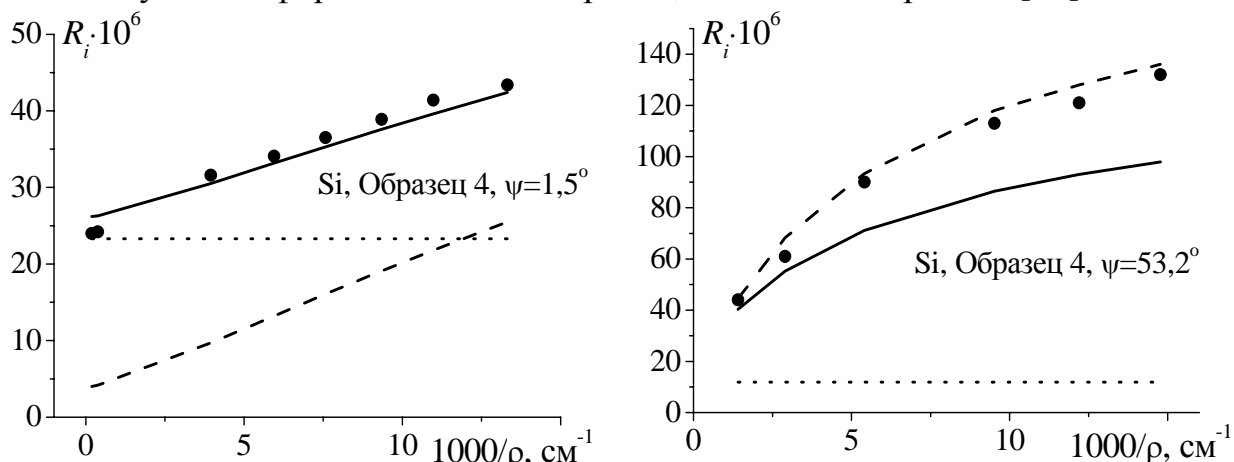


Рис. 4.18. Экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), а также рассчитанные в рамках модели 1 зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир), рассчитанные без учета влияния УИ на диффузное рассеяние. Модель 1 предполагает наличие в исследуемом образце дискообразных кластеров ($R_{cl}=0,22$ мкм, $h_{cl}=8,4$ нм, $c_{cl}=8,7 \cdot 10^{-13}$) и наноразмерных петель ($R_{sl}=32$ нм, $c_{sl}=9,2 \cdot 10^{-10}$).

Как видно из представленных результатов, предложенным методом определены тип и характеристики СРД, не наблюдаемых методами избирательного травления и рентгеновской топографии.

§7. Выводы

Проведена экспериментальная апробация существующей теоретической модели деформационной зависимости полной интегральной отражательной способности (ПИОС) в монокристаллах со случайно распределенными дефектами (СРД), учитывающая влияние эффектов экстинкции за счет рассеяния на СРД на деформационную зависимость когерентной составляющей ПИОС и пренебрегающая зависимостью от упругой деформации (УД) диффузной составляющей и обусловленных ею эффектов экстинкции. Показано, что эта модель не дает адекватного количественного описания совместного влияния УД и СРД на ПИОС. Однако показано, что эта модель дает качественное объяснение наблюдаемых аномальных эффектов возможного в зависимости от величины эффектов экстинкции как аддитивного (для малых величин), так и неаддитивного (для больших) влияния СРД и УД на ПИОС.

Предложена новая модель деформационной зависимости ПИОС в кристаллах с СРД, учитывающая влияние деформации на диффузную составляющую ПИОС и на обусловленные диффузным рассеянием эффекты экстинкции обеих составляющих ПИОС, которая впервые позволила дать адекватное количественное описание соответствующих экспериментальных данных и впервые экспериментально установить зависимость от УД диффузной составляющей ПИОС, а также факторов экстинкции, обусловленной рассея-

нием на дефектах.

Феноменологически разделены вклады упругого изгиба и СРД в ПИОС путем факторизации всех параметров предложенной модели на множители, зависящие только от СРД, и множители, зависящие только от УД. Найден явный вид указанных зависимостей, что позволило создать уникальный метод количественной диагностики характеристик СРД на основе изучения деформационных зависимостей ПИОС.

ГЛАВА 5. ТОЧНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ РЕНТГЕНОВСКОЙ КРИСТАЛЛООПТИКИ ДЛЯ СТРУКТУР С ПЕРЕМЕННЫМ ГРАДИЕНТОМ ДЕФОРМАЦИИ

Методы анализа кривых дифракционного отражения (КДО) от кристаллических структур высокой степени совершенства, основанные на анализе рентгенодифракционных (РД) данных, можно условно разделить на два основных направления. К первому направлению относятся методы, основанные преимущественно на численном решении уравнений Такаги или вычислении кинематического интеграла (в условиях применимости кинематического приближения) для заданного поля деформаций в кристалле, моделирующего реальную структуру, и сопоставлении с экспериментальными РД данными. Подгонка теоретической кривой дифракционного отражения (КДО) к экспериментальной производится вариацией структурных параметров, определяющих данную модель.

Наиболее полная реализация такого подхода сводится к решению обратной задачи дифракции [1,2], когда при помощи различных критериев при сопоставлении экспериментальных и теоретических КДО восстанавливается профиль деформации по всей глубине кристалла. Решение обратной задачи, вообще говоря, неоднозначно (здесь имеется тесная связь с известной фазовой проблемой в рентгеноструктурном анализе). Однако в ряде случаев при задании некоторой априорной информации о характере деформации в структуре, скажем монотонного уменьшения по глубине или чередования известного числа резко выраженных эпитаксиальных слоев, таким способом можно получать вполне надежные данные о профиле деформации.

Но при всей своей очевидности и идейной простоте подобный подход неизбежно имеет существенный недостаток. Численное решение не позволяет в большинстве случаев увидеть какие-либо закономерности и выявить качественные соотношения между структурными параметрами, характеризующими деформационное состояние кристалла, и существенными особенностями КДО.

В этой связи важное значение приобретает второе направление – отыскание аналитических решений для модельных задач дифракции, когда профиль деформации задается некоторой известной функцией. При этом особенно выделяется немногочисленный класс задач, имеющих точные аналитические решения. Значимость точно решаемых моделей состоит в том, что они в некотором смысле характерны для реальных структур: идеальный кристалл [3], кристалл с постоянным градиентом деформации (например, изогнутый кристалл или эпитаксиальная пленка твердого раствора с линейным изменением концентрации – варизонная структура) [3,4], система пленка–подложка с переходным слоем на границе раздела [5-8], некоторые модели сверхрешеток (СР) [9-11]. Под характерностью здесь подразумевается то, что ряд реальных кристаллических структур с той или иной степенью точности описывается указанными моделями.

Точные решения позволяют анализировать общие закономерности процессов когерентного рассеяния рентгеновских волн в модулированных кристаллических решетках для определенных частных случаев, представляющих интерес.

В ряде случаев для пленок с монотонным изменением деформации приближение постоянного градиента [4] оказывается недостаточным и возникает необходимость дальнейшего обобщения – рассмотрения профилей деформации с переменным градиентом.

Прежде чем мы рассмотрим аналитические решения задач с конкретным видом профиля деформации, представляет интерес проанализировать в общем случае задачу распространения рентгеновской волны в кристалле с переменным градиентом деформации на качественном уровне.

Качественные аналитические методы при исследовании задач динамического рентгеновского рассеяния актуальны по ряду причин. Главным образом это связано с тем, что они могут быть применены в совершенно различных областях науки [12]. Например, распространение волн различной природы в периодических средах относится к сфере физики твердого тела, а различные волновые процессы в средах с распределенной обратной связью рассматриваются в радиотехнике и электронике. Применимость качественного подхода обусловлена общим свойством различных физических систем и процессов – наличием параметрического влияния характеристик среды на формирование волнового поля.

В случае рентгеновской дифракции в деформированном кристалле влияние на волновое поле оказывают параметры, которые можно условно разделить на две группы. К первой группе относятся собственно дифракционные (геометрические) характеристики – реализуемая схема дифракции, углы отклонения от точного брэгговского значения. Во вторую группу входят параметры, определяющие свойства кристалла как (квази)периодической среды с заданными электронной плотностью и изменением межплоскостного расстояния, то есть деформации. С точки зрения теории дифракции несомненный интерес представляет выяснение влияния структурных параметров – толщин деформированных слоев, градиентов и амплитуды деформации – на характеристики кривой дифракционного отражения. В дальнейшем мы будем рассматривать задачу рентгенодифракционного анализа именно в этом аспекте.

Качественные аналитические методы могут быть использованы для широкого класса моделируемых профилей деформации, включающих не только СР [11], но и структуры с монотонными произвольными градиентами деформации [13]. Важно при этом, что достигаемая степень общности качественного анализа позволяет выявить ряд закономерностей дифракционной картины при минимальной конкретизации характера распределения деформации по глубине кристалла.

Эти закономерности обусловлены, в первую очередь, математической структурой уравнений Такаги. Кроме того, можно выделить характерные особенности, связанные с общими свойствами различных профилей дефор-

маций, позволяющими провести их классификацию по некоторым специфическим параметрам. Сказанное делает очевидным использование качественных методов исследования решений дифференциальных уравнений, и конкретно, с позиций математической теории устойчивости [14,15].

Такой подход был впервые применен в [16] как для акустической, так и для эпитаксиальной СР, и впоследствии развит в целом ряде работ [17-19] и распространен на произвольные модели СР. Подробное изложение этого метода и его применение для ряда частных задач дифракции в СР приведены в монографии [20].

Рассмотрим кратко физическую интерпретацию возможных типов решений уравнений Такаги с точки зрения теории устойчивости.

§1. Физическая интерпретация типов решений уравнений Такаги согласно теории устойчивости

Известно, что устойчивое решение линейной системы дифференциальных уравнений всегда ограничено на всем рассматриваемом бесконечном интервале значений аргумента (для нелинейных систем уравнений, в общем случае, такое утверждение уже несправедливо [15]). Напротив, неустойчивое решение, вообще говоря, может неограниченно возрастать. Важно отметить, что для линейной системы свойства решений (устойчивость или неустойчивость) носят инвариантный характер, то есть они либо все одновременно устойчивы, либо неустойчивы. Отсюда следует, что тип решения не зависит от выбора фундаментальной системы решений (для системы уравнений – фундаментальной матрицы решений).

Устойчивый характер решения системы уравнений Такаги означает, что падающая рентгеновская волна свободно распространяется в глубь кристалла, не испытывая затухания, связанного с интерференционными эффектами. (Здесь мы отвлекаемся от не влияющих на общую картину эффектов истинного фотоэлектрического поглощения и некогерентного рассеяния). Если же решение оказывается неустойчивым, то для полубесконечного кристалла неограниченно возрастающую по модулю амплитуды волну мы должны отбросить как не соответствующую реальной физической ситуации, и оставить только затухающую волну. Затухание волны в этом случае будет связано с интерференционными эффектами типа экстинкции, не позволяющими ей проникать на значительную глубину в кристалл, и перераспределением энергии из падающей в отраженную волну. Как следствие, падающая волна "выталкивается" из кристалла.

Граничные условия, соответствующие различным схемам дифракции (по Брэггу – на отражение, или по Лауэ – на прохождение), "формируют" в каждом случае такую конфигурацию волнового поля, которая обеспечивает образование дифракционного максимума только для одного типа решения. В случае дифракции по Брэггу области дифракционного максимума будет соответствовать неустойчивое решение, а для дифракции по Лауэ, наоборот,

устойчивое. Такая интерпретация дифракционной картины в применении к СР и была использована в [16].

Тип решений, разумеется, определяется соотношениями между параметрами, входящими в исследуемую систему уравнений. Для уравнений Такаги эти параметры задаются угловой отстройкой от точного угла Брэгга и структурными характеристиками кристалла и деформационного профиля. Принципиальным моментом здесь является то, что математическая теория устойчивости позволяет для ряда важнейших случаев проводить конструктивную классификацию возможных типов решений. Она проводится на основании соотношений между специфическими комбинациями параметров дифференциальной системы и аналитических свойств рассматриваемых профилей деформации.

Из проведенного рассуждения следует вывод. Основные качественные закономерности формирования единого волнового поля в кристалле с заданным законом изменения деформации по глубине могут быть получены без решения уравнений Такаги на основании только упомянутых выше параметрических соотношений. Более того, такой анализ можно проводить для целых классов различных деформационных профилей, имеющих лишь некоторые характерные общие свойства.

Важно, что такой подход остается эффективным, даже если мы не располагаем полной информацией о деформационном профиле (как чаще всего и бывает на практике), а имеем только некоторые общие сведения (например, монотонное уменьшение деформации по глубине или дополнительную периодичность).

Такой подход обладает несомненной эвристической ценностью, позволяя с наиболее общих позиций анализировать закономерности динамической дифракции. Связано это с тем, что указанным соотношениям и аналитическим свойствам деформационных профилей придается вполне определенный физический смысл. Тем самым, для класса рассматриваемых задач выделяются некоторые общие параметрические соотношения, определяющие особенности формирования единого волнового поля в деформированном кристалле в условиях динамической дифракции.

Естественно, что более детальную информацию о решении получить таким способом не удастся. Здесь уместно провести следующее пояснение. Методы теории устойчивости позволяют находить некоторые детали решения (комбинации параметров) и его свойства (например, ограниченность в заданном угловом интервале), однако "рецепт" конструирования конкретного решения из этих деталей отсутствует. Кроме того, оставаясь в рамках данного подхода, мы не можем сказать, нашли ли мы все комбинации параметров, необходимые для описания дифракции для рассматриваемого профиля.

Существует еще одно ограничение, связанное с качественным анализом. Дело в том, что теоремы теории устойчивости чаще всего формулируются в терминах лишь достаточных условий, оставляя открытыми вопросы, связанные с необходимостью получаемых соотношений между параметрами.

Учет граничных условий, осуществляемый неявно на основе указанной выше интерпретации, позволяет не решать каждый раз граничную задачу. При этом однозначное сопоставление угловых интервалов, получаемых из параметрических соотношений, реальным областям соответствующих дифракционных максимумов строго справедливо лишь для полубесконечного кристалла. Это связано с очевидным пренебрежением эффектами интерференции стоячих волн, заключенных между противоположными гранями облучаемого кристалла.

Разумеется, аналитический метод, не обладая общностью подхода, связанного с применением теории устойчивости, позволяет получать детальную информацию о свойствах решений конкретных точно решаемых модельных задач, а в ряде случаев, опираясь на данные качественного анализа, и экстраполировать эти свойства на другие модели, решение для которых неизвестно.

Таким образом, взаимно дополняющее использование качественного и аналитического подходов позволяет при определенных условиях получать информацию о дифракционных полях, недоступную каждому из них в отдельности.

Покажем применение изложенных выше общих рассуждений для конкретного класса кристаллических структур с переменным градиентом деформации в случае динамической рентгеновской дифракции по Брэггу [21,22].

§2. Структура с переменным градиентом деформации

Проведем вначале общий качественный анализ задачи для кристалла с переменным градиентом деформации. Для этого запишем систему уравнений Такаги в специальной форме:

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_{\mathbf{H}} \end{pmatrix} = (\mathbf{A} + \mathbf{B}(\tau)) \begin{pmatrix} E_0 \\ E_{\mathbf{H}} \end{pmatrix},$$

где $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & i2f\chi_{\mathbf{H}}\bar{\eta}\frac{\gamma_{\mathbf{H}}}{\gamma_0} \\ i2f\chi_{\mathbf{H}}\eta & -i2\kappa \end{pmatrix}$, $\mathbf{B}(\tau) = i2\xi X(\tau) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Безразмерная координата τ по нормали в глубь кристалла нормирована на некоторую характерную длину l . Обычно в этом качестве выступает длина экстинкции. Функция $X(\tau)$ в матрице $\mathbf{B}(\tau)$ моделирует профиль деформации вдоль нормали к поверхности кристалла.

Приведенная форма записи системы уравнений Такаги явно выделяет "основную" матрицу \mathbf{A} , собственные значения которой дают волновые вектора преломленной и дифрагированной волн в идеальном кристалле, и "возмущающую" матрицу $\mathbf{B}(\tau)$, пропорциональную параметру

$$\xi = \frac{2\pi L_{ext}\epsilon_0}{\lambda \sin(\theta \pm \varphi)} \sin^2 \theta \left(\cos^2 \varphi \pm \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \theta \sin 2\varphi \right),$$

который совпадает, с точностью до нормировки на период, с параметром ко-

герентности CP [17]. Здесь L_{ext} – длина экстинкции, ε_0 – амплитуда деформации, φ – угол наклона отражающей атомной плоскости к поверхности кристалла. Остальные обозначения стандартные.

Рассмотрим деформационные поля в полубесконечном кристалле, убывающие по нормали в глубь кристалла до нуля на бесконечности. Такое ограничение выглядит вполне естественным и под него подпадают практически все физически реализуемые поля деформаций (об одном из особых случаев – периодическом поле деформаций, описывающем CP, будет сказано ниже).

В математической теории устойчивости [15] известна теорема об устойчивости так называемой линейной системы с почти постоянной матрицей. Применительно к рассматриваемому случаю она формулируется следующим образом.

Если линейная система дифференциальных уравнений Такаги, где \mathbf{A} – постоянная матрица (идеальный кристалл), такова, что система

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_{\mathbf{H}} \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_{\mathbf{H}} \end{pmatrix}$$

устойчива, и выполняется интегральное условие

$$\int_0^{\infty} X(\tau) d\tau < \infty,$$

то решение исходной системы устойчиво при $\tau \rightarrow \infty$, или, что то же самое, решения системы Такаги остаются ограниченными на всем рассматриваемом интервале τ .

Как известно, условие устойчивости решений уравнений Такаги для идеального кристалла (матрица $\mathbf{B}(\tau)=0$) в случае дифракции по Брэггу ограничивает угловой интервал областями, лежащими вне области полного дифракционного отражения:

$$\kappa^2 > \delta \quad \delta = (l/L_{ext})^2.$$

Для выполнения интегрального условия достаточно, чтобы деформация убывала на глубине с градиентом

$$\left| \frac{dX}{d\tau} \right| > \frac{\text{const}}{\tau^2}.$$

Или, иначе, функциональная зависимость профиля деформации по глубине должна допускать асимптотическую оценку

$$X(\tau) \sim \tau^{-\alpha}, \quad \alpha > 1.$$

Разумеется, указанное условие заведомо удовлетворяется для профилей, скорость убывания которых больше любой наперед заданной отрицательной целой степени τ . К таковым в частности относятся профили экспоненциального типа, асимптотика которых имеет, например, такой вид:

$$X(\tau) \sim e^{-a\tau}.$$

Еще одна возможность соблюдения интегрального условия – это обращение

ние в ноль деформации при превышении заданной глубины (финитная функция). Ясно, что произвольная многослойная эпитаксиальная структура (пленка-подложка) удовлетворяет этому требованию.

Из приведенной выше теоремы следует весьма существенный физический результат.

1. Угловая область полного дифракционного отражения (ПДО) от кристалла с переменным градиентом деформации, удовлетворяющим интегральному условию, такая же как от идеального кристалла и не зависит от параметров нарушенного слоя. Сам же характер затухания в области ПДО $-\sqrt{\delta} < \kappa < \sqrt{\delta}$, разумеется, будет различным для каждого конкретного случая.

В функцию $X(\tau)$ входят параметры, определяющие модель структуры: толщины слоев, глубины их залегания, переходные области между слоями, градиент деформации и т. д. Соответственно, аналитическое выражение для интегрального условия (или же асимптотические оценки, если интеграл не берется) будет содержать некоторые соотношения между указанными параметрами. Если ограничиться лишь профилями, монотонно убывающими на бесконечности, то можно выделить некоторое общее свойство.

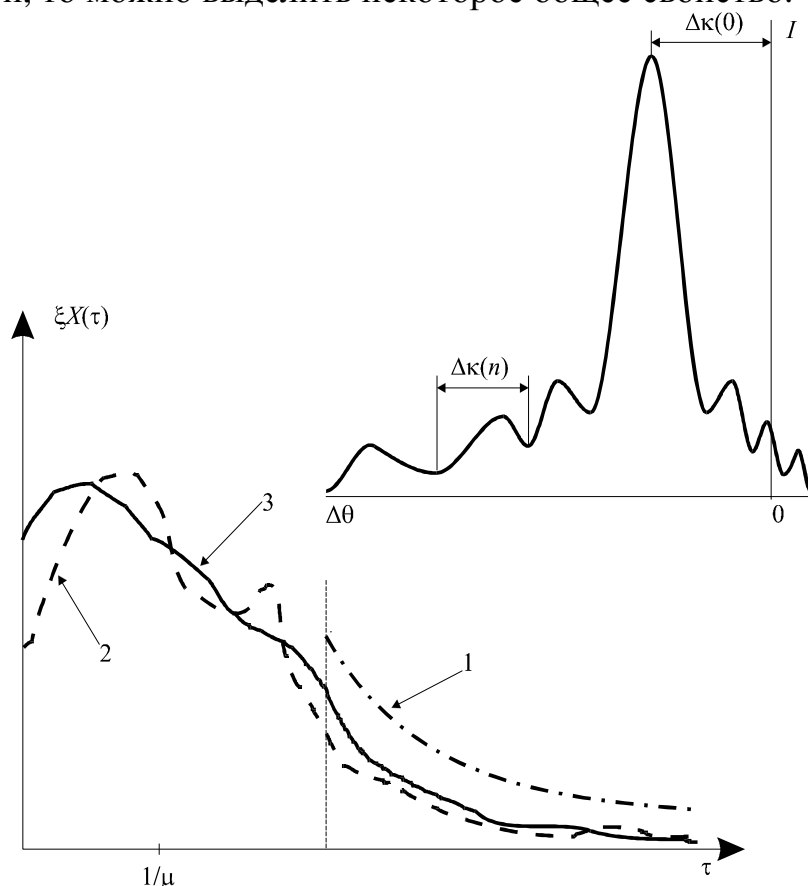


Рис. 5.1. Иллюстрация физических результатов теоремы "об устойчивости системы с почти постоянной матрицей". 1 – "граничный" профиль $1/z$, 2 и 3 произвольные профили деформации, удовлетворяющие условиям теоремы. Угловая ширина основного РД максимума для профилей 2 и 3 такая же как для профиля 1. На вставке схематический вид КДО, для которой угловое расстояние $\Delta\kappa(0)$ определяется амплитудой деформации в характерной области толщиной $1/\mu$. Угловая ширина осцилляций $\Delta\kappa(n)$ существенно различна для разных профилей деформации

Выполнение интегрального условия, а значит, возможность использования приведенной выше теоремы, определяется величиной $1/\mu$, где μ задает скорость убывания (градиент) деформации в глубине кристалла. Параметр $1/\mu$ в этом случае имеет смысл некоторой приведенной "эффективной толщины", на которой и происходят наиболее существенные изменения структуры волнового поля по отношению к известной картине, соответствующей идеальному кристаллу. Кроме того, как следует из системы уравнений Такаги, параметр ξ , определяющий своеобразную "степень когерентности" [17] рассеяния на толщине $1/\mu$, входит в "возмущающую" матрицу $\mathbf{B}(\tau)$ как мультипликативная константа.

2. Таким образом, величина ξ/μ является характерным "масштабом" дифракционной задачи и должна рассматриваться как один из специфических параметров для данных условий дифракционной задачи. Сказанное иллюстрируется на рис. 5.1.

Именно эта эвристическая информация и должна быть использована как при нахождении точных аналитических решений, так и при построении эффективных асимптотических представлений.

Структура с периодическим полем деформации подробно проанализирована в обзоре [23] и монографиях [24,25].

§3. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. Точное аналитическое решение и основные качественные особенности волнового поля

В связи с вышесказанным представляет интерес постановка задачи и рассмотрение общего характера решения для задачи динамической рентгеновской дифракции в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации:

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_0 e^{-Mz}, \quad (5.1)$$

где M – величина, пропорциональная градиенту деформации и определяющая некоторую характерную толщину, на которой происходит изменение деформации, z – координата в глубь кристалла. В дальнейшем будем считать, что $M > 0$ и $\varepsilon_0 > 0$, то есть деформация убывает по глубине кристалла. Случай $M < 0$ представляется несколько экзотичным (неестественным), хотя и не бессмысленным. При этом необходимо иметь в виду, что $|\varepsilon(z)| < 1$ (строго говоря $|\varepsilon(z)| \ll 1$). Поэтому такой случай предполагает достаточно малую толщину структуры и обоснованность строго динамического подхода требует дополнительного исследования. Случай же $\varepsilon_0 < 0$ очевидно может быть сведен к $\varepsilon_0 > 0$ путем соответствующей перенормировки (изменения начала отсчета) деформации.

Из уравнений Такаги для произвольного поля деформации в кристалле обычной процедурой можно получить уравнение для амплитуды дифрагированной волны E_H [26]:

$$\frac{d^2 E_H}{d\tau^2} + i2(\kappa + \xi f(\tau)) \frac{dE_H}{d\tau} + \left(-\delta_0 + i2\xi \frac{df}{d\tau} \right) E_H = 0. \quad (5.2)$$

Здесь введены следующие обозначения: $\tau=Z/L$ – нормированная на толщину кристалла L координата в глубь кристалла, $f(\tau)$ – функция, задающая модель изменения деформации по глубине.

Следуя [27,28], получим точное решение для профиля деформации вида $f(\tau)=e^{-\mu\tau}$, $\mu=ML$. Подставляя $f(\tau)$ в (5.2) и делая замену переменной $t=e^{-\mu\tau}$, получим уравнение гипергеометрического типа

$$t^2 \frac{d^2 E_H}{dt^2} + \left(t - i2t \left(\frac{\kappa}{\mu} + \frac{\xi}{\mu} t \right) \right) \frac{dE_H}{dt} - \left(i2\xi\mu + \frac{\delta_0}{\mu^2} \right) E_H = 0. \quad (5.3)$$

Поскольку для уравнения (5.3) точка $t=0$ является регулярной особой точкой, то решение его ищется в форме Фробениуса $E_H=t^\alpha y(t)$, где α – характеристический показатель, определяемый из условия регулярности решения в окрестности $t=0$. Это условие приводит к квадратному уравнению относительно α , решения которого имеют вид

$$\alpha_{1,2} = \frac{i}{\mu} (\kappa \pm \kappa_0), \quad \kappa_0^2 = \kappa^2 - \delta_0.$$

Для функции $y(t)$ имеем следующее уравнение:

$$t \frac{d^2 y}{dt^2} + \left(1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu} - \frac{i2\xi}{\mu} t \right) \frac{dy}{dt} - \frac{i2\xi}{\mu} \left(1 + \frac{i}{\mu} (\kappa \pm \kappa_0) \right) y = 0. \quad (5.4)$$

Наконец, делая в (5.4) подстановку $x = i2\xi t / \mu$, получаем стандартную форму вырожденного гипергеометрического уравнения:

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (c - x) \frac{dy}{dx} - ay = 0 \quad (5.5)$$

с параметрами $a = 1 + i(\kappa \pm \kappa_0)/\mu$, $c = 1 \pm i2\kappa_0/\mu$.

Впервые редукция системы уравнений Такаги с экспоненциальным законом изменения деформации к вырожденному гипергеометрическому уравнению, но другим способом, была проведена в [29].

Общее решение уравнения (5.5) в окрестности начальной точки $x=0$ представляется следующим образом

$$y(x) = C_1 F(a, c; x) + C_2 x^{1-c} F(a - c + 1, 2 - c; x), \quad (5.6)$$

где F – вырожденная гипергеометрическая функция (функция Куммера), C_1 и C_2 – произвольные постоянные, определяемые граничными условиями задачи. Подставляя в (5.6) значения параметров a и c и возвращаясь к безразмерной координате τ , получим общую формулу для амплитуды дифрагированной волны:

$$E_H(\tau) = C_1 e^{-i(\kappa + \kappa_0)\tau} F \left(1 + \frac{i}{\mu} (\kappa + \kappa_0), 1 + \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau} \right) + \\ + C_2 e^{-i(\kappa - \kappa_0)\tau} F \left(1 + \frac{i}{\mu} (\kappa - \kappa_0), 1 - \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau} \right). \quad (5.7)$$

Отметим, что неоднозначность выбора знака при определении характе-

ристического показателя α устраняется при надлежащем выборе фундаментальной системы решений уравнения (5.5). В частности решения, образующие фундаментальную систему (5.6), взаимно переходят друг в друга при изменении знака κ_0 , как это видно из (5.7).

Таким образом, общая структура поля дифрагированной волны в кристалле с экспоненциальным изменением деформации определяется формулой (5.7). Согласно (5.7), амплитуда дифрагированной волны представляет собой суперпозицию стоячих волн, возникающих в идеальном кристалле, однако каждая из них оказывается модулированной соответствующей вырожденной гипергеометрической функцией. Причем характер этой модуляции определяется соотношением угловых переменных κ и κ_0 , а также амплитуды деформации ξ , нормированных κ величине μ . Тем самым точное решение (5.7) позволяет нам выделить в общем случае три величины κ/μ , κ_0/μ , ξ/μ как специфические параметры, задающие особенности волнового поля в кристалле с переменным градиентом деформации.

Параметры κ/μ , κ_0/μ явно выделяют характерную угловую область, в которой разыгрываются все наиболее существенные изменения структуры волнового поля. Величина же ξ/μ заслуживает отдельного рассмотрения. Для этого запишем ее в следующем виде, ограничиваясь для простоты случаем симметричной брэгговской дифракции ($\varphi=0$):

$$\frac{\xi}{\mu} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda} \cdot \pi \varepsilon_0 r = \frac{\pi \varepsilon_0 r}{d}, \quad (5.8)$$

где $r=1/M$ – "эффективная" толщина, на которой деформация уменьшается в e раз, d – межплоскостное расстояние.

В [17] была развита общая идеология процессов динамического рентгеновского рассеяния в СР, где было показано, что параметр, аналогичный нашему ξ/μ , названный "параметром когерентности", определяет характерный масштаб длины, на котором происходит синфазное рассеяние внутри периода СР. Существенно, что, поскольку СР представляет собой периодический объект, то зависимость характеристик дифракционного поля от "параметра когерентности" в первом порядке теории возмущений носит линейный характер. При этом такое приближение оказывается вполне достаточным для описания специфических особенностей волнового поля и, соответственно, КДО от СР.

В нашем же случае – кристалла с непериодическим переменным градиентом деформации зависимость дифракционного поля от этого параметра должна быть нелинейной. Это обстоятельство должно быть учтено при получении приближенных асимптотических выражений из точного аналитического решения (5.7) для амплитуды дифрагированной волны.

В связи с этим представляет интерес выяснение влияния фактора (5.8) как такового на особенности формирования КДО, а также связи заложенных в него конкретных структурных параметров деформированного слоя с угловыми положениями основного дифракционного максимума и осцилляций вблизи него. Кроме того, нелинейные эффекты, определяемые величиной (5.8),

должны приводить к новым качественным закономерностям, возникающим как результат интерференции волн на характерных глубинах деформированной области кристалла.

Ситуация, когда амплитуда волны выражается через специальные функции, в известном смысле типична в задачах динамической дифракции для моделей, имеющих точные аналитические решения (если конечно можно говорить о типичности, располагая небогатым набором из трех решений). Особенность состоит в том, что для каждого из решений реализуются различные варианты, определяемые конкретными соотношениями между структурными параметрами и условиями дифракции. Существенно при этом, что подобное многообразие вариантов отражает не столько количественные, сколько качественные отличия формирования единого волнового поля и соответственно вида КДО при непрерывном переходе от одного тривиального предельного варианта модели к другому. Ясно поэтому, что аналитические соотношения для волнового поля, отражающие эту ситуацию, не могут в общем случае выражаться через элементарные функции типа синуса или экспоненты. Для рассматриваемой задачи упомянутое разнообразие конкретных форм решений при фиксированной ε_0 и соответствующих им сложных осцилляционных структур КДО заключено между двумя элементарными предельными случаями: $\mu \rightarrow \infty$ (идеальный кристалл) и $\mu \rightarrow 0$ (тоже идеальный кристалл, но с однородно деформированной по всей толщине элементарной ячейкой). Заметим кстати, что уже во втором случае мы имеем дело с нетривиальным пределом для функции F , когда оба параметра и аргумент стремятся к ∞ . Такой предел очевидно должен обеспечивать непрерывный переход к случаю идеального кристалла со смещенным началом отсчета углов: $\kappa \rightarrow \kappa + \xi$, $\kappa_0 \rightarrow \kappa_1 = \sqrt{(\kappa + \xi)^2 - \delta_0}$.

Основные качественные особенности структуры волнового поля в структурах с переменным градиентом деформации

Проведенный выше общий качественный анализ задачи динамической дифракции для кристалла с переменным градиентом деформации применительно к рассматриваемому случаю дает следующее условие:

$$\int_0^{\infty} \|\mathbf{B}(z)\| dz < \xi \int_0^{\infty} e^{-Mz} dz = \frac{\xi}{M}, \quad M \neq 0.$$

Значит, при любом отличном от нуля градиенте решение за пределами ПДО от идеального кристалла будет устойчивым. Только при $M=0$ мы имеем в угловом интервале $-\sqrt{\delta_0} < (\kappa + \xi) < \sqrt{\delta_0}$ область неустойчивого решения, то есть основной дифракционный максимум для однородно деформированного кристалла. Таким образом, $F(a, c; x)$ должна оставаться ограниченной на всем интервале изменения M и лишь в случае $M=0$ непрерывно переходить в известное неустойчивое решение внутри области ПДО, выражающееся через гиперболические функции. Это означает, что при любом, даже самом малом

градиенте деформации, мы не имеем области ПДО в указанном выше угловом интервале $-\sqrt{\delta_0} < (\kappa + \xi) < \sqrt{\delta_0}$.

Этот вывод является частным случаем полученного выше общего утверждения об отсутствии зависимости угловой области ПДО $-\sqrt{\delta_0} < \kappa < \sqrt{\delta_0}$ от параметров деформированного поверхностного слоя.

Условие ограниченности решения вне угловой области ПДО необходимо использовать в дальнейшем при нахождении равномерного приближения $F(a, c; x)$. Кроме того, величина ξ/M , определяющая это условие, очевидно, относится к указанным выше специфическим параметрам рассматриваемой задачи.

Коэффициент отражения. Точное выражение

Используя точную формулу для амплитуды дифрагированной волны (5.7), а также граничные условия дифракции по Брэггу:

$$E_{\text{H}}(\tau = 1) = 0, \quad E_0(\tau = 0) = 1,$$

можно стандартным образом получить общее выражение для коэффициента отражения. Учитывая известные дифференциальные соотношения между смежными функциями $F(a \pm 1, c \pm 1; x)$ [30], из (5.7) получим точную формулу для амплитуды дифрагированной волны от кристалла конечной толщины:

$$E_{\text{H}}(0) = i2f\chi_{\text{H}}\eta \frac{F_{(0)}(1+)F_{(1)}(1-)e^{i2\kappa_0} - F_{(0)}(1-)F_{(1)}(1+)}{i(\kappa - \kappa_0)F_{(0)}(+)F_{(1)}(1-) - i(\kappa + \kappa_0)F_{(0)}(-)F_{(1)}(1+)}, \quad (5.9)$$

где введены следующие обозначения:

$$F_{(0)}(1\pm) = F\left(1 + \frac{i}{\mu}(\kappa \pm \kappa_0), 1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu}\right),$$

$$F_{(1)}(1\pm) = F\left(1 + \frac{i}{\mu}(\kappa \pm \kappa_0), 1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu}e^{-\mu}\right),$$

$$F_{(0)}(\pm) = F\left(\frac{i}{\mu}(\kappa \pm \kappa_0), 1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu}\right).$$

Приведенным выражением исчерпывается описание кривой дифракционного отражения (КДО), если не делать никаких предположений относительно входящих в (5.9) величин. Прямое применение формулы (5.9) для расчета КДО в случае произвольного соотношения между упомянутыми выше параметрами κ/μ , κ_0/μ , а также ξ/μ , требует расчета функции F , что вряд ли более оправдано, чем непосредственное численное решение исходного уравнения (5.2) с заданными граничными условиями. Поэтому дальнейшее аналитическое рассмотрение возможно лишь при определенных ограничениях на структурные параметры. В связи с этим выделим два различных предельных случая: случай резкого градиента $\kappa/\mu \ll 1$ и случай слабого градиента деформации $\kappa/\mu \ll 1$. В следующем параграфе мы рассмотрим наиболее интересный для практических приложений первый случай.

§4. Динамическая дифракция в случае резкого градиента деформации

Здесь мы в основном следуем [31]. Прежде чем анализировать случай резкого градиента деформации, обратим внимание, что угловые величины κ_0 , κ входят в функцию $F(a, c; x)$ через параметры a и c , а зависимость от деформации (параметр ξ) полностью отнесена к аргументу x . Такое "разделение" позволяет найти эффективную аппроксимацию $F(a, c; x)$ при произвольных значениях деформации в некотором заданном угловом интервале, то есть найти так называемое равномерно пригодное разложение для вырожденных гипергеометрических функций, входящих в выражения (5.7) и (5.9).

Кроме того, заранее ясно, что в случае резкого градиента малая приповерхностная область кристалла, в которой имеет место значительная деформация решетки, должна выступать в роли некоторого "возмущения", весьма незначительно искажающего структуру волнового поля в идеальном кристалле. То есть, влияние "нарушенного слоя" на качественном уровне не приведет к сколько-нибудь значительным изменениям известных результатов динамической теории для идеального кристалла. Вместе с тем, следует ожидать, что указанное влияние проявится в более тонких интерференционных эффектах. Следствием сказанного должно быть наличие определенных соотношений между структурными параметрами приповерхностного слоя и характерными областями КДО.

В качестве параметра малости выберем "эффективную толщину" деформированной области, отнесенную к полной толщине кристалла $1/\mu = r/L$. При этом угловая область, для которой справедливо использованное приближение, ограничивается значениями $|\kappa/\mu| \ll 1$ и $|\kappa_0/\mu| \ll 1$.

В следующем параграфе на одном частном примере изложена схема получения равномерно пригодного разложения. Согласно этому методу для интересующих нас функций имеем следующий результат:

$$F\left(1 + \frac{i}{\mu}(\kappa \pm \kappa_0), 1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right) \sim \exp\left(\frac{i2\xi}{\mu}\right) \exp\left(\delta(\mu) \text{Ein}\left(\frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right)\right), \quad (5.10)$$

$$F\left(\frac{i}{\mu}(\kappa \pm \kappa_0), 1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right) \sim \exp\left(-\delta(\mu) \text{Ein}\left(-\frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right)\right), \quad (5.11)$$

где

$$\text{Ein}(z) = \int_0^z \frac{(1 - e^{-t})}{t} dt \quad (5.12)$$

– интегральная показательная функция [30], а $\delta(\mu)$ определяется соотношением:

$$\delta(\mu) = \frac{\frac{i}{\mu}(\kappa \mp \kappa_0)}{1 \pm \frac{i2\kappa_0}{\mu}}. \quad (5.13)$$

Знак κ_0 в формулах (5.10) и (5.11) должен совпадать со знаком κ . Это,

во-первых, обеспечивает непрерывный переход к кинематическому пределу, а во-вторых, приводит к ограниченному по модулю решению вне пределов области ПДО.

Из формул (5.10), (5.11) видно, что волновое поле для произвольного значения деформации в указанном угловом интервале имеет достаточно сложную осцилляционную структуру с ограниченными по амплитуде колебаниями. Экспоненциально затухающее в глубь кристалла решение, а значит и связанный с этим экстинкционный эффект, существует в пределах области ПДО идеального полубесконечного кристалла $-\sqrt{\delta_0} < \kappa < \sqrt{\delta_0}$. Этот результат находится в полном соответствии с приведенными в [28] общими выводами.

Используя (5.10) и (5.11), приведем формулу (5.9) для рассматриваемого случая резкого градиента к виду, совпадающему по форме с известным выражением для КДО идеального кристалла:

$$|E_H(0)|^2 = \left| \frac{2f\chi_H\eta \sin(\kappa_{0,(1,3)} + \omega_{(1,3)}^*)}{i\kappa \sin(\kappa_{0,(1,3)} + \omega_{(1,3)}) - \kappa_{0,(1,3)} \cos(\kappa_{0,(1,3)} + \omega_{(1,3)})} \right|^2, \quad \kappa^2 > \delta_0, \quad (5.14)$$

$$|E_H(0)|^2 = \left| \frac{2f\chi_H\eta \sin(\kappa_{0,2} + \omega_2^*)}{i\kappa \sin(\kappa_{0,(2)} - \omega_2) - i\kappa_{0,(2)} \cos(\kappa_{0,(2)} - \omega_2)} \right|^2, \quad \kappa^2 < \delta_0, \quad (5.15)$$

где, как обычно в динамической теории дифракции по Брэггу, амплитудный коэффициент отражения рассматривается в различных областях максимума: область ПДО (формула (5.14)) и две прилегающие к ней области по разные стороны точного брэгговского положения (формула (5.15)). В формулах (5.14) и (5.15) введены следующие обозначения:

$$\omega_{(1,3)} = \frac{\frac{\kappa_{0,(1,3)}}{\mu} \left(2\frac{\kappa}{\mu} \text{Si}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) - \text{Cin}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) \right) + i\frac{\kappa_{0,(1,3)}}{\mu} \left(2\frac{\kappa}{\mu} \text{Cin}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) + \text{Si}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) \right)}{1 + 4\frac{\kappa_{0,(1,3)}^2}{\mu^2}}, \quad (5.16)$$

$$\omega_{(2)} = \frac{\frac{\kappa_{0,(2)}}{\mu} \left(2\frac{\kappa}{\mu} \text{Cin}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) + \text{Si}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) \right) + i\frac{\kappa_{0,(2)}}{\mu} \left(\text{Cin}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) - 2\frac{\kappa}{\mu} \text{Si}\left(\frac{2\xi}{\mu}\right) \right)}{1 - 4\frac{\kappa_{0,(2)}^2}{\mu^2}}, \quad (5.17)$$

$$\kappa_{0,(1,3)}^2 = \kappa^2 - \delta_0, \quad (5.18)$$

$$\kappa_{0,(2)}^2 = \delta_0 - \kappa^2. \quad (5.19)$$

Звездочка в формулах (5.14), (5.15) означает комплексное сопряжение.

Из выражений (5.14) и (5.15) следует, что в случае резкого градиента деформации общая структура КДО, присущая идеальному кристаллу, в целом сохраняется. Однако наличие дополнительных комплексных фаз в три-

гонометрических функциях, обусловленное влиянием малой приповерхностной области кристалла с заметно отличной от нуля деформацией, приводит к тому, что основной дифракционный максимум и максимумы осцилляций смещаются по-разному от положения точного угла Брэгга.

В связи с этим возникает вопрос об однозначности определения структурных параметров деформированного приповерхностного слоя по РД данным, в частности, по угловому смещению основного максимума и осцилляций. Покажем, что в рассматриваемом случае может быть получен качественный критерий оценки амплитуды деформации и толщины деформированного слоя [32].

Рассчитаем это угловое смещение стандартным способом, дифференцируя по параметру κ выражение (5.14). В итоге, для определения углового смещения основного дифракционного максимума необходимо решить получающееся трансцендентное уравнение относительно границ угловых интервалов, прилегающих к области ПДО, в которых происходит переход от одного типа решения к другому (от устойчивого к неустойчивому и наоборот). Примем при этом во внимание, что область ПДО весьма мало смещается от положения, соответствующего идеальному кристаллу: $-\sqrt{\delta_0} < \kappa < \sqrt{\delta_0}$. Поэтому будем искать угловые положения границ области ПДО в виде разложения в ряд по степеням малой величины $1/\mu$ вблизи значений $\kappa = \pm\sqrt{\delta_0}$:

$$\kappa_r = \sqrt{\delta_0} + \frac{\kappa_r^{(1)}}{\mu} + \dots, \quad \kappa_l = -\sqrt{\delta_0} + \frac{\kappa_l^{(1)}}{\mu} + \dots,$$

где κ_r и κ_l – соответственно правая и левая границы области ПДО. За угловое положение основного максимума по аналогии с [28] примем середину области ПДО. Результат расчета с точностью до члена второго порядка имеет вид:

$$\Delta\kappa(0) = -\frac{15(2\delta_0^2 + \delta_0 + 3)}{12\delta_0^2 + 7\delta_0 + 15} \cdot \frac{\text{Si}(2\xi/\mu)}{\mu}. \quad (5.20)$$

Как видно из (5.20), основной максимум всегда смещен влево от нулевого положения. Из (5.20) получим два характерных предела: кинематический предел ($\delta \rightarrow 0$) и случай толстого кристалла, соответствующего формальному пределу $\delta_0 \rightarrow \infty$. Для кинематического предела из (5.20) будем иметь

$$\Delta\kappa(0)_{kin} = -3 \frac{\text{Si}(2\xi/\mu)}{\mu}, \quad (5.21)$$

а для толстого кристалла угловое смещение основного максимума определяется соотношением:

$$\Delta\kappa(0) = -\frac{5}{2} \cdot \frac{\text{Si}(2\xi/\mu)}{\mu}. \quad (5.22)$$

Таким образом, два существенно различных с точки зрения физики рассеяния случая отличаются только численным коэффициентом.

Как видно из (5.21) и (5.22), зависимость углового смещения от ампли-

туды деформации оказывается существенно нелинейной, и, более того, между ними в общем случае вообще нет однозначного соответствия вследствие осцилляционного поведения интегрального синуса.

Далее, если интерпретировать формирование основного дифракционного максимума как результат некоторого "усреднения" дифракционной волной поля деформаций в кристалле, то подобное "усреднение" в данном случае оказывается нетривиальным. Это означает, что формула (5.21) в общем случае не может быть наглядно интерпретирована, подобно случаю кристалла с постоянным градиентом деформации, когда положение максимума однозначно определяет среднее по толщине кристалла значение деформации [4]. Следует заметить, что полученный результат аналогичен выводам задачи дифракции для кристалла с переходной областью [5-7], где угловое расстояние между РД максимумами пленки и подложки определяется помимо амплитуды деформации также и градиентом деформации в переходной области. Такую особенность формирования КДО можно отнести к существенным признакам дифракции в кристалле с переменным градиентом деформации.

К одной из специфических особенностей рассматриваемой нами задачи можно отнести следующую. Для вполне реальных больших значений ξ , интегральный синус асимптотически стремится к $\pi/2$ [30]. Поэтому положение максимума, как это видно из (5.21) и (5.22), оказывается вообще не зависящим от амплитуды деформации.

Аналогичный расчет для угловых положений максимумов осцилляций (точки, в которых коэффициент отражения обращается в ноль) дает следующий результат:

$$\kappa_{\min} = n\pi \left(1 + \frac{1}{\mu} \text{Cin}(2\xi/\mu) \right), \quad (5.23)$$

где порядковый номер n минимума не должен быть слишком большим, чтобы разложение оставалось справедливым. Отсюда для угловых ширин осцилляционных максимумов получим:

$$\Delta\kappa(n) = \pi \left(1 + \frac{1}{\mu} \text{Cin}(2\xi/\mu) \right). \quad (5.24)$$

При выводе (5.23) было принято во внимание, что динамические эффекты проявляются в основном лишь в пределах области ПДО, поэтому уже практически при $n \geq 2$ можно использовать кинематическое приближение [3].

В случае малых значений аргумента для функций $\text{Si}(x)$ и $\text{Cin}(x)$ имеем оценку $\text{Si}(x) \sim x$, и $\text{Cin}(x) \sim x^2$, в то время как для больших $2\xi/\mu$ (фактически уже при $2\xi/\mu > 2$) $\text{Si}(x) \sim \pi/2$, и $\text{Cin}(x) \sim \ln(x)$ [30].

Таким образом, основной и осцилляционные дифракционные максимумы в обоих предельных вариантах смещаются по-разному. Это обстоятельство позволяет для реального эксперимента во-первых, выяснить характер рассеяния (кинематический или динамический), а во-вторых, в ряде случаев оценить амплитуду и градиент деформации. Действительно, комбинируя

формулы (5.21) и (5.24), а также (5.21) и (5.24), можно получить выражения, связывающие относительные угловые положения основного и ближайших осцилляционных дифракционных максимумов как для толстых "динамических", так и для тонких "кинематических" кристаллов.

Представляет интерес интерпретация полученных соотношений для углового смещения основного дифракционного максимума. В случае $2\xi/\mu < 1$ из формулы (5.21) и из приведенной выше оценки интегральных тригонометрических функций следует, что угловое смещение оказывается пропорциональным величине

$$\Delta\kappa \sim \frac{\varepsilon_0 r^2}{\lambda L} = \frac{\Delta n}{\lambda} \cdot \frac{r}{L}. \quad (5.25)$$

Здесь в качестве меры амплитуды деформации ε_0 принята величина несоответствия межплоскостных расстояний $\Delta d/d$ на поверхности кристалла и на достаточно большой глубине, а n – число отражающих атомных плоскостей, укладывающихся на "эффективной" толщине r . Первый сомножитель в (5.25) дает полный набег фазы дифракционной волны на толщине r , а второй сомножитель можно интерпретировать как нормировочную константу, определяющую характерный масштаб, на котором проявляются основные дифракционные эффекты, связанные с "нарушенным" приповерхностным слоем. Формулу (5.25) можно записать также в виде:

$$-\Delta\theta \operatorname{ctg} \theta \sim \bar{\varepsilon} \frac{r}{L}, \quad \bar{\varepsilon} = \varepsilon_0 \frac{r}{L}, \quad (5.26)$$

откуда следует, что для кристалла с переменным градиентом деформации имеется качественное отличие от известного результата для модели кристалла с линейным изменением параметра решетки (постоянный градиент), для которого угловое положение дифракционного максимума определяется средней деформацией $\bar{\varepsilon}$.

С другой стороны, как это видно из (5.20), в случае $2\xi/\mu \gg 1$ угловое смещение основного дифракционного максимума определяется следующей простой зависимостью:

$$\Delta\kappa \sim \frac{r}{L}. \quad (5.27)$$

Таким образом, в этом случае положение максимума оказывается не зависящим от амплитуды и градиента деформации, а определяется лишь "эффективной" толщиной деформированной приповерхностной области кристалла. Соотношения (5.25) и (5.27) демонстрируют разные способы реагирования структуры волнового поля в кристалле на "возмущение", вызванное деформацией малой приповерхностной области, при различных соотношениях между параметрами деформированного слоя.

Первый вариант, отвечающий формуле (5.25), соответствует малому набегу фазы на характерной толщине r , и, как следствие, волновое поле в пределах углового интервала ПДО оказывается зависимым от всех структурных параметров деформированного слоя. Этот случай находится в согласии с

обычными представлениями об информативности структуры КДО относительно деформированного состояния кристалла.

Во втором случае (формула (5.27)), согласно (5.21), $\varepsilon_0 r \gg d$ и фаза дифрагированной волны многократно инвертируется на толщине нарушенного слоя. В результате такого процесса информация о начальных условиях "возмущения" теряется и в угловом положении основного дифракционного максимума оказывается заложена лишь наиболее общая информация об эффективной толщине деформированного слоя. Иными словами, система "забывает" о деталях начального "возмущения" и сохраняет лишь одну характерную величину – эффективную толщину. Таким образом, этот случай в определенном смысле подобен марковскому процессу.

Интересно отметить, что аналогичные выводы можно получить и при рассмотрении задачи дифракции в так называемом полукинематическом приближении, когда приповерхностный нарушенный слой кристалла считается рассеивающим кинематически, а подложка рассеивает как идеальный динамический кристалл. В [33] при решении такой задачи были получены соотношения, связывающие Фурье-трансформанту КДО вдали от основного максимума с некоторой эффективной толщиной и средней величиной изменения параметра решетки нарушенного слоя. Используя эти соотношения, можно показать, что в первом из указанных выше характерных пределов (неполное инвертирование фазы) эффективная толщина зависит от параметров нарушенного слоя, и, таким образом, оказывается возможным их восстановление по виду КДО. С другой стороны, оценка интегрального соотношения, полученного в [33], для частного случая монотонного изменения деформации и нашего условия $2\xi/\mu \gg 1$ (многократное инвертирование фазы), приводит к выводу, что параметр, названный в [33] эффективной толщиной, сводится лишь к глубине нарушенного слоя и не зависит от амплитуды деформации.

Такое соответствие позволяет предположить, что указанные закономерности рентгеновской дифракции не ограничиваются рассмотренной выше конкретной задачей, и присущи всем структурам с переменным градиентом деформации и монотонным изменением деформации по глубине.

§5. Расчет равномерно пригодных разложений для вырожденных гипергеометрических функций

Рассмотрим задачу нахождения асимптотического представления вырожденной гипергеометрической функции вида

$$F\left(1, 1 - \frac{i2\kappa}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right) = F(1, 1 - \varepsilon; t), \quad (5.28)$$

где величина $i2\kappa/\mu = \varepsilon$ рассматривается как малый параметр, а $t = \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}$ – независимая переменная.

В пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ функция (5.28) переходит в $e^{i2\xi/\mu}$. Чтобы явно учесть

это обстоятельство, используем преобразование Куммера [30]

$$F(a, c; x) = e^x F(c - a, 2 - c; -x), \quad (5.29)$$

и будем рассматривать функцию $F\left(-\varepsilon, 1 - \varepsilon; -\frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu t}\right)$, как решение дифференциального уравнения

$$t \frac{d^2 F}{dt^2} + (1 + t - \varepsilon) \frac{dF}{dt} - \varepsilon F = 0 \quad (5.30)$$

с начальными условиями

$$F(t = 0) = 1, \quad \left. \frac{dF}{dt} \right|_{t=0} = -\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}. \quad (5.31)$$

Для решения (5.30) используем метод многих масштабов, иначе именуемый методом разложения производной [34]. Основная идея метода состоит в следующем. Искомое решение рассматривается как функция, зависящая не только от аргумента t и ε , но и от их комбинаций вида $\varepsilon t, \varepsilon^2 t, \dots$:

$$F(t; \varepsilon) = \mathcal{F}(\varepsilon t, \varepsilon^2 t, \dots; \varepsilon) = \mathcal{F}(T_0, T_1, T_2, \dots; \varepsilon), \quad (5.32)$$

то есть вводятся новые независимые переменные $T_n = \varepsilon^n t$. При этом, поскольку ε по определению считается малой, то величины T_n определяют характерные масштабы задачи, и исследование решения проводится на каждом из этих масштабов. Дифференциальные операторы, входящие в рассматриваемое уравнение, также разлагаются по степеням малого параметра ε по правилу

$$\frac{d}{dt} = \sum_{n=0} \varepsilon^n \frac{\partial}{\partial T_n}, \quad \frac{d^2}{dt^2} = \sum_{n=0} \varepsilon^n \frac{\partial}{\partial T_n} \cdot \sum_{k=0} \varepsilon^k \frac{\partial}{\partial T_k}. \quad (5.33)$$

Тем самым исходная задача с обыкновенным дифференциальным уравнением переходит в задачу с уравнением в частных производных. Решение получаемого уравнения ищется, как обычно, в виде ряда по степеням ε :

$$F = F_0(T_0, T_1, T_2, \dots) + \varepsilon F_1(T_0, T_1, T_2, \dots) + \dots \quad (5.34)$$

Приравнивание коэффициентов при различных степенях ε дает цепочку уравнений, последовательное решение которых позволяет найти функции F_i и получить требуемое разложение. Дополнительные переменные используются для исключения секулярных членов в правых частях уравнений.

Нам однако потребуется некоторое обобщение стандартной процедуры. Такая необходимость обусловлена следующими причинами. Структура уравнения (5.30) такова, что каждый член в правых частях цепочки уравнений порождает секулярные члены в разложении (5.34), и в рамках обычного подхода мы оказываемся не в состоянии исключить их. Кроме того, как было показано выше, функция $F(1, 1 - \varepsilon; t)$ описывает устойчивое решение исходной системы Такаги, а значит, она должна быть ограничена как по аргументу, так и по параметрам. Обычное же разложение по степеням ε очевидно не удовле-

творяет этому требованию и должно быть заменено более общей последовательностью.

Для того чтобы учесть эти обстоятельства, будем рассматривать искомое разложение как функцию масштабов

$$T_n = \delta_n(\varepsilon)\varphi_n(T_0). \quad (5.35)$$

Здесь и в дальнейшем $\delta_n(\varepsilon)$ – некоторая асимптотическая последовательность функций, удовлетворяющая условиям

$$\begin{aligned} \delta_1(\varepsilon) &= O(\varepsilon), \\ \delta_n(\varepsilon) &= O(\delta_{n-1}(\varepsilon)) \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \\ |\delta_n(\varepsilon)| &< M, \end{aligned} \quad (5.36)$$

а $\varphi_n(T_0)$ – функции масштабов, подлежащие определению. Разложение дифференциальных операторов в этом случае имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &= \sum_{n=0} \delta_n(\varepsilon) \frac{d\varphi_n}{dT_0} \frac{\partial}{\partial T_n}, \\ \frac{d^2}{dt^2} &= \left(\sum_{n=0} \delta_n(\varepsilon) \frac{d\varphi_n}{dT_0} \frac{\partial}{\partial T_n} \right) \left(\sum_{k=0} \delta_k(\varepsilon) \frac{d\varphi_k}{dT_0} \frac{\partial}{\partial T_k} \right). \end{aligned} \quad (5.37)$$

Таким образом, использование нами нелинейных масштабов для аргумента является обобщением стандартного метода многих масштабов и позволяет получить равномерно пригодные разложения для функций типа (5.28). Подставляя (5.34) и (5.37) в уравнение (5.30) и затем, приравнивая члены одного порядка по ε , получим цепочку уравнений:

$$T_0 \frac{\partial^2 F_0}{\partial T_0^2} + (1 + T_0) \frac{\partial F_0}{\partial T_0} = 0, \quad (5.38)$$

$$T_0 \frac{\partial^2 F_1}{\partial T_0^2} + (1 + T_0) \frac{\partial F_1}{\partial T_0} = \quad (5.39)$$

$$= -T_0 \left(\frac{d^2 \varphi_1}{dT_0^2} \frac{\partial F_0}{\partial T_1} + 2 \frac{d\varphi_1}{dT_1} \frac{\partial^2 F_0}{\partial T_0 \partial T_1} \right) - (1 + T_0) \frac{d\varphi_1}{dT_1} + \frac{\partial F_0}{\partial T_0} + F_0$$

и так далее.

Решение уравнения (5.38) имеет вид:

$$F_0 = U_1(T_1, T_2, \dots)(\text{Ein}(T_0) - \ln T_0) + U_2(T_1, T_2, \dots), \quad (5.40)$$

где, как обычно в методе многих масштабов, константы интегрирования $U_j(T_1, T_2, \dots)$ оказываются не постоянными величинами, а функциями последующих масштабов и

$$\text{Ein}(z) = \int_0^z \frac{1 - e^{-x}}{x} dx$$

– интегральная показательная функция [30]. Мы намеренно выделили логарифмическую часть

рифмическую особенность в решении для дальнейшего использования. С учетом начальных условий (5.31) из (5.40) получим

$$F_0 = U_2(T_1, T_2, \dots), \quad (5.41)$$

то есть решение в пределах нулевого масштаба сводится к постоянной. Подстановка (5.41) в (5.39) дает

$$T_0 \frac{\partial^2 F_1}{\partial T_0^2} + (1 + T_0) \frac{\partial F_1}{\partial T_0} = -T_0 \left(\frac{d^2 \varphi_1}{dT_0^2} + (1 + T_0) \frac{d\varphi_1}{dT_0} \right) \frac{\partial U_2}{\partial T_1} + U_2. \quad (5.42)$$

По принятому в теории возмущений правилу при нахождении высших приближений F_1, F_2, \dots учитываются лишь частные решения неоднородных уравнений типа (5.39). В нашем случае каждое слагаемое в правой части (5.42) порождает секулярные члены в разложении (5.34). Следовательно, мы должны добиться обращения в ноль всей правой части уравнения (5.42), то есть по существу превратить его в однородное уравнение. Таким образом, члены разложения (5.42), начиная со второго, оказываются равными нулю и вся информация о влиянии возмущения оказывается сосредоточенной в первом члене разложения. Мы достигнем этого, если решим уравнение

$$\left(T_0 \frac{d^2 \varphi_1}{dT_0^2} + (1 + T_0) \frac{d\varphi_1}{dT_0} \right) \frac{\partial U_2}{\partial T_1} - U_2 = 0 \quad (5.43)$$

относительно неизвестной функции φ_1 . Функция U_2 согласно (5.41) не может зависеть от переменной T_0 . Вместе с тем множитель при $\partial U_2 / \partial T_1$ зависит только от T_0 . Единственная возможность совместить эти два условия состоит в том, чтобы приравнять указанный коэффициент константе:

$$T_0 \frac{d^2 \varphi_1}{dT_0^2} + (1 + T_0) \frac{d\varphi_1}{dT_0} = C. \quad (5.44)$$

Таким образом, мы получили уравнение (5.38) с постоянной правой частью. При этом решение (5.43) дается следующим выражением:

$$U_2 = U(T_2, T_3, \dots) \exp(T_1 / C), \quad (5.45)$$

где величина U зависит от следующих масштабов и может быть принята за константу, если ограничиться первым порядком разложения. Частный интеграл уравнения (5.44) имеет вид:

$$\varphi_1 = C \ln|T_0|. \quad (5.46)$$

В итоге, для уравнения (5.45) будем иметь:

$$U_2 = U \exp \left[\delta_1(\varepsilon) \left(\frac{r_1}{C} (\text{Ein}(T_0) - \ln T_0) + \frac{r_2}{C} + \ln T_0 \right) \right], \quad (5.47)$$

где r_1 и r_2 – некоторые константы. В пределе $T_0 \rightarrow 0$ целая функция $\text{Ein}(T_0) \rightarrow 0$, а логарифмы в (5.47) приводят к особенности в точке $T_0 = 0$, несовместимой с начальными условиями (5.31). Поэтому, чтобы исключить их, мы должны положить $r_1 = C$. Кроме того, из начальных условий (5.31) следует, что $r_2 = 0$,

$U=1$. Тогда получим следующее асимптотическое выражение

$$F(1, 1 - \varepsilon; t) \sim e^t e^{\delta_1(\varepsilon) \text{Ein}(t)}. \quad (5.48)$$

Для того чтобы найти явный вид $\delta_1(\varepsilon)$, примем во внимание, что формула (5.48) и ряд Куммера

$$F(1, 1 - \varepsilon; t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{(1 - \varepsilon)_n} = 1 + \frac{t}{1 - \varepsilon} + \frac{t^2}{(1 - \varepsilon)(2 - \varepsilon)} + \dots \quad (5.49)$$

представляют собой различные разложения одной и той же функции и потому должны иметь одинаковый вид в некоторой общей области значений параметров и аргумента. В данном случае эти формулы должны совпадать при $t \rightarrow 0$. Разлагая (5.48) по t и сравнивая с (5.49), определим $\delta_1(\varepsilon)$:

$$\delta_1(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}. \quad (5.50)$$

В итоге, подставляя (5.45) в (5.48) и возвращаясь к исходным обозначениям, найдем искомое асимптотическое представление:

$$F\left(1, 1 - \frac{i2\kappa}{\mu}; \frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right) \sim \exp\left(\frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau} + \frac{\frac{i2\kappa}{\mu}}{1 - \frac{i2\kappa}{\mu}} \text{Ein}\left(\frac{i2\xi}{\mu} e^{-\mu\tau}\right)\right), \frac{1}{\mu} \ll 1. \quad (5.51)$$

Формула (5.51) и есть искомое равномерно пригодное разложение вырожденной гипергеометрической функции на всем интервале значений аргумента и удовлетворяет начальным условиям (5.31). Кроме того, если учесть, что для чисто мнимого аргумента

$$\text{Ein}(ix) = \text{Cin}(x) + i \text{Si}(x),$$

где $\text{Cin}(x) = \int_0^x \frac{1 - \cos y}{y} dy$, $\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin y}{y} dy$ – соответственно интегральный косинус и интегральный синус, то видно, что (5.51) действительно остается

ограниченным при любых допустимых значениях параметра и аргумента.

Используя условие $|i2\kappa/\mu| \ll 1$, мы фактически получили разложение, пригодное для всех значений аргумента (то есть деформации); указанное ограничение определяет только угловой интервал, в котором можно использовать формулу (5.51). Иными словами, величина градиента деформации оказывается существенной лишь по отношению к отстройке от точного угла Брэгга. Зависимость от ξ согласно (5.51) носит осциллирующий (хотя и не периодический) характер.

Для остальных функций $F(a, c; x)$ разложение проводится аналогично. Следует отметить, что получаемые таким способом асимптотические представления, вообще говоря, не допускают дальнейшего упрощения без потери аналитических свойств исходных функций.

§6. Новые точные аналитические решения рентгеновской динамической дифракции в кристаллах с переменным градиентом деформации

Решение модельных задач динамической теории дифракции в деформированных кристаллических структурах имеет важное значение для анализа как общих закономерностей, так и специфических особенностей структуры единого волнового поля, проявляющихся в форме кривой дифракционного отражения. Подобный анализ возможно провести в наиболее полном виде, если удастся найти точное аналитическое решение для какого-либо модельного профиля изменения деформации по глубине кристалла.

При исследовании особенностей дифракции в кристаллах с переменным градиентом деформации, следующих из характеров решений уравнений Такаги, в [35] был получен ряд общих закономерностей. Одно из них формулируется в виде достаточного условия на профиль изменения деформации. А именно, профили деформации, спадающие на глубине быстрее, чем $1/z$, характеризуются определенными общими свойствами в структуре кривой дифракционного отражения. В связи с этим принципиальным является поиск точных аналитических решений как для граничного профиля деформации вида $\varepsilon(z) \sim 1/z$, так и для профилей деформации, не удовлетворяющих указанному выше достаточному условию. К таковым, в частности, относится деформация вида $\varepsilon(z) \sim 1/\sqrt{z}$. Здесь мы покажем, каким образом могут быть получены точные аналитические решения для указанных выше профилей [36-39].

Запишем систему уравнений Такаги в виде одного матрично-векторного уравнения:

$$\frac{d\mathbf{E}}{dz} = (\mathbf{A} + \mathbf{B}(z))\mathbf{E}, \quad (5.52)$$

где
$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_0 \\ E_h \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & a_{\bar{H}} \\ a_H & -i2\kappa \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}(z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -i2\xi\varphi(z) \end{pmatrix}, \quad (5.53)$$

а a_H и $a_{\bar{H}}$ – некоторые постоянные комплексные коэффициенты, пропорциональные Фурье-компонентам поляризуемости кристалла χ_H и $\chi_{\bar{H}}$, соответственно, κ – параметр углового отклонения падающего рентгеновского пучка от точного брэгговского значения, ξ – величина, пропорциональная амплитуде деформации, $\varphi(z)$ – функция, задающая распределение деформации по координате z , направленной вдоль нормали к поверхности в глубь кристалла (модель).

Такая форма записи уравнений Такаги явно выделяет "возмущающую" матрицу $\mathbf{B}(z)$, которая определяет искажения, вносимые полем деформации $\varphi(z)$ в картину дифракции от идеального кристалла, описываемую "основной" постоянной матрицей \mathbf{A} .

Анализ точных решений для указанных выше моделей показывает, что они всегда могут быть представлены в виде некоторой суперпозиции собственных волн, соответствующих дифракции в идеальном кристалле, однако каждая из них оказывается модулированной переменной амплитудой, зави-

сящей от профиля деформации. Волновые векторы собственных волн определяются собственными значениями матрицы \mathbf{A} . Это обстоятельство позволяет предположить, что любое аналитическое решение может быть представлено в таком виде.

Здесь необходимо сделать следующее замечание. Решение в виде суперпозиции волн означает, что результирующая волна возникает при "перемешивании" отдельных "элементарных" волн (колебательных мод) и некоторая особая "внутренняя симметрия" задачи оказывается скрытой. Вместе с тем выявление этой "внутренней симметрии" облегчает, а зачастую и делает вообще возможным успешное решение той или иной задачи. В соответствии с этим приведем систему (5.52) к виду, наиболее отражающему ее симметричную структуру.

В уравнении (5.52) сделаем подстановку

$$E_H = \bar{E}_H \exp(-ikz)$$

и приведем матрицу \mathbf{A} к диагональному виду с помощью некоторой постоянной матрицы \mathbf{C} :

$$\mathbf{A} = \mathbf{C}^{-1} \Lambda, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} ik_0 & 0 \\ 0 & -ik_0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{a_{\bar{H}}}{i(\kappa + \kappa_0)} \\ \frac{a_H}{i(\kappa + \kappa_0)} & 1 \end{pmatrix}, \quad ik_0 = \sqrt{(ik)^2 + a_H a_{\bar{H}}}. \quad (5.54)$$

В случае идеального кристалла решение уравнения (5.52) можно представить в виде:

$$\mathbf{E} = \mathbf{C} e^{\Lambda z} \mathbf{R}, \quad e^{\Lambda z} = \begin{pmatrix} e^{ik_0 z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_0 z} \end{pmatrix}.$$

Экспоненциал $e^{\Lambda z}$ представляет собой "чистый" набор собственных волн, распространяющихся в кристалле, а матрица \mathbf{C} "перемешивает" их, приготавливая падающую E_0 и рассеянную волны $E_{\bar{H}}$ в соответствии с условиями дифракции и структурными характеристиками кристалла. Постоянный вектор \mathbf{R} определяется из граничных условий.

В случае деформированного кристалла, как было сказано выше, собственные волны оказываются дополнительно модулированными. В соответствии с этим естественно заменить постоянный вектор \mathbf{R} переменным вектором $\mathbf{U}(z)$ и искать решение (5.52) в виде

$$\mathbf{E}(z) = \mathbf{C} e^{\Lambda z} \mathbf{U}(z).$$

Тем самым мы полагаем, что модуляция, накладываемая на "основное" поле деформацией $\xi\varphi(z)$, оказывается целиком отнесенной к вектор-столбцу $\mathbf{U}(z)$.

В результате для $\mathbf{U}(z)$ получим следующее уравнение:

$$\frac{d\mathbf{U}}{dz} = \mathbf{P}(z)\mathbf{U}, \quad (5.55)$$

где

$$\mathbf{P}(z) = -\frac{\xi\varphi(z)}{\kappa_0} \begin{pmatrix} \frac{a_H a_{\bar{H}}}{i(\kappa + \kappa_0)} & a_{\bar{H}} e^{-i2\kappa_0 z} \\ a_H e^{i2\kappa_0 z} & i(\kappa + \kappa_0) \end{pmatrix}. \quad (5.56)$$

Отметим основные особенности уравнения (5.55). Структура уравнения (5.55) имеет вполне симметричный вид. При этом матрица $\mathbf{P}(z)$ оказывается вырожденной ($\det \mathbf{P}(z) \equiv 0$), поскольку по построению она подобна сингулярной матрице $\mathbf{B}(z)$. Кроме того, в такой записи принципиально важным оказывается то, что функциональная зависимость $\varphi(z)$, определяющая поле деформации по глубине кристалла, есть скалярный множитель матрицы $\mathbf{P}(z)$, чего нет в традиционной форме записи системы уравнений Такаги (5.52). Именно эти свойства матрицы $\mathbf{P}(z)$ позволяют эффективно находить точные аналитические решения динамических задач дифракции.

Векторы-столбцы $\mathbf{c}^{(k)}$ матрицы \mathbf{C} представляют собой собственные векторы матрицы \mathbf{A} и находятся из следующих условий ортогональности:

$$[\mathbf{A} + (-1)^k i\kappa_0 \mathbf{I}] \mathbf{c}^{(k)} = 0, \quad k = 1, 2,$$

где \mathbf{I} – единичная матрица, причем

$$\det[\mathbf{A} + (-1)^k i\kappa_0 \mathbf{I}] \equiv 0$$

в силу характеристического уравнения. Таким образом, компоненты матрицы \mathbf{C} находятся из решения однородной системы линейных уравнений и следовательно определяются неоднозначно. Эта неоднозначность не влияет на последующий ход рассуждений, однако при рассмотрении конкретных выражений для коэффициента отражения, и в частности при переходе к кинематическому приближению надлежащий выбор \mathbf{C} приводит к существенному упрощению выкладок. Поэтому приведенный выше вид матрицы \mathbf{C} выбран именно из этих соображений.

Теперь перейдем от векторного уравнения (5.55) к скалярному уравнению второго порядка относительно компоненты u_2 вектора-столбца $\mathbf{U}(z)$:

$$\frac{d^2 u_2}{dz^2} + \left(i2\xi\varphi(z) - \frac{\varphi'(z)}{\varphi(z)} - i2\kappa_0 \right) \frac{du_2}{dz} - i2\xi(\kappa + \kappa_0)\varphi(z)u_2 = 0. \quad (5.57)$$

Здесь штрих означает дифференцирование по z . Это уравнение может рассматриваться как основное при нахождении аналитических решений.

Рассмотрим уравнение (5.55) для модели [37]:

$$\varphi(z) = \frac{1}{1 + \mu z}, \quad (5.58)$$

где μ определяет величину градиента деформации. Вид функции (5.58) выбран в соответствии с условием нормировки деформации на поверхности кристалла.

Уравнение (5.57) для $\varphi(z)$ вида (5.58) является уравнением гипергеометрического типа, поскольку его коэффициенты линейно зависят от независимой переменной z . Это уравнение может быть проинтегрировано в терми-

нах вырожденных гипергеометрических функций с помощью подстановки

$$x = \frac{i2\kappa_0}{\mu}(1 + \mu z). \quad (5.59)$$

Выполняя подстановку (5.58) в (5.57), получим каноническую форму дифференциального уравнения для вырожденной гипергеометрической функции:

$$x \frac{d^2 u_2}{dx^2} + (c - x) \frac{du_2}{dx} - au_2 = 0 \quad (5.60)$$

с параметрами

$$c = 1 + \frac{i2\xi}{\mu}, \quad a = \frac{i2\xi}{\mu} \cdot \frac{\kappa + \kappa_0}{2\kappa_0}. \quad (5.61)$$

Выберем в качестве пары линейно независимых решений (5.60) вырожденные гипергеометрические функции

$$F(a, c; x), \quad x^{1-c} F(a-c+1, 2-c; x).$$

Используя (5.55), можно получить аналогичный набор линейно независимых решений для компоненты u_1 . Полный набор этих решений образует фундаментальную систему – интегральную матрицу \mathbf{X} :

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} C_1 \cdot F(1+a, c; x) & C_1 \cdot x e^{-i2\kappa_0 z} F(c-a, 2-c; x) \\ F(a, c, x) & x^{1-c} F(a-c+1, 2-c, x) \end{pmatrix}, \quad (5.62)$$

где $C_1 = -\frac{i(\kappa + \kappa_0)}{a_H}$.

Окончательно решение для волнового поля имеет вид:

$$\mathbf{E} = e^{-i\kappa z} \mathbf{C} e^{\Lambda z} \mathbf{X} \mathbf{r}, \quad (5.63)$$

где постоянный вектор-столбец \mathbf{r} определяется из граничных условий.

Возвратимся к уравнению (5.63). Рассмотрим дифракционную задачу для профиля

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{1 + \mu z}}, \quad (5.64)$$

где μ , как и ранее, определяет скорость уменьшения деформации по глубине кристалла. В уравнении (5.55) сделаем замену независимой переменной по формуле $t = (2\sqrt{1 + \mu z})/\mu$ и с помощью подстановки

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{V}(t) e^{ht}, \quad h = -i\xi \frac{\kappa_0 + \kappa}{\kappa_0}$$

перейдем к новому неизвестному вектору $\mathbf{V}(t)$. Стандартная процедура перехода от дифференциальной системы к одному скалярному уравнению относительно компоненты v_2 приводит к следующему уравнению:

$$\frac{d^2 v_2}{dt^2} - \left(\frac{i2\xi\kappa}{\kappa_0} + i\kappa_0 \mu t \right) \frac{dv_2}{dt} - a_H a_H \left(\frac{\xi}{\kappa_0} \right)^2 v_2 = 0. \quad (5.65)$$

Это уравнение также гипергеометрического типа. Оно приводится к каноническому виду (5.60) с помощью подстановки

$$y = \frac{i\kappa_0}{\mu} \left(t + \frac{2\kappa\xi}{\kappa_0^2\mu} \right)^2. \quad (5.66)$$

При этом параметры вырожденного гипергеометрического уравнения имеют следующий вид:

$$c = \frac{1}{2}, \quad a = -\frac{ia_H a_{\bar{H}}}{2\kappa_0\mu} \left(\frac{\xi}{\kappa_0} \right)^2. \quad (5.67)$$

Компоненты интегральной матрицы в обозначениях (5.66) и (5.67) записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} X_{11} &= -\frac{\kappa_0}{(\kappa + \kappa_0)\xi} \left(\frac{i\kappa_0}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} F\left(\frac{1}{2} + a, \frac{1}{2}; y \right) e^{-i\kappa_0 z}, \\ X_{12} &= \frac{a_H a_{\bar{H}}}{i(\kappa + \kappa_0)} \left(t + \frac{\xi\kappa}{\kappa_0^2\mu} \right) F\left(1 + a, \frac{3}{2}; y \right) e^{-i\kappa_0 z}, \\ X_{21} &= y^{\frac{1}{2}} F\left(\frac{1}{2} + a, \frac{3}{2}; y \right), \quad X_{22} = F\left(a, \frac{1}{2}; y \right). \end{aligned} \quad (5.68)$$

С учетом (5.68) структура решения для волнового поля определяется общей формулой (5.63).

Поскольку решения получены в рамках единого подхода, это позволяет анализировать их с общих позиций [40,41]. Отметим, что для обеих рассмотренных моделей параметр гипергеометрических функций c не зависит от эффектов динамического перерасеяния и поэтому сохранит свой вид при переходе к кинематическому приближению. Напротив, параметр a существенно зависит от динамических эффектов так, что решения при переходе к кинематическому приближению существенно упрощаются (в частности, в кинематическом пределе $a_{\bar{H}} = 0$). В этом случае решение для первой модели выражается через неполную гамма-функцию, а для второй – через функцию ошибок или через связанные с нею интегралы Френеля.

Интересно отметить, что уравнение (5.57) позволяет найти и все остальные известные точные решения для упомянутых выше моделей, причем решение ищется по единой схеме.

В частности, легко показать, что для модели с постоянным градиентом деформации (5.57) непосредственно переходит в вырожденное гипергеометрическое уравнение. Для экспоненциального градиента и для модели переходного слоя путем подстановки $t = e^{-\mu z}$ из (5.57) получается уравнение, родственное (5.60), или, соответственно, дифференциальное уравнение гипергеометрического типа.

Такое "единообразие" позволяет говорить об определенной генетиче-

ской взаимосвязи точно решаемых моделей, выражающейся в общих особенностях профилей деформации. К таковым, в частности, относится монотонное изменение деформации по глубине кристалла (знакоопределенный градиент). При этом подобная "общность" моделей, разумеется, не распространяется до полной аналогии, и решение для каждого профиля имеет свою вполне определенную специфику.

Таким образом, показано, что для моделей (5.58) и (5.64) существуют точные аналитические решения динамической задачи дифракции, сводящиеся к решениям вырожденного гипергеометрического уравнения (5.61).

§7. Рентгенодифрактометрическое исследование двухслойной гетероструктуры с переходным слоем с учетом изменения электронной плотности

Проблема динамической дифракции в многослойных эпитаксиальных структурах представляет собой одно из актуальных направлений рентгеновской кристаллооптики. В таких дифракционных задачах модель многослойной гетероструктуры задается посредством изменения деформации по глубине кристалла. Однако, как известно, в микроэлектронике особое значение имеют структуры, состоящие из эпитаксиальных слоев различного состава. Как правило, для этой цели используются трех- и четырехкомпонентные твердые растворы на основе соединений A^3B^5 и A^2B^6 [42]. В связи с этим возникает вопрос о влиянии изменения состава эпитаксиальных слоев на дифракционную картину. Это означает, что, наряду с деформацией, необходимо также учесть изменение электронной плотности по глубине гетероструктуры.

Здесь эта задача решается для двухслойной гетероструктуры с переходным слоем:

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_0 (1 + \exp(m(z - h)))^{-1}, \quad (5.69)$$

где ε_0 – амплитуда деформации, h – толщина пленки, $1/m$ – ширина переходной области. Координата z направлена по нормали в глубь кристалла. Точное решение задачи для модели (5.69) было получено в [5,6], где было показано, что амплитуда дифрагированной волны выражается через гипергеометрические функции.

Решение поставленной задачи должно исходить из модифицированных с учетом модуляции электронной плотности уравнений Такаги. Это было сделано в [9,23], где рассматривалась аналогичная задача для сверхрешетки. Воспользуемся этими результатами и кратко воспроизведем вывод уравнений применительно к модели переходного слоя.

Как правило, обобщение задачи приводит к увеличению числа задаваемых параметров и, как следствие, усложнению описания. Эффективность обобщения определяется возможностью, с одной стороны, получения общего аналитического решения рентгенооптической задачи, и, с другой стороны, анализа полученного решения для обозримого числа вариантов. Здесь имеется непосредственная аналогия с динамической дифракцией в СР [23]. В этом случае в рамках формализма зонных диаграмм [23] возникает задача опреде-

ления минимально необходимого числа параметров. Оказывается [17], что для чисто деформационных СР требуется три параметра, один из которых, – параметр когерентности, – представляет собой, с точностью до множителя, амплитуду деформации. Важно при этом, что математическая процедура минимизации параметров имеет общий характер и не привязана к конкретной модели структуры.

Будем исходить из уравнений Такаги в следующем виде:

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\kappa - if\chi_0\alpha_0 \left(1 - \frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right) X(z) & i2f\chi_{\bar{H}}\eta \frac{\gamma_H}{\gamma_0} (1 + \alpha_{\bar{H}} X(z)) \\ i2f\chi_H\eta (1 + \alpha_H X(z)) & -i\kappa + if\chi_0\alpha_0 \left(1 - \frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right) X(z) - i2\xi X(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix} \quad (5.70)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$\kappa = f\beta_H = -f \left(2\Delta\theta \sin 2\theta + \chi_0 \left(1 - \frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right) \right), \quad f = -\frac{\pi L_{ext}}{2\lambda \sin(\theta \pm \varphi)}, \quad \alpha_{0,H} = \frac{\Delta F(0,H)}{F(0,H)}$$

– амплитуда относительного изменения структурного фактора решетки в направлении вектора обратной решетки \vec{H} , $X(z)$ – модель изменения структурного фактора и деформации.

Уравнения (5.70) можно получить двояко. С одной стороны, кристалл можно рассматривать как предельный случай когерентно сопряженных эпитаксиальных слоев различного состава и параметра решетки, причем в пределах каждого слоя состав и деформация остаются постоянными. Если при этом исходить из требования, чтобы уравнения Такаги были ковариантны для всех слоев относительно изменения электронной плотности, то мы приходим к (5.70). С другой стороны, уравнения (5.70) можно получить, разлагая поляризуемость кристалла в обобщенный ряд Фурье вида

$$\chi(\vec{r}) = \sum_H \chi_H (1 + \alpha_H X(\vec{r})) \exp\left((2\pi i \vec{H}(\vec{r}) + \vec{U}(\vec{r})) \vec{r} \right),$$

где $\vec{U}(\vec{r})$ – сумма упругого смещения атомных плоскостей и смещения, вызванного изменением межплоскостного расстояния при сопряжении слоев различного состава. Далее, используя стандартный вывод уравнений Такаги, получим систему (5.70).

Здесь необходимо отметить важное допущение, которое принято в (5.70). Изменение состава и деформации в эпитаксиальном слое и в подложке происходит по одному и тому же закону $X(z)$. Это допущение представляется вполне естественным и становится почти очевидным при рассмотрении двухслойной гетероструктуры, с резко выраженным эпитаксиальным слоем и малой переходной областью. Однако, строго говоря, возможны ситуации, когда указанная "синфазность" изменения параметра решетки и электронной плотности не имеет места.

Дальнейший вывод проведен в [43], поэтому приведем лишь окончательный результат.

Система (5.70) может быть представлена в виде матричного уравнения:

$$\frac{d\mathbf{E}}{dz} = (\mathbf{A} + X(z)\mathbf{B})\mathbf{E}, \quad (5.71)$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} i\kappa & i2f\chi_{\bar{H}}\eta\frac{\gamma_H}{\gamma_0} \\ i2f\chi_H\eta & -i\kappa \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -if\chi_0\alpha_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right) & i2f\chi_{\bar{H}}\eta\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\alpha_{\bar{H}} \\ i2f\chi_H\eta\alpha_H & if\chi_0\alpha_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)-i2\xi \end{pmatrix}.$$

Из (5.71) с помощью линейного преобразования получим:

$$\frac{d\mathbf{V}}{dz} = (\tilde{\mathbf{A}} + X(z)\tilde{\mathbf{B}})\mathbf{V}. \quad (5.72)$$

где

$$\tilde{\mathbf{A}} = i \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & -a_{11} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -i2\tilde{\xi} \end{pmatrix},$$

$$\tilde{\xi} = \left(\left(\xi - f\chi_0\alpha_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right) \right)^2 + 4f^2\eta^2\chi_H\chi_{\bar{H}}\alpha_H\alpha_{\bar{H}}\frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right)^{1/2} =$$

$$= \left(\xi_0^2 + 4f^2\eta^2\chi_H\chi_{\bar{H}}\alpha_H\alpha_{\bar{H}}\frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right)^{1/2}, \quad (5.73)$$

a_{ij} – постоянные коэффициенты, явный вид которых мы не приводим ввиду их громоздкости. Отметим лишь, что матрицы $\tilde{\mathbf{A}}$ и \mathbf{A} подобны. Легко видеть, что уравнение (5.72) совпадает по форме с уравнением (5.71).

Таким образом, четыре параметра: ξ , α_0 , α_H и $\alpha_{\bar{H}}$ не являются независимыми по отношению к динамическому рассеянию, а образуют вместе одну величину $\tilde{\xi}$. Эта величина в частном случае чисто деформационной гетероструктуры сводится к параметру когерентности ξ [17] и поэтому ее естественно назвать обобщенным параметром когерентности.

Полученный результат означает, что решение дифракционной задачи [5,7] на кристалле с переходным слоем (5.69) остается в силе и в общем случае, если в соответствующих выражениях сделать формальную замену $\xi \rightarrow \tilde{\xi}$ и $\mathbf{A} \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}$. Вместе с тем необходимо отметить известную условность указанного соответствия, поскольку величины ξ и $\alpha_0, \alpha_H, \alpha_{\bar{H}}$ имеют разный физический смысл и по-разному влияют на распространение рентгеновской волны.

Согласно (5.73), в гетероструктуре с переменной электронной плотностью и деформацией существует принципиальная возможность обращения

величины $\tilde{\xi}$ в ноль. Это означает, что в данном случае гетероструктура по отношению к рассеянию рентгеновской волны ведет себя как идеальный кристалл с некоторой модифицированной электронной плотностью, поскольку матрица, связанная с эпитаксиальным слоем, оказывается равной нулю.

Кроме того, комбинация параметров $\alpha_0, \alpha_H, \alpha_{\bar{H}}$, входящая в (5.73), играет роль своеобразной "деформации" в кристалле. Особенно ярко это проявляется в случае гетероструктуры с полностью согласованными слоями, то есть без деформации. Как известно, такие структуры создаются на основе изопериодических четырехкомпонентных твердых растворов, а значит, электронная плотность оказывается модулированной. Интуитивные представления о характере рассеяния в такой гетероструктуре на первый взгляд приводят к выводу о том, что дифракционная картина, слегка искаженная эффектами дополнительного преломления, в целом будет соответствовать идеальному кристаллу. Однако, вид (5.73), говорит о том, что, вообще говоря, такой вывод не соответствует действительности.

Отметим также важное обстоятельство. Все проведенные выше рассуждения и выкладки носят общий характер и никак не связаны с конкретным видом модели $X(z)$. Это означает, что основные выводы остаются в силе и для других структур.

Получим теперь точное решение задачи динамической дифракции для кристалла с переходным слоем.

С помощью метода, изложенного в [43], получим из (5.72) следующую систему:

$$\frac{d\mathbf{U}}{dz} = \mathbf{P}(z)\mathbf{U}, \quad (5.74)$$

где

$$\mathbf{P}(z) = -\frac{\tilde{\xi}X(z)}{\kappa_0} \begin{pmatrix} i(\kappa_0 - a_{11}) & ia_{12} \exp(-i2\kappa_0 z) \\ ia_{21} \exp(i2\kappa_0 z) & i(\kappa_0 + a_{11}) \end{pmatrix}, \quad (5.75)$$

$$\kappa_0 = \sqrt{\kappa^2 + 4f^2 \eta^2 \chi_H \chi_{\bar{H}} \frac{\gamma_H}{\gamma_0}}.$$

С помощью подстановки $r = -\exp(m(z-h))$ решение системы (5.74) для модели (5.69) может быть получено в виде матрицы с компонентами:

$$u_{11} = -\frac{(\kappa_0 + \kappa_1)^2 - \tilde{\xi}^2}{2\tilde{\xi}a_{21}} \exp(-i2\kappa_0 h) \exp(-i\pi 2\kappa_0/m) r^{i(-\kappa_0 - \tilde{\xi} + \kappa_1)/m} \times \quad (5.76a)$$

$$\times F(i(-\kappa_0 - \tilde{\xi} + \kappa_1)/m, 1 + i(\kappa_0 - \tilde{\xi} + \kappa_1)/m, 1 + i2\kappa_1/m; r),$$

$$u_{12} = -\frac{(\kappa_0 - \kappa_1)^2 - \tilde{\xi}^2}{2\tilde{\xi}a_{21}} \exp(-i2\kappa_0 h) \exp(-i\pi 2\kappa_0/m) r^{i(-\kappa_0 - \tilde{\xi} - \kappa_1)/m} \times \quad (5.76b)$$

$$\times F(i(-\kappa_0 - \tilde{\xi} - \kappa_1)/m, 1 + i(\kappa_0 - \tilde{\xi} - \kappa_1)/m, 1 - i2\kappa_1/m; r),$$

$$u_{21} = r^{i(\kappa_0 - \tilde{\xi} + \kappa_1)/m} \times \quad (5.76\text{в})$$

$$\times F(i(\kappa_0 - \tilde{\xi} + \kappa_1)/m, 1 + i(-\kappa_0 - \tilde{\xi} + \kappa_1)/m, 1 + i2\kappa_1/m; r),$$

$$u_{22} = r^{i(\kappa_0 - \tilde{\xi} - \kappa_1)/m} \times \quad (5.76\text{г})$$

$$\times F(i(\kappa_0 - \tilde{\xi} - \kappa_1)/m, 1 + i(-\kappa_0 - \tilde{\xi} - \kappa_1)/m, 1 - i2\kappa_1/m; r).$$

$$\kappa_1^2 = \kappa_0^2 + \tilde{\xi}^2 + 2\kappa_0\tilde{\xi} - 4f^2\eta^2\chi_H\chi_{\bar{H}} \frac{\gamma_H}{\gamma_0} (\alpha_H - \alpha_{\bar{H}}). \quad (5.77)$$

Здесь, $F(a, b, c; r)$ – гипергеометрическая функция.

Дальнейшие процедуры включают в себя построение волнового поля в кристалле и вывод коэффициента отражения. Эти задачи сводятся к перемножению соответствующих преобразующих матриц и получению матрицы распространения, связывающей поля на противоположных границах кристалла. Коэффициент отражения при этом получается как отношение компонент интегральной матрицы.

Ограничимся теперь случаем полубесконечного кристалла без учета поглощения, тогда амплитудный коэффициент отражения может быть представлен в виде:

$$R = \frac{R_S + R_L}{1 + R_L/R_S^*}, \quad (5.78)$$

$$R_S = \frac{2f\eta|\chi_H|(\xi_0 + \tilde{\xi} + (\kappa_0 - |\kappa|)\alpha_H)}{(\kappa_0 + |\kappa|)(\xi_0 + \tilde{\xi}) - 2f\eta|\chi_H|\alpha_{\bar{H}}}, \quad (5.79)$$

$$R_S^* = \frac{2f\eta|\chi_{\bar{H}}|}{\kappa_0 + |\kappa|}, \quad (5.80)$$

где R_S, R_L – коэффициенты отражения от подложки и пленки соответственно. Величина R_S^* представляет собой отношение амплитуд дифрагированной и прошедшей волн на бесконечности и может быть интерпретирована как коэффициент отражения при дифракции с обратной стороны подложки.

Для centrosymmetric кристалла, когда выполняется условие $\chi_H = \chi_{\bar{H}}, \alpha_H = \alpha_{\bar{H}}$, формула (5.79) переходит в классическое выражение для идеального кристалла:

$$R_S = \frac{2f\eta|\chi_H|}{\kappa_0 + |\kappa|}.$$

Это означает, что в этом случае амплитуда отраженной от подложки волны не испытывает влияния модуляции электронной плотности. Интересно отметить, что, как видно из (5.80), для R_S^* это утверждение имеет место для кристалла с произвольной симметрией, что вполне согласуется с указанной выше интерпретацией – волна, распространяющаяся с обратной стороны подложки, не "чувствует" пленку.

Мы не будем приводить общий вид для R_L , а рассмотрим наиболее ин-

интересный частный случай резкого градиента деформации ($\varepsilon = 1/m \ll 1$) в переходной области, как наиболее отвечающий реальным гетероструктурам. Для этого необходимо получить эффективные аппроксимации для гипергеометрических функций. Воспользуемся методом, впервые использованным в задаче динамической дифракции в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации [28,31]. Метод [31] позволяет получать так называемые равномерно пригодные разложения гипергеометрических функций. Вкратце он сводится к следующему. Разложение гипергеометрической функции по малому параметру ε ищется в виде решения соответствующего дифференциального уравнения. При этом применяется обобщенный вариант одного из методов теории возмущений – метода многих масштабов, который позволяет строить единое приближение искомой функции в заданном интервале значений аргумента.

Для интересующих нас гипергеометрических функций применение указанного метода приводит к следующему результату:

$$F(\varepsilon a, 1 + \varepsilon b, 1 + \varepsilon c; r) \sim (1 - r)^{-\varepsilon a}, \quad \varepsilon \ll 1. \quad (5.81)$$

В зависимости от величины hm формула (5.81) приобретает различный вид, соответственно, получаются различные выражения для R_L . При этом структура коэффициента отражения такова, что ширина переходного слоя $\varepsilon = 1/m$ входит лишь в гипергеометрические функции. Поэтому формула (5.81) позволяет оценить область влияния размытия интерфейса на волновое поле: $z \sim h \pm \varepsilon$. Эта оценка дает основание предполагать, что переходная область может заметно влиять на коэффициент отражения, если толщина пленки сопоставима с шириной интерфейса: $hm \sim 1$.

Это предположение оправдывается при выводе R_L для обычного случая, когда $hm \gg 1$. Результат имеет вид:

$$R_I = \exp(i4\pi k_0 \varepsilon) \times \frac{4\tilde{\xi} f \chi_H \eta (\exp(-ik_1 h) - \exp(ik_1 h))}{((k_0 + k_1)^2 - \tilde{\xi}^2) \exp(-ik_1 h) - ((k_0 - k_1)^2 - \tilde{\xi}^2) \exp(ik_1 h)}. \quad (5.82)$$

Отсюда видно, что размытость переходной области может слабо проявиться лишь в пределах максимума подложки, когда k_0 – действительная величина. Максимум пленки формируется, как и следовало ожидать, вблизи $k = -\xi_0$ и имеет угловую ширину $\Delta\theta \sim |\chi_H| (1 + \alpha_H \alpha_{\bar{H}})^{1/2}$, согласно дисперсионному соотношению (5.77).

Следует отметить, что, строго говоря, выражения (5.79), (5.80) и (5.82) не могут рассматриваться отдельно, а только в виде (5.78). Это связано с тем, что, во-первых, необходимо учитывать эффекты перераспределения между пленкой и подложкой (знаменатель формулы (5.78)), и, во-вторых, учитывать вклад интерференционных членов вида $R_S R_L$ в интенсивность рассеянной волны. Однако, если рассматривать гетероструктуру со значительным рассогласованием слоя и подложки ($\tilde{\xi} \geq 1$), то указанные факторы носят характер малых поправок.

ГЛАВА 6. РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В НАНО-ПОРИСТОМ КРЕМНИИ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ ФОСФОРА

В настоящей главе изложены результаты работ, в которых изучены возможности исследования методами рентгеновской дифракции в сочетании с атомно-силовой микроскопией структурных изменений в поверхностных слоях кремния, подвергнутого разным видам технологических обработок: ионной имплантации, химическому травлению, а также их совместному действию. Выявлено функциональное и количественное различие после разных этапов обработки толщинных зависимостей деформации, значений максимальной деформации, степени поврежденности и области протяженности упругих деформаций. Описано существенное изменение спектра фотолюминесценции в пористом слое после ионной имплантации в процессе естественного старения.

§1. Введение

Пористый кремний представляет собой монокристалл *c*-Si, в котором с помощью химического травления можно образовать огромное количество мелких пор. Плотность пор в некоторых образцах является настолько большой, что происходит их перекрытие, и непротравленные участки кремния приобретают вид кораллоподобной системы нитей переменного сечения [1-6].

Главным стимулом интенсивного изучения свойств пористого кремния является перспектива его практического использования для создания кремниевых светоизлучающих приборов. Однако на пути реализации подобных задач возникают серьезные проблемы, связанные с нестабильностью структурных, оптических, люминесцентных и других характеристик пористого кремния. Возможное решение такой проблемы прогнозируется в использовании ионной имплантации и определенных режимов термообработки [7-10]. Однако, образованные в результате ионной имплантации и отжига постимплантационные дефекты не дают возможности использовать в полном объеме электрические и структурные характеристики аморфизированного приповерхностного слоя материала. Наличие локальных напряжений в переходной зоне гетерограницы $Si_{\text{пор}}/Si_{\text{кр}}$ часто приводит к смещению полос поглощения [8].

§2. Объект исследований

Для определения структурных изменений, возникающих при разных технологических обработках (111) поверхности, использован образец высококачественного кремния, выращенного методом Чохральского.

Образец подвергался химическому травлению, полировке. Вследствие диффузии фосфора из $POCl_3$ создан эмиттер. На тыльной поверхности создан контакт с Ag/Al, а также проведена химическая очистка поверхности.

Согласно обозначениям рис. 6.1 на поверхности образца создано четыре области: первая – исходная, вторая – подвержена ионной имплантации, третья и

четвертая – химическому травлению на протяжении 40 секунд в растворе HF, HNO₃. В этих областях сформирована пористая структура, кроме того, третья область дополнительно подвергнута еще и имплантации ионами фосфора. Энергия имплантированных ионов – $E=180$ кэВ, доза $Q=8 \cdot 10^{14}$ ион/см². Имплантация проводилась таким образом, чтобы исключить эффект каналирования. При таких дозах и энергиях имплантируемых ионов приповерхностный слой разрушается с образованием многочисленных разупорядоченных областей, в которых концентрируются значительные плотности точечных дефектов, приводящих к изменению оптических свойств [8-10].

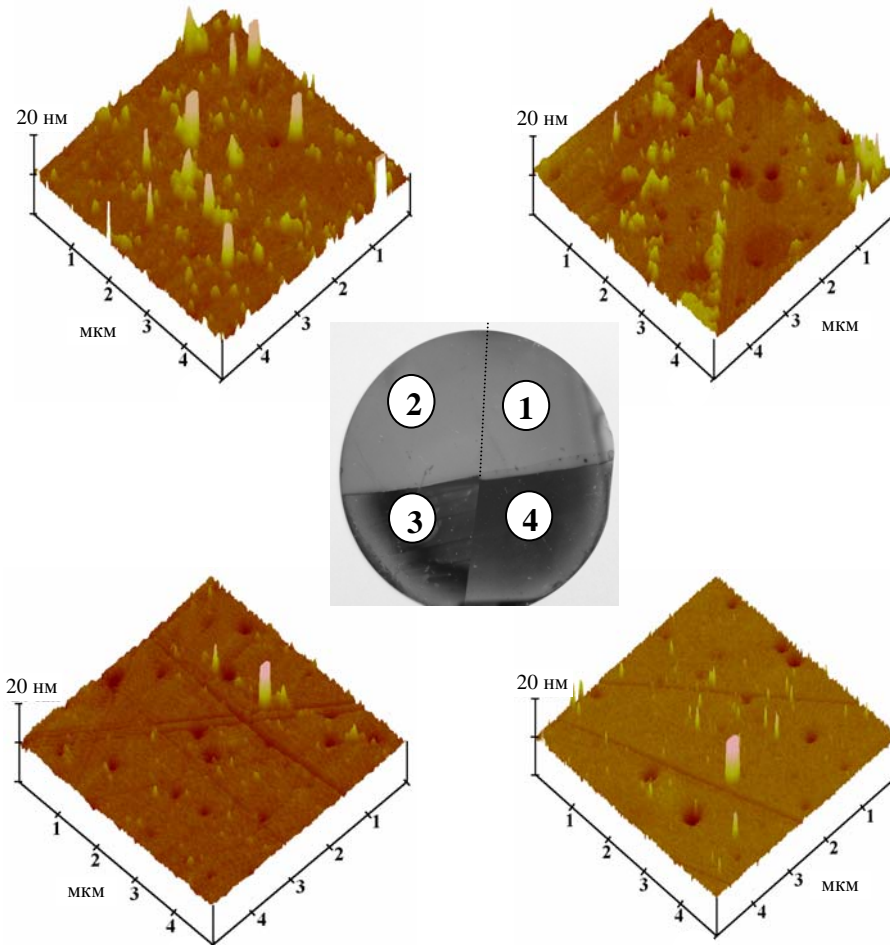


Рис. 6.1. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) областей №1-4. Область №1 – часть исходного образца, №2 – имплантирована ионами фосфора, №3 – химическое травление (пористая часть)+имплантация ионами фосфора, №4 – химическое травление (пористая часть)

§3. Экспериментальная часть

Для проведения рентгено топографических исследований использованы симметричная, асимметричная и косонесимметричная схемы дифракции на отражение для (111), (333), (311) рефлексов CuK_α -излучения.

Измерения кривых качания проводилось на трёхосевом дифрактометре. На первых двух осях дифрактометра размещены два германиевых монохроматора, а на третьей оси – исследуемый образец кремния. При симметричном (333) отражении в взаимодисперсионной схеме монохроматоры практически

полностью погашают π -поляризацию характеристического $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучения. Высокo коллимированный падающий луч после монохроматоров имеет следующие спектральные и пространственные характеристики: $\Delta\lambda/\lambda \approx 5 \cdot 10^{-7}$ и $\delta\theta = 2''$.

§4. Теоретическая часть

Для моделирования рентгеновской дифракции в кристаллах с поврежденными поверхностными слоями используется кинематическая и динамическая теории. Динамическая теория рассеяния, в отличие от кинематической, учитывает эффекты многократного перерассеяния, и поэтому лишена ограничений на толщину слоев кристалла. Она эффективно используется для анализа кривых качания от кристаллов, подвергнутых различным внешним воздействиям [11, 14-15].

Отметим, что в косонесимметричном случае дифракции для определенных плоскостей отражения, поворотом кристалла вокруг нормали к входной поверхности можно постепенно уменьшать экстинкционную длину более, чем на два порядка [16]. По величине она может быть меньше или соизмерима с эффективной толщиной поврежденного поверхностного слоя.

Путем функционального задания профиля деформаций ($\varepsilon(z) = \Delta d(z)/d$) и нарушений поверхностного слоя $W(z)$ ($W = 1 - e^{-L}$, где L – показатель фактора Дебая-Валлера) в рамках кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей рассчитывались кривые качания до удовлетворительного соответствия с экспериментальными. Функциональные зависимости $\varepsilon(z)$ и $W(z)$ задавались в виде набора экспоненциальных и синусоидальных пиков разной высоты и ширины, размещенных на определенных глубинах. При этом, ордината каждой точки кривой качания является функцией всего профиля деформации $\varepsilon(z)$, который в первом приближении определяется путем решения обратной задачи рентгеновской дифракции по экспериментальной кривой качания [14, 17].

В рамках кинематической теории амплитуда отражения A_N рентгеновских лучей от N слоев является суммой амплитуд отражения от каждого слоя j с учетом разности фаз, которая обусловлена $\varepsilon_j(z)$ и W_j , и представляется следующим образом [17]:

$$A_N = |q| \sum_{j=1}^N e^{-L_j} \exp\{i[(n-1)\delta_j/2 + \Phi_j]\} \frac{\sin(n\delta/2)}{\sin(\delta/2)}, \quad (6.1)$$

где $q = i \frac{d\lambda}{V \sin \theta_B} \frac{e^2}{mc^2} |F_{hkl}^0|$ – амплитуда волны от одной кристаллографической плоскости совершенного кристалла в случае, когда амплитуда падающей волны равна 1, V – объем элементарной ячейки, δ_j – фазовый сдвиг между соседними кристаллографическими плоскостями в слое j :

$$\delta_j = \frac{4\pi}{\lambda} d \sin \theta_B \Delta\theta + 2\pi\varepsilon_j, \quad (6.2)$$

Φ_j – суммарный фазовый сдвиг после прохождения $j-1$ слоев:

$$\Phi_j = \sum_{i=1}^{j-1} n_i \delta_i, \quad \Phi_1=0. \quad (6.3)$$

Показатель фактора Дебая-Валлера L_j задается соотношением:

$$L_j = \frac{8\pi^2}{\lambda^2} \sin^2 \theta_B U_j^2, \quad (6.4)$$

где λ – длина волны излучения, \bar{U}_j^2 – среднеквадратичное смещение узлов решетки в слое j , обусловленное дефектами структуры. Нарушения $W_j=1-e^{-L_j}$ в слое j для совершенного кристалла равны нулю и единице в случае полностью неупорядоченного состояния.

Для удовлетворительного соответствия теоретической и экспериментальной кривых качания в случае решения прямой задачи использован метод минимизации неотрицательной невязки [13]:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_{10}, \Delta\theta) = \sum_{k=1}^k \rho_k \left\{ \frac{I_{\text{exp}}(\Delta\theta_k) - I(x_1, x_2, \dots, x_{10}, \Delta\theta)}{I_{\text{exp}}(\Delta\theta_k)} \right\}^2, \quad (6.5)$$

где $\rho_k(\Delta\theta_k) = 1 - (1 + (\Delta\theta_k - \theta_0)^2 W)^{-1}$ – весовая функция, θ_k – абсцисса k -ой точки кривой качания, θ_0 – абсцисса основного максимума, который соответствует рассеянию от объема кристалла, W – величина, обратная полуширине кривой качания для идеального кристалла.

На первом этапе оптимизации в каждом тонком слое, на которые разбивается весь профиль деформации и нарушений, определялись значения $(\Delta d/d)_j$ и W_j . Далее полученные значения изменялись вблизи исходных величин до достижения максимального совпадения (<3%) экспериментальных и теоретических кривых качания (рис. 6.2-6.4). При этом, обработка экспериментальных данных для выбранной модели деформации считалась удовлетворительной, если она обеспечивала величину F в интервале $\chi^2 = 1 \pm \sqrt{2/n_f}$, где $n_f = n - n_p$ – число степеней свободы при подгонке, n – число экспериментальных точек, n_p – число переменных параметров [17].

Следует отметить, что компьютерная обработка рентгеновских кривых качания с процедурой подгонки и минимизации функции невязки без детального анализа степени влияния различных параметров на форму кривых качания и точности их определения не дает гарантии однозначности полученных результатов.

§5. Результаты

5.1. Рентгенодифракционные исследования

Количественные оценки структурных изменений в отмеченных областях определялись из анализа кривых качания для (111) и (333) отражений $\text{CuK}_{\alpha 1}$ – излучения (рис. 6.2-6.4).

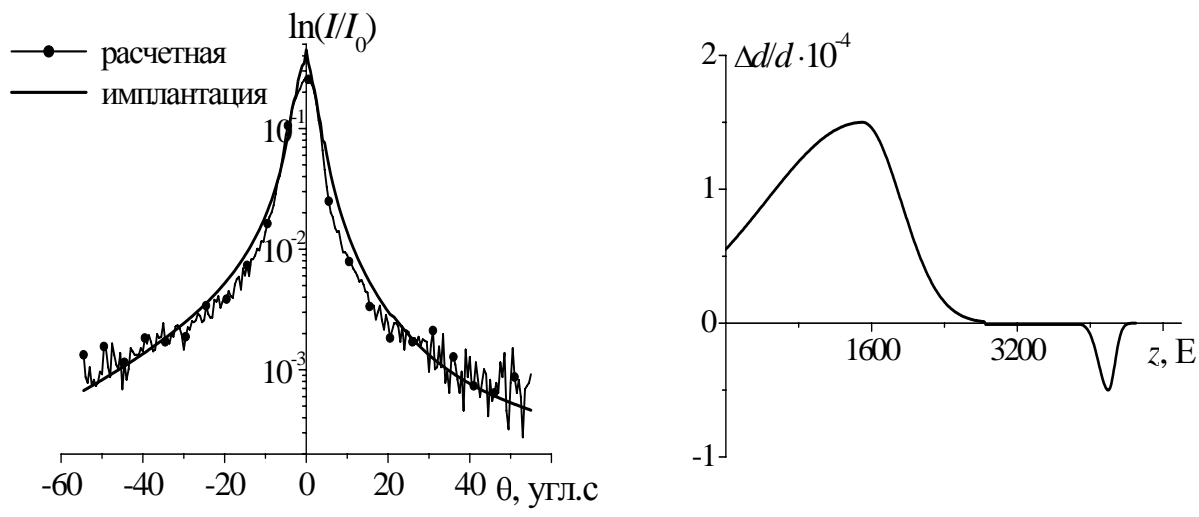


Рис. 6.2. Экспериментальная и рассчитанная кривые качания. Отражение $(333) \text{Cu}K_\alpha$ – излучения. Справа – профиль $\Delta d/d(z)$ для области №1

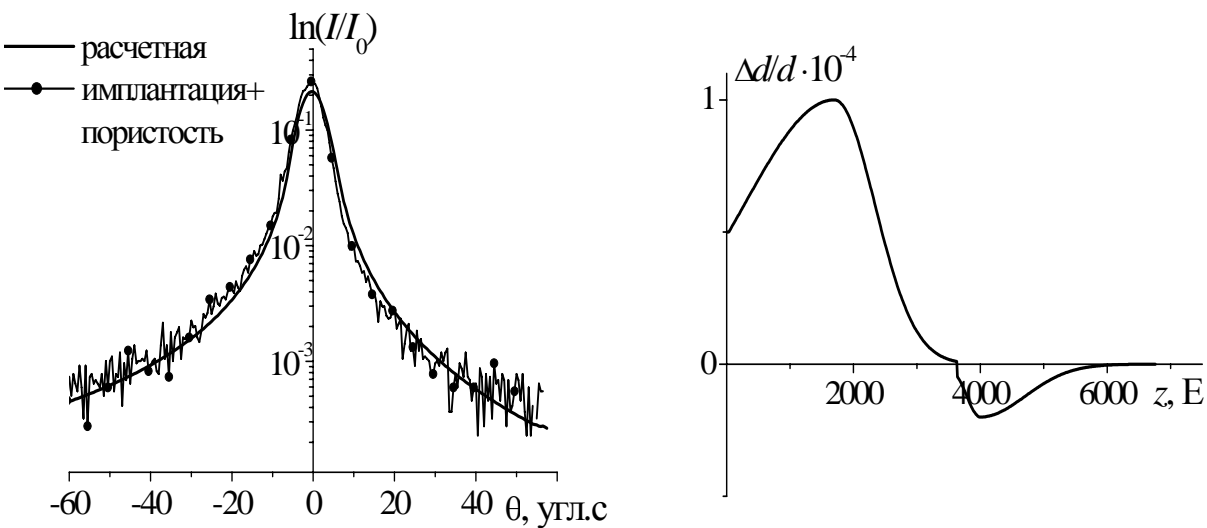


Рис. 6.3. Экспериментальная и рассчитанная кривые качания. Отражение $(333) \text{Cu}K_\alpha$ – излучения. Справа – профиль $\Delta d/d(z)$ для области №3

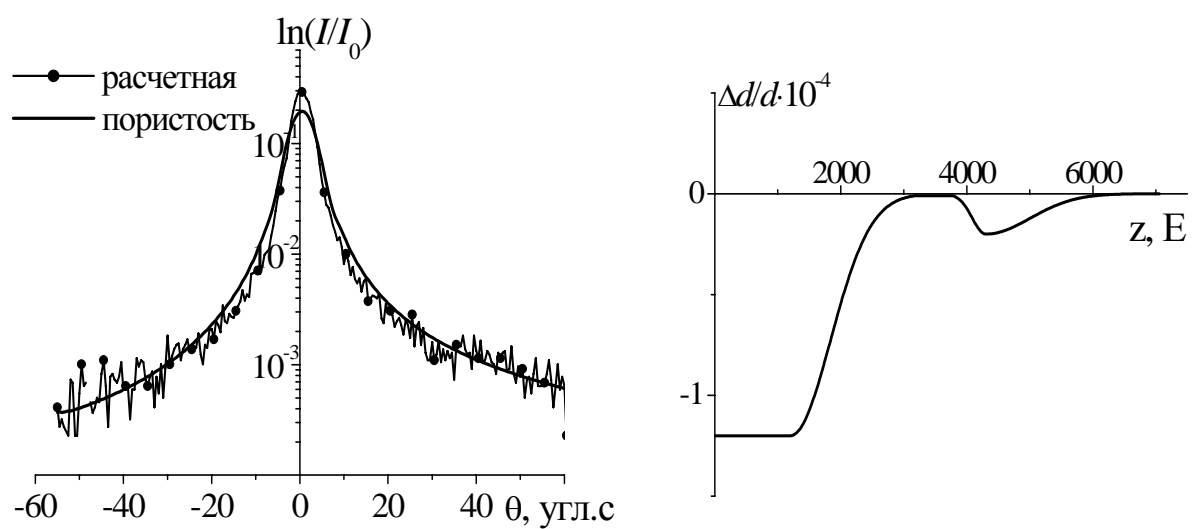


Рис. 6.4. Экспериментальная и рассчитанная кривые качания. Отражение $(333) \text{Cu}K_\alpha$ – излучения. Справа – профиль $\Delta d/d(z)$ для области №4

Анализ кривых дифракционного отражения рентгеновских лучей на рис. 6.2-6.4 показывает, что отмеченные выше воздействия на поверхность образца приводят к изменению формы кривой качания – особенно ее "хвостов" по отношению к исходной части образца. Имеет место также незначительное увеличение полуширины кривой качания и максимального значения интенсивности. Вид кривой качания свидетельствует о наличии разных по характеру, протяженности и степени повреждения приповерхностных слоев в отмеченных частях образца.

Для отмеченных областей характерным является наличие протяженных знакопеременных деформаций ε в направлении, перпендикулярном поверхности, величина которых для соответствующих областей равна:

№2 – протяженность деформаций L по толщине до 0,44 мкм, $\varepsilon_{\max}^+ \sim 1,5 \cdot 10^{-4}$ при $z_{\max}^+ = 0,15$ мкм, максимум отрицательных деформаций $\varepsilon_{\max}^- \sim -0,5 \cdot 10^{-4}$ при $z_{\max}^- = 0,42$ мкм;

№3 – $L \sim 0,6$ мкм, $\varepsilon_{\max}^+ \sim 1 \cdot 10^{-4}$ при $z_{\max}^+ = 0,17$ мкм, $\varepsilon_{\max}^- \sim -0,2 \cdot 10^{-4}$ при $z_{\max}^- = 0,4$ мкм.

№4, $L \sim 0,58$ мкм, $\varepsilon_{\max}^- \sim -1,2 \cdot 10^{-4}$ при $z_{\max}^- = 0,12$ мкм с последующим спадом по экспоненциальному закону до 0,34 мкм, максимум отрицательных деформаций $\varepsilon_{\max}^- \sim -0,2 \cdot 10^{-4}$ при $z_{\max}^- = 0,43$ мкм.

Отметим, что в реальное значение деформации могут вносить вклад также и иные дефекты структуры, например, тетраэдрические дефекты упаковки вакансионного типа, дислокационные петли междуузельного типа [14], а также сжатие решетки вследствие выпадения различного рода выделений, например SiC.

По данным атомно-силовой микроскопии (рис. 6.1) минимальные размеры сечений кремниевых нитей и их изолированных участков (кластеров) после химического травления (область №4) составляют несколько нанометров. Поэтому, повреждения поверхности в целом незначительны как по изменению межплоскостного расстояния так и по протяженности. Это в целом подтверждается "поведением хвостов" экспериментальных кривых качания (рис. 6.3 и 6.4).

Основной вклад в прирост диффузной составляющей рассеяния на "хвостах" кривой качания вносит, по-видимому, изменение плотности приповерхностного слоя (степень пористости $\sim 40\%$) и рельеф поверхности.

Как следовало ожидать наибольшее значение $R_a = 0,398$ нм (среднеарифметическое отклонение высот от средней плоскости рельефа поверхности) характерно для области №3. Для областей №2 и №4 значения R_a составляют соответственно 0,288 нм, 0,303 нм. Исходная область кристалла характеризуется наименьшим значением $R_a = 0,17$ нм.

5.2. Фотолюминесценция

Исследование структурных особенностей областей №3 и №4 дополняет получение спектров фотолюминесценции (рис. 6.5) с интервалом в 24 месяца. Под действием возбуждающего люминесценцию света полосы люминесценции сдвигаются в красную область (рис. 6.5). При этом спектральное смещение осуществляется как перераспределение интенсивности между разными полосами. Согласно работе [7] наличие двух компонент в спектре отвечают двум группам в распределении кремниевых нитей по диаметру. Иными словами, имеется связь между энергией (длиной волны) рекомбинационного излучения и структурными особенностями строения пористой части образца. Поскольку длинноволновая компонента спектра релаксирует медленнее, то ее относительная интенсивность в спектре должна возрастать, что и подтверждается экспериментальными данными.

Вследствие старения пористого кремния наблюдается уширение основной полосы (~30%) при незначительном увеличении (на 2-3%) высоты максимума. Для имплантированной фосфором пористой области выявлено смещение интенсивности в длинноволновую область с появлением пика характерного для пористого кремния.

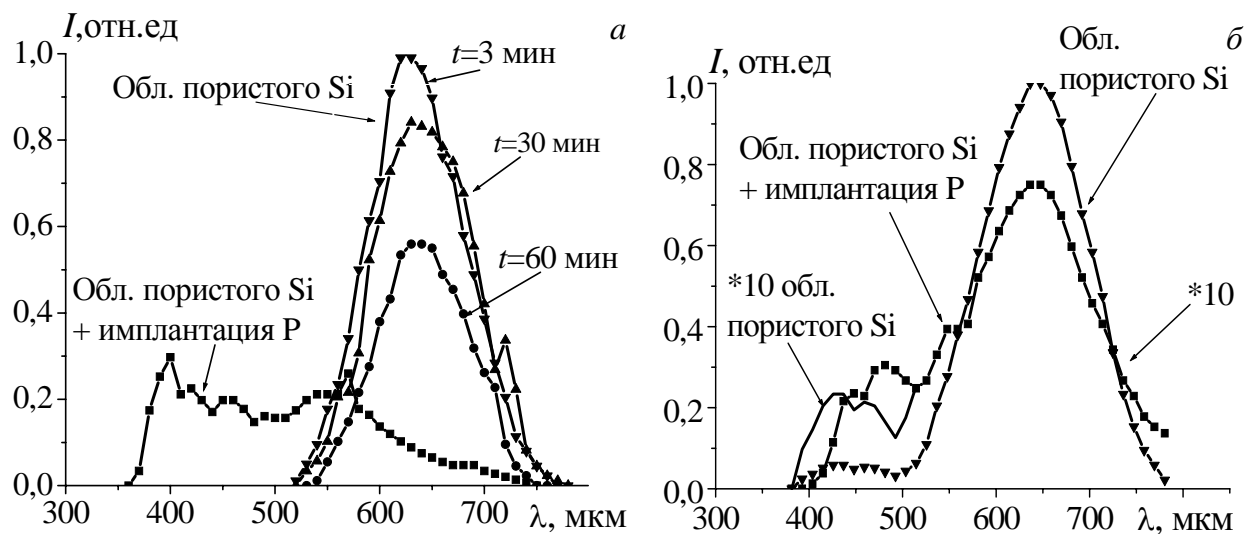


Рис. 6.5. Спектры фотолюминесценции (ФЛ) от разных областей исследуемого образца: свежеприготовленного образца (а), через 24 месяца (б)

На полученных спектрах (рис. 6.5,б) наблюдается также эффект "усталости" люминесценции (произвольное уменьшение интенсивности фотолюминесценции при неизменных условиях возбуждения). На протяжении 60 мин интенсивность уменьшилась больше чем в два раза, и спектральный сдвиг полосы люминесцентного свечения (на 25-35 мкм) при продолжительной экспозиции образца под возбуждающим люминесценцию световым пучком. Спектральное положение видимой полосы люминесценции пористого кремния в большинстве существующих на данное время моделей связывается с величиной поперечного сечения квантоворазмерных кремниевых нитей [1-7]. Причиной "усталости" фотолюминесценции может быть изменение с течени-

ем времени концентрации центров безлучеиспускающей рекомбинации. Одна и та же концентрация безлучеиспускающих центров приводит к разной вероятности процесса рекомбинации для разных компонент полосы. При этом временное и спектральное положения компонент полосы, по-видимому, определяются структурными особенностями пористого слоя, а именно, наличием адсорбированных молекул и разнообразных поверхностных дефектов, создающих случайный потенциал, влияние которого на дрейф носителей зависит от поперечных размеров квантовых нитей.

§6. Выводы

1. Методами рентгеновской дифрактометрии выявлена количественная разница в толщинных зависимостях деформации, значениях максимальной деформации, степени поврежденности и протяженности областей упругих деформаций в частях образца, подверженных имплантации ионов фосфора, а также химическому травлению.

2. Для отмеченных областей характерным является наличие значительных знакопеременных деформаций ε в направлении, перпендикулярном поверхности, величина которых для соответствующих областей равна: №2 $\sim 1,5 \cdot 10^{-4}$, №3 $\sim 1,0 \cdot 10^{-4}$, №4 $\sim -1,2 \cdot 10^{-4}$. Протяженность деформаций по толщине до 300 нм, максимум отрицательных деформаций находится на глубине ~ 400 нм.

Высота R_a характерного рельефа неровностей на поверхности в областях №1-№4 порядка: 0,17 нм, 0,288 нм, 0,398 нм, 0,303 нм соответственно.

3. Пористый слой, полученный на модифицированной имплантацией ионами фосфора поверхности кремниевой пластины, характеризуется существенно другим спектром фотолюминесценции по сравнению со спектром от обычного пористого слоя. В условиях естественного старения на протяжении 24 месяцев наблюдается изменение относительной интенсивности спектра, а также смещение части спектра в длинноволновую область.

ГЛАВА 7. РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ИМПЛАНТАЦИИ КРЕМНИЯ ИОНАМИ ФОСФОРА

Для фотогальванического преобразования энергии спектра аморфный кремний в инфракрасной области солнечного спектра имеет намного больший коэффициент поглощения ($\beta \geq 8 \text{ см}^{-2}$), чем монокристаллический кремний [1-6]. Однако он обладает намного худшими электрическими свойствами. При совмещении аморфной и кристаллической фаз в одном оптоэлектронном устройстве видно новое, перспективное решение повышения эффективности преобразования солнечной энергии [7,8]. Принципиально слабым местом такого совмещения является несогласование скоростей генерации и рекомбинации носителей при введении аморфной фазы. Возможное решение такой проблемы состоит в использовании свойств границ раздела, создаваемой имплантированными ионами и определенными режимами термообработки [8]. Однако, образованные в результате имплантации и последующего отжига постимплантационные дефекты пока не дают возможности использовать в полном объеме электрические и структурные характеристики кремния. Например, наличие локальных напряжений в переходном слое гетерограницы $\text{Si}_{\text{ам}}/\text{Si}_{\text{кр}}$ часто приводит к смещению полос поглощения [7].

В данном разделе представлены рентгенодифракционные исследования напряжений, которые возникают в переходных слоях границ раздела при формировании так называемой δ -BSF структуры (δ -тонкого подповерхностного слоя кремния, в который имплантированы ионы фосфора). Имплантация проводилась таким образом, чтобы исключить эффекты каналирования. Энергия имплантированных ионов $E=180 \text{ кэВ}$, доза $Q \sim 10^{15} \text{ ион/см}^2$. При таких дозах и энергиях имплантированных ионов кристаллическая структура разрушается с образованием многих разупорядоченных областей, в которых концентрируются значительные плотности точечных дефектов. Это приводит к изменению оптических свойств поверхностных слоев кремния [7-9].

§1. Интегральные параметры структурного совершенства имплантированных ионами фосфора кристаллов Si

Объектом исследований в данном параграфе являются монокристаллы кремния после ионной имплантации фосфором: энергия облучения – 180 КэВ, доза – $8 \cdot 10^{14} \text{ ион/см}^2$. Все образцы после финишной химико-механической обработки имели вид плоскопараллельных пластин с ориентацией рабочей поверхности (100) ($\rho \sim 2-2,5 \text{ Ом/см}$, $d=250 \text{ мкм}$). Угловая разориентация между входной и кристаллографической (100) плоскостями в направлении базового среза [110] не превышала 50 угл. мин. Для данных слоев характерно наличие сложной формы изгиба атомных плоскостей. Радиус изгиба пластин, измеренный с помощью двухкристального спектрометра, на отдельных участках составлял от 200 до 800 м.

При взаимодействии ускоренных ионов с кристаллом, кроме явления внутренней ионизации и проникновения атома в кристалл, возникают также и радиационные дефекты. Ядерные столкновения сопровождаются большими потерями энергии иона и приводят к изменению направления его движения, что вызывает нарушение структуры мишени. На пути проникновения иона образуются кластеры, которые представляют собой области с высокой концентрацией точечных дефектов. Размеры кластеров могут достигать 10 нм и больше [4-6]. При большой плотности потока имплантированных ионов кластеры сливаются, создавая при этом сплошной слой. Относительно стойкие комплексы дефектов структуры, образованные в результате взаимодействия первичных точечных дефектов между собой и с другими примесями, а также дислокационные петли, возникающие в областях сильных смещений или в областях импульсного перегрева вблизи остановки иона, осуществляют достаточно сильное влияние на свойства облученного вещества [7-9]. На данное время удается подбирать условия ионного проникновения и отжига дефектов, таким образом, чтоб значительная часть имплантированных атомов примесей была электрически активной [8].

Для практического применения ионной имплантации очень важно иметь достаточно точную информацию о наборе дефектов и степени аморфизации в кристалле как непосредственно после ионного проникновения при комнатной температуре, так и после отжига. Поэтому для выявления напряжений, возникающих в объеме и в поверхностных слоях кремния после имплантации и последующего отжига, были использованы различные рентгеновские дифракционные методы.

Для анализа структурных изменений в поверхностных слоях кристалла использованы рентгеновские методы: однокристалльная топография и двухкристалльный спектрометр ($n, -n$) с установкой исследуемого кристалла в симметричной и косонесимметричной геометрии дифракции на отражение [31,32,40]; метод интегральных характеристик [29, 36-39]; численные методы решения обратных задач рентгеновской дифрактометрии [27,30,33,34].

Для рентгено топографических исследований выбраны отражения: симметричное (400) CuK_α - и "косонесимметричное" (331) CoK_α -излучения. В последнем случае углы дифракции θ и разориентации ψ между входной (001) и отражающей плоскостями различаются незначительно ($\theta - \psi \approx -1^\circ$). Изменением угла азимутального сканирования ϕ можно подобрать такие случаи, ко-

гда экстинкционная длина $\Lambda = \frac{\lambda}{|\chi_h|} \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}$ (где χ_h – коэффициенты Фурье-поляризации, λ – длина волны, $\gamma_0 = \sin \phi_0$, ϕ_0 – угол падения рентгеновского луча, $\gamma_h = \sin \phi_h$, ϕ_h – угол выхода рентгеновского луча с кристалла) будет совпадать с толщиной поврежденного ионами слоя.

На топограммах от исходного кристалла (рис. 7.1) при углах падения рентгеновского луча, близких к углам полного внешнего отражения ($\theta_{\text{кр}}$), наблюдаются различного типа механические повреждения поверхности: мик-

роцарапины, впадины и выступы, а также завалы краев пластины. Высоты отдельных бугорков – микродефектов на поверхности пластины – оцениваются достаточно просто из соотношения $l = b / \operatorname{tg} \phi_0$, где b – длина их тени, и находятся в пределах 0,1-3 мкм. Механические повреждения поверхности при определенных условиях могут стать дополнительными источниками напряжений в имплантированных слоях.

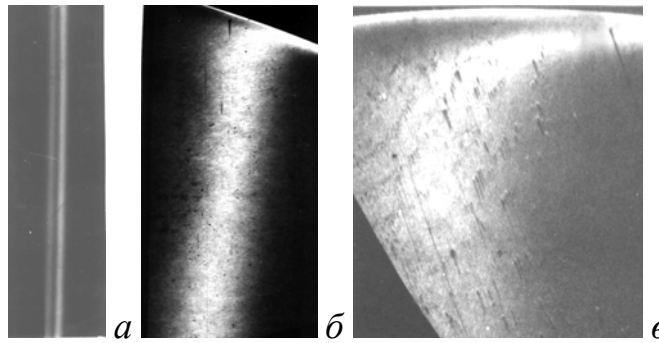


Рис. 7.1. Рентгеновские топограммы исходной (эталонной) пластины кремния. Отражение: симметричное (004) CuK_α (а); косонесимметричное (331) CoK_α , $\Lambda=0,54$ мкм (б), $\Lambda=0,24$ мкм (в). Увеличение $\times 10$

На рис. 7.2 и 7.3 представлены топограммы от облученных ионами образцов, наглядно демонстрирующие структурные изменения в поверхностных слоях облученных кристаллов с образованием активной гетерограницы, которая вносит значительные напряжения в поверхностные слои кристалла. На топограммах от имплантированных образцов (рис. 7.2. и 7.3), в отличие от эталона (рис. 7.1), наблюдается искривление и расширение рефлексов линий дублета (400), (311) в CuK_α и (331) в CoK_α -излучениях. Причиной этому, возможно, является то, что в поверхностном слое возникает градиент периода решетки не только в направлении перпендикулярном к поверхности. При этом, наличие аморфного слоя приводит сначала к частичному (при $\varphi=3^\circ$, $\Lambda=0,7$ мкм, рис. 7.3,а), а потом к полному подавлению ($\varphi=2^\circ$, $\Lambda=0,5$ мкм) рефлексов K_α -дублета (рис. 7.3,б). При такой энергии и дозе ионов возрастает вероятность образования дефектов в следующей последовательности: атомы в междоузлиях, вакансии, пары Френкеля, комплексы и скопления вакансий и междоузельных атомов, дислокационные петли, разупорядоченные области, аморфизированные слои. Когда энергия E бомбардирующего иона превышает так называемую пороговую энергию E_d , достаточную для перемещения атома из узла в междоузельные положения, то возникает дефект типа Френкеля. Если $E \gg E_d$, то возникает каскад атомных смещений. При небольших дозах облучения это число равно QN_d , где Q – доза облучения, N_d – среднее число атомов, которые смещаются одним имплантированным ионом. Для Si $E_d=22$ эВ, т.е. на каждый внедренный ион фосфора с энергией 180 кэВ вокруг его трека образуется в среднем $N_d \sim 4200$ междоузельных атомов кремния и столько же вакансий [6]. По окончании процесса смещения, который длится 10^{-13} - 10^{-14} с, в решетке проходит процесс релаксации напряжений вокруг междоузельных атомов и вакансий. Большая часть энергии при этом вы-

зывает колебание атомов и рассеивается в виде тепла. Часть, которая осталась, сохраняется в виде потенциальной энергии дефекта.

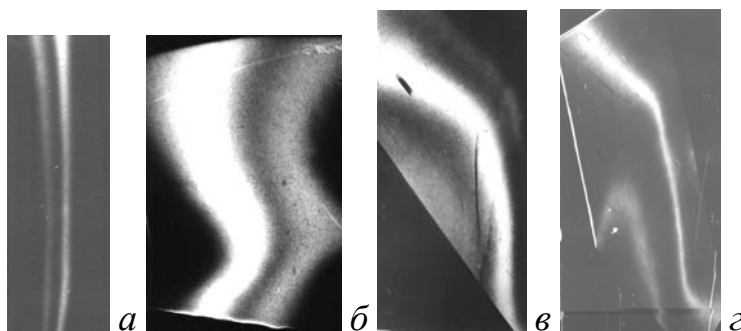


Рис. 7.2. Контрольная пластина Si, облученная ионами (полностью). Входная поверхность (001). Отражение: симметричное (004) (а); асимметричное (311) $\text{CuK}\alpha$ (б); косонесимметричные (331) $\text{CoK}\alpha$, $\Phi_0=5^\circ$, $\Lambda=0,9$ мкм (в), $\Phi_0=2,5^\circ$, $\Lambda=0,6$ мкм (г). $\times 10$

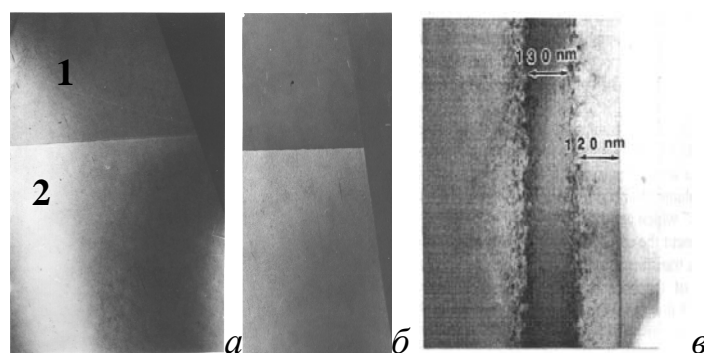


Рис. 7.3. Пластина Si №1. 1 – необлученная, 2 – облученная ионами часть образца. Косонесимметричное отражение: (331) $\text{CoK}\alpha$, $\Lambda=0,74$ мкм (а), $\Lambda=0,5$ мкм (б). $\times 10$. Электронно-растровая микроскопия высокой разрешающей способности. Снимок сечения пластины Si по толщине, имплантированного ионами фосфора до отжига из работы [8] (в)

Отметим, что на рис. 7.2 представлены исследования контрольной пластины, поверхность которой подвергалась полностью имплантации. Минимально возможный угол падения рентгеновских лучей на поверхность – $\Phi_0=2,5^\circ$. Это значит, что на топограмме рис. 7.2,г рефлексы $K_{\alpha 1}$ и $K_{\alpha 2}$ получены при достаточно значительной экспозиции (~36 часов) от слоев кристалла, которые находятся под сильно разупорядоченной поверхностной областью. Сказанное более наглядно продемонстрировано на рис. 7.3, где при толщине порядка 0,5 мкм рефлексы K_α от облученной части уже полностью поглотились. Сложная форма изгиба рефлексов (рис. 7.2) свидетельствует о распространении упругих деформаций на значительные глубины кристалла, а также об их неоднородном планарном распределении.

Качественные результаты топографии дополняют информацию, полученную из зависимостей полуширин кривых качания от изменения экстинкционной длины, полученных в косонесимметричной схеме дифракции (рис. 7.4). Сравнение этих зависимостей от необлученной и облученной половин пластины дает следующую картину. Начиная с $\Lambda=1$ мкм на облученной половине постепенно увеличивается полуширина кривой качания (в среднем на 15-20%), а при $\Lambda=0,5$ мкм дифракционное отражение подавляется полностью.

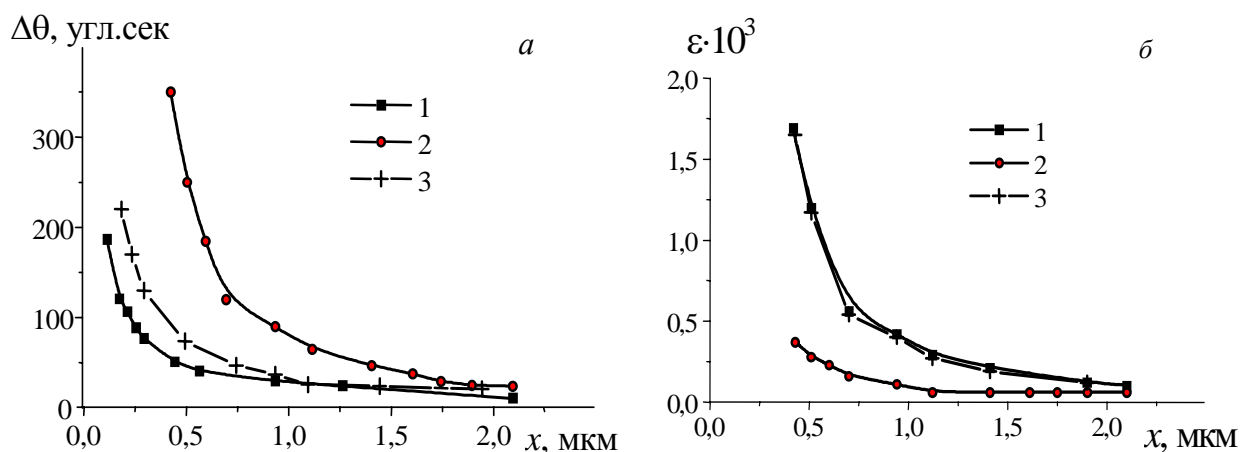


Рис. 7.4. Образец №1. Отражение $(331) \text{Co}K_{\alpha}$. Зависимость $\Delta\theta(\Lambda)$ для облученной (кривая 3) и необлученной (кривая 2) частей кристалла; кривая 1 – теоретическая зависимость (а). Распределение деформаций по толщине (б). Согласно рис.7.4,а: 1 – приращение деформаций ε в облученной части относительно необлученной, 2 – ε в облученной части относительно эталона, 3 – ε в необлученной части кристалла относительно эталона

На "хвостах" кривых качания появляется диффузное рассеяние значительной интенсивности. В целом возрастает интегральная отражающая способность кристалла. Величина пиковой интенсивности отражения в точном положении дифракции уменьшается в среднем на 10-15% (рис. 7.3,а).

В то же время, от необлученной половины кристалла наблюдается достаточно четкий рефлекс $K_{\alpha 1}$ и при $\Lambda < 0,2$ мкм. Такое поведение названных параметров структурного совершенства свидетельствует о возникновении в поверхностных слоях как локальных, так и протяженных полей деформаций, что является следствием повреждения и разупорядочения поверхностных слоев в процессе ионной имплантации.

Для количественного анализа данных использован метод, который базируется на Фурье-анализе кривых дифракционного отражения (КДО) [29]. Это позволило определить эффективную толщину поврежденного слоя $L_{\text{эф}}$, среднюю величину деформации кристаллической решетки $\bar{\varepsilon} = (\Delta d / d)$ и среднеквадратичную величину деформации.

По сравнению с необлученной половиной образца в облученной произошли структурные изменения, что выражается в увеличении параметра Дебая-Валлера L (таблица 7.1) и интегральной отражающей способности R . При этом, наличие недифрагирующего, но поглощающего аморфного слоя привело к некоторому ослаблению пика КДО, поскольку толщина поврежденного слоя достаточно значительна. Для максимально деформированного слоя величина деформации равна $\varepsilon_{\text{max}} \sim 3,6 \cdot 10^{-3}$.

Радиационные дефекты в переходной кристаллической области, которая лежит под аморфизированным слоем, определяют появление в ней положительных деформаций решетки величиной $\varepsilon \sim 3 \div 5 \cdot 10^{-4}$.

Толщина переходного слоя составляет $\sim 0,3$ мкм, толщина аморфизированного слоя $\sim 0,2$ мкм. Эффективная глубина локализации значительных повреждений поверхностного слоя для образца №1 находится в пределах 0,4-0,7

мкм (рис. 7.4,а). Это почти в два раза превышает длину свободного пробега ионов фосфора при данных энергиях и дозах. Кроме того, отметим присутствие значительной области упругих деформаций – до 1,1-1,5 мкм.

Таблица 7.1. Изменение фактора Дебая-Валлера имплантированной стороны кристалла относительно неимплантированной

№ кристалла с имплантированной стороны	(hkl)			
	400K _α	400K _β	800K _α	800K _β
	ΔL			
№2	1,67·10 ⁻²	1,79·10 ⁻²	8,50·10 ⁻³	2,29·10 ⁻²
№3	2,20·10 ⁻²	3,47·10 ⁻²	1,41·10 ⁻¹	1,56·10 ⁻¹
№4	4,66·10 ⁻²	3,81·10 ⁻²	5,30·10 ⁻²	3,81·10 ⁻²

Таблица 7.2

Образец	μ _{ds} , см ⁻¹			
	400K _{α1}	400K _β	800K _{α1}	800K _β
Эталон	2,9	2,4	1	0,6
Имплантиция	6,3	5,7	2,8	1,8

Дифрактометрические исследования проводились в схеме однокристалльного спектрометра. Профили распределения интенсивности дифрагированного пучка $I_h(x)$ при дифракции (400) и (800) MoK_{α1} и MoK_β-излучений получались путем поворота стрелы детектора с узким входным окном (0,05 мм) на небольшие углы Δφ в области угла точного положения дифракции θ_B. При этом $x = rΔφ / \sin θ_B$, где r – расстояние между входной щелью детектора и осью гониометра. Расхождение первичного пучка рентгеновских лучей составляло примерно 5 угловых минут. Использование более высоких порядков отражения удобно тем, что в этом случае незначительные изменения периода решетки исследуемого слоя разворачиваются в более широкую угловую область по сравнению с шириной максимума отражения от подложки [35-39].

Характерным для полученных профилей пространственного распределения интенсивности является изменение их формы и то, что при достаточном отдалении от θ_B ($x \gg 2Δ$) когерентное рассеяние на эталонных (необлученных) половинах практически полностью подавлено (интенсивность спадает к уровню фона). В то же время, для облученных половин образцов появляется (рис. 7.5) значительная избыточная интенсивность рассеяния, которая соответствует диффузному фону. Для нормирования этой интенсивности использовались значения полной интегральной интенсивности отражения идеальным кристаллом (при полностью открытом окне детектора).

Сравнительный анализ пространственного распределения интенсивности вдоль основы палатки Бормана с теоретически рассчитанными для идеального кристалла позволяет получить значение показателя структурного фактора Дебая-Валлера L [35,36] – интегрального параметра изменения структурного совершенства облученных кристаллов, а также коэффициент

экстинкции за счет рассеяния на дефектах μ_d [37,38]. Найденные значения L и μ_d представлены в таблицах 7.1 и 7.2.

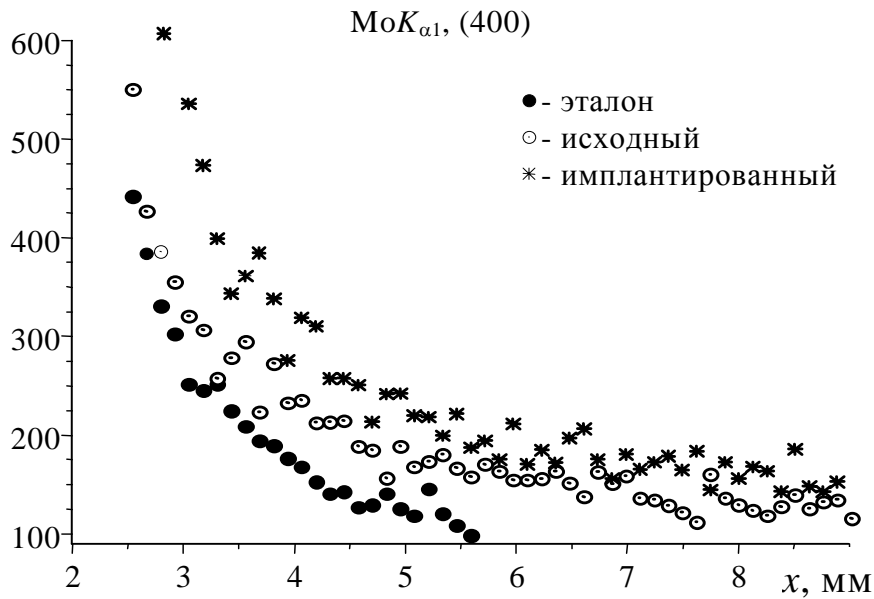


Рис. 7.5. Распределения $I_R(x)$ при $x > \Lambda$. Отражение (400) CuK_α -излучения

Как показывает количественный анализ изменения полуширин и формы кривых качания, а также интегральных интенсивностей, плотность дислокаций при такой дозе облучения ($\sim 10^{15} \text{ см}^{-2}$) возрастает больше, чем на два порядка. Это объясняется, наверное, тем, что наличие высоких концентраций точечных дефектов и их неоднородное распределение приводят к образованию дислокационных линий вдоль атомных рядов кристалла. Концы дислокационных линий могут быть прочно закреплены примесными атомами или кластерными образованиями. Во время релаксационных процессов возникают внутренние напряжения, под влиянием которых дислокационная линия изгибается и при определенных условиях возникает дислокационная петля [6]. При продолжении такого процесса петля будет увеличиваться и будет работать, как источник Франка–Рида, то есть будет генерировать дислокационные петли.

Зная величины L и μ_d (таблица 7.1 и 7.2), можно оценить средние размеры разупорядоченных областей – кластеров, которые возникают вследствие ионной имплантации [35, 12-17]:

$$L = 8nR^{9/2}(\beta H)^{3/2}, \quad \mu_d = 8\pi^2(\cos\theta_B)^2 LR/\Lambda^2, \quad (7.1)$$

$$R = \frac{\Lambda^2 \mu_d}{8\pi^2 \cos^2 \theta_B L}. \quad (7.2)$$

Полученные параметры дают возможность оценить также концентрацию (C_L) и радиус (R) промежуточных дислокационных петель по ε_\perp и L согласно [12-17].

$$\varepsilon_\perp = \frac{1,77}{3} \frac{b\pi R^3 C_L}{V_c}, \quad L = \frac{1}{2} (Hb)^{3/2} \cdot \frac{R^3 C_L}{V_c}, \quad (7.3)$$

где число 1,77 – фактор, который учитывает одномерный характер (вдоль поверхностной нормали) деформации в Si (100) [9], b – модуль вектора Бюргера дислокационной петли, C_L – концентрация петли, R – радиус петли, V_c – атомный объем, а H – модуль вектора обратной решетки. Получены такие значения – $C_L=(7\pm 1)\cdot 10^{12}$ петель/см², $R=1,30\pm 0,05$ нм. Эти значения достаточно хорошо согласуются с данными, полученными при помощи метода просвечивающей электронной микроскопии [8]. Более точный подход, учитывающий динамические эффекты рассеяния диффузного фона, требует проведения дополнительных теоретических исследований.

Следовательно, проведенные комплексные исследования облученных кристаллов в косонесимметричной и традиционной схемах дифракции свидетельствуют о том, что ионная имплантация ионов фосфора при энергии $E=180$ кэВ и дозе $Q=8\cdot 10^{14}$ ион/см² вносит значительные напряжения в поверхностные слои кристалла кремния [40]. При формировании спрятанных под поверхностью аморфных слоев эффективная глубина локализации значительных повреждений поверхностного слоя, как следует из анализа рентгеновских топограмм, кривых качания и пространственных распределений интенсивности, находится в пределах от 0,6 до 0,7 мкм. Это почти в два раза превышает длину свободного пробега ионов фосфора при таких энергиях и дозах. Область упругих деформаций доходит до глубин 1,1-1,5 мкм. Максимальная величина деформации деформированного слоя представляет $\sim 3,6\cdot 10^{-3}$. Радиационные дефекты в переходные кристаллической области, которая лежит под аморфизированным слоем, определяют появление в ней положительных $\sim 3\div 5\cdot 10^{-3}$. Толщина аморфизированного слоя представляет $\sim 0,3$ мкм, а толщина переходного слоя между аморфной областью и кристаллом $\sim 0,2-0,4$ мкм. Величина показателя фактора Дебая-Валлера L для отражений (400) и (800) MoK_α изменяется в пределах от $5,4\cdot 10^{-2}$ до $1,2\cdot 10^{-1}$, параметр экстинкции за счет рассеяния на дефектах μ_d – от 2,8 до 6,3. Это эквивалентно наличию кластерных образований размерами $R=10^{-6}$ см при концентрации дислокационных петель $C_L \sim 10^{12}-10^{13}$ петель/см².

§2. Влияние отжига на процессы дефектообразования в имплантированных ионами фосфора кристаллах кремния

После ионной бомбардировки поверхностные слои кристалла находятся в структурно метастабильном состоянии. Это делает нестабильными свойства имплантированных слоев. Необходимость проведения примеси в более стойкое состояние требует проведение постимплантационного отжига. При отжиге может происходить сток примесей и дефектов на поверхность или, наоборот, их переход от поверхности в область торможения ионов. Конкретная ситуация зависит от многих факторов: режима отжига, типа ионов, наличия исходных примесей и дефектов в кристалле.

Как уже отмечалось, важным параметром процесса термообработки, который необходим для активации ионов при рекристаллизации, наряду с

температурой выступает время. Как правило, время отжига составляет от 10 до 13 минут. В основном оно зависит от условий эксперимента и от времени нагревания образца. Так как электрическая активация представляет собой термодинамический процесс, то вместо изохронного отжига можно проводить изотермический отжиг. Более длительное время отжига используют тогда, когда наряду с активацией ионов предусматривают проведение диффузии. Процесс отжига имплантированных слоев сильно зависит от дозы имплантации. С ростом дозы, а, следовательно, с увеличением концентрации радиационных дефектов, часто необходимо повышать температуру отжига, чтобы достигнуть определенной степени электрической активности. Тем не менее, при очень больших дозах, когда кристалл становится аморфным, достаточно низкой температуры отжига, для Si – 500-650°C [2,6].

Отметим, что при имплантации в Si элементов V группы возможно образование комплекса их с донором (*E*-центр). Возможно также электрическое взаимодействие между отрицательно заряженными вакансиями и положительно заряженными ионами фосфора [1-9]. Названные эффекты влияют не только на концентрацию дефектов, кинетику отжига, а также на диффузионные процессы. Вакансии и атомы в междоузельных положениях могут группироваться в плоские или линейные включения (стержни), которые представляют собою макроскопические дефекты размером 1-2 мкм. Эти включения могут захватывать примеси, ковалентные радиусы которых сильно отличаются от радиусов атомов основной решетки (например, В и Р в Si). В целом такой процесс термодинамически выгоден, поскольку чужеродные атомы оказывают содействие снижению потенциала решетки вблизи включений. При отжиге, как правило, плоские и стержневые включения диссоциируют и переходят в дислокационные петли [1-9]. Кроме того, дислокационные линии и петли могут образовываться или вследствие объединения простых дефектов в процессе ионного торможения, или вследствие механических напряжений, возникающие вблизи радиационных дефектов.

В данном параграфе, как и в предыдущем, проведены комплексные рентгенодифракционные исследования влияния продолжительности температурного отжига на структурные изменения поверхностных слоев кремния имплантированных ионами фосфора (рис. 7.6 и 7.7). Из анализа полученных данных следует, что влияние времени отжига на границу раздела поверхность–имплантированный слой–матрица – существенно. Структурная релаксация в спрятанном под поверхностью слое приводит к мезоскопической неоднородности распределения напряжений, и как следствие, к локальному увеличению внутренних напряжений [7]. При этом наблюдается существенное отличие в распределении напряжений нормально и параллельно гетерогранице. Незначительный изгиб рефлексов K_{α} на топограммах (рис. 7.6,а) и постоянное значение радиуса изгиба по сечению пластин, измеренное с помощью двухкристального спектрометра, свидетельствуют о релаксации напряжений в направлении, параллельном гетерогранице. В то же время, вследствие различных плотностей кристаллической и аморфной фаз (~2%) в плос-

кости слоя, при присутствии значительных искажений в переходных слоях, такой релаксации в субструктуре не наблюдается. Это можно объяснить тем, что вследствие различия концентраций точечных дефектов на верхней и нижней границах раздела твердофазная эпитаксия аморфных слоев происходит с различной скоростью (рис. 7.6). Так как отжиг разупорядоченных слоев происходит в результате параллельных процессов перестройки и аннигиляции точечных дефектов, то каждая следующая степень увеличения времени отжига отвечает установлению определенного метастабильного набора дефектов, стойких в пределах данного диапазона температур. Перестройка охватывает не только скопления точечных дефектов, но и дислокационную структуру пластины [6, 12-22].

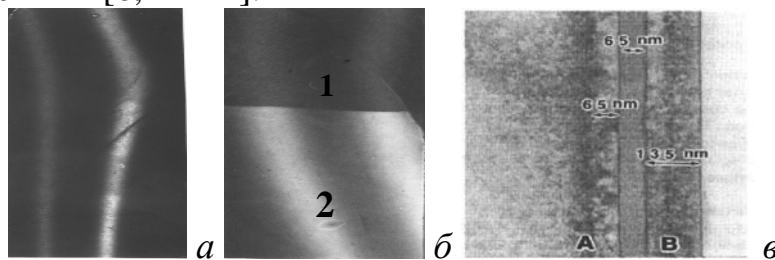


Рис. 7.6. Образец №2. Входная поверхность (001). Отражение (331) CoK_{α} . $\times 10$. $\Lambda=0,65$ мкм (а) и $\Lambda=0,44$ мкм (б). Высокорастворяющая электронно-растровая микроскопия. Изображение границ раздела после отжига ($t_{отж.}=6$ минут) поверхностного кристаллического слоя–аморфный слой–матрица (г)

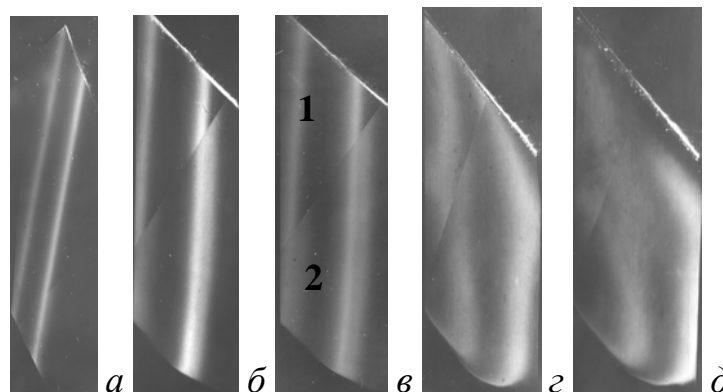


Рис. 7.7. Образец №3. Входная поверхность (001). Отражение (331) CoK_{α} . $\times 10$. 1 – необлученная, 2 –облученная ионами часть образца. $\Lambda=1,25$ мкм (а), $\Lambda=0,94$ мкм (б), $\Lambda=0,65$ мкм (в), $\Lambda=0,44$ мкм (г), $\Lambda=0,25$ мкм (д)

Из данных высокоразрешающей электронной микроскопии (рис. 7.6,г) следует, что при кратковременном температурном отжиге (образец №2 – время отжига $t=6$ минут при $T=500^{\circ}C$) имеет место значительная "кластеризация" поверхности и неполная рекристаллизация поврежденных слоев. Следует отметить, что охлаждение данной пластины произошло на воздухе, в результате чего поверхность пластины покрылась окислом. Это отражается соответствующим образом на значениях полуширин кривых качания (рис. 7.7), максимальной (пиковой) интенсивности и форме пространственных распределений интенсивности. Значения полуширин кривых качания в облученной и необлученной частях пластины №2 значительно превышают эталонные, соответственно в 10 и 7 раз. Среднее значение пиковой интенсивности в необ-

лученной области возросло на 20-25%, а в облученной немного уменьшилось на 10-12%, по отношению к эталону, и на столько же возросло по отношению к образцу №1. Значение показателя фактора Дебая-Валера составляет $L \sim 2,29 \cdot 10^{-2}$ для отражения (800) MoK_{β} -линии (таблица 7.3). После такого отжига максимальное значение деформации ε_{\max} увеличивается почти в два раза – $\bar{\varepsilon} \sim 3,1 \cdot 10^{-2}$. Полученные результаты можно объяснить на основе представлений о глубокой миграции примесей и взаимодействии с исходными структурными нарушениями компонентов френкелевских пар, диффундирующих от имплантированного слоя в процессе облучения и при последующем отжиге. Иная возможность таких структурных преобразований – перестройка дефектов под воздействием упругих волн, которые возникают при торможении ионов, а также отжиге дефектов (например, при аннигиляции вакансий и междоузельных атомов) вблизи облученной поверхности [20].

Таблица 7.3. Значение показателя фактора Дебая-Валера L имплантированной стороны кристалла относительно неимплантированной

Образец	400 K_{α}	400 K_{β}	800 K_{α}	800 K_{β}
	$\Delta L \cdot 10^2$			
№2	1,67	1,79	0,850	2,29
№3	2,20	3,47	14,1	15,6
№4	4,66	3,81	5,30	3,81

Роль статических упругих полей в процессе формирования остаточной дефектности имплантированного слоя во время облучения в наибольшей степени проявляется в местах пространственной неоднородности механических напряжений в кристалле. Так как пластины облучались ионами не по всей поверхности, то зона с максимальной амплитудой напряжений локализована в поверхностном слое (толщиной порядка пробега введенных атомов) вблизи границы раздела между облученной и необлученной областью. Как раз в этих областях на топограммах наблюдается максимальное искажение и размытие дифракционных рефлексов (рис. 7.7).

Увеличение времени отжига до 15 минут (образец №3, отжиг проводился в инертной (аргонной) среде) вызывает еще более интенсивную рекристаллизацию аморфного слоя. Об этом качественно свидетельствуют топограммы на рис. 7.7. Значение полуширин кривых качания (рис. 7.7) в облученной части пластины почти в два раза превышают соответствующие значения для образца №1.

На толщинных распределениях интенсивности $I_R(x)$ наблюдается значительный прирост диффузной составляющей рассеяния и некоторая трансформация формы пространственных распределений. Заметим, что уширение кривых качания уменьшают точность вычисления интегральных характеристик. При этом возрастает толщина переходной кристаллической области до 0,1-0,15 мкм. Среднее значение деформации здесь представляет $\bar{\varepsilon} \sim 1 \cdot 10^{-4}$. Значительное изменение формы "хвостов" по обе стороны кривых качания

свидетельствует о появлении отрицательных деформаций кристаллической решетки. Эти деформации могут быть вызваны как замещением Si в узлах решетки атомами фосфора с меньшим тетраэдрическим ковалентным радиусом, так и значительной дефектностью рекристаллизованного слоя. Величину отрицательных деформаций, вызванных примесями замещения, можно оценить из соотношения [28]:

$$\frac{\Delta a}{a} = 1,44\beta \cdot C_n, \quad (7.4)$$

где C_n – средняя объемная концентрация, β – коэффициент деформации, обусловленный несоответствием ковалентных радиусов, для P⁺, Si $\beta_T = 1,13 \cdot 10^{-13}$ см². При этом средняя величина реально существующих отрицательных деформаций значительно больше оценочных β_T (в 4 раза). То есть, в реальное значение β вносят вклад также и иные дефекты структуры, например, тетраэдрические дефекты упаковки вакансионного типа, дислокационные петли междоузельного типа [8,17,26], а также сжатие решетки вследствие выпадения различного рода выделений, например Si.

При более продолжительном отжиге (образец №4, $t=30$ минут), как и в предыдущих случаях, не наблюдается уменьшение напряжений в переходных слоях. Значение полуширины кривой качания возрастает в среднем в 3 раза, значительно падает пиковая интенсивность на 30% по отношению к образцу №1. Увеличилось также и значение показателя фактора Дебая-Валлера – почти в два раза (таблица 7.3). На кривой дифракционного отражения (рис. 7.8) наблюдается появление дополнительных максимумов вне области углов, которые отвечают максимуму отражения от подложки. Среднее значение деформации в переходном слое – $\bar{\epsilon} \sim 6 \cdot 10^{-3}$. Выше сказанное свидетельствует о преобразовании аморфной фазы в поликристаллическую и значительной трансформации границ раздела. На формирование кривых качания и пространственных распределений интенсивности значительно влияют также упругие деформации. Это можно объяснить предположением, что процесс перестройки дефектов не атомарный, а коллективный, то есть синхронно в акте перестройки участвует достаточно большое число элементарных дефектов и атомов кристалла. Благодаря этому, процесс структурной перестройки распространяется на значительные расстояния от границы раздела (на 1,3-1,5 мкм). Действительно, если продолжительность процесса отжига кластера меньше, чем время, на протяжении которого успевает произойти деформационный отклик кристалла на перестройку каждого дефекта в середине кластера, то это может стимулировать распад мелких кластеров с последующей коагуляцией точечных дефектов в большие по размерам кластеры. Это свидетельствует о преобразовании аморфной фазы в поликристаллическую и значительной трансформации границ раздела. Для созданной таким образом структуры характерна большая плотность различных по размерам микродефектов.

Используя соотношения (7.1)-(7.3) можно оценить размеры и концентрацию дислокационных петель. Получены значения: для кристалла №2

$C_L=1,5 \cdot 10^{11}$ петель/см², $R=20$ нм, для кристалла №4 – $C_L=1,5 \cdot 10$ петель/см², $R=50$ нм указывают на тенденцию повышения размера петель и уменьшения их плотности с возрастанием времени отжига. Укажем, что при $R=10^{-4}$ см величина $C_L=10^3-10^4$ петель/см². Значение концентраций и размеров дислокационных петель удовлетворительно согласуется со значениями, полученными методом просвечивающей электронной микроскопии [7,8]

Таким образом:

1. Имплантация ионов фосфора с энергией 180 кэВ и дозой порядка 10^{15} ион/см² и последующий за ним кратковременный низкотемпературный отжиг позволяют сформировать локализованные под поверхностью аморфизированные слои.

2. Для сформированных структур характерным является наличие значительных напряжений в направлении, перпендикулярном границе раздела, величины которых изменяются от $\bar{\epsilon} \sim 3,1 \cdot 10^{-2}$ при времени отжига $t=6$ минут до $\bar{\epsilon} \sim 6 \cdot 10^{-3}$ при $t=30$ мин. Значение показателя фактора Дебая-Валлера L возрастает от $1,67 \cdot 10^{-2}$ до $4,6 \cdot 10^{-2}$ для отражения (400) MoK_α .

3. Статические напряжения могут существенно влиять на скорость процесса структурной перестройки дефектов в кремнии. Их роль в самой большой степени проявляется в процессе формирования остаточной дефектности имплантированного слоя во время облучения в местах пространственной неоднородности механических напряжений в кристалле. Как раз в этих областях на топограммах наблюдается максимальное искажение и размытие дифракционных рефлексов, возрастание полуширин кривых качания, трансформация формы пространственных распределений и значительный прирост диффузного фона.

4. Комплексное использование топографических и дифрактометрических методов дает возможность исследовать структурные изменения и возникающие при этом распределения напряжений в поверхностных слоях монокристаллического кремния.

§3. Моделирования распределения деформаций в поверхностных слоях кремния, имплантированного ионами фосфора

В данном параграфе представлены результаты теоретического моделирования распределения напряжений, которые возникают в переходных слоях границ раздела при формировании имплантацией ионов фосфора спрятанного под поверхностью тонкого аморфизированного слоя [7-9]. Для этого использованы возможности косонесимметричной схемы дифракции на отражение – неразрушающего, селективного послойного анализа структурных изменений в поверхностных слоях и на границах раздела. Такой подход позволяет из серии кривых отражения от различных по толщине слоев исследовать, определить и воссоздать распределение деформаций в тонких (~0,01 мкм и меньших) поверхностных слоях кристаллов [9-30].

Как уже отмечалось, поверхностный слой имплантированных кристал-

лов имеет отличный от объема период решетки в направлении, перпендикулярном поверхности. Это проявляется на экспериментальных кривых дифракционного отражения в виде дополнительных максимумов вне области углов, которые отвечают максимуму отражения от подложки (рис. 7.8). Поскольку непосредственное построение профиля деформаций из экспериментальных кривых дифракции в общем случае не возможно, то рассмотрим одно из возможных решений так называемой обратной задачи рентгенодифракционного анализа.

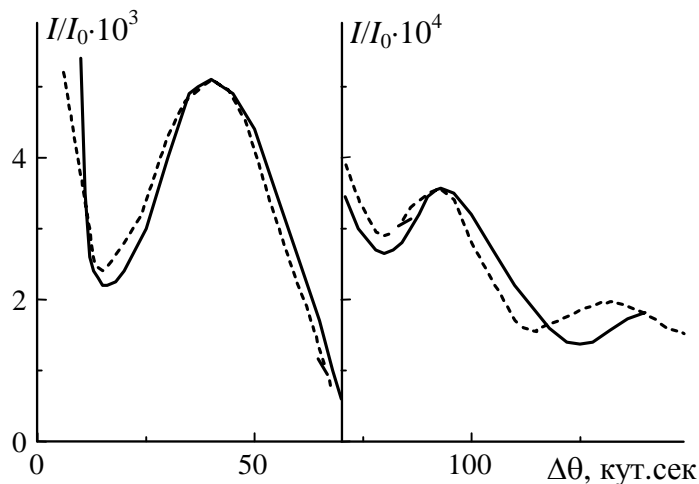


Рис. 7.8. Кривая качания кристалла кремния, имплантированного ионами фосфора. Отражение $(400) \text{CuK}\alpha$ -излучение. Пунктирная линия – расчетная, сплошная – экспериментальная

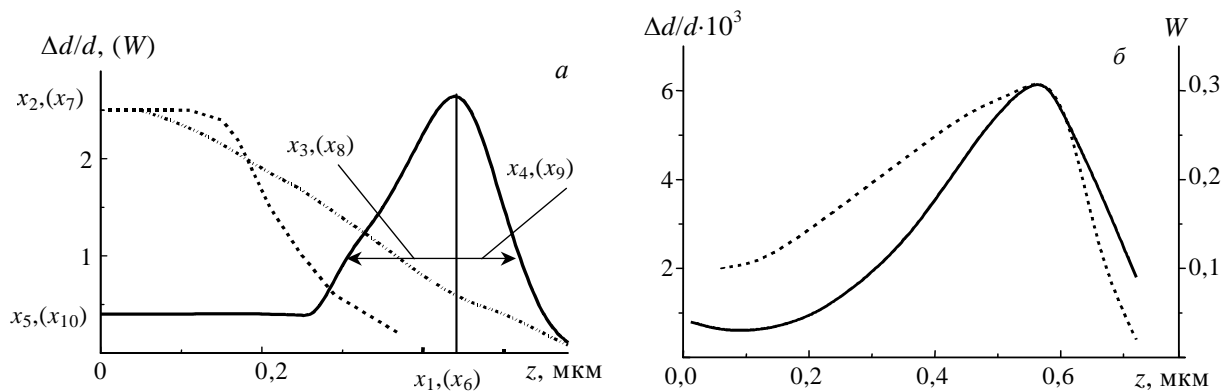


Рис. 7.9. Возможные профили распределения деформаций, которые описываются соотношением (7.5). x_1, \dots, x_{10} – параметры оптимизации (а). Профили деформаций – пунктирная линия, и нарушений – сплошная кривая (б)

Из заданного распределения деформаций (рис. 7.9,а) рассчитывается кривая качания рентгеновских лучей и сравнивается с экспериментальной кривой качания. Путем функционального задания профиля деформаций, нарушений и оптимизации параметров моделирование на ЭВМ до получения удовлетворительного совпадения экспериментальной и теоретической кривых отражения.

Распределение с толщиной z упругих деформаций $(\Delta d(z)/d)$ и нарушений $W(z)$ задается в виде:

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta d(z)}{d} &= \begin{cases} x_2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_1}{2x_3}\right)^2\right] & \text{при } \frac{\Delta d}{d} > x_5, \text{ i } z \leq x_1, \\ x_5 & \text{при } \frac{\Delta d}{d} \leq x_5 \text{ i } z \leq x_1, \\ x_2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_1}{2x_4}\right)^2\right] & \text{при } z > x_1, \end{cases} \\
W(z) &= \begin{cases} x_7 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_1}{2x_4}\right)^2\right] & \text{при } z > x_{10}, \\ x_{10} & \text{при } W \leq x_{10} \text{ i } z \leq x_6, \\ x_7 \cdot \exp\left[-\left(\frac{z-x_6}{2x_3}\right)^2\right] & \text{при } z > x_6. \end{cases} \quad (7.5)
\end{aligned}$$

Все параметры на рис. 7.9,а, за исключением x_2 , x_5 , x_7 , x_{10} , выражены через экстинкционную длину Λ . Отметим, что в косонесимметричном случае дифракции, в отличие от обычного, экстинкционная длина может постепенно изменяться более, чем на два порядка [40], то есть может быть соизмеримой и значительно превышать эффективную толщину поврежденного поверхностного слоя.

На первом этапе оптимизации в каждом тонком слое, на которые разбивается весь профиль деформации (нарушений), определяются значения $(\Delta d / d)_j$ и W_j . Далее полученные значения изменяются вблизи исходных величин до получения наилучшего совпадения экспериментальных и теоретических кривых качания (рис. 7.9). Это приводит к уменьшению возможного несоответствия истинного профиля деформаций (нарушений) профиля, что описывается соотношением (7.5).

В целом, воспроизведенный профиль деформаций и нарушений в Si, имплантированном P^+ , не является симметричным. Отметим удовлетворительное совпадение теоретических и экспериментальных кривых качания. Максимальное расхождение составляет не больше 10%.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о том, что ионная имплантация фосфора вносит значительные напряжения в поверхностные слои кристалла. Эффективная глубина локализации значительных повреждений поверхностного слоя, как следует из построенных распределений деформаций, находится в пределах от 0,6 до 0,7 мкм. Толщина аморфизированного слоя – 0,2-0,3 мкм. Значение средней и среднеквадратичной деформации находятся в пределах $6,1 \cdot 10^{-3}$ и $4,3 \cdot 10^{-3}$ соответственно.

В то же время, предложенный метод моделирования позволяет из кривых качания построить профили деформаций и нарушений тонких слоев кристалла. Функциональное задание профилей на первом этапе значительно повышает точность воспроизведения реальных профилей деформаций и откло-

нений атомных плоскостей в приповерхностных слоях.

204

ГЛАВА 8. ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СИСТЕМ

§1. Введение

Многослойные эпитаксиальные композиции с пленками разного состава широко используются в современной полупроводниковой электронике. Их создание обусловлено, с одной стороны, принципами действия самих электронных приборов, требующими создания слоев с различным электронным потенциалом, а с другой стороны, требованиями технологии, в которой выращивание различных промежуточных буферных слоев позволяет скомпенсировать напряжения несоответствия и улучшить кристаллическое совершенство гетероструктур.

Рентгеновская дифрактометрия является универсальным инструментом для изучения структурных характеристик многослойных систем. Число теоретических, методических и экспериментальных работ, начиная с 70-х годов, посвященных рентгенодифракционному исследованию эпитаксиальных систем, насчитывает не одну сотню (см., например, литературу в монографии [1]).

Рентгеновская дифрактометрия используется, во-первых, для определения структурных (геометрических) параметров многослойных систем, к ним относятся прежде всего состав и толщина отдельных слоев и последовательность их расположения. Кроме этого, в дифракционных кривых содержится информация о резкости гетерограниц (наличии переходных слоев) и деформации слоев. Вторая область приложения дифрактометрии – изучение структурного совершенства эпитаксиальных слоев и композиций, определение типа дефектов и получение их параметров.

В настоящей главе рассмотрены некоторые аспекты рентгенодифракционного исследования эпитаксиальных структур, обобщены результаты последних экспериментальных исследований ряда эпитаксиальных композиций, освещены методические аспекты использования рентгеновской дифрактометрии для исследований гетероструктур и определения их структурных параметров.

§2. Использование двухкристальных кривых отражения

Двухкристальная дифрактометрия является основным методом структурного исследования гетероэпитаксиальных систем. Дифракционные кривые отражения измеряются при этом в интегральном режиме с широко открытым окном детектора, при котором вся дифрагированная интенсивность фиксируется детектором. В обратном пространстве область наблюдения представляет собой полосу, перпендикулярную волновому вектору дифрагированной волны \vec{k}_h . Использование двухкристальной дифрактометрии оправдано прежде всего для псевдоморфных нерелаксированных структур с когерентными гетерограницами. Для них интенсивность в плоскости рассеяния распределена

вдоль нормали к поверхности кристалла и полоса наблюдения пересекает ее лишь в небольшой области, обусловленной конечной шириной отражения монохроматора, поэтому угловое разрешение на двухкристальных кривых ничем не отличается от разрешения соответствующего трехкристального сканирования (см. далее).

Во многих случаях параметры эпитаксиальных структур определяются непосредственно из двухкристальных кривых отражения, измеренных в симметричной брэгговской геометрии. Если кривая отражения содержит четко фиксируемые дифракционные пики от отдельных слоев, то их угловое положение определяется средним межплоскостным расстоянием d_i . Из углового расстояния $\Delta\theta$ между пиками слоя и подложки определяется относительная разница в межплоскостных расстояниях i -го слоя и подложки:

$$(\Delta d / d)_{\perp} = \frac{d_i - d_0}{d_0} = -\Delta\theta / \operatorname{tg}(\theta_B), \quad (8.1)$$

где в данном случае d_i и d_0 есть расстояния между кристаллографическими плоскостями, параллельными поверхности. Для структур кубической сингонии $(\Delta d / d)_{\perp}$ связано с относительной разницей параметров решетки $\Delta a / a$ соотношением

$$(\Delta d / d)_{\perp} = (\Delta a / a)(1 + p), \quad (8.2)$$

где p есть деформационный множитель, выражаемый через упругие постоянные (для ориентации нормали к поверхности $\langle 001 \rangle$ $p=2c_{12}/c_{11}$). Для эпитаксиальных структур гексагональной сингонии, выращенных на поверхности (0001)

$$(\Delta d / d)_{\perp} = \Delta c / c + p(\Delta a / a), \quad (8.3)$$

где $p=2c_{13}/c_{33}$ (c и a – параметры гексагональной элементарной ячейки).

Поскольку материал (состав) подложки, как правило, известен точно, то из полученной разницы параметров решетки определяется состав слоя.

Толщина слоев может быть определена двумя способами. Как известно, кривая отражения тонкого кристалла содержит, кроме, основного пика, побочные максимумы (толщинные осцилляции). Если такие осцилляции около какого-либо пика фиксируются на экспериментальной кривой, то из периода осцилляций $\delta\theta$ по известной формуле $\delta\theta=\lambda/(2t\cos\theta_B)$ определяется толщина слоя. Пример такой кривой приведен на рис. 8.1 для структуры GaAs–(001)Ge. При отсутствии осцилляций толщина слоя может быть получена из интегральной интенсивности соответствующего дифракционного пика, правда, это может быть однозначно сделано только для слоев, толщина которых значительно меньше экстинкционной длины, в этом случае можно надежно использовать формулу кинематической теории:

$$R_i = \frac{r_e^2 F_h^2 e^{-2M}}{v_c^2} \frac{\lambda^3}{\sin(2\theta_B) \sin(\theta_B)} \frac{t}{\sin(2\theta_B)} = \frac{\pi \chi_h e^{-M}}{\sin(2\theta_B)} u, \quad (8.4)$$

где F_h – структурный фактор, χ_h – пропорциональная F_h Фурье-компонента поляризуемости, λ – длина волны, $r_e=2,818 \cdot 10^{-13}$ см – классический радиус электрона. Последнее равенство написано в приведенных величинах, где приве-

денная толщина $u = \pi t / \Lambda_e$, Λ_e – экстинкционная длина ($\Lambda_e = \lambda \sqrt{|\gamma_h| |\gamma_0|} / |\chi_h|$, γ_h и γ_0 – направляющие косинусы падающей и дифрагированной волн, соответственно, для симметричной брэгговской геометрии $\gamma_0 = -\gamma_h = \sin(\theta_B)$).

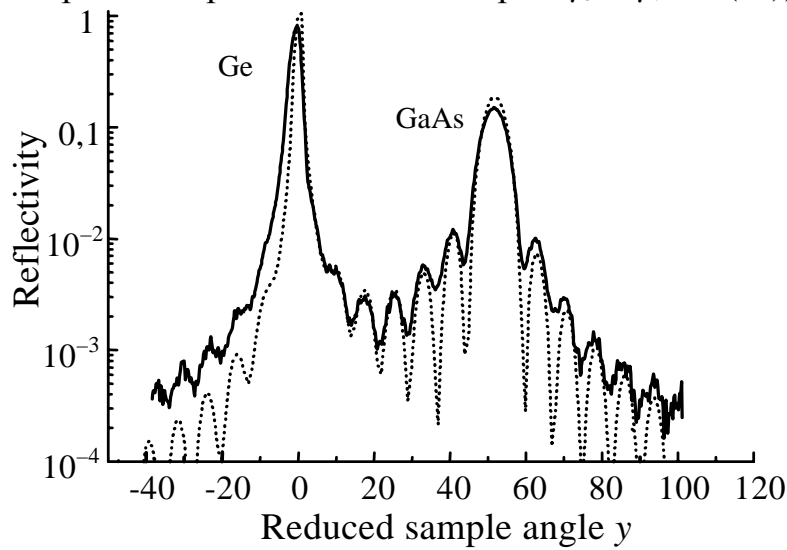


Рис. 8.1. Двухкристальная кривая дифракционного отражения (400) для эпитаксиальной системы GaAs–(001)Ge. Сплошная линия – эксперимент, пунктир – расчет с использованием параметров слоя: $\Delta d/d = 1,39 \cdot 10^{-3}$, $t = 622$ нм

Выражение (8.4) может быть использовано для оценки толщины и более толстых релаксированных слоев, дающих уширенные дифракционные пики (см. ниже), но при этом возможно влияние вторичной экстинкции, которое недостаточно изучено.

При исследовании многослойной системы возникает проблема идентификации отдельных пиков на дифракционной кривой и определения последовательности расположения соответствующих слоев по глубине. Для достаточно толстых поглощающих слоев стандартным способом ее решения является измерение двух порядков отражения с разным углом падения и, следовательно, разной глубиной проникновения. По относительному изменению интенсивности пиков можно судить о том, какой из слоев лежит ближе к поверхности, а какой глубже.

При использовании выражений (8.2-8.4) важно быть уверенным, что эпитаксиальные слои имеют когерентные границы, т.е. система не релаксирована. Релаксация упругих напряжений (в основном, напряжений несоответствия, но иногда и термоупругих напряжений) может происходить с помощью разных механизмов [2], основным из которых является возникновение сетки дислокаций несоответствия. При этом наряду с нормальным $(\Delta d/d)_\perp$ появляется тангенциальное несоответствие $(\Delta d/d)_\parallel$. (Для нерелаксированных систем расстояние между плоскостями, перпендикулярными гетерограницам, одинаково для всех слоев и подложки). На кривых релаксация проявляется в угловом сдвиге дифракционных пиков и их уширении по сравнению с упруго напряженной системой. Однако из углового положения пиков симметричных брэгговских отражений нельзя сделать вывод о том, находится ли данный слой в упруго напряженном или релаксированном состоянии, если состав данного

слоя заранее не известен. Уширение пиков тоже не всегда может быть замечено, особенно если собственная угловая полуширина пика, определяемая толщиной слоя, значительно больше дарвиновской полуширины. Таким образом, симметричная брэгговская геометрия в большинстве случаев не позволяет зафиксировать релаксацию упругих напряжений в эпитаксиальной системе и определить ее степень.

Для определения релаксации методом двухкристальной дифрактометрии используются асимметричные брэгговские рефлексy. Их применение основано на том, что дисторсия элементарной ячейки решетки эпитаксиального слоя в результате напряжений несоответствия (для кубической сингонии превращение кубической ячейки в тетрагональную, так называемая тетрагональная дисторсия) приводит к развороту наклонных к поверхности кристаллографических плоскостей на когерентных гетерограницах. Измерение кривых отражения в двух геометриях – со скользящим углом падения ($|\gamma_h| > \gamma_0$) и скользящим углом отражения ($|\gamma_h| < \gamma_0$) позволяет определить как разницу $\Delta\theta$ брэгговских углов, так и угол разворота $\delta\varphi$ соответствующих плоскостей. В первом случае эти величины складываются по абсолютной величине (пики отстоят дальше друг от друга), во втором вычитаются (пики ближе друг к другу). Значения $\Delta\theta$ и $\delta\varphi$ определяются как, соответственно, полусумма и полуразность угловых расстояний между пиками на этих кривых. Релаксация ведет к уменьшению угла разворота $\delta\varphi$, при полном снятии упругих напряжений $\delta\varphi=0$. Из величин $\Delta\theta$ и $\delta\varphi$ определяются как нормальное $(\Delta d/d)_\perp$, так и латеральное $(\Delta d/d)_\parallel$ несоответствие межплоскостных расстояний:

$$\Delta\theta = -[(\Delta d/d)_\perp \cos^2 \theta_B + (\Delta d/d)_\parallel \sin^2 \theta_B] \operatorname{tg} \theta_B, \quad (8.5)$$

$$\delta\varphi = [(\Delta d/d)_\perp - (\Delta d/d)_\parallel] \sin \varphi \cos \varphi, \quad (8.6)$$

где φ есть угол между отражающими плоскостями и поверхностью, $\varphi < 0$ при скользящем падении и $\varphi > 0$ при скользящем отражении.

Сверхрешетки (СР) представляют собой периодическую последовательность двух чередующихся слоев разного состава. Когерентная СР из двух слоев с резкими гетерограницами характеризуется 4-мя параметрами – периодом T , соотношением толщин двух слоев t_1/t_2 и составом слоев x_1 и x_2 , который определяет межплоскостное расстояние в слоях d_1 и d_2 и их структурные факторы F_1 и F_2 . Если СР состоит из слоев чистых веществ (например, AlAs/GaAs, AlSb/GaSb и др.), то число параметров сокращается до двух, если один из слоев представляет собой тройной твердый раствор (например, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$), тогда до трех. Типичная кривая дифракционного отражения от СР содержит 2 системы осцилляций – периодических распределений интенсивности в зависимости от угла падения. Первая из них – толщинные осцилляции, характерные для любого отражения от тонкого слоя, вторая – периодически распределенные сателлиты, обусловленные периодическим распределением межплоскостного расстояния $d(z)$ и рассеивающей способности $F(z)$ по глубине кристалла. Типичная кривая отражения от сверхрешетки показана на рис. 8.2.

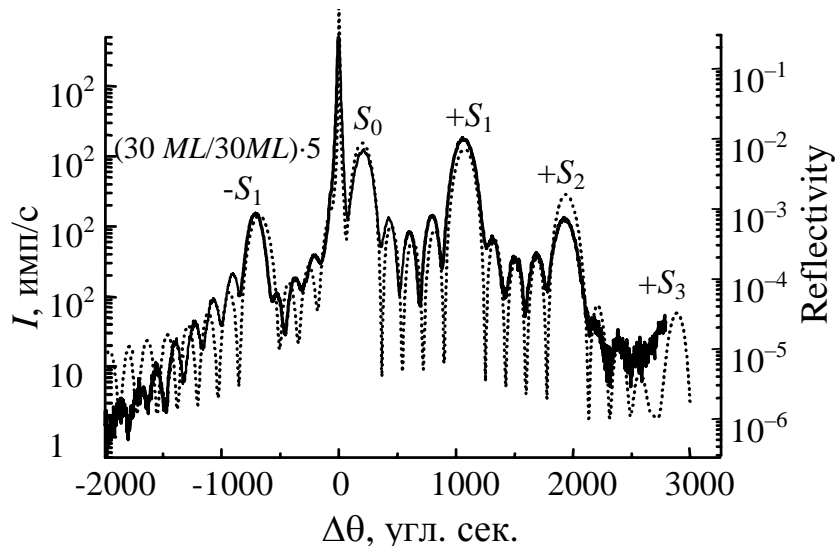


Рис. 8.2. Двухкристальная дифракционная кривая симметричного брэгговского отражения (111) от сверхрешетки $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2$, выращенной на (111)Si. CuK_α -излучение. Сплошная линия – эксперимент, пунктир – расчет. Параметры СР: период 181 \AA , $t_1=t_2$

Два параметра определяются непосредственно из кривых отражения: период T из расстояния между сателлитами $\delta\theta$

$$T = \frac{|\gamma_h|\lambda}{\sin(2\theta_B)\delta\theta} \quad (8.7)$$

и среднее межплоскостное расстояние $\langle d \rangle$ – из угла между пиком подложки и средним пиком СР (нулевым сателлитом).

$$\Delta\theta = -\frac{\langle d \rangle - d_0}{d_0} \text{tg} \theta_B \frac{2|\gamma_h|}{\gamma_0 + |\gamma_h|}. \quad (8.8)$$

Этих двух величин достаточно для получения параметров СР, состоящих из чистых веществ. В остальных случаях требуется анализ интенсивности сателлитов.

§3. Моделирование кривых отражения

В большинстве случаев, однако, дифракционные кривые не поддаются такому элементарному анализу. Даже для однослойной эпитаксиальной структуры размытие гетерограницы приводит к заметному изменению формы кривой отражения. Для слоев, близких по составу, пики отражения могут не разделяться. Интерференция волн, отраженных от подложки и разных слоев, смешение систем осцилляций, принадлежащих отражениям разных слоев, приводят к тому, что дифракционные кривые от многослойных структур имеют сложную форму с множеством пиков, ступенек, осцилляций. Надежное извлечение параметров структуры из таких кривых требует расчета дифракционных отражений с последующей процедурой подгонки.

Моделирование кривых дифракционного отражения от кристаллов с неравномерным распределением деформации по глубине поверхностного слоя (гетероструктур, диффузионных, имплантированных слоев) выполняется или по кинематической теории [3] путем составления классической кинематиче-

ской суммы или по динамической теории [4-8] на основе решения уравнений Такаги-Топэна [9]. В работах П.В.Петрашеня [10-12] было предложено полукинематическое приближение, по которому отражение от подложки (матрицы) вычисляется на основе динамических, а от поверхностной структуры – кинематических формул. Такой подход является во многих случаях оптимальным, поскольку эпитаксиальные слои выращиваются на достаточно совершенных подложках, а толщина отдельных слоев, а часто и общая толщина (без подложки), как правило, значительно меньше экстинкционной длины.

Форма кривой дифракционного отражения определяется изменением по глубине межплоскостного расстояния $d(z)$ и рассеивающей способности (структурного фактора) $F(z)$. Когда угловая шкала дифракционных кривых рассматривается относительно пика подложки, то первая функция выражается через относительное изменение межплоскостного расстояния $\Delta d/d(z)$, многими авторами обозначаемая как деформация ε_{zz} (в этом случае деформация каждого слоя рассматривается не относительно его свободного состояния, а относительно параметров элементарной ячейки подложки). Для нерелаксированных эпитаксиальных систем обе функции $\varepsilon_{zz}(z)$ и $F(z)$ определяются изменением состава системы по глубине. При моделировании на основе динамической теории в расчеты закладывается единое значение χ_h и изменение структурного фактора входит в функцию изменения статического фактора Дебая-Валлера $L(z)$, который вводится в этих расчетах. В релаксированных системах функция $\varepsilon_{zz}(z)$ зависит уже не только от состава слоев, но и от степени их релаксации.

В последнее время, в связи с расширяющимися возможностями компьютерных вычислений в большинстве работ преобладает прямое моделирование дифракционных кривых и получение структурных характеристик многослойных систем на основе подгонки экспериментальных и расчетных кривых путем минимизации функции невязки. При этом сложились два подхода к расчету кривых, закладываемых в программы расчетов. В первом из них дифракция от эпитаксиальных систем рассматривается как сумма отражений от отдельных слоев, амплитуды дифрагированных волн от которых складываются с учетом соответствующих фаз. Размытие гетерограниц при этом учитывается с помощью введения дополнительных слоев со средними параметрами, такой же путь используется для учета изменения межатомных расстояний на интерфейсах, хотя введение слоев толщиной, не пропорциональной межплоскостным расстояниям с физической точки зрения выглядит сомнительным. Во втором случае суммируются амплитуды рассеяния от всех мономолекулярных или моноатомных плоскостей, что дает возможность адекватно описывать тонкую структуру интерфейсов [13,14].

По полукинематическому приближению [12] коэффициент отражения многослойной структуры

$$R = |A_0 + iA_L|^2, \quad (8.9)$$

где A_0 есть амплитуда динамического отражения подложки:

$$A_0 = \left| |y| - \sqrt{y^2 - 1} \right|, \quad (8.10)$$

а A_L – кинематическая амплитуда поверхностной структуры, вычисляемая как сумма амплитуд отражения отдельных слоев:

$$A_L = \sum_{i=1}^n \frac{\sin[(y - f_i)u_i] K_i}{y - f_i} \exp(-i\varphi_i). \quad (8.11)$$

Фаза φ_i учитывает собственную фазу i -го слоя и набег фазы в нижележащих слоях:

$$\varphi_i = (y - f_i) u_i + \sum_{k=1}^{i-1} 2(y - f_k) u_k. \quad (8.12)$$

В общем случае несимметричной дифракции для когерентных систем приведенная угловая переменная равна

$$y = \frac{\Delta\theta \sin(2\theta)}{|\chi_H|} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}}, \quad (8.13)$$

где угол $\Delta\theta$ отсчитывается от пика подложки. Приведенная деформация

$$f_j = -\varepsilon_{zz}^j \frac{(\gamma_H - \gamma_0)\gamma_H}{|\chi_H|} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}} \quad (8.14)$$

есть центр отражения i -го слоя в y -шкале, а толщина u слоев выражается в долях экстинкционной длины (см. выше). Величины $K_i = |F_i|/|F_0|$ учитывают различие структурных факторов F_i слоев и F_0 подложки.

Для сверхрешеток суммирование (8.11) проводится только по двум слоям, составляющим период, соответствующую величину определим как структурный фактор сверхрешетки F_{SL} , полная же амплитуда рассеяния равна:

$$A_{SL} = F_{SL} \frac{\sin(m\Phi)}{\sin(\Phi)} \exp[-i(m-1)\Phi], \quad (8.15)$$

где

$$\Phi = (y - f_1)u_1 + (y - f_2)u_2. \quad (8.16)$$

Равенство нулю знаменателя в (8.15) ($\Phi = n\pi$) определяет угловое положение n -го сателлита, а числителя – положение толщинных осцилляций.

При втором способе расчета (суммировании по атомным или молекулярным слоям) для симметричного брэгговского отражения в расчет принималось только среднее положение каждой атомной плоскости по нормали к поверхности (координата z) и не учитывалась латеральная неравномерность высоты локальных областей. Тогда амплитуда рассеяния от СР с числом периодов m равна

$$A_{sl}(\theta) = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda}{\sin(\theta)} F_{sl} \frac{\sin(m\pi ST)}{\sin(\pi \cdot ST)} \exp[i(m-1)\pi ST], \quad (8.17)$$

где F_{sl} есть рассеивающая способность (структурный фактор) одного периода СР толщиной T , S есть дифракционный вектор ($S = 2\sin(\theta_B)/\lambda$). Если СР состоит

из слоев двойных соединений с общим анионом или катионом или их тройных твердых растворов на их основе (например, AlSb/GaSb, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$, ZnSe/CdSe, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ и др.), то каждый монослой рассматривается как слой однородного состава (например, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}$) с x , меняющимся по глубине периода. Вычисление F_{sl} выполняется путем суммирования по всем монослоям в периоде:

$$F_{sl}(\theta) = \sum_{k=1}^n \rho_k F_k \exp(-2\pi i S z_k). \quad (8.18)$$

При этом межплоскостное расстояние k -го монослоя:

$$d_k(x) = \frac{1}{2} [a(x) - (a(x) - a_0)(1 - r_k) p(x)], \quad (8.19)$$

где $a(x) \cong a_2 x + a_1(1 - x)$, a_0 , a_1 и a_2 – параметры решетки подложки и двух чистых соединений AB (AlN и GaN, CdSe и ZnSe), входящих в СР, соответственно. Положение монослоя по глубине z :

$$z_k = \sum_{j=1}^{k-1} d_j + d_k / 2, \quad (8.20)$$

его рассеивающая способность

$$F_k(\theta) = f_1 x + f_2(1 - x) + f_3 \exp(\pi i S d_k) \quad (8.21)$$

и слоевая плотность

$$\rho_k = 2/[a_0 + (a(x) - a_0)r_k] \quad (8.22)$$

зависят от состава монослоя (т.е. от x). Возможная релаксация монослоев принимается в расчет с помощью коэффициентов r_k ($r=0$ для нерелаксированного и $r=1$ для полностью релаксированного слоя).

Угловое положение сателлита n -го порядка определяется условием

$$\pi S T = n\pi, \quad (8.23)$$

что аналогично соответствующему выражению для Φ из (8.16).

Как видно из (8.17), интенсивность (высота) сателлитов определяется значениями F_{sl} в этих угловых точках. Согласно [14], интенсивность нулевого сателлита с угловой координатой y_0 равна

$$J_0 = \left[\frac{\sin((y - f_2)u_2)}{(y - f_2)u_2} \right]^2 (u_1 + u_2)^2 m^2. \quad (8.24)$$

Величину $(y_0 - f_2)u_2 = -(y_0 - f_1)u_1$ (обозначим ее как B) можно выразить в виде:

$$B \equiv \pi S \Delta \varepsilon \frac{t_1 t_2}{t_1 + t_2} \cos \varphi. \quad (8.25)$$

Здесь $\Delta \varepsilon$ есть относительная разность межплоскостных расстояний (нормальных к поверхности) двух слоев $\Delta \varepsilon = 2(d_2 - d_1)/(d_2 + d_1)$. Первый множитель в (8.4) показывает зависимость B от порядка отражения. Интенсивность остальных сателлитов также может быть выражена аналитически как функция параметров СР. Она тем больше, чем больше общая толщина СР. Однако если рассматривать относительную интенсивность сателлитов по отношению

к высоте нулевого, то она не будет зависеть от числа периодов СР и может быть написана в следующем виде:

$$\frac{J_n}{J_0} = \left[\frac{\sin(B + na)}{B + na} \left(a - \frac{K \cdot (B + na)(\pi - a)}{-B + n(\pi - a)} \right) \right]^2 / \left(\frac{\sin B}{B} \right)^2, \quad (8.26)$$

где $a = \pi / (1 + t_2/t_1)$. Отсюда видно, что относительная интенсивность сателлитов является функцией только 3 неизвестных: деформационного параметра B , отношения толщин двух слоев $b = t_2/t_1$ и отношения их структурных факторов $K = F_2/F_1$. При этом период T входит в них неявно, только через значения B . Использование выражений (8.25) и (8.26) позволяет заменить подгонку интенсивности всей дифракционной кривой от СР расчетом интенсивности в отдельных угловых точках – максимумах сателлитов.

В большинстве случаев определяющее влияние на форму кривой дифракции от СР оказывает величина B . Как видно из (8.25), ее увеличение может быть достигнуто как за счет увеличения рассогласования параметров решетки двух слоев, так и за счет роста периода СР. Поэтому вполне возможна ситуация, когда одинаковая относительная интенсивность сателлитов (форма кривой) будет наблюдаться как для короткопериодной СР, но с большой разницей $\Delta\varepsilon$, так и для слабо рассогласованной СР с большим периодом. Конечно, при этом абсолютные значения интенсивности и занимаемый угловой интервал будут отличаться. Чем больше значение B при прочих равных условиях, тем больше интенсивность боковых сателлитов по отношению к среднему, при $B > \pi/2$ нулевой сателлит может стать слабее боковых. В этом случае возникает проблема его идентификации.

В другом крайнем случае, для малых значений B , интенсивность боковых сателлитов быстро спадает, при $B < 0,1$ удается зафиксировать только сателлиты первого порядка. Уменьшение B достигается не только уменьшением $\Delta\varepsilon$ и T , но и уменьшением толщины одного из слоев при неизменном периоде. Если $B = 0$, что имеет место для согласованных по параметру СР твердых растворов, или в симметричной Лауэ-геометрии ($\cos\varphi = 0$) для всех когерентных СР, боковые сателлиты появляются за счет разницы структурных факторов, при этом их относительная интенсивность выражается простой формулой:

$$\frac{J_n}{J_0} = \left(\frac{\sin(n\pi t_2/T)}{n\pi t_2/T} \right)^2 \left| \frac{t_2(1-K)}{t_1 + t_2 K} \right|^2 \quad (8.27)$$

Из (8.27) видно, что кривая должна иметь симметричную форму, а интенсивность боковых сателлитов спадает достаточно медленно, если толщина одного из слоев много меньше толщины другого.

Два параметра СР определяются непосредственно из кривых отражения: период T из расстояния между сателлитами $\delta\theta$ и среднее межплоскостное расстояние $\langle d \rangle$ – из угла между пиком подложки и средним пиком СР (нулевым сателлитом). 3 неизвестные (B , b и k) могут быть вычислены из относительных интенсивностей сателлитов (разумеется, если число их на измеренной кривой больше 3, включая нулевой). Этих пяти величин достаточно, чтобы

вычислить все 4 параметра когерентной СР. Однако это имеет место в идеальном случае. В действительности чувствительность интенсивности спутников к величинам b и K зависит от интервалов их изменения и может быть достаточно слабой, что не дает возможности определить их с достаточной точностью.

В случае, когда один из слоев много тоньше другого ($b \ll 1$) (что имеет место для многослойных квантовых ям), параметр B зависит только от произведения рассогласования на толщину тонкого слоя и представляет собой фазовый сдвиг волн, дифрагированных толстым слоем и вызываемый наличием тонкого слоя

$$B \approx \Delta \varepsilon t_2. \quad (8.28)$$

Это произведение определяет и среднее межплоскостное расстояние в СР и отсюда угловое положение нулевого спутника. Следовательно, число параметров, которое мы можем определить из дифракционной кривой, уменьшается до трех.

Реальные структуры могут отличаться от двухслойной системы с резкими гетерограницами. На форму кривой отражения влияют возможное размытие интерфейсов, а также наличие в гетеросистеме дополнительных слоев – буферных и крышек. Однако во всех случаях двухслойная структура может рассматриваться в качестве первого приближения, приведенный выше анализ позволяет получить начальные параметры, которые затем могут уточняться путем моделирования кривых и процедуры подгонки. Такой комбинированный подход (аналитика плюс подгонка) находит в последнее время все большее признание (см., например, [15]), поскольку позволяет значительно сократить время расчета.

Ниже (далее в §5 и §6) на примере двух крайних случаев структур – короткопериодных СР CdSe/BeTe с субмонослойными вставками и сильнонарушенных толстых релаксированных систем AlGaIn/GaN рассмотрены общие подходы к анализу рентгенодифракционных кривых от сверхрешеток и особенности извлечения структурных параметров для каждого вида структур.

§4. Использование трехкристальной дифрактометрии

Трехкристальная дифференциальная дифрактометрия позволяет с помощью третьего кристалла-анализатора отбирать определенные направления дифрагированного пучка. Фиксируемая интенсивность становится функцией двух угловых параметров – угла падения α и угла отражения 2θ . Это дает возможность получать распределение интенсивности дифракции в плоскости рассеяния в обратном пространстве. При этом каждая пара углов α и 2θ определяет точку наблюдения в плоскости рассеяния (на самом деле это некоторая малая область, определяемая угловым разрешением монохроматора и анализатора). Двумерное представление распределения интенсивности в плоскости рассеяния для эпитаксиальных структур рассматривается обычно в ортогональных осях q_z и q_x , параллельных, соответственно, нормали к по-

верхности гетероструктуры и параллельно ей. Началом системы координат выбирается обычно ближайший узел обратной решетки подложки. Используется и другая система осей (q_h и q_{\perp}), параллельно и перпендикулярно вектору обратной решетки соответствующего отражения. В этом случае координаты q_h и q_{\perp} связаны с углами α и θ соотношениями:

$$q_h = k2\theta \cos \theta_B \text{ и } q_{\perp} = k(2\alpha - 2\theta) \sin \theta_B. \quad (8.29)$$

Распределение в обратном пространстве получается с помощью измерения так называемых мод сканирования (трехкристальных кривых). При θ – 2θ -сканировании мы имеем сечение плоскости рассеяния (и следовательно, распределение интенсивности в направлении дифракционного вектора \vec{H}), при θ -сканировании – по нормали к \vec{H} , для 2θ -моды – вдоль сферы Эвальда перпендикулярно волновому вектору \vec{k}_h отраженной волны.

При исследовании эпитаксиальных структур трехкристальная дифрактометрия используется: 1) для выделения и исследования диффузного рассеяния; 2) определения степени релаксации и 3) для изучения дефектной структуры (в основном, дислокационной) релаксированных слоев.

Диффузное рассеяние в гетероструктурах обусловлено, в основном, шероховатостью интерфейсов, его интенсивность на двухкристальных кривых отражения может заметно осложнить процедуру подгонки экспериментальных и расчетных зависимостей, поэтому использование кривых θ – 2θ -моды сканирования, где вклад диффузного рассеяния минимален, позволяет более надежно определять параметры эпитаксиальных структур.

Основным приложением трехкристальной геометрии является определение релаксации эпитаксиальных структур. Оно основано на том, что интенсивность когерентного рассеяния от нерелаксированных полностью напряженных эпитаксиальных гетероструктур распределена в плоскости рассеяния в направлении, параллельном нормали к поверхности. В этом направлении расположены дополнительные узлы – центры отражения от отдельных слоев, толщинные осцилляции, а также сателлиты для сверхрешетки. Релаксация фиксируется на картах распределения интенсивности вокруг узлов обратной решетки, соответствующих асимметричным брэгговским отражениям, для которых вектор дифракции составляет угол φ с нормалью \vec{n} . Для полностью релаксированной структуры узлы – центры отражения отдельных слоев должны лежать вдоль вектора дифракции. При частичной релаксации они занимают некоторое промежуточное положение. Таким образом, если центры на распределении интенсивности, соответствующие двум соседним слоям или слою и подложке, расположены на нормали \vec{n} , то между ними не произошло релаксации и гетерограница когерентна, если нет, то это указывает на релаксацию. Релаксация будет полной, если узлы лежат на направлении вектора обратной решетки \vec{H} .

Пример дифракционной картины для релаксированной структуры приведен на рис. 8.3 [16]. На нем представлено распределение интенсивности диф-

ракции вокруг узла обратной решетки 113 эпитаксиальной системы $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}-\text{Ge}(001)\text{Si}$. Видно, что слой Ge полностью релаксирован относительно подложки Si (центры отражения находятся на направлении вектора обратной решетки $\vec{H}=\langle 113 \rangle$). Что касается верхнего слоя SiGe, то центр отражения от него расположен в промежуточном положении между направлением \vec{H} и нормали $\vec{n}=\langle 001 \rangle$ относительно узла Ge, из чего следует, что он релаксирован не полностью и находится в состоянии растяжения.

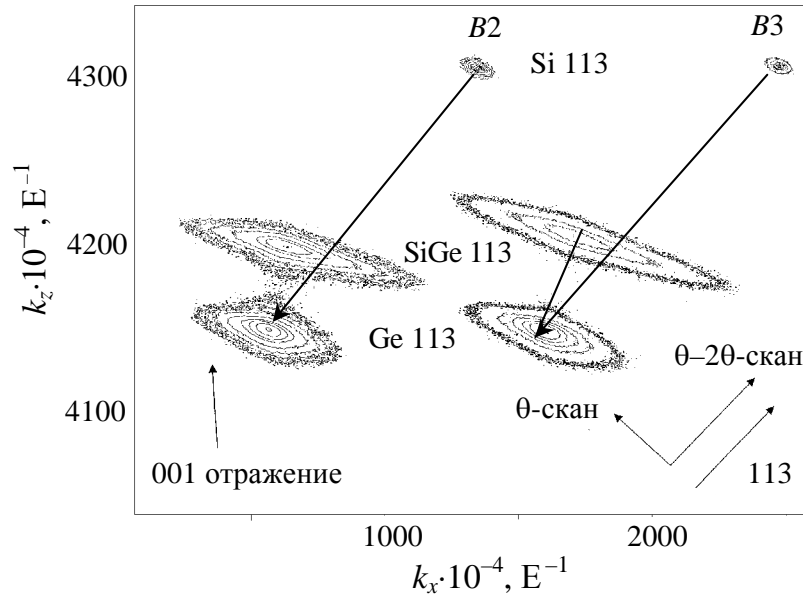


Рис. 8.3. Распределение интенсивности вокруг узла обратной решетки (113) асимметричного брэгговского отражения для двух образцов эпитаксиальной структуры $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}-\text{Ge}(001)\text{Si}$. CuK_α -излучение

Степень релаксации между соседними слоями определяется из разности координат Δq_{\parallel} и Δq_{\perp} их центров отражений. По (8.29) из этих величин находятся разности соответствующих углов $\Delta\alpha$ и $\Delta 2\theta$, из которых, с использованием (8.5) и (8.6) вычисляются значения нормального $(\Delta d/d)_{\perp}$ и латерального $(\Delta d/d)_{\parallel}$ несоответствий межплоскостных расстояний двух соседних слоев. Равенство нулю латерального несоответствия однозначно указывает на отсутствие релаксации между двумя слоями и когерентность гетерограницы между ними.

Однако равенство $(\Delta d/d)_{\perp}$ и $(\Delta d/d)_{\parallel}$ отнюдь не означает отсутствия напряжений в двух соседних слоях, поскольку не исключает их общей релаксации как целого относительно нижележащих слоев или подложки. Что касается 100% (полной) релаксации слоя, то она должна относиться к параметрам решетки слоя в свободном состоянии и определяться относительно подложки (центры отражения слоя и подложки лежат на направлении \vec{H} , $(\Delta d/d)_{\perp}=(\Delta d/d)_{\parallel}$, где Δd отсчитывается относительно подложки).

Отметим, что данные рассуждения относятся к структурам с кубической сингонией с ориентацией высокой симметрии или гексагональной, для которой для всех слоев сохраняется соотношение плотной упаковки $c/a=1,633$.

§5. Определение параметров сверхрешеток CdSe/BeTe

Образцы выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках (001)-GaAs. Период СР составлял 50–60 Å, толщина субмонослойных вставок CdSe варьировалась для разных образцов от 0,4 до 1,5 ML (мономолекулярных слоев), число периодов m равнялось 10 для образцов со вставками толщиной до 1 ML и 5 для остальных. На каждом интерфейсе до и после выращивания слоев CdSe наносилось очень малое (в доли монослоя) количество CdTe. Образцы двух серий отличались временем (и, следовательно, количеством) наносимых CdTe-островков. СР помещалась между нижним буферным слоем BeTe толщиной порядка 10 ML и верхним слоем-крышкой ZnSe толщиной около 50 Å.

Структуры CdSe/BeTe не имеют общих анионов и катионов. Если слои BeTe оканчиваются атомами Te, а слои CdSe атомами Se, то первый интерфейс (между BeTe и CdSe) образован связями Cd–Te, а второй (между CdSe и BeTe) – связями Be–Se. Поскольку полное количество нанесенного CdSe и CdTe в каждом периоде не превышает двух монослоев, то в качестве первого приближения можно принять двухслойную структуру, в которой один слой есть BeTe толщиной n_1 монослоев, а второй (тонкий) субслой образуют вставки CdSe+CdTe с прилегающими интерфейсами. Считая толщину этого слоя равной числу n_2 монослоев, отличных по составу от BeTe, мы можем рассматривать его состав как смесь соединений (связей) CdSe, CdTe, BeTe, BeSe со средним межплоскостным расстоянием

$$\langle d_2 \rangle = d_{\text{BeTe}} \cdot (n_2 - x - y - z) + d_{\text{CdSe}} \cdot x + d_{\text{CdTe}} \cdot y + d_{\text{BeSe}} \cdot z. \quad (8.30)$$

При таком описании тонкий слой характеризуется 4-мя параметрами: n_2 , x , y и z , а для всей СР требуется определить 5 величин (с добавлением n_1).

Однако в идеальном случае, когда нижняя граница CdSe-вставки образована связями Cd–Te, а верхняя – Be–Se, их наличие не сказывается на среднем межплоскостном расстоянии в слое и на фазовом смещении, обусловленном этой вставкой, поскольку в силу постоянства ковалентных радиусов атомов в одноподобных соединениях для параметров решетки имеет место примерное равенство:

$$a(\text{BeTe}) + a(\text{CdSe}) = a(\text{CdTe}) + a(\text{BeSe}). \quad (8.31)$$

Если мы хотим определить тонкую структуру интерфейсов, мы должны рассматривать тонкие вставки как последовательность атомных слоев смешанного состава: (Be, Cd) – катионных и (Te, Se) анионных. Если n_2 не превышает 3-х мономолекулярных слоев, т.е. атомы Cd могут находиться в 3-х катионных слоях, а атомы Se в 3-х анионных, то вся тонкая вставка с интерфейсами может быть описана шестью расстояниями между атомными слоями. Они равны 1/4 параметра решетки четверного твердого раствора $\text{Cd}_x\text{Be}_{1-x}\text{Se}_y\text{Te}_{1-y}$ и зависят от состава соответствующих анионных и катионных слоев. Все эти величины вряд ли могут быть однозначно определены из дифракционных кривых. Поэтому в данной работе мы рассматривали несколько моделей распределения состава в тонких вставках, исходящих из условий роста. Средние

параметры СР определялись из анализа интенсивности спутников 002-кривых, а наиболее подходящая модель уточнялась с использованием анализа кривых рефлекса 004, более чувствительного к распределению деформации.

На рис. 8.4 (002 отражение) и рис. 8.5 (004 отражение) представлены примеры дифракционных кривых для образцов, содержащих СР CdSe/BeTe двух типов. На них наблюдаются спутники (до 2-го порядка включительно) и толщинные осцилляции, что свидетельствует о хорошем структурном качестве образцов. Кривые 002 отражения содержат больше деталей по сравнению с 004-кривыми. Имеются различия в форме кривых для структур, выращенных в двух разных режимах, кривые для образцов второй серии (с меньшим временем нанесения CdTe) имеют более симметричный характер.

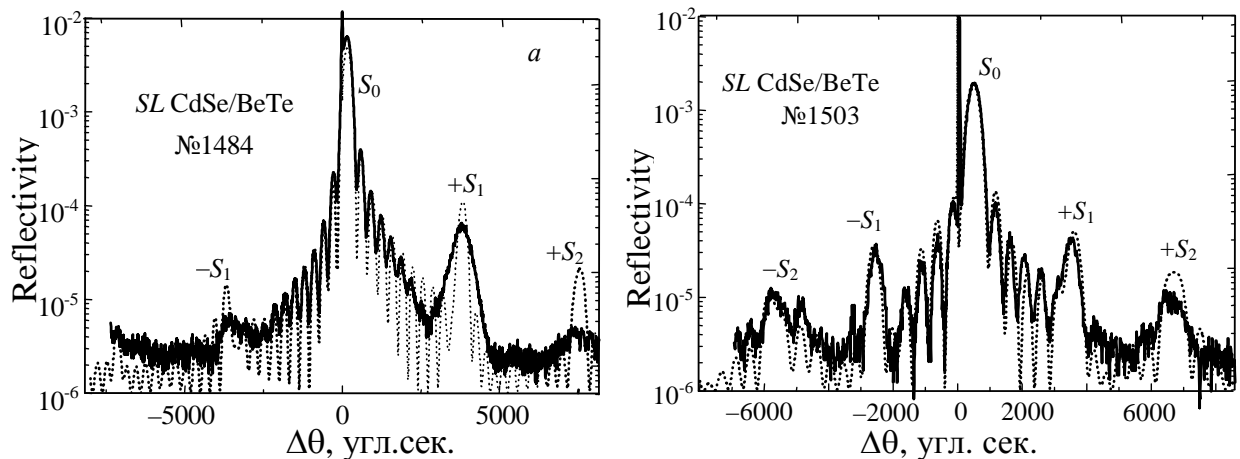


Рис. 8.4. Двухкристальные дифракционные кривые 002 отражения для сверхрешеток CdSe/BeTe, выращенных MBE-методом на (001)GaAs в двух разных режимах (а, б). Сплошная линия – эксперимент, пунктирная – расчет. Параметры СР, полученные в результате подгонки, указаны в таблице 8.1

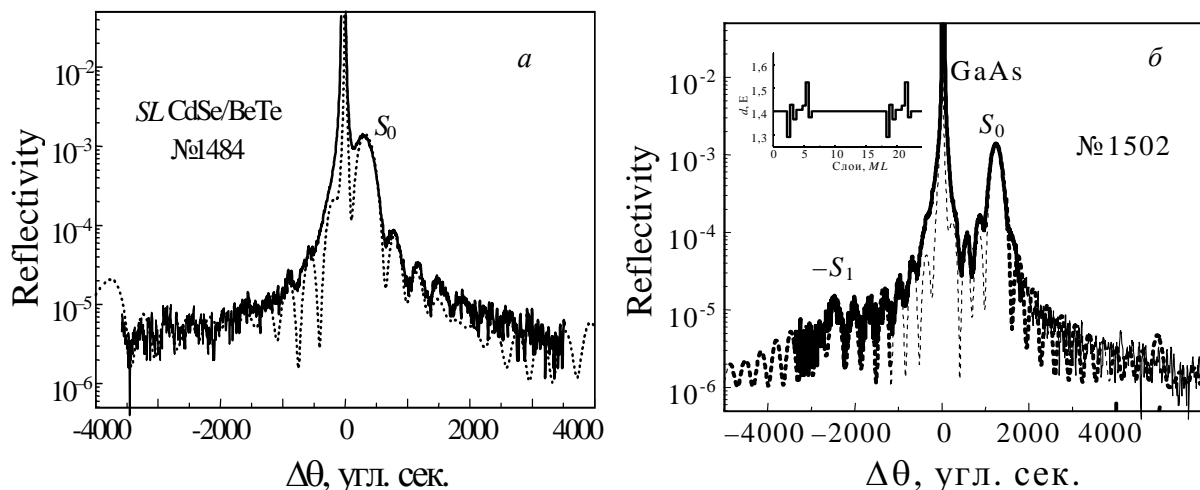


Рис. 8.5. Двухкристальные дифракционные кривые 004 отражения для сверхрешеток CdSe/BeTe, выращенных в разных режимах. Сплошная линия – эксперимент, пунктирная – расчет. На вставке к рис. 8.5,б – распределение межатомного расстояния по глубине СР, соответствующее лучшему совпадению расчетной и экспериментальной кривых

Непосредственно из кривых (002) были получены значения периода и среднего межплоскостного расстояния СР, а из относительной интенсивности спутников значения параметров B , K и b в приближении двухслойной

модели, которые приведены в таблице 8.1. В свою очередь, эти параметры были использованы для вычисления концентрации компонент x и z . Содержание CdTe, наносимого в двух режимах роста, определялось из независимого эксперимента, в котором измерялись кривые отражения от СР, содержащих только вставки CdTe (т.е. без CdSe), полученные значения $y=0,19$ для первого режима и $y=0,09$ для второго. Полученные значения содержания компонент в периоде закладывались в качестве первоначальных данных для расчета полной кривой отражения и уточнялись с помощью процедуры подгонки. Расчетные кривые, дающие наилучшее сходство с экспериментальными, показаны пунктиром на рис. 8.4, а,б, а соответствующие параметры даны в таблице 8.1.

Таблица 8.1. Структурные параметры сверхрешеток CdSe/BeTe, полученные из рентгенодифракционных кривых 002 отражения

	Период	B	t_2/t_1	$K=F_2/F_1$	x (CdSe)	y (CdTe)	z (BeSe)
1484	46 Å	0,24	0,29	0,84	0,31	0,36	0,36
1483	56,6 Å	0,12	0,25	0,49	0,93	0,36	1,14
1502	50,8 Å	0,031	0,35	0,68	0,63	0,28	1,09
1503	54 Å	0,025	0,35	0,50	1,2	0,28	1,43

Окончательные значения x и z немного (порядка 20%) отличаются от первоначальных, полученных по двухслойной модели из интенсивности сателлитов. Факторами, определяющими это отличие, являются: а) наличие буферного слоя и слоя-крышки, которые влияют на высоту слабых сателлитов; б) изменение структурных факторов соединений в угловом интервале измеряемой кривой отражения (при использовании параметра K брались их значения только при брэгговском угле для соответствующей компоненты); в) наличие интерфейсов, по составу связей анион–катион отличных от среднего состава тонкого слоя даже в предположении полного и равномерного смешения компонент.

Из таблицы 8.1 видно, что исследованные СР содержат большое число дополнительных связей Be–Se. Действительно, если первый интерфейс для CdSe-вставки образован связями Cd–Te, а второй – связями Be–Se, то слои CdSe, вставленные в матрицу BeTe, сдвинуты в направлении к поверхности (схематически это показано на рис. 8.6,а). Это смещение может влиять на интенсивности сателлитов и учитывалось при расчете кривых отражения. Однако, как показано выше (см. (8.10)), в целом связи Cd–Te и Be–Se уравниваются друг друга и мы можем их не учитывать при рассмотрении средней деформации СР. Тогда количество y CdTe-компоненты равно сумме нанесенного на два интерфейса CdTe, а отличие значения z (количество компоненты BeSe) от 0 равносильно появлению дополнительных Be–Se связей. Иными словами, число осажденных атомов Se превышает число атомов Cd, а содержание Te в СР должно быть меньше, чем атомов Be, если мы полагаем отсутствие вакансий.

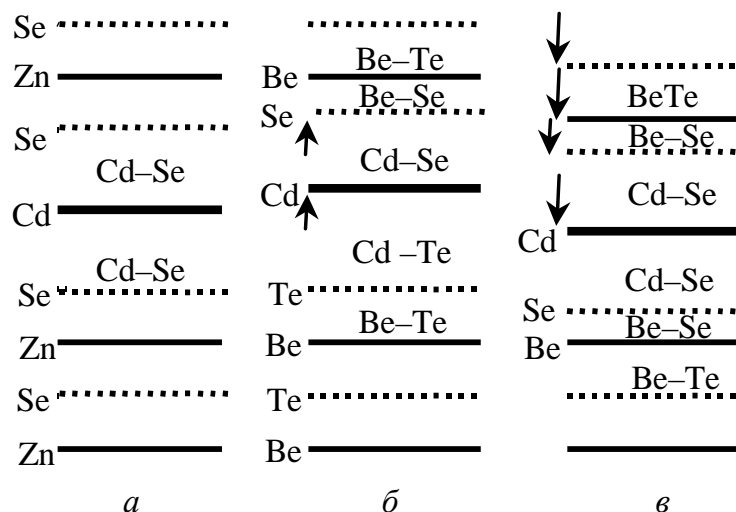


Рис. 8.6. Схематическое расположение атомных плоскостей на интерфейсах. В системе CdSe/ZnSe (а), со вставкой одного молекулярного слоя CdSe (б), в структуре CdSe/BeTe без образования дополнительных связей Be–Se (в) и с образованием связей Be–Se на нижнем интерфейсе. Стрелками показано смещение атомных плоскостей относительно их средних положений

Дополнительные связи Be–Se могут возникать на нижнем интерфейсе в результате выбивания атомами Se лежащих на поверхности атомов Te в процессе нанесения CdSe-слоя. Такой процесс обусловлен двумя обстоятельствами: намного большей энергией связи Be–Se по сравнению с Be–Te и значительным превышением концентрации анионов в потоке молекулярного пучка CdSe. Если в результате произошла полная замена атомов Te в верхнем атомном слое на атомы Se, то такая ситуация характеризуется значением $z=1$. Соответствующее расположение атомных плоскостей показано на рис. 8.6,б.

Из трех соединений CdTe, CdSe и BeSe первые два имеют положительное рассогласование параметров решетки относительно BeTe ($\Delta a/a$ равно, соответственно, 14 и 8 %), а BeSe – отрицательное (–9%). С другой стороны, для разностного рефлекса 002 структурные факторы всех трех компонент тонкого слоя меньше по абсолютной величине, чем значение $F(\text{BeTe})$, а $F(\text{CdSe})$ имеет даже другой знак. Поэтому одновременное увеличение или уменьшение концентрации CdSe и BeSe (x и z) с сохранением средней деформации, определяемой из углового положения среднего пика CP, заметно изменяет среднюю рассеивающую способность тонкого слоя. С этим обстоятельством и связана чувствительность интенсивности сателлитов на кривых 002 отражения к сложному составу CP и возможность определения значений x и z .

Это позволяет объяснить и особенности кривых, изображенных на рис. 8.4 и 8.5. Для CP, выращенных во втором режиме, образуется значительно больше BeSe-связей (относительно вставки CdSe+CdTe), чем для образца, выращенного в первом, связи Be–Se компенсируют по деформации вклад Cd–Te и Cd–Se, и среднее межплоскостное расстояние $\langle d \rangle$ тонкого слоя мало отличается от $d(\text{BeTe})$. Деформационный вклад мал (см. таблицу 8.1) и интенсивность сателлитов определяется значительной разницей структурных факторов BeTe и тонкого слоя, чем и обусловлена согласно (8.27) почти симметричная

форма кривой рис. 8.4,а с медленно спадающими сателлитами.

Для отражения 004 параметр решетки и структурный фактор соединений изменяются в одну и ту же сторону, поэтому для сложной композиции с малым отличием межплоскостного расстояния тонкого и толстого субслоев мала и разница их рассеивающих способностей, что ведет к подавлению интенсивностей сателлитов на 004-кривых (рис. 8.5, а,б). С другой стороны, 004-кривые более чувствительны к изменению межплоскостного расстояния d по глубине тонкого слоя. Расчет, сделанный для нескольких возможных распределений $d(z)$, соответствующих разным моделям роста, показал, что наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных кривых получается в предположении смещения компонент в пределах $3 ML$ (вставка на рис. 8.5,б), что указывает на шероховатость интерфейсов.

§6. Исследование сверхрешеток AlGaN/GaN

Описанные выше короткопериодные СР CdSe/BeTe относились к когерентным структурам (из-за малой общей толщины СР и толщины тонкой вставки) и при их изучении мы столкнулись с проблемой определения сложного состава тонкого слоя и интерфейсов. Исследованные нами сверхрешетки $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ характеризовались как достаточно большим несоответствием параметров решетки двух слоев (до 1% и больше), так и большой толщиной самих слоев и общей толщиной СР. Поэтому при их исследовании возникает проблема другого рода – определения релаксации и деформационного состояния как СР в целом, так и отдельных слоев.

Структуры AlGaN/GaN с примерно равной толщиной двух чередующихся слоев и периодом от 50 до 1000 Å и общей толщиной около 3 мкм были выращены методом MOCVD на сапфире с предварительным нанесением буферного слоя GaN или AlGaN толщиной 0,6 мкм. Рентгенодифракционные измерения проводились с использованием нескольких геометрий дифракции: симметричной брэгговской (0002-рефлекс), асимметричной брэгговской (отражение $11\bar{2}4$) и симметричной Лауэ (рефлекс $11\bar{2}0$).

Поскольку пленки AlN-нитридов, выращенные на сапфире, практически полностью релаксируют при температуре роста и напряжения в них, наблюдаемые при комнатной температуре, носят, в основном, термоупругий характер, то мы можем отнести это и к буферному слою и характеризовать СР двумя параметрами релаксации – релаксацией СР в целом относительно буферного слоя и релаксацией между отдельными слоями СР.

Для вюрцитных структур (к которым относятся слои AlGaN и GaN), растущих вдоль гексагональной оси $\langle 0001 \rangle$, параметр решетки a определяет межплоскостные расстояния в плоскости интерфейса, параметр c – перпендикулярно ему. Обозначим через a_i и c_i реальные (измеряемые) параметры решетки i -го слоя в системе, а через a_i^b и c_{ib} – соответствующие значения для слоя данного состава в свободном (ненапряженном состоянии), где индекс $i=0$ соответствует буферному слою, а $i=1,2$ – первому и второму субслоям СР.

Упругая деформация слоев СР будет равна

$$\varepsilon_i = \frac{a_i - a_i^b}{a_i^b}, \quad (8.32)$$

а реальный параметр $c_i = c_{ib} \cdot (1 - p\varepsilon_{ii})$, где $p = 2c_{13}/c_{33}$ есть отношение Пуассона. Тогда релаксацию упругих напряжений в СР можно характеризовать скачком $\Delta a_i = a_i - a_{i-1}$ параметра решетки a на гетерогранице или относительным уровнем релаксации

$$r_i = \frac{a_i - a_{i-1}}{a_i^b - a_{i-1}} = \frac{\Delta a_i}{a_i^b - a_{i-1}} \quad (8.33)$$

Величины Δa_1 и r_1 соответствуют релаксации на нижней гетерогранице (между буферным слоем и первым слоем СР), а Δa_2 и r_2 – релаксации на границах между отдельными слоями (рис. 8.7). Для нерелаксированной когерентной структуры $\Delta a_1 = \Delta a_2 = 0$. При сохранении когерентности отдельных слоев СР и ее релаксации как целого относительно буфера $\Delta a_2 = 0$, Δa_1 может быть как меньше, так и больше 0 в зависимости от состава буферного слоя. В общем случае релаксированной некогерентной СР оба скачка параметра будут отличны от 0, при этом для сохранения периодичности структуры Δa_2 должно быть одинаковым по абсолютной величине на всех границах между слоями СР.

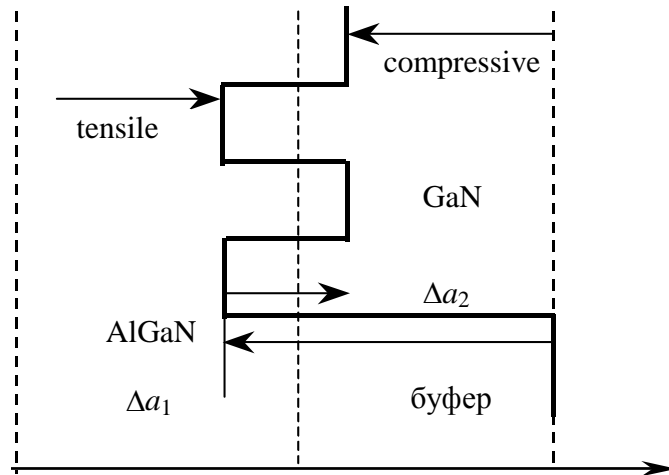


Рис. 8.7. Схематическое распределение параметра решетки a по глубине релаксированной сверхрешетки AlGaIn/GaN на буферном слое GaN. Пунктирные линии соответствуют параметру a для ненапряженных слоев и среднему значению по периоду сверхрешетки

Релаксация СР в целом приводит к изменению средних параметров решетки СР и, следовательно, к смещению дифракционной картины (кривой) от СР по шкале углов, не изменяя отношения интенсивностей отдельных сателлитов.

Что касается релаксации между слоями, то она вызывает изменение разности деформаций $\Delta\varepsilon$, которая может быть выражена виде:

$$\Delta\varepsilon_{\perp} = \frac{c_{AlN} - c_{GaN}}{c_{GaN}} x + p \frac{a_{AlN} - a_{GaN}}{a_{GaN}} x - p \frac{\Delta a_2}{a_{GaN}}, \quad (8.34)$$

где c_{GaN} , a_{GaN} и c_{AlN} , a_{AlN} – табличные параметры решетки соединений GaN и

AlN, соответственно, а отношение Пуассона $p=2c_{13}/c_{33}$ взято одинаковым для слоев GaN и AlGaN. Отсюда следует изменение параметра B и относительной интенсивности сателлитов.

Таким образом, СР $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ могут быть охарактеризованы пятью структурными параметрами: двумя релаксационными, содержанием x Al в слое твердого раствора, и толщиной слоев t_1 и t_2 . Вообще говоря, их значения могут быть получены из дифракционной кривой одного брэгговского симметричного отражения (0002 в нашем случае), анализ которой (см. выше) дает 5 независимых величин: $\langle c \rangle$, T , B , b и K . Однако такой путь для системы $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ (при небольших концентрациях $x < 0,3$) не дает надежных результатов, поскольку отношение структурных факторов 0002-рефлекса слоев GaN и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ близко к 1 и интенсивности сателлитов мало чувствительны к его изменению. Поэтому для получения необходимого набора структурных характеристик требуется привлечение дополнительных дифракционных измерений. Как и для большинства гетероструктур, для определения степени релаксации СР AlN-нитридов обычно используется асимметричная брэгговская дифракция [17-19]. В нашем исследовании мы использовали для этой цели симметричную Лауэ-геометрию, что позволяет непосредственно определить средний параметр $\langle a \rangle$ СР.

Конкретно процедура получения структурных параметров выглядела следующим образом. Из дифракционных кривых брэгговского отражения определялись: период T и средний параметр $\langle c \rangle$ (непосредственно из кривых) и соотношение толщин b и деформационный фактор B (из отношений интенсивностей сателлитов). Из измерений симметричного Лауэ-отражения получалось значение среднего параметра a сверхрешетки:

$$\langle a \rangle = (a_1 t_1 + a_2 t_2) / T.$$

Далее из величин B , $\langle c \rangle$ и $\langle a \rangle$ определялись реальные параметры c_i и a_i для обоих слоев СР, а отсюда содержание Al в слое AlGaN и релаксационные параметры Δa_1 и Δa_2 , а также деформации отдельных слоев СР по (8.32).

Эпитаксиальные слои нитридов, выращенные на сапфире, характеризуются большой плотностью прорастающих дислокаций (до 10^{10} см^{-2}), что вызывает сильное уширение дифракционных отражений. Поэтому классическая дифракционная картина с сателлитами не фиксируется на двухкристальных кривых симметричных брэгговских отражений, измеренных с широко открытым детектором. Однако прямое измерение распределения интенсивности вокруг узлов обратной решетки, выполненное методом трехкристальной дифрактометрии, показывает его периодический характер в направлении, нормальном к поверхности, хорошо разрешаемый для образцов с периодом СР вплоть до 1000 \AA . (рис. 8.8). Это обусловлено особенностью дефектной структуры нитридных пленок, характеризующейся превалирующей плотностью семейств прямолинейных дислокаций, прорастающих перпендикулярно поверхности. Последнее приводит к тому, что дифракционная картина в основном уширена в направлении, параллельном поверхности, а уширение в нормальном направлении значительно меньше [20-22].

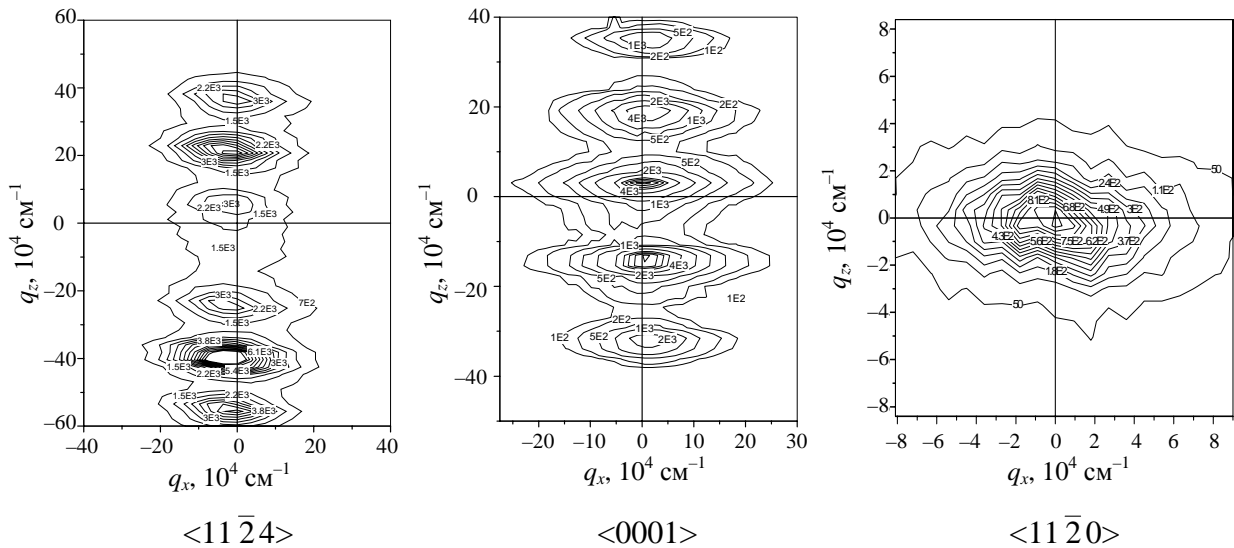


Рис. 8.8. Распределение интенсивности вокруг узлов обратной решетки для одного из образцов CP AlGa_xN/GaN, экспериментально измеренное на трехкристальном дифрактометре с образцом в симметричной брэгговской геометрии (узел 0002), асимметричной брэгговской (узел 11 $\bar{2}$ 4) и симметричной Лауэ-дифракции (узел 11 $\bar{2}$ 0)

Рис. 8.8 показывает такой же характер уширения для распределения интенсивности вокруг трех узлов обратной решетки, соответствующих 0002 симметричному брэгговскому отражению, 11 $\bar{2}$ 0 Лауэ-рефлексу и асимметричной брэгговской дифракции (11 $\bar{2}$ 4). Это указывает на то, что дислокационная структура сверхрешеток, составленных из нитридных слоев, во многом идентична той, что имеет место для однослойных нитридных пленок. Поскольку дополнительные центры отражения (сателлиты) распределены вдоль нормали (в направлении периодического изменения состава кристаллического слоя), то они могут быть зафиксированы на кривых, представляющих сечение узлов обратной решетки в этом направлении, что и имеет место для θ - 2θ -сканирования в симметричной брэгговской геометрии и для θ -кривых в симметричном случае Лауэ. Сателлиты видны также на интегральных двухкристальных кривых в асимметричной геометрии скользящего падения за счет того, что дифрагированная интенсивность интегрируется в направлении наибольшего уширения (касательная к сфере Эвальда почти параллельна поверхности).

Дифракционные кривые θ - 2θ -сканирования 0002 отражения для нескольких структур с примерно равным содержанием Al, но разным периодом CP приведены на рис. 8.9, а-в. В зависимости от параметров CP на них наблюдаются сателлиты вплоть до пятого порядка, что является свидетельством хорошей периодичности выращенных структур. Видно, что с увеличением периода CP при сохранении x кривые 0002 отражения заметно меняют свою форму. Интенсивность среднего пика падает, а боковых сателлитов возрастает. При больших $T > 1600$ Å кривая распадается на две системы осцилляций, локализованных около центров отражения (брэгговского угла) двух слоев GaN и AlGa_xN. Такая трансформация связана с увеличением деформационного параметра B с увеличением периода CP. Что касается углового положения среднего пика, то оно практически одинаково для CP с периодом 50÷400 Å.

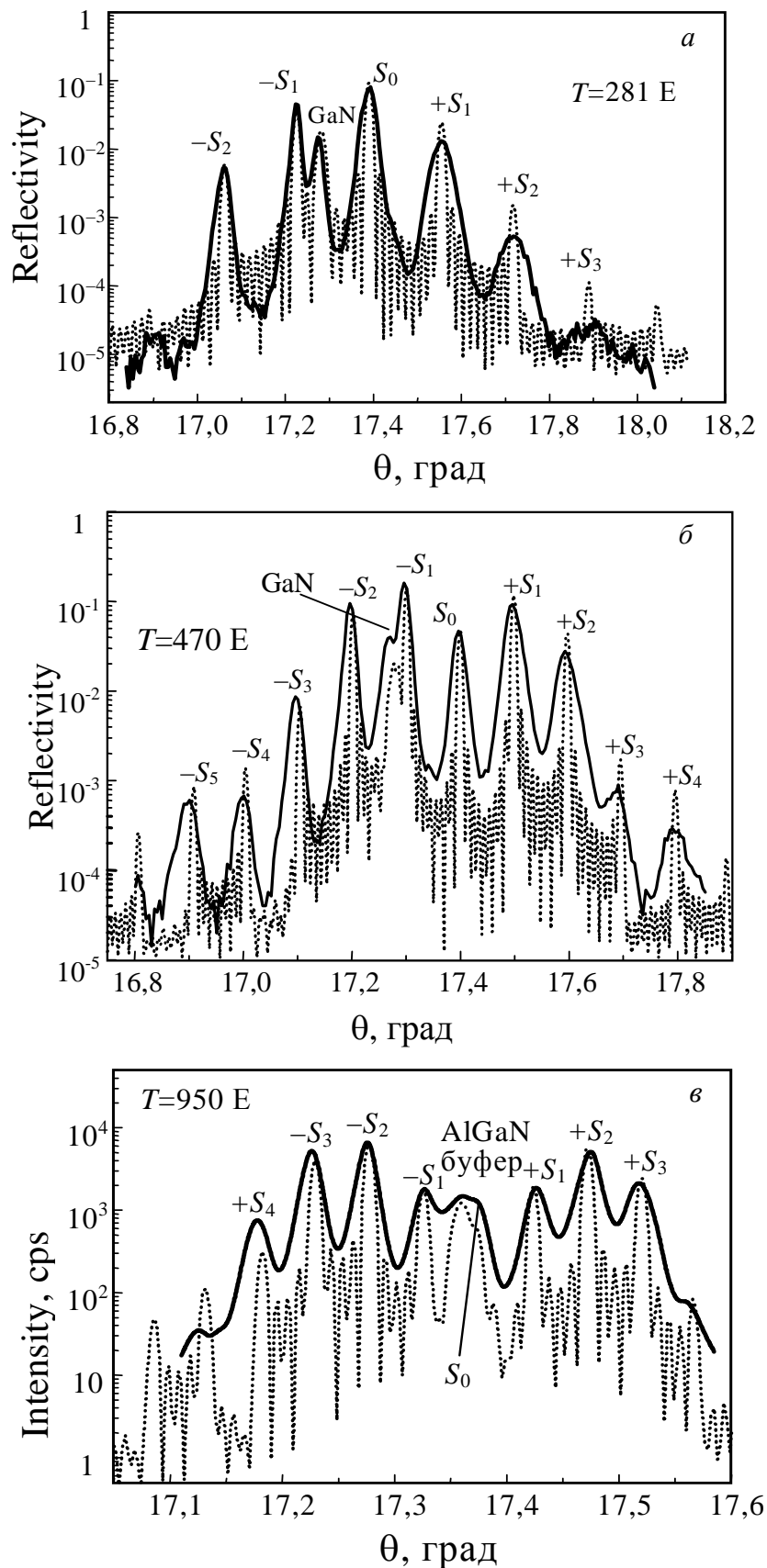


Рис. 8.9. Трехкристальные кривые θ - 2θ -сканирования симметричного брэгговского рефлекса 0002 для образцов системы AlGaIn/GaN с разным периодом СР. Сплошная линия – эксперимент, пунктирная – расчет. Параметры СР приведены в таблице 8.2

Таблица 8.2. Параметры сверхрешеток $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ и деформация слоев, определенные из рентгенодифракционных данных

№ образца	Буфер GaN				Буфер AlGaN		
	1055	1054	1051	1044	1059	927	870
$T, \text{Å}$	53,5	129	281	470	238	570	950
B	0,212	0,622	1,21	2,29	1,09	2,21	3,67
K	0,86	0,79	0,85	0,84	0,79	–	0,86
$\langle c \rangle, \text{Å}$	5,154	5,152	5,153	5,155	5,155	5,162	5,160
$\langle a \rangle, \text{Å}$	3,176	3,1761	3,177	3,176	3,175	3,176	3,175
t_{AlGaN}	1,2	1,05	1,15	1,05	1	1,3	1,1
t_{AlGa}							
$x (\text{Al})$	0,286	0,314	0,3	0,29	0,31	0,26	0,265
$a1, \text{Å}$	-0,018	-0,012	-0,016	-0,010	0,007	0,001	-0,003
$a2, \text{Å}$	0,010	0	0,008	0	-0,007	-0,003	-0,006
$\varepsilon_{\text{GaN}} \cdot 10^{-3}$	-2,4	-4,0	-2,6	-3,1	-3,75	-3,6	-3,3
$\varepsilon_{\text{AlGaN}} \cdot 10^{-3}$	1,3	3,6	2,2	2,3	2,7	1,41	1,1

Отметим, что на дифракционных кривых от нитридных пленок, выращенных на сапфире, нет пика подложки (ближайший рефлекс сапфира отстоит на несколько градусов от измеряемого интервала углов), который служит обычно реперной точкой для определения деформаций эпитаксиальных слоев. Поэтому для определения параметров a и c необходима привязка к абсолютной шкале углов отражения. Это осуществлялось путем измерения угла рассеяния 2θ для среднего пика CP или одного из наиболее сильных сателлитов с помощью анализатора.

Параметры CP, полученные описанным выше способом и уточненные с помощью процедуры подгонки экспериментальных и расчетных кривых, приведены в таблице 8.2. Расчетные кривые, показывающие наилучшее соответствие с экспериментом, изображены пунктиром на рис. 8.9. Расчет, выполненный с использованием выражений (8.1) и (8.8), дает дифракционную картину для идеальной сверхрешетки без структурных дефектов. Для дефектных структур, к которым относится изучаемая нами система, пики-сателлиты уширены за счет влияния дефектов. Однако практика показала, что все сателлиты сверхрешетки искажаются одинаковым образом (если учитывать только влияние дефектов, а не ошибок в периодичности CP), что позволяет проводить сравнение расчетных (для идеальной CP) и экспериментальных (искаженных) кривых отражения по относительной высоте сателлитов, или по их интегральной интенсивности.

Из таблицы 8.2 видно, что слои GaN в CP находятся в состоянии сжатия ($\varepsilon_{\text{GaN}} < 0$), а слои твердого раствора – в состоянии растяжения ($\varepsilon_{\text{AlGaN}} > 0$), причем это имеет место для всех исследованных структур независимо от состава буферного слоя, при этом значения деформаций меняются от образца к образцу, но какой-либо зависимости от периода CP не выявляется. В абсо-

лутном выражении деформации сжатия слоев GaN больше, чем деформация растяжения слоев AlGaIn. Это отличие вызвано, в основном, термоупругим напряжением. Его можно оценить эмпирически, исходя из углового положения пика отражения буферного слоя GaN в симметричной лауэвской геометрии (полученное значение $\delta\varepsilon_T = -1,2 \cdot 10^{-3}$). Если вычесть термоупругий вклад, то значения ε_{GaN} и $\varepsilon_{\text{AlGaIn}}$ становятся близкими по абсолютной величине. Это показывает, что для всех исследованных СР имеет место релаксация на нижней гетерогранице, т.е. снятие напряжений, возникающих между СР в целом и буферным слоем. Это не удивительно, учитывая общую толщину СР (около 3 мкм) и относительное несоответствие между СР в целом и буферным слоем GaN порядка $-0,32\%$ и выше (исходя из среднего состава $\text{СР}_{\langle x \rangle} = 0,15$) так что возникающие напряжения заведомо больше критических. Последнее относится и к росту на буферном слое твердого раствора, если концентрация Al в буферном слое заметно отличается от средней по СР. Если из данных таблицы 8.2 вычислить средние по периоду деформации СР при температуре релаксации, то их значения показывают наличие остаточных деформаций растяжения $\langle \varepsilon \rangle \approx (0,6-1,2) \cdot 10^{-3}$ для образцов, выращенных на GaN-буфере.

Из полученных данных видно, что снятие напряжений происходит не только на нижней гетерогранице СР-буфер, но и между отдельными слоями СР. На это указывают отличные от 0 значения скачка параметра Δa_2 . Значения этой величины меняются от образца к образцу, не обнаруживая какой-либо закономерной зависимости от периода или содержания Al. Такой разброс можно объяснить тем, что релаксация между слоями зависит от дефектной структуры буферных слоев и пленок, а последняя не в последнюю очередь определяется конкретными условиями роста того или иного образца.

Выше мы определяли параметры СР из сравнения экспериментальных кривых отражения с расчетными по относительным интенсивностям сателлитов. Возникает вопрос, насколько правомерно использовать кинематические формулы, годные для идеальных сверхрешеток с общей толщиной меньше экстинкционной длины, для расчета кривых отражения от толстых и сильно нарушенных структур. В подтверждение такой возможности можно высказать несколько соображений. Во-первых, само наличие сателлитов на экспериментальных кривых (даже в случае распада общей кривой на две системы пиков) указывает на когерентность волн, дифрагированных на разной глубине, и необходимость сложения амплитуд, а не интенсивностей от разных слоев. (Когерентность в данном случае задается самим упорядоченным расположением кристаллических областей с определенным параметром решетки и рассеивающей способностью по глубине). Во-вторых, при измерении кривых $\theta-2\theta$ -моды сканирования вклад в дифракцию дает только малая доля кристаллических областей каждого слоя (для которых кристаллографические плоскости 0002 параллельны поверхности в пределах ширины интерференционной области данного отражения), так что эффективная рассеивающая способность каждого слоя сильно падает. Это исключает влияние динамических эффектов первичной экстинкции и делает структуру с общей толщиной порядка 4-5 мм

много меньшей эффективной экстинкционной длины. Из рис. 8.9 видно, что дифракционные кривые, рассчитанные по кинематической теории с использованием параметров, приведенных в таблице 8.2, показывают хорошее согласие с экспериментальными кривыми по относительной интенсивности спутников.

§7. Определение параметров дислокационной структуры эпитаксиальных слоев

Эпитаксиальные слои отличаются по своей дефектной структуре от ростовых монокристаллов. Это вызвано тем, что основным источником генерации дефектов в слоях является релаксация упругих напряжений несоответствия, возникающих из-за неравенства параметров решетки пленки и подложки или отдельных слоев между собой. Поэтому дефектная структура характеризуется более упорядоченным распределением дефектов, большой анизотропией полей смещений и появлением явно выраженных направлений – вдоль поверхности кристаллической пластины (и гетерограниц) и по нормали к ней. Основным типом дефектов являются дислокации, которые обычно разделяют на дислокации несоответствия, локализованные в виде упорядоченных сеток на гетерограницах и прорастающие дислокации. Последние образуются, главным образом, при островковом *3D*-росте эпитаксиальных слоев с большим несоответствием параметров решетки относительно подложки ($\Delta a/a > 0,01$).

Основным эффектом, производимым дислокациями, является уширение дифракционных пиков. Еще в 70-е годы полуширина максимума на двухкристальной кривой отражения являлась главным критерием структурного совершенства выращенной эпитаксиальной пленки. Затем, в связи с развитием трехкристальной дифференциальной дифрактометрии стали измерять угловую ширину дифракционных отражений от слоев в двух направлениях: вдоль дифракционного вектора и перпендикулярно ему. Анализ уширений проводится в большинстве работ на основе блочной модели кристалла, развитой еще в работах [23,24]. В настоящее время при изучении дислокаций используются 4 параметра. Уширение перпендикулярно дифракционному вектору связывается со средним разворотом блоков $\langle \omega \rangle$ и их эффективным латеральным размером $\langle \tau_x \rangle$, а вдоль вектора \vec{H} – с деформацией внутри блоков $\langle \varepsilon \rangle$ и их размерами $\langle \tau_z \rangle$ в направлении нормали \vec{n} . Разделение деформационных и размерных вкладов осуществляется с помощью графиков Вильямсона-Холла [25] на основе измерения нескольких порядков отражения. Применение блочной модели к анализу хаотически распределенных дислокаций представляется сомнительным, но оно широко распространено за неимением более строгих подходов. При этом плотности дислокаций вычисляются на основе классических формул Гая-Хирша-Келли, рассмотревших уширение $\langle \omega \rangle$ рефлексов, вызванное средними разориентациями локальных областей кристалла вокруг дислокаций [23], и Гордона-Авербаха [24], рассчитавших дилатационное уширение $\langle \varepsilon \rangle$ от дислокаций. Применительно к полупроводниковым системам на основе соединений со структурой сфалерита эти форму-

лы преобразованы в работе [26]. В последние годы появились работы, в которых проводится более строгое теоретическое рассмотрение влияния различных семейств дислокаций в гетероструктурах на дифракционную картину [27,28].

Многочисленные экспериментальные работы показали, что дислокационные сетки, локализованные на гетерогранице, вызывают растяжение дифракционной картины в направлении, перпендикулярном вектору обратной решетки, независимо от направления последнего [29,30]. Пики θ -сканирования от слоев уширены и имеют форму, близкую к гауссовской, а распределение интенсивности вокруг узлов – форму эллипсов, вытянутых перпендикулярно \vec{H} . При этом уширение дифракционных линий вдоль \vec{H} много меньше, что объясняется как общим свойством дислокационных ансамблей (дислокации приводят, в основном, к разворотам кристаллических плоскостей), так и тенденцией к образованию сгустков одноименных дислокаций в упорядоченной сетке.

Если влияние дислокационных сеток еще укладывается в рамки вышеописанной блочной модели, то для структур с прорастающими дислокациями первые же работы с использованием комбинации нескольких геометрий дифракции (симметричной и асимметричной по Брэггу, брэгговской и лауэвской дифракции) показали, что разориентационное и деформационное уширение могут быть не одинаковы для разных геометрий отражения [31-33]. Пример такого анизотропного уширения показан на рис. 8.10, где приведены кривые радиального ($\theta-2\theta$) и поперечного (θ) сечений узлов обратной решетки 0002 (симметричная брэгговская геометрия) и $(10\bar{1}0)$ (симметричная Лауэ-дифракция) для системы сверхрешетка AlGaIn/GaN-буфер GaN-(111)Si. Наблюдается характерное для слоев AlN-нитридов преимущественное уширение θ -моды в брэгговской и $\theta-2\theta$ -кривой в Лауэ-геометрии.

Поэтому в [34,35] был предложен более общий подход к анализу уширений и дислокационной структуры эпитаксиальных слоев. Эпитаксиальные слои характеризуются компонентами тензора средней дисторсии $\langle e_{ij} \rangle$ и их среднеквадратичными отклонениями δe_{ij} (компонентами микродисторсии).

Значения $\langle e_{ij} \rangle$ описывают изменение параметров средней элементарной ячейки относительно монокристалла той же ориентации. В обратном пространстве они определяют положение узла обратной решетки. Компоненты микродисторсии δe_{ij} вызваны локальными полями смещений вокруг структурных дефектов. Диагональные компоненты означают локальные изменения $\delta c/c$ и $\delta a/a$ межплоскостных расстояний, недиагональные – развороты локальных областей и деформацию сдвига. Микродисторсия вызывает уширение распределения интенсивности вокруг узлов обратной решетки:

$$\delta H_i = \sum \delta_{ji} H_j. \quad (8.35)$$

Связь между δH и угловой шириной трехкристалльных кривых зависит от моды сканирования: $w=\delta H/H$ для θ - и $w=\delta H/(k\cos\theta_B)$ для $\theta-2\theta$ -кривых. Для симмет-

ричных рефлексов, где $|\vec{H}|=H_z$, H_x или H_y (направление z параллельно нормали \vec{n} , оси x и y лежат в плоскости поверхности), полуширина каждого сканирования (w_θ и $w_{\theta-2\theta}$) связана только с одной компонентой δe_{ij} .

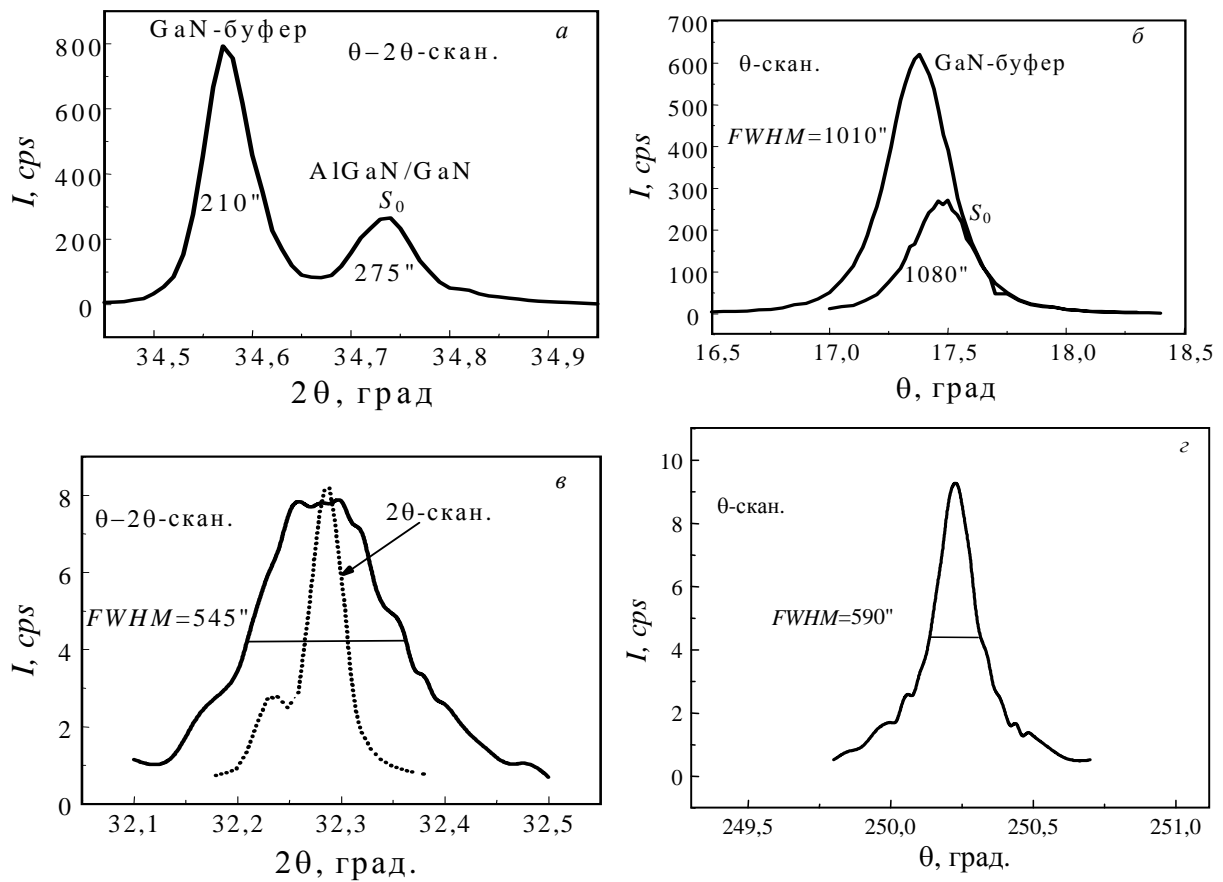


Рис. 8.10. Анизотропное уширение дифракционных пиков для нитридных слоев. Кривые $\theta-2\theta$ - и θ -сканирования: симметричного брэгговского отражения (0002) (а, б) и симметричного Лауэ-рефлекса ($10\bar{1}0$) (в, г). Структура CP AlGaIn/GaN–буферный слой GaN, выращенная MBE-методом на (111)-Si. Пунктиром на рис. 8.10,в показано распределение интенсивности в падающем пучке

При анализе учитывается дополнительное уширение рефлексов из-за ограниченных размеров областей когерентного рассеяния согласно $\delta H_i=1/\langle\tau_i\rangle$. Для разделения вкладов микродисторсии и размерного эффекта измеряются два порядка отражения в каждой геометрии и используется разная зависимость их от брэгговского угла. Для высокосимметричных ориентаций кристалла плоскости, параллельные поверхности, изотропны, направления x и y равнозначны, и число независимых компонент δe_{ij} уменьшается до 5. Из измерений в трех симметричных геометриях (Брэгг-, Лауэ- и скользящей) получаются все 5 компонент δe_{ij} и размеры когерентных областей в направлении нормальном к интерфейсу (τ_z) и параллельном (τ_x). В симметричной брэгговской геометрии ($\vec{H} \parallel \vec{z}$) определяются δe_{zz} и δe_{zx} , в симметричной Лауэ-дифракции ($\vec{H} \parallel \vec{x}$, \vec{n} лежит в плоскости дифракции) – δe_{xx} и δe_{xz} , в скользящей геометрии ($\vec{H} \parallel \vec{y}$, \vec{n} перпендикулярно плоскости дифракции) – δe_{xx} и δe_{xy} .

Компоненты тензора микродисторсии могут быть увязаны с определенными системами дислокаций в эпитаксиальном слое. Согласно М.А. Кривоглазу [36], для ансамблей прямолинейных дислокаций распределение интенсивности дифракции вокруг узлов обратной решетки имеет форму дисков, перпендикулярных линии дислокации, а ширина гауссовского распределения в них определяется произведением $(\vec{H}\vec{b})$, где \vec{b} – вектор Бюргерса дислокаций. Схема связи между различными прямолинейными семействами дислокаций, компонентами микродисторсии и формой уширения узлов обратной решетки представлена на рис. 8.11.

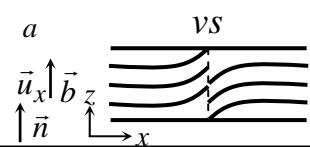
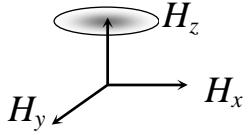
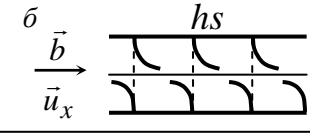
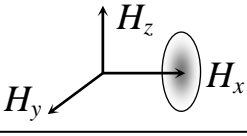
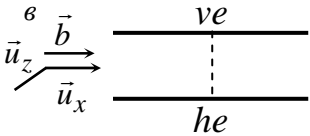
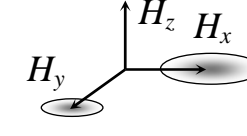
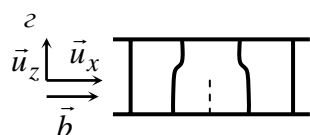
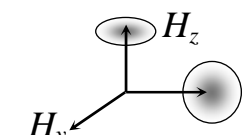
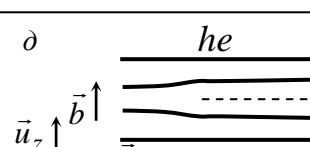
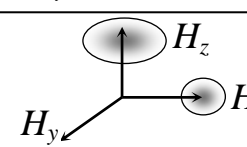
Тип дислокаций	$\langle \delta e_{ij} \rangle$	Обратное пространство
a 	$\langle \delta e_{zx} \rangle$	
b 	$\langle \delta e_{xz} \rangle$ $\langle \delta e_{xy} \rangle$	
c 	$\langle \delta e_{xx} \rangle$ $\langle \delta e_{xy} \rangle$	
z 	$\langle \delta e_{xz} \rangle$ $\langle \delta e_{zx} \rangle$ $\langle \delta e_{xx} \rangle$ $\langle \delta e_{zz} \rangle$	
d 	$\langle \delta e_{xz} \rangle$ $\langle \delta e_{zx} \rangle$ $\langle \delta e_{xx} \rangle$ $\langle \delta e_{zz} \rangle$	

Рис. 8.11. Связь между распределением интенсивности вокруг узлов обратной решетки (правый столбец), компонентами тензора микродисторсии δe_{ij} и типом прямолинейных дислокаций (левый столбец): *vs* – вертикальные винтовые, *hs* – горизонтальные винтовые, *ve* – вертикальные краевые, *he* – горизонтальные краевые дислокации. \vec{b} – вектор Бюргерса, \vec{u} – направления поля смещения вокруг дислокаций, H_z , H_x и H_y – дифракционные векторы в симметричной брэгговской, симметричной Лауэ- и скользящей геометрии дифракции, соответственно

Из него видно, что параллельные интерфейсу краевые дислокации дают вклад в δe_{xx} , δe_{zz} , δe_{xz} , δe_{zx} , а параллельные интерфейсу винтовые дислокации в δe_{xy} и δe_{xz} . Краевые дислокации, перпендикулярные интерфейсу, приводят к уширениям в симметричной Лауэ- и скользящей геометрии (компоненты δe_{xx} и δe_{xy}) и никак не сказываются на симметричных брэгговских отражениях. С другой стороны, вертикальные винтовые дислокации вызывают только уширение θ -моды в симметричной брэгговской геометрии и не фиксируются в других симметричных отражениях. Поскольку скользящая геометрия диф-

рации обладает малой глубиной проникновения излучения, то она может быть заменена измерением ряда некопланарных рефлексов (например, типа $(00\bar{1}l)$ для гексагональных структур) от дифрагирующих плоскостей, составляющих большие углы с поверхностью (нормаль \vec{n} не лежит в плоскости рассеяния) [37]. Правда, при этом в большинстве работ предельные значения полуширины двухкристалльных пиков таких отражений связываются только с так называемым кручением (*twist*), т.е. компонентой δe_{xy} .

Для вычисления плотности дислокаций из уширений трехкристалльных кривых, можно использовать уже упомянутые классические выражения [23,24]. Тогда для недиагональных компонент δe_{ij} (уширение из-за разориентаций)

$$\langle \delta e_{ij} \rangle^2 \cong 0,8b^2\rho. \quad (8.36)$$

Здесь b – проекция вектора Бюргерса на вектор обратной решетки \vec{H} . (Отметим, что δe_{ij} в нашем случае определяется как дисперсия гауссовской кривой θ -моды сканирования). Из диагональных компонент δe_{ii} (деформационное уширение) плотность дислокаций определяется по уравнению [25]:

$$\langle \delta e_{ii} \rangle^2 \cong K_{av} \frac{5b^2\rho}{16\pi^2} \left| \ln(2 \cdot 10^{-7} \rho) \right|, \quad (8.37)$$

где K_{av} есть фактор, зависящий от взаимной ориентации \vec{b} , \vec{H} и нормали к плоскости скольжения дислокаций [26].

Если одноименные дислокации образуют малоугловые границы, то из соответствующей недиагональной компоненты их плотность равна

$$\rho_b \cong \frac{\delta e_{ij}}{b\tau_i}. \quad (8.38)$$

Анализ компонент микродисторсии был использован при изучении дислокационной структуры эпитаксиальных слоев GaN и твердых растворов AlGaN [38, 39]. Для большинства образцов этих структур наблюдается сильная анизотропия в уширении рентгеновских рефлексов. Как правило, $w_\theta(\text{Брэгг}) \gg w_\theta(\text{Лауэ})$, а $w_{\theta-2\theta}(\text{Брэгг}) \ll w_{\theta-2\theta}(\text{Лауэ})$, т.е. полуширина θ -пиков заметно больше в брэгговской геометрии, а $\theta-2\theta$ -пиков – для симметричных Лауэ-отражений. Для компонент микродисторсии обычно получают соотношения: $\delta e_{zx} > \delta e_{xz}$, $\delta e_{xx} > \delta e_{zz}$, $\delta e_{xy} > \delta e_{yx}$.

В качестве примера в таблице 8.3 приведены данные для компонент микродисторсии, полученные для двух образцов толстых (порядка 25 мкм) пленок GaN, выращенных методом газофазной эпитаксии на подложке (0001) сапфира без буферного слоя (A1) и с предварительным нанесением MOCVD-GaN-буфера (A2). Приведены также данные, полученные для самого буферного слоя (B2). Неравенство $\langle \delta e_{zx} \rangle > \langle \delta e_{xz} \rangle$ показывает, разориентации плоскостей, параллельных поверхности, выше чем для перпендикулярных плоскостей. Соотношение $\langle \delta e_{xx} \rangle > \langle \delta e_{zz} \rangle$ соответствует более сильным локальным вариациям расстояний между плоскостями, нормальными к поверхности, чем между параллельными ей плоскостями.

Таблица. 8.3. Компоненты тензора микродисторсии для слоев GaN, выращенных на *c*-сапфире

Слой	$\langle \delta e_{zz} \rangle, 10^{-4}$	$\langle \delta e_{zx} \rangle, 10^{-4}$	$\langle \delta e_{xx} \rangle, 10^{-4}$	$\langle \delta e_{xz} \rangle, 10^{-4}$	$\langle \delta e_{xy} \rangle, 10^{-4}$
A1	2,3	12,5	7,6	12,2	67,0
B2	2,4	9,2	6,7	4,3	41,0
A2	2,6	4,7	3,7	1,9	32,5

Эти свойства ведут к уширению узлов обратной решетки GaN-слоев в направлении, параллельном поверхности, причем это имеет место для рефлексов разных геометрий. Отсюда следует вывод о существовании в слоях АЗ-нитридов преимущественной плотности прорастающих перпендикулярно гетерогранице дислокаций винтового (из первого неравенства) и краевого (из второго неравенства) типов (см. рис. 8.3). Тогда плотность первых из них определяется из разницы квадратов двух недиагональных компонент δe_{zx} и δe_{xz} с использованием (8.36), а плотность вторых – из разности диагональных компонент δe_{xx} и δe_{zz} по формуле (8.37). С использованием пары компонент δe_{xx} и δe_{xy} (первая из них определяется из измерений в Лауэ-геометрии, вторая – из скользящей дифракции) удается разделить вклады от краевых дислокаций, хаотически распределенных в слое и образующих малоугловые границы, и определить плотности тех и других.

Для образцов, описанных выше, параметры дефектной структуры (плотности дислокаций и размеры областей когерентного рассеяния) приведены в таблице 8.4. Из нее видно, что плотности всех семейств дислокаций для пленки, выращенной на буфере, уменьшаются по сравнению с самим буферным слоем. В то же время структурное совершенство пленки, выращенной без буфера (A1) заметно хуже, чем для остальных слоев. Для этого же образца компоненты δe_{zx} и δe_{xz} практически равны друг другу, что указывает на более хаотическое распределение дислокаций в образце.

Таблица. 8.4. Размеры областей когерентного рассеяния параллельно поверхности (τ_x) и в направлении нормали к ней (τ_z) и плотности дислокаций вертикальных винтовых (ρ_{vs}), вертикальных краевых (ρ_{ve}) и краевых в вертикальных малоугловых границах (ρ_b)

Слой	τ_x , мкм	τ_z , мкм	$\rho_{vs}, 10^8 \text{ см}^{-2}$	$\rho_{ve}, 10^9 \text{ см}^{-2}$	$\rho_b, 10^9 \text{ см}^{-2}$
A1	0,7	0,40	–	2,3	2,9
B2	1,00	1,3	2,9	1,8	1,2
A2	1,6	> 1	0,9	0,8	0,6

Аналогичная дислокационная структура наблюдается и для сверхрешеток на основе нитридов Ga и Al. Об этом говорит, прежде всего, форма распределения интенсивности в обратном пространстве (контуры равной интенсивности вытянуты в направлении, параллельном поверхности) (см. рис. 8.10). Для структур, описанных в §6, из экспериментальных кривых разных мод сканирования следует, что для значений w имеют место те же соотношения, которые характерны и для одиночных слоев АЗ-нитридов, а именно,

$$w_{\theta-2\theta}(\text{Брэгг}) < < w_{\theta-2\theta}(\text{Лауэ}), w_{\theta}(\text{Брэгг}) >> w_{\theta}(\text{Лауэ}).$$

Зависимость полуширины пиков $\theta-2\theta$ - и θ -мод сканирования от состава слоя твердого раствора для образцов с одинаковым периодом приведена на рис. 8.12.

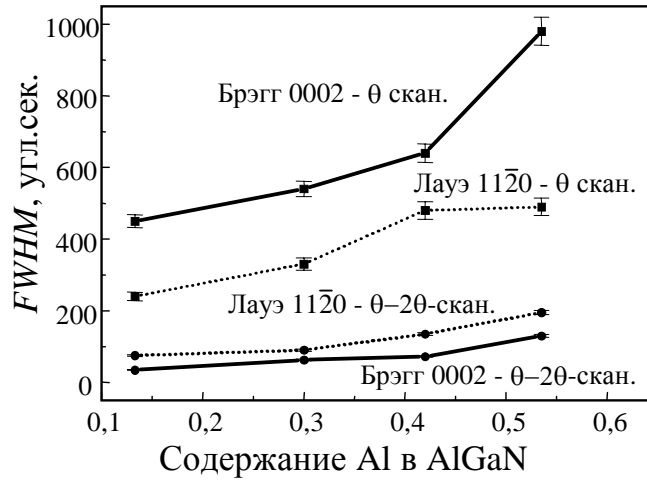


Рис. 8.12. Зависимость полуширины дифракционных пиков $\theta-2\theta$ - и θ -сканирования симметричных брэгговского и лауэвского рефлексов для CP AlGaN/GaN от содержания Al в слоях твердого раствора

Полный набор данных (5 компонент тензора микродисторсии и размеры областей когерентного рассеяния) некоторых образцов с разным периодом и содержанием Al приведен в таблице 8.5. Для образцов с содержанием $x=0,3$ имеют место характерные для большинства нитридных слоев соотношения между компонентами микродисторсии ($\delta\epsilon_{xx} > \delta\epsilon_{zz}$ и $\delta\epsilon_{zx} > \delta\epsilon_{xz}$), что является свидетельством превалирующей плотности прорастающих винтовых и краевых дислокаций (или смешанных). Из таблицы 8.5 следует, что изменения полуширины мод сканирования на рис. 8.12 от периода и концентрации Al связаны, в основном, с увеличением плотности дислокаций.

Таблица 8.5. Компоненты тензора микродисторсии и размеры областей когерентного рассеяния для сверхрешеток AlGaN/GaN на сапфире

Период, Å	$x(\text{Al})$	$\delta\epsilon_{zz}, 10^{-4}$	$\delta\epsilon_{zx}, 10^{-4}$	$\delta\epsilon_{xx}, 10^{-4}$	$\delta\epsilon_{xz}, 10^{-4}$	$\delta\epsilon_{xy}, 10^{-4}$	$\tau_z, \text{мкм}$	$\tau_x, \text{мкм}$
53	0,29	3,8	10,3	6,1	4,1	19	0,46	0,22
280	0,30	2,2	12				0,22	>1
470	0,31	2,9	11,3	5,4	3,4	29	0,93	0,67
142	0,54	9,5	20,1	9,8	10,5	22	0,28	1,4

Из таблицы 8.5 видно, что для образцов с разным периодом заметно меняются компоненты $\delta\epsilon_{zz}$ и $\delta\epsilon_{xz}$, связанные с горизонтальными дислокациями. Появление в сверхрешетках горизонтальных дислокаций или дислокаций с большой горизонтальной проекцией (по сравнению с одиночными слоями GaN) обусловлено релаксацией сверхрешетки как целого относительно буферного слоя и частичным снятием напряжений между отдельными слоями CP (см. выше). Из таблицы 8.5 следует, что плотность горизонтальных дислокаций больше для образца с наименьшим периодом CP, что может быть

объяснено тем, что данные дислокации – это дислокации (сетки) на гетерограницах между субслоями СР, а количество таких границ, разумеется, тем больше, чем меньше период СР при одинаковой общей толщине СР.

Несколько иная тенденция имеет место при увеличении содержания Al в СР (образцы 1044 и 1075). Здесь имеет место увеличение всех компонент, кроме $\delta\varepsilon_{xy}$, т.е. увеличение плотности всех дислокаций. Примерное равенство компонент $\delta\varepsilon_{xx}$ и $\delta\varepsilon_{zz}$ для образца с наибольшей концентрацией Al позволяет предположить, что для данного образца имеет место не типичная структура с прямолинейными дислокационными ансамблями, перпендикулярными гетерогранице, но более хаотическое распределение дислокаций по толщине. Правда, большое значение $\delta\varepsilon_{zx}$ говорит о том, что система прямолинейных винтовых дислокаций сохраняется и в этом образце. В компоненту ε_{xy} основной вклад вносят вертикальные краевые дислокации, объединяющиеся в стенки и обеспечивающие разворот отдельных областей (столбцов) вокруг нормали к поверхности. Уменьшение $\delta\varepsilon_{xy}$ с ростом x , вероятно, связано с уменьшением вероятности образования таких стенок при более хаотическом распределении дислокаций. На это же указывает заметно большее значение эффективного латерального размера когерентных областей для этой сверхрешетки.

Выше мы анализировали полуширины дифракционных максимумов. Не менее важной проблемой для понимания рассеяния в дислокационных кристаллах и строения дислокационных ансамблей является форма пиков. Этот вопрос в последние годы стал предметом дискуссии [28, 40, 41]. Для хаотических дислокаций как приближенная блочная модель [23-25], так и строгая кинематическая теория с рассмотрением полей деформаций вокруг дислокаций [36, 42], оперируют, за некоторыми исключениями, гауссовской формой уширенных дифракционных пиков. Только на дальних крыльях распределения вдоль дифракционного вектора интенсивность меняется как $1/q^3$. Гауссовская форма кривых получается и из теоретического анализа влияния дислокационных сеток в рассогласованных эпитаксиальных системах в случае $rd > 1$, где ρ – линейная плотность дислокаций в сетке, а d – толщина пленки [27]. Экспериментальные измерения для систем с сетками дислокаций на гетерогранице пленка–подложка также показали гауссовское уширение перпендикулярного дифракционному вектору (θ -мода сканирования) распределения интенсивности. Но для сильно рассогласованных систем, где велик вклад прорастающих дислокаций, образующихся в процессе 3D-роста пленок, распределение вдоль дифракционного вектора (θ -2 θ -мода) имеет лоренцовскую форму [31].

Измеренные в наших работах уширенные пики (сателлиты) рефлексов от СР не имели чисто гауссовской формы, а хорошо аппроксимировались пиковой функцией Войта с большой долей лоренцовской составляющей как для θ -, так и для θ -2 θ -мод сканирования. На рис. 8.13 представлен характерный пример такой аппроксимации для θ -кривых 0002 брэгговского и 11 $\bar{2}$ 0 лауэвского рефлексов одного из образцов. Видно, что для брэгговских пиков прева-

лирует гауссовская составляющая, а для Лауэ-геометрии вклады гауссовского и лоренцовского уширений примерно равны. Можно предположить, что упорядоченные семейства одноименных дислокаций приводят к гауссовской форме уширенных дифракционных пиков, в то же время хаотическое распределение дислокаций дает распределение интенсивности ближе к функции Лоренца. Учитывая, что в кривые θ -моды брэгговской дифракции основной вклад вносят прорастающие прямолинейные винтовые дислокации, а уширение θ -кривых симметричных Лауэ-отражений может быть вызвано только горизонтальными дислокациями, можно говорить о более хаотическом распределении горизонтальных дислокаций или их фрагментов по сравнению с вертикальными дислокациями. Для образца с наибольшим содержанием Al в

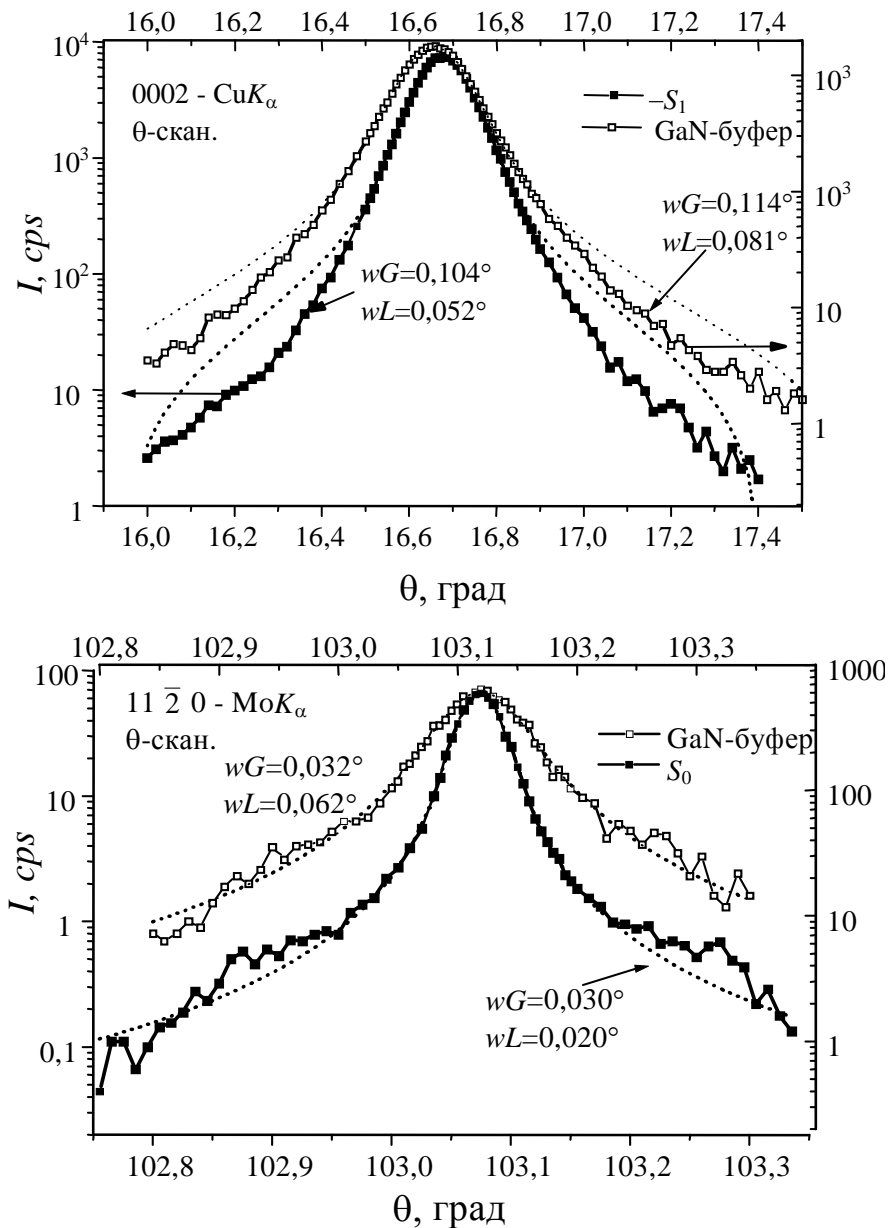


Рис. 8.13. Дифракционные пики θ -сканирования симметричных брэгговского (0002) (а) и лауэвского ($11\bar{2}0$) рефлексов (б) (сплошная линия с точками) и их аппроксимация пиковой функцией Войта (пунктир). Образец – CP AlGaIn/GaN-буфер GaN-с-сапфир. Полуширины соответствующих гауссовского и лоренцовского уширений приведены на рисунке

слоях СР форма уширенных дифракционных пиков становится близкой к лоренцевской функции, что указывает на сильно неупорядоченное распределение дислокаций в этом образце.

Таким образом, использование дифференциальной дифрактометрии и комбинации нескольких геометрий дифракции с последующим анализом как полуширин, так и формы дифракционных пиков позволяет определять типы дислокационных ансамблей, оценивать плотности дислокаций и судить о регулярности их распределения в эпитаксиальных слоях.

ГЛАВА 9. ДИАГНОСТИКА МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

В настоящем разделе показано, что двухкристальная рентгеновская дифрактометрия является эффективным неразрушающим инструментом исследования ультратонких гетерофазных многослойных систем. Исследованы многослойные полупроводниковые структуры, содержащие квантовые ямы. Путем моделирования полученных кривых дифракционного отражения и сравнения с экспериментальными определены характер взаимодействия In и Ga на границах раздела КЯ до и после отжига, степень релаксации напряжений. Определено содержание азота в квантовой яме и изменение его концентрации в зависимости от условий выращивания.

§1. Введение

Многослойные гетероструктуры [1,2] с пространственным ограничением носителей заряда по одному или трем измерениям (квантовые ямы и квантовые точки) реализуют предельный случай размерного квантования в полупроводниках, когда модификация электронных свойств материала наиболее выражена. Для идеальной квантовой точки (КТ) электронный спектр представляет собой набор дискретных уровней, разделенных областями запрещенных состояний, и соответствует электронному спектру одиночного атома, хотя реальная КТ при этом может состоять из сотен тысяч атомов [2]. Таким образом, появляется уникальная возможность разрешить основную проблему современной микро- и оптоэлектроники – "размывание" носителей заряда в энергетическом окне порядка kT . Такие важнейшие характеристики материалов, как: время излучательной рекомбинации, время энергетической релаксации между электронными подуровнями, коэффициенты Оже-рекомбинации и т.д., кардинально зависят от геометрических размеров и формы квантовых ям и квантовых точек. Это позволяет использовать одну и ту же полупроводниковую систему для реализации приборов с существенно различающимися требованиями к активной среде [3-5].

На данное время полупроводниковые структуры для оптоэлектронных приборов в спектральном диапазоне 1,3-1,55 мкм синтезируются на основе материалов InGaAsP/InP [1-3]. Недостатком лазеров на основе подобных структур является низкая температурная стабильность характеристик вблизи комнатной температуры. К тому же, качество подложек InP существенно ниже, а стоимость гораздо выше, чем подложек GaAs . Использование четырехкомпонентного соединения InGaAsN и гетероструктур InGaAsN/GaAs может быть весьма перспективным для улучшения характеристик лазеров для волоконно-оптических линий связи, поскольку позволяет существенно увеличить длину волны излучения гетероструктур на основе GaAs и улучшить температурную стабильность лазеров, излучающих вблизи 1,3 мкм [3-34].

На основе гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) InGaAsN/GaAs и квантовыми точками (КТ) InAs/InGaAs , создаваемых на подложках GaAs , ус-

пешно реализованы инжекционные лазеры, излучающие с торца [3,9], и вертикально излучающие лазеры [3,9,30] на длине волны 1,3 мкм. Однако, продвижение в сторону больших длин волн излучения, вплоть до 1,55 мкм, для обоих типов гетероструктур затруднено вследствие принципиальных ограничений на состав и толщину КЯ, налагаемых пределом псевдоморфного роста.

Сильное сужение ширины запрещенной зоны в четверном соединении $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ обусловлено взаимодействием между состояниями зоны проводимости InGaAs – матрицы и состояниями азота, локализованными в узкой резонансной зоне [3,9,13,18]. Параметрами, которые управляют длиной волны излучения, является содержание индия x и азота y в четверном соединении (рис. 9.1), а также ширина квантовой ямы. Увеличение каждого из этих параметров должно приводить к длинноволновому сдвигу максимума излучения. Однако, увеличение содержания азота ухудшает качество кристалла и дает меньшую интенсивность люминесценции. Природа ФЛ спектров, особенно ФЛ спектра для только что выращенных InGaAsN пленок, еще не имеет достаточно четкого объяснения. В связи с этим, исследование зависимости структурного совершенства квантовых ям InGaAsN от химического состава четверного соединения не потеряло актуальности.

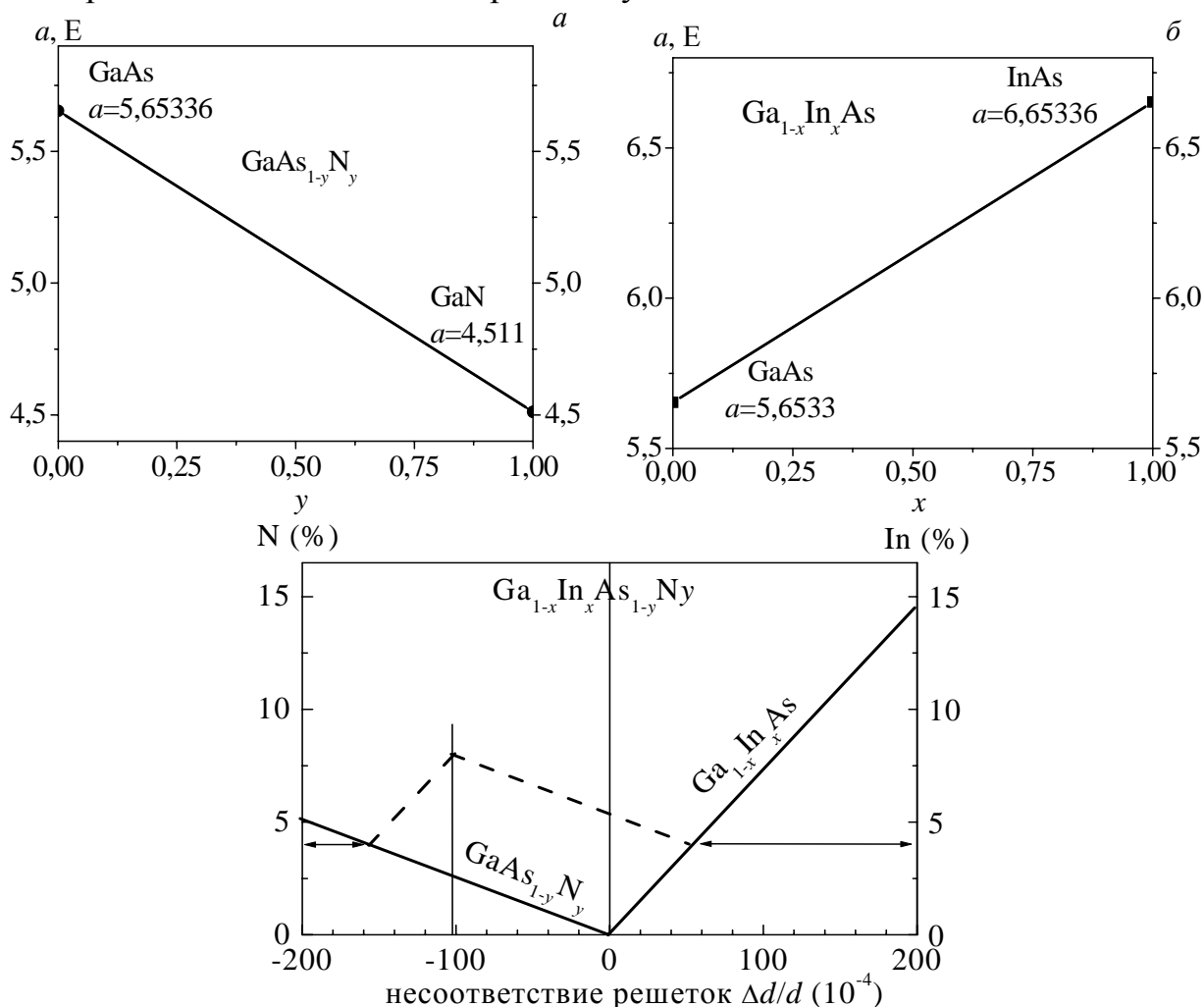


Рис. 9.1. Диаграммы Вегарда для тройных $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ (а), $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ (б) и четверного соединений $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ (в)

Особенный интерес представляют исследования структур, которые содержат квантовые точки и квантовые ямы, высокоразрешающими методами рентгеновской и синхротронной дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [35-63]. Возможности этих дифракционных методов взаимно дополняют друг друга при изучении упорядоченных наноразмерных объектов, в частности при исследовании их пространственного упорядочения: возможности ПЭМ ограничены величиной исследуемого объема [57], тогда как пространственной разрешающей способности рентгеновских топографических методов недостаточно для детальных исследований объектов такого размера.

Потому изучение механизма релаксации упругих напряжений и пространственного упорядочения рассеивающих объектов типа КЯ, исследование особенностей их рентгеновского дифракционного отображения составляют значительный интерес и помогают установить взаимосвязь между структурой рассеивающих объектов и их отображением.

В работах [34-64] продемонстрированы большие возможности стандартного метода двухкристальной рентгеновской дифрактометрии для анализа многослойных систем со слоями нанометровой толщины. Наличие тонких слоев с резко выраженными границами определяет появление большого числа осцилляций на кривой дифракционного отражения (КДО) в широком угловом диапазоне порядка десятка тысяч угловых секунд.

В этом случае КДО содержит большой объем информации о параметрах структуры, и использование адекватных теоретических моделей и математического аппарата позволяет определить не только структурные параметры, которые задаются технологией создания слоев, но и характеристики границ раздела между ними. В итоге появляется уникальная возможность контролировать размеры структуры с точностью до нанометров на больших глубинах от поверхности кристалла. Благодаря этому давно известный метод двухкристальной рентгеновской дифрактометрии становится одним из наиболее интересных и важных для анализа многослойных структур с нанометровыми толщинами слоев [34-64].

Целью данного раздела является демонстрация возможностей высокоразрешающей двухкристальной дифрактометрии в исследовании процессов взаимодиффузии атомов In и Ga в многослойных наноразмерных системах на основе GaAs, содержащих квантовые ямы (КЯ) типа $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$.

§2. Теоретическая часть

С момента появления первых искусственно выращенных эпитаксиальных наноразмерных сверхрешеток (СР) рентгеновская дифрактометрия является основным методом определения их структурных параметров [35-41]. Уже в первых работах как экспериментально, так и теоретически были рассмотрены особенности дифракции от СР, предложены методики анализа дифракционных кривых [36-40,44,45,48] и определения параметров СР. В частности, в [36] предложен способ нахождения среднего пика СР (нулевого сателлита), про-

анализированы зависимости интенсивности отдельных сателлитов от соотношения толщин слоев СР. В работе [37] предложены простые соотношения для анализа интенсивности сателлитов от идеальной двухслойной СР как для симметричной, так и для асимметричной геометрии дифракции, показана возможность получения параметров СР без расчета кривых отражения.

В работах [29,38] теоретически и экспериментально исследованы влияние размывания границ между слоями многослойных систем (МС) на дифракционную картину. Впоследствии, в связи с развитием компьютерного моделирования, в исследованиях МС стали преобладать моделирование дифракционных кривых и получение структурных характеристик на основе сопоставления экспериментальных и расчетных кривых. При этом расчет кривых отражения МС основан на теоретических разработках, выполненных в рамках как кинематической [37,55], так и динамической теорий [38,39,43,44, 48,50,55,59]. Разработаны стандартные программы анализа дифракционных кривых, а число экспериментальных работ, которые используют рентгеновскую дифракцию для изучения многослойных гетеросистем, насчитывает не одну сотню [35,40-43,53,59,63].

В кинематической теории при расчете кривых качания по Брэггу от слоев, толщина которых значительно меньше экстинкционной толщины, пренебрегается многократным рассеянием. Динамическая теория рассеяния эти эффекты учитывает, и поэтому лишена ограничений на толщину слоев кристалла. Она эффективно используется для анализа кривых качания (КК) от гетероструктур, имеющих согласованные или почти согласованные решетки [34-64].

В соответствии с теорией Такаги-Топена дифференциальное уравнение для амплитудного отношения $D_{0,h}/D_a$ рассеянных $D_{0,h}$ и падающей D_a волн представляется в виде [35-38, 65]:

$$i \frac{dX}{dA} = (1 + ik)X^2 - 2(y + ig)X + (1 + ik), \quad (9.1)$$

где $X = D_h / (\beta^{1/2} D_0)$, D_0 , D_h – амплитуды рассеяния проходящей и дифрагированной волн соответственно, $\beta = |\gamma_0 / \gamma_h|$, $A = (P\pi |\chi'_h| z) / \lambda |\gamma_0 \gamma_h|^{1/2}$, λ – длина волны, z – толщина слоя, P – коэффициент поляризации, $g = (1 + \beta)\chi''_0 / (2P |\chi'_h| \beta^{1/2})$, $k = \chi''_h / \chi'_h$, γ_0 , γ_h – косинусы углов падения и отражения соответственно, $y = [(1 + \beta)\chi'_0 - \beta\alpha_h] / (2P |\chi'_h| \beta^{1/2})$, $\alpha_h = -2\Delta\theta \sin 2\theta_B - \alpha_\varepsilon$, $\alpha_\varepsilon = C\varepsilon(z)$, $\Delta\theta$ – угловое отклонение падающего луча от угла Брэгга θ_B , $\varepsilon(z)$ – одномерная деформация, $C = \cos^2 \varphi \operatorname{tg} \theta_B \pm \sin \varphi \cos \varphi$, где верхний знак соответствует скользящим углам падения $(\theta_B - \varphi)$ относительно поверхности образца, нижний – при углах $(\theta_B + \varphi)$; φ – угол между отражающей плоскостью и поверхностью образца, χ_0 , χ_h – Фурье-коэффициенты поляризуемости кристалла.

Кривая качания представляет собой зависимость коэффициента отра-

жения рентгеновских лучей R от $\Delta\theta$

$$R = X(\Delta\theta)X^*(\Delta\theta),$$

где знак "*" – комплексно сопряженное.

Как правило, численное интегрирование уравнения (9.1) проводится методом Рунге-Кутты четвертого и пятого порядков. Известны также менее строгие подходы, которые, как правило, используются для почти кинематических приближений [35,37,59, 63].

Аналитическое решение уравнения (9.1) для слоя $j+1$ с постоянным значением деформации $\varepsilon(z_j)=\text{const}$ записывается следующим образом

$$X_{j+1}(A_{j+1}) = \frac{SX_j + i(B + FX_j) \text{tg}[S(A_{j+1} - A_j)]}{S - i(F + BX_j) \text{tg}[S(A_{j+1} - A_j)]}, \quad (9.2)$$

где $X_j=X(A_j)$ амплитуда рассеяния нижнего слоя j , $B=-(1+ik)$; $F=y+ig$; $S=(F^2 - B^2)^{1/2}$.

Выражение (9.2) является рекуррентной формулой для расчета амплитуды рассеяния X_{j+1} на выходе из каждого $j+1$ слоя по известному значению X_j на границе слоя j . Учитывая, что на границе между последним слоем и подложкой амплитуда рассеяния соответствует решению для идеального кристалла, то есть

$$X_{j=0} = \frac{-F \pm (F^2 - B^2)^{1/2}}{B}, \quad (9.3)$$

то используя процедуру (9.2) для произвольного количества гетерослоев, можно определить величину $X(\Delta\theta)$ на поверхности многослойной системы, состоящей из произвольного числа слоев

Основная сложность численного решения (9.1) – неоднозначность определения параметра S для разных значений $\Delta\theta$ и ε . Амплитуда рассеяния должна стремиться к нулю при $\Delta\theta \rightarrow \infty$, а зависимость $X(\Delta\theta)$ – быть непрерывной. При этом, ордината каждой точки КК является функцией всего профиля деформации $\varepsilon(z)$, который определяется путем решения обратной задачи рентгеновской дифракции по известной кривой качания [40,41,47]. В этом методе используется минимизация неотрицательной невязки между экспериментальной и теоретической КК [47]. Для увеличения вклада боковых участков и сателлитных максимумов кривой качания в функционал неотрицательной невязки, целесообразно использовать функционал вида

$$\Phi = \sum_n g(\theta_n)(R_n^{\text{теор}} - R_n^{\text{экспер}})^2, \quad (9.4)$$

где $g(\theta_n) = 1 - (1 + (\theta_n - \theta_0)^2 W)^{-1}$ – весовая функция, θ_n – абсцисса n -й точки кривой качания, θ_0 – абсцисса основного максимума, который соответствует рассеянию от объема кристалла, W – величина, обратная полуширине кривой качания для идеального кристалла.

В современной теории обработки экспериментальных данных избранная модель может считаться удовлетворительной, если она обеспечивает ве-

личину χ^2 в интервале $\chi^2 = 1 \pm \sqrt{2/n_f}$ где $n_f = n - n_p$ – число степеней свободы при подгонке, n – число экспериментальных точек, n_p – число переменных параметров [44].

Отметим, что процедура определения профилей распределения параметров не является однозначной, поскольку в ходе эксперимента изменяется только интенсивность отраженной волны и нет возможности в рамках этого метода получить достоверную информацию о фазе волны [43].

В работе [43] предложен метод, с помощью которого можно найти все эквивалентные решения. Число возможных эквивалентных решений растет с увеличением числа слоев N по статистическому закону пропорционально $2N$. Кроме того, возможны и случайные решения с близкими значениями χ^2 . Для того чтобы убедиться, что полученные решения однозначны, необходимы дополнительные исследования.

Как уже отмечалось, рентгеновская дифрактометрия в последнее время широко используется для выявления структурных дефектов в различных гетероэпитаксиальных наноразмерных композициях. При этом, здесь также возможна диагностика и таких характерных нарушений, как сетки дислокаций несоответствия и других дислокационных ансамблей. Что касается трехмерных дефектов, которые имеют деформационное поле смещения кулоновского типа, то и здесь уже достигнуты определенные успехи [55,63]. При этом основная информация о структуре дефектов, их типе, размере, концентрации, получается из анализа диффузного рассеяния (ДР) [54,60].

Экспериментально ДР наблюдается и от дефектов, локализованных в тонких поверхностных слоях, в частности, для ионно-легированных кристаллов после температурного отжига [43,47], а также для очень тонких эпитаксиальных пленок в начальной стадии образования дислокационных сеток [20,54].

Таким образом, характер диффузного рассеяния от тонких слоев должен иметь особенности, которые не имеют места для объемных монокристаллов. Во-первых, для не релаксированных структур должна наблюдаться анизотропия локальных полей деформации, обусловленная тангенциальными напряжениями в слое. Во-вторых, возможная релаксация напряжений на поверхности слоя также может привести к перераспределению диффузной составляющей интенсивности [54]. В-третьих, при переходе от трехмерного кристалла к двумерному (при уменьшении толщины слоя) изменяется характер суммирования по ансамблю дефектов, что должно привести к изменению влияния полей смещений дефектов на интенсивность ДР. Поэтому экспериментальные исследования наличия дефектов кулоновского типа на границах раздела в многослойных системах должны представлять интерес с целью дальнейшего развития теории динамического рассеяния рентгеновского излучения от тонких слоев.

Отметим результаты, полученные в работе [63], когда для анализа параметров и степени кристаллического совершенства многослойных систем используются так называемые "квазизапрещенные структурой отражения".

Следует, однако заметить, что компьютерная обработка рентгеновских кривых качания с процедурой подгонки и минимизации функции невязки без детального анализа степени влияния различных параметров на форму кривых и точности их определения не дает гарантии однозначности полученных результатов. В частности, трудности исследования СР, в которых один из слоев намного меньше другого (многослойные квантовые ямы), связаны с тем, что сами квантовые ямы не вносят вклада в интенсивность дифракции и с помощью кривых качания определяется только фазовый сдвиг от тонких слоев, обусловленный произведением деформации на толщину тонкого слоя.

§3. Объект исследований

Исследованные образцы получены на подложках GaAs (001) с помощью технологии молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в оптоэлектронном исследовательском центре технологического университета г. Тампере (Финляндия). Толщина слоев многослойной структуры определялась по осцилляциям отражательной способности дифракции высокоэнергетических электронов на отражение.

Сначала количество азота в слое находили по угловой разориентации между максимумами отражений от подложки и соответствующих слоев, а затем уточняли при последующей подгонке расчетных к экспериментальным КК.

Измерения КК проводились на двухкристальном рентгеновском дифрактометре фирмы "Bede" с медной трубкой ($\lambda=0,15405$ нм). Коллимированный монохроматический рентгеновский пучок формировался с помощью симметричного монохроматора GaAs (001) для отражения (004). Отраженный пучок детектировался сцинтилляционным счетчиком с узкой щелью в процессе сканирования $\theta-2\theta$ в области симметричного отражения (004) на протяжении почти 16 часов.

Во многих исследованиях показано [3,25], что большинство атомов N занимают преимущественно подрешетку As. При этом отмечается, что образование изолированного междуузельного N в GaNAs энергетически невыгодно и вместо образования комплексов As-N или N-N, расположенных в междуузельных положениях решетки, энергетически выгоднее первое [27]. Образование N-As комплексов вносит напряжения сжатия в эпислой, тогда как N-N комплексы растягивают его по сравнению с атомом замещения N_{As}. Связывание этих незамещающих атомов N может приводить к отклонению от закона Вегарда [26] и вносить дополнительные угловые отклонения на КК.

Для того, чтобы рассчитать рентгеновские КК с помощью формализма Такаги-Топена, нужно учесть напряжения, обусловленные несоответствием решеток между тонкой КЯ и толстым барьерным материалом. В нашем случае КЯ – псевдоморфная и период решетки однородный для всей структуры [60].

При эпитаксии слоев InGaAs на GaAs (001) возникают напряжения сжатия. С увеличением In такого рода напряжения резко уменьшают критическую толщину слоя, выше которой начинается релаксация напряжений, то

есть образование дислокаций несоответствия. В то же время, введение азота в слой InGaAs уменьшает не только напряжения, но и ширину запрещенной зоны. Оценки количества азота, необходимого чтобы компенсировать напряжения в слоях InGaAs, выращенных псевдоморфно на подложках GaAs, можно получить с двойной диаграммы Вегарда (рис. 9.1).

Отметим, что параметром, ограничивающим суммарную толщину многослойной структуры, содержащей КЯ, является критическая толщина слоя, при превышении которой начинается процесс пластической релаксации упругих напряжений с образованием протяженных структурных дефектов. При этом существенное влияние на процессы релаксации оказывают как размеры самих слоев КЯ, так и толщины промежуточных слоев GaAs между ними [2,4,44,46,58]. Процесс релаксации упругих напряжений в совершенной многослойной структуре с КЯ может происходить в несколько последовательных стадий. Пространственное упорядочение основных компонент в КЯ стоит рассматривать как начальную адаптационную стадию релаксации упругих напряжений [2,4,51]. Следующая стадия процесса – изгиб кристаллографических плоскостей, и только после этого начинается генерация структурных дефектов. Очевидно, что уже на стадии изгиба кристаллографических плоскостей и пространственного искажения ростовой поверхности возникают условия для генерации точечных дефектов [52,56,58], которые аккумулируются на границах слоев в кластеры, а затем трансформируются в протяженные дефекты дислокационного типа.

Несоответствие периодов решеток обуславливает тетрагональную деформацию решетки и проявляется в направлении, перпендикулярном границе гетероперехода. Если рост Oz происходит вдоль $\langle 001 \rangle$, то на слой GaInNAs с КЯ влияют биаксиальные деформации сжатия параллельно оси Ox вдоль направления $\langle 100 \rangle$ и направления Oy вдоль $\langle 010 \rangle$. Плоскостные деформации вдоль оси Oz изменяются при изменении состава после взаимодиффузии. Биаксиальные плоскостные деформации и одноосные деформации сдвига после взаимодиффузии задаются выражением [56],

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\text{нес}}(x), \quad (9.5)$$

$$\varepsilon_{zz} = -2[c_{12}(x)/c_{11}(x)]\varepsilon_{\text{нес}}(x), \quad (9.6)$$

где $\varepsilon_{\text{нес}}(x)$ – фактор несоответствия между ямой и барьером, для напряжений сжатия он отрицательный, $c_{12}(x)$ и $c_{11}(x)$ – константы жесткости. Обобщенный параметр a для четырехкомпонентных соединений $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ определяется из параметров четырех бинарных соединений AB, AD, BC, CD [19]:

$$a(x, y) = (1 - x)ya_{BC} + xya_{AC} + x(1 - y)a_{AD} + (1 - x)(1 - y)a_{BD}. \quad (9.7)$$

В случае $x, y \ll 1$, из формулы (9.7) следует, что параметр a почти линейно зависит от значений y и x . Очевидно, что такая же зависимость должна наблюдаться и для параметров несоответствия решеток слоя и подложки.

В целом, характер изменения поля напряжений вокруг квантовых точек [3-14] и на границах раздела слоев слишком сложен для описания в рамках

простых аналитических выражений (9.5) и (9.6). Оценить среднее значение деформации можно с помощью соотношения:

$$\varepsilon_{\parallel}^L = \frac{a_{\parallel}^L - a_0^S}{a_0^S}, \quad \varepsilon_{\perp}^L = \frac{a_{\perp}^L - a_0^S}{a_0^S}, \quad (9.8)$$

где индекс L относится к гетероэпитаксиальному слою, S – к подложке, \perp – к направлению роста и 0 – к случаю отсутствия напряжений. Для тонкой когерентно выращенной пленки на толстой подложке $a_{\parallel}^L = a_0^S$ и тогда, $\varepsilon_{\parallel}^L = 0$, a_{\perp}^L вычисляется так:

$$a_{\perp}^L = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} (a_0^L - a_0^S) + a_0^S. \quad (9.9)$$

По данным рентгеновской топографии, дислокации несоответствия в исследуемых образцах наблюдались редко. Значение критической величины деформации зарождения дислокаций несоответствия $\varepsilon_{\text{кр}}^{\text{ДН}}$ можно получить из соотношения [2,46]:

$$\varepsilon_{\text{кр}}^{\text{ДН}} = \frac{b}{8\pi(1-\nu)h} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \right) \left(\ln \frac{2h}{b} - \frac{1}{2} \right). \quad (9.10)$$

Для толщины слоя $h=6,8$ нм при векторе Бюргерса $b=0,4$ нм ($b=a/2\langle 110 \rangle$) и коэффициенте Пуассона $\nu=0,352$ – $\varepsilon_{\text{кр}}^{\text{ДН}}=6,17 \cdot 10^{-3}$. Очевидно, для большинства исследуемых образцов $\varepsilon_{\text{кр}}^{\text{ДН}} > \varepsilon_{\text{нес}}$.

§4. Результаты исследований

Взаимодиффузия – это термический процесс, который способствует движению атомов около границы раздела гетероструктуры. Такое движение может изменить и зонную структуру и свойства КЯ [3, 26-29]. Во многих работах показано, что кратковременный отжиг соединения GaInNAs, как правило, улучшает фотолюминесцентные и прочие фотоэлектрические свойства, но полного объяснения этого факта пока что нет [3,6,12,17,28,52,56,60]. Во время отжига могут происходить следующие структурные изменения. Азот, связанный с атомом индия, релаксирует в направлении атомов Ga, уменьшая деформацию и увеличивая частоту Ga–N связи в N₂Ga₃In кластере относительно кластера Ga₄N. Это объясняет сдвиг фотолюминесцентного максимума в "голубую" область спектра [27]. Во время роста атомы азота размещены в узлах решетки и окружены четырьмя атомами галлия. При отжиге локальная деформация ослабляется образованием In–N связей. Это, вероятно, результат перемещения азота, но не исключена возможность и движения индия. Кроме формирования пар In–N, также имеет место второе структурное изменение – образование новых связей Ga–N. После отжига большее количество атомов азота расположено в N₂Ga₃In кластерах. Формирование этого кластера, который содержит связь In–N, уменьшает напряжение в системе [28].

4.1. Многослойная структура с КЯ типа $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Схема многослойной структуры с такой КЯ представлена на вставке к рис. 9.2. Толщина КЯ – 6,8 нм (12 атомных слоев), $x=0,37$. Толщина слоя значительно меньше критической толщины образования дислокаций несоответствия. Экспериментальные и расчетные кривые качания (КК) от многослойной системы представлены на рис. 9.2.

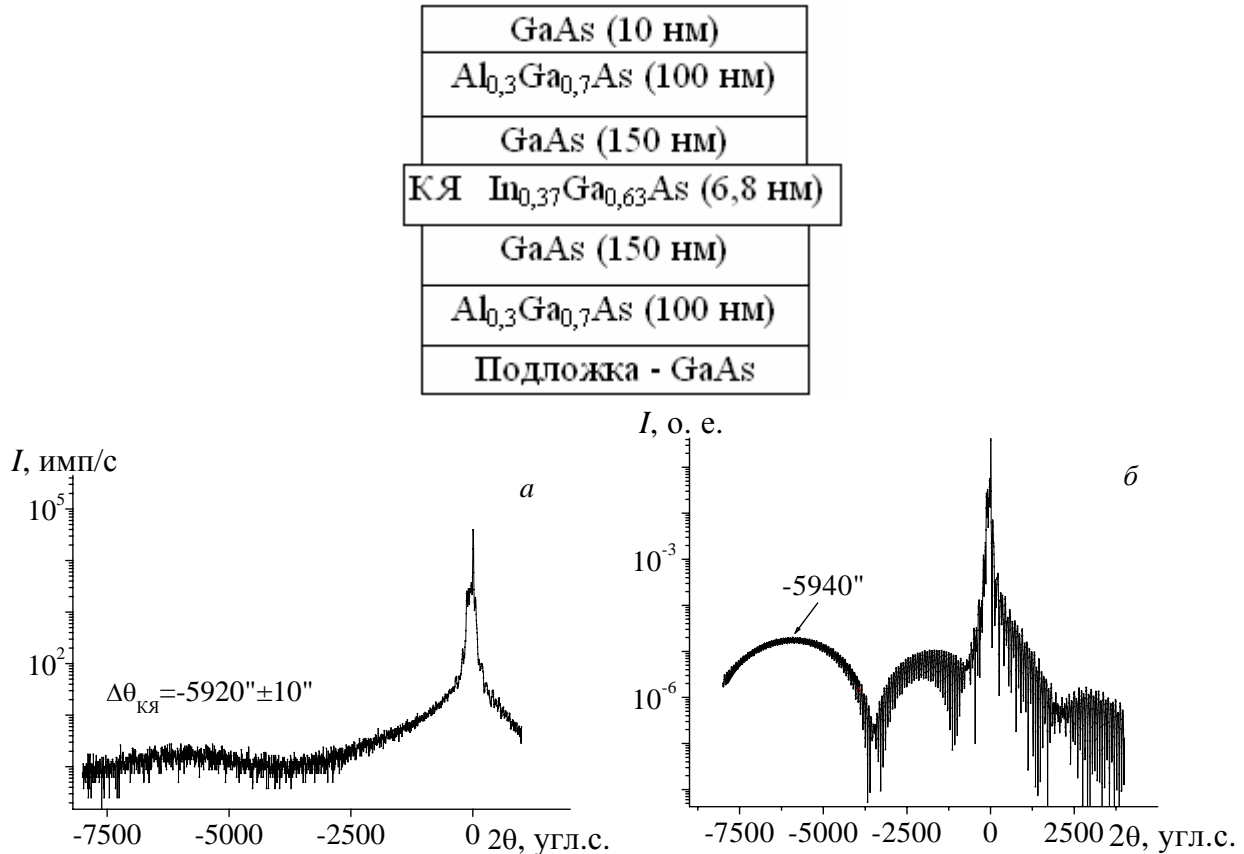


Рис. 9.2. Экспериментальная (а) и расчетная (б) КК от многослойной системы с КЯ – $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}$

Максимум интенсивности отражения от КЯ на экспериментальных КК (рис. 9.2,а) смещен относительно главного максимума (от подложки GaAs) на $\Delta\theta_{\text{КЯ}}=5920\pm 10$ угл.с. Для отожженной структуры, в сравнении с не отожженной, наблюдается некоторое увеличение $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$, (~50 угл.с). Причиной этого может быть: межслоевая взаимодиффузия $\text{In}\leftrightarrow\text{Ga}$; релаксация упругих напряжений между слоями; появление квантовых точек и дислокаций, тогда граница раздела становится более шероховатой [56].

Качественный анализ формы и параметров КК, показал (рис. 9.2), что данные МС являются достаточно совершенными. Эпитаксиальные слои: планарные, интерфейсы – достаточно резкие, плотность и размер структурных дефектов (в основном точечного типа или их кластеров) не настолько значительны, что бы обуславливать непланарность слоев, объемные напряжения. Для упрощения последующего численного моделирования, происходило сопоставление и уточнение для каждой выращенной структуры полученных из

КК параметров (толщины слоев и процентного состава) с технологическими параметрами.

При анализе КК необходимо учитывать, то что многослойные гетероструктуры, как правило, являются системами "интерференционного типа". В кристаллически совершенных структурах этого типа каждый из слоев, а также совокупность некоторых из них определенным образом независимо влияют на форму и параметры результирующей дифракционной кривой отражения. Например, параметры квантовой ямы (толщина и состав) в первую очередь влияют на форму огибающей кривой в области пиков, что отвечают волноводным слоям. Толщина и состав слоя КЯ и волноводных слоев определяют форму эмиттерных пиков, положение и форма которых при хорошем соответствии состава в нижнем и верхнем эмиттерных слоях (в границах 2-4% по количеству Al) однозначно определяются интерференцией дифрагирующего ими излучения. Результирующая картина вблизи максимума отражения от подложки является суперпозицией толщинных осцилляций от всех слоев в целом (кроме буферного) и от верхнего контактного слоя. Наличие и четкость именно этих осцилляций вместе с другими отмеченными признаками является свидетельством высокого кристаллического совершенства исследованных структур. Существенные изменения параметров и формы КК, обусловленные значительными нарушениями кристаллического совершенства гетероструктур, как правило, удается легко интерпретировать. Отсутствие той или другой группы толщинных осцилляций на КК, изменение их формы, например, вблизи эмиттерных пиков или подложки, указывает на нарушение ростового процесса на определенной его стадии.

Для уточнения профиля распределения деформации и состава, а также оценки плотности структурных дефектов нами применялись методы численного решения уравнения (9.1) [65]. Учитывая, что рассеяние рентгеновского излучения на структурных дефектах приводит к уменьшению интенсивности основных пиков на КК, которое может быть учтено эффективным статическим фактором Дебая-Валлера, можно осуществить количественные оценки структурного совершенства эпитаксиальных слоев. Как стартовое приближение для расчета профиля деформации использованы технологические профили распределения состава, уточненные при сравнении теоретических и экспериментальных кривых отражения. Как правило, это позволяет сократить число подгоночных параметров, обеспечить более высокую достоверность расчетных данных. При подгонке расчетной КК варьированием параметров многослойной системы (состав и толщина слоев) можно добиться совпадения положения и формы основных максимумов и толщинных осцилляций, учитывая интерференционную природу формирования дифракционных кривых. После сопоставления форм расчетной и экспериментальной КК отличие их параметров указывает, в основном, на существование в исследуемой структуре мелких кристаллических дефектов кластерного типа [17] и, соответственно, на необходимость учета диффузного рассеяния.

Локальные разупорядочения в промежутках между соседними гетерос-

лоями, могут обуславливать различные микроструктурные нарушения в слоях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$. Из-за этого тонкие слои $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ могут иметь размытую форму границ раздела с GaAs, средняя межфазная шероховатость которой находится в пределах 5-20 Å [10,23,55].

Во многих работах допускается [3,27,58,59], что наномасштабные флуктуации содержания In, обусловленные объединениями In в фазовые сепарации, действуют как квантовые точки (КТ) [3]. В КТ носители "глубоко" локализованы и это мешает их миграции в направлении стоков (дислокаций). Поэтому ожидается высокая эффективность фотолюминесценции, если плотность КТ намного больше плотности дислокаций. Флуктуации содержания In или образование КТ могут происходить по нескольким механизмам [3,6,12,9,23], включая образование зародышей кристаллизации, введенных деформациями, спинодальные распады, эффект вытягивания состава. Однако, не известно, какой механизм образования флуктуаций состава доминирует.

Рассчитанная КК с учетом процесса межслоевой взаимодиффузии на границах КЯ представлена на рис. 9.1,б. Увеличение x на 0,01 приводит к увеличению угловой разориентации между максимумами от КЯ и подложки в среднем на 180 угл.с. При этом наилучшее совпадение расчетной и экспериментальной КК наблюдается при втором варианте размытия границ КЯ (рис. 9.3).

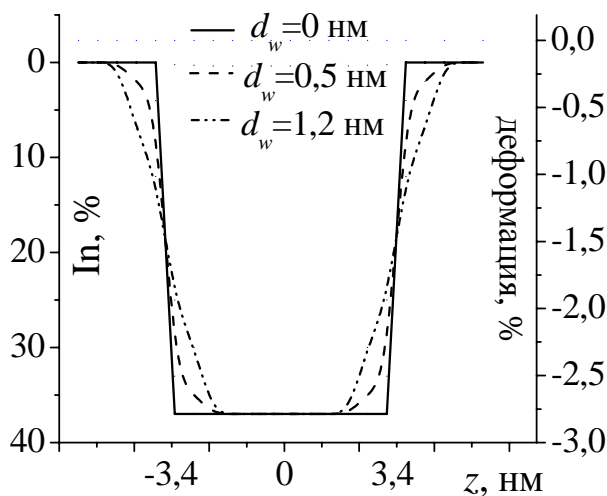


Рис. 9.3. Диаграмма распределения напряжений несоответствия вследствие перераспределения In в КЯ и вне её в случае размытия. Толщина КЯ – 6,8 нм (12 монослоев $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}$), $d_w=0$ нм – КЯ не размыта, $d_w=0,5$ нм – 1-й вариант размытия, $d_w=1,2$ нм – 2-й вариант

В нашем случае каждый из слоев характеризовался толщиной l_j , периодом решетки a_j и статическим фактором Дебая-Валлера $f_j=\exp(-w_j)$, задающим степень аморфизации слоя. В качестве начального приближения использованы параметры структуры, заложенные в технологии ее выращивания. Так, на рис. 9.2 при расчете КК слой представлен в виде семи подслоев, для каждого из них подбирались параметры l_j , a_j , f_j [60]. Параметры решетки для последних атомных слоев считались равными соответствующему параметру подложки. Варьирование этих параметров не приводит к сколь ни-будь значительному улучшению качества подбора, а отклонение этих параметров от

ростовых лишь незначительно превышает их среднеквадричную погрешность. Кроме того, изменялся и фактор Дебая-Валлера в буферном слое. Результаты такого подбора представлены на рис. 9.2-9.7.

При переходе к модели размытия границ слоя КЯ дополнительные подслои в не размытую систему (рис. 9.3) вводились по одному в разной последовательности или группами в разных комбинациях и последовательностях. Все параметры менялись произвольно, но в пределах 10-15% от их среднего значения.

Поскольку местоположения максимумов отражения от КЯ до и после отжига изменилось незначительно, будем считать, что основной процесс размытия КЯ происходит еще во время ее выращивания. Отметим, что значительное перемешивание $\text{In} \leftrightarrow \text{Ga}$ на границе раздела происходит даже в только что выращенных КЯ типа $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ [23]. Путем взаимодиффузии элементов III группы в процессе выращивания КЯ атомы In диффундируют в барьерный GaAs слой, а атомы Ga – в КЯ [29]. Получается тонкая и градуированная граница раздела, толщиной $2d_w$ (рис. 9.3). Наилучшее соответствие между экспериментальными и рассчитанными КК для не отожженного образца $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ достигается при размытии границ слоя КЯ на глубину 1,2 нм (на два атомных слоя слева и справа от границ слоя КЯ) при общем уменьшении In на 19%. Непродолжительный термический отжиг, как правило, приводит к упорядочению распределения атомов $\text{In} \leftrightarrow \text{Ga}$ в образованной таким образом межслоевой прослойке, а также уменьшает напряжения несоответствия на границах раздела.

Эффективная толщина d_w размытия слоев (сравнимая с длиной взаимодиффузии $\text{In} \leftrightarrow \text{Ga}$) может также возрасти с увеличением температуры подложки. Соответственно, толщина d слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ уменьшается. Однако, d_w+d не изменяется во время процесса наращивания следующих слоев [29]

При расчете КК для данной многослойной структуры учтены варианты возможного размытия слоя КЯ (рис.9.2). При этом рассмотрены различные концентрации азота в КЯ и буферных слоях, а также их влияние на формирование структуры КК. На рис. 9.3 распределение атомов In и Ga в слое КЯ, как и в работе [29], описывается функцией распределения

$$x(z) = \frac{x_0}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{L_z + 2z}{4d_w} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{L_z - 2z}{4d_w} \right) \right], \quad (9.11)$$

где L_z – толщина КЯ, x_0 – концентрация In в КЯ, z – координата, КЯ центрирована при $z=0$, при этом концентрационный профиль As и N не изменяется. Концентрация Ga в центральной области КЯ не изменяется, а длина диффузии возрастает от 0 до 1,1 нм (рис. 9.3).

Из анализа экспериментальных КК следует, что диффузия атомов In в барьерный слой уменьшает несоответствие решеток в гетеропереходе, то есть является причиной релаксации деформации в слоях, соседних с КЯ. Для только что выращенного слоя с КЯ деформация несоответствия составляет

2,65% для не размытой квантовой ямы (рис. 9.3). Взаимодиффузия уменьшает деформацию сжатия до 2% в слоях на границе раздела с КЯ в первом варианте и до 0,92% во-втором. В барьерной области напряжения сжатия возрастают, поскольку концентрация атомов In увеличивается возле поверхности. Напряжения сжатия достигают 0,15% в первом и 0,3% во втором варианте размытия при длине диффузии $L_d=0,565$ нм.

4.2. Многослойная структура с КЯ типа $In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y$

В данном пункте представлены результаты исследований серии образцов различной толщины слоев КЯ и процентного содержания азота y . Согласно технологическим условиям – $x=0,37$. Характерные экспериментальные КК для одного из образцов представлены на рис. 9.4.

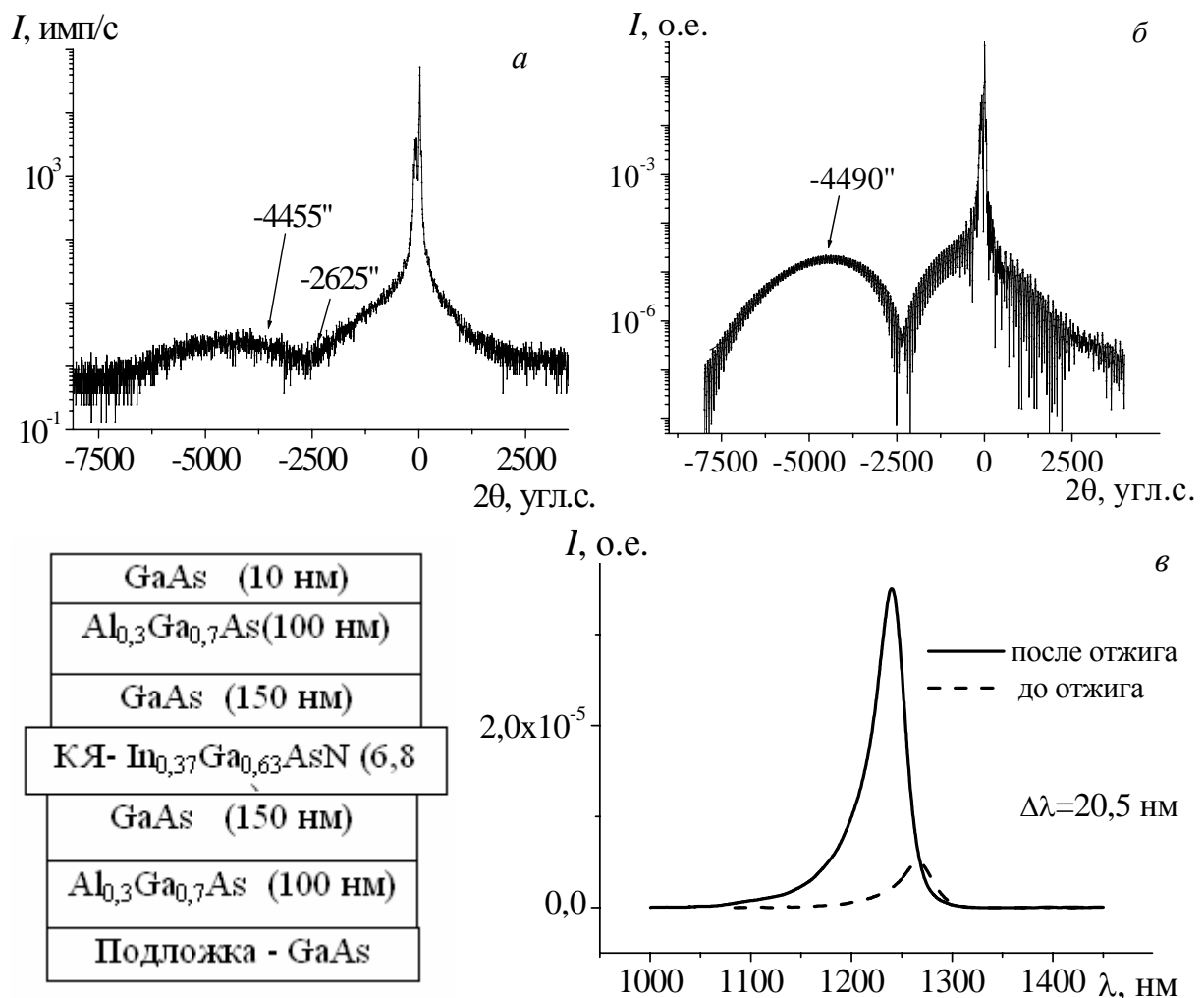


Рис. 9.4. КК от многослойной системы с КЯ – $In_{0,37}Ga_{0,63}As_{1-y}N_y$, $y \approx 3,1\%$: экспериментальная (а); расчетная с учетом размытия (2-й вариант) (б); ФЛ-спектр излучения (в)

Наличие азота в слое КЯ уменьшает угловую разориентацию $\Delta\theta_{КЯ}$ и соответственно параметры несогласования решеток [23]. При увеличении концентрации N на 1% $\Delta\theta_{КЯ}$ уменьшается на 500 угл.с. Анализ расчетных КК без учета и с учетом вариантов размытия границ слоя КЯ (рис. 9.3) дает возможность оценить содержание азота в КЯ с точностью $\sim 0,05\%$.

Максимально полное совпадение экспериментальных и расчетных КК достигается лишь с учетом инструментальных факторов, а также с учетом параметров атомной шероховатости межслойных границ раздела.

В сравнении с КЯ InGaAs (рис. 9.2) значительно уменьшается угловое расстояние между максимумами от слоя КЯ InGaAsN и подложки – на 1070 угл.с (рис. 9.4).

Как и в предыдущем случае, допускаем, что распределение атомов In и Ga в КЯ описывается функцией распределения искажений (9.11), поскольку концентрационный профиль As и N не изменяется. Атомы Ga возле поверхности раздела диффундируют в слой КЯ, а атомы In – в барьерный. Концентрация Ga в центральной области слоя КЯ не изменяется, а длина диффузии возрастает от 0 до 1,1 нм. Для только что выращенного слоя с КЯ деформация несоответствия при $N=1\%$ составляет $\sim 2,4\%$ для не размытой ямы. Для первого варианта размытия взаимодиффузия уменьшает деформацию сжатия до 2,15%, для второго – до 0,7%. Напряжения сжатия в барьерном слое достигают $\sim 0,14\%$ для первого варианта размытия и 0,28% – для второго при длине диффузии $L_d=0,565$ нм.

Для отожженных образцов наблюдается некоторое уменьшение угловой разориентации слоя КЯ с подложкой (на 10-15 угл.с.) в сравнении с не отожженными образцами. Причиной этого может быть уменьшение напряжений на границах раздела между слоями вследствие связывания атомов In атомами N.

Численное моделирование КК для различных концентраций N в слое КЯ показало, что увеличение y на 1% уменьшает угловую разориентацию между слоем КЯ и подложкой GaAs в среднем на 505 угл.с независимо от степени размытия границ КЯ. При увеличении концентрации азота исчезают первые осцилляции интенсивности по обе стороны от основного максимума, а отражения от КЯ приобретают более выраженную асимметричную форму.

Отметим, что после кратковременного отжига (~ 10 с) данной системы местоположение максимума отражения от подложки почти не изменилось. Для отожженных образцов наблюдается незначительное уменьшение угловой разориентации (на 30-40 угл.с) слоя по отношению к подложке по сравнению с не отожженными образцами.

4.3. Многослойная структура с буферными слоями $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ и слоем КЯ типа $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

Отличие данной структуры от предыдущей состоит в количестве вспомогательных слоев, т.е. наличии буферных слоев $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ по обе стороны от слоя КЯ (см. вставку рис. 9.5).

Для улучшения качества GaInNAs/GaAs содержание N в слое КЯ уменьшают, хотя это приводит к увеличению деформации в квантовых ямах. Вводя компенсационный барьер к этой системе, можно вырастить слой КЯ GaInNAs с высокой степенью структурного совершенства, без деформаций

несоответствия (рис. 9.1) и увеличить число слоев КЯ в лазерной структуре (рис. 9.6).

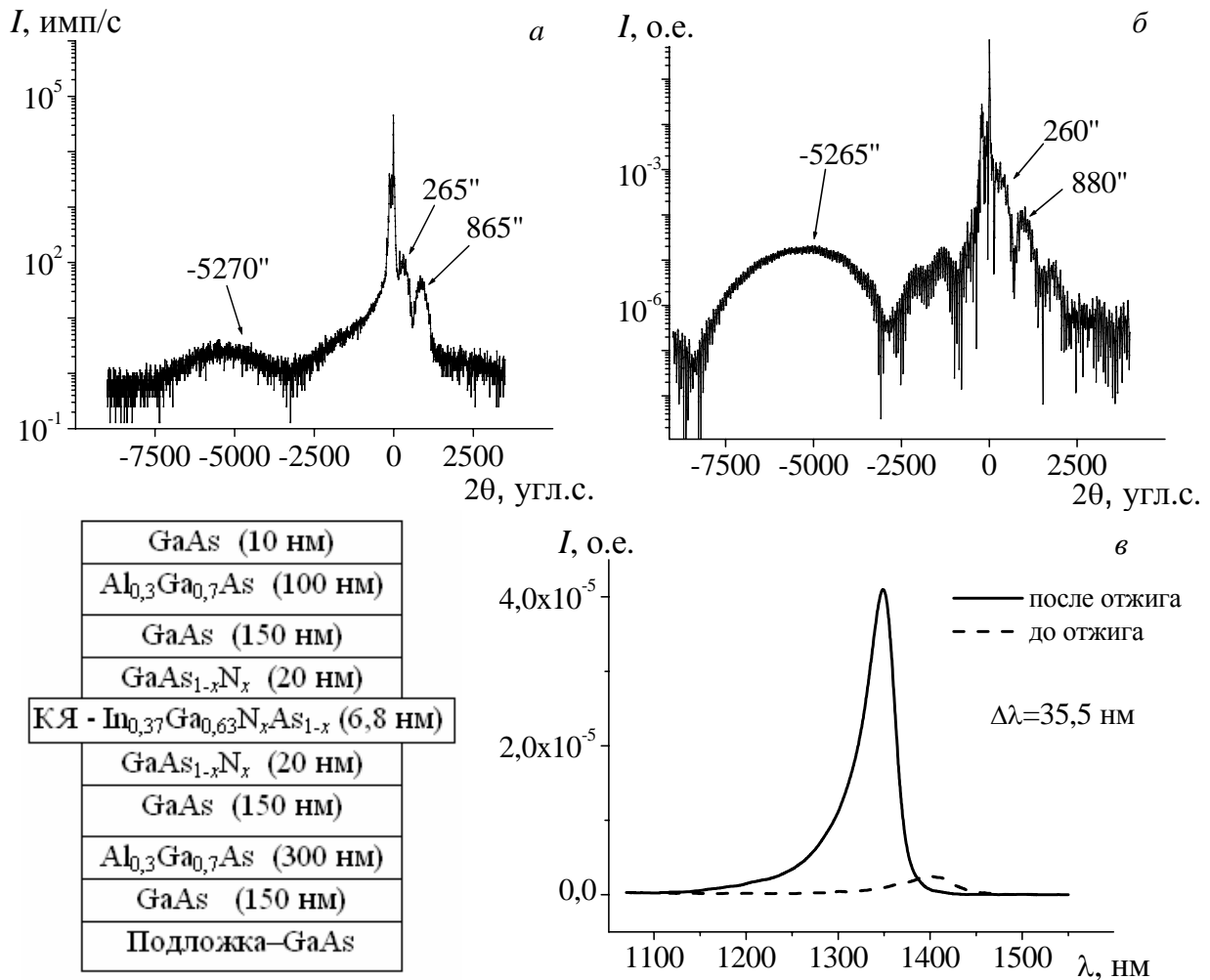


Рис. 9.5. КК от системы з КЯ In_{0,37}Ga_{0,63}As_{1-y}N_y, x=0,37 (In), δ=6,8 нм (12 монослоев) и буферными слоями GaAs_{1-y}N_y, шаг сканирования θ-2θ -5 угл.с.: экспериментальная (а); расчетная (б); ФЛ-спектр до и после отжига (в). Содержание азота в КЯ и буферных слоях 2,1% и 1%, соответственно

Рассмотрим новую многослойную систему с КЯ GaInNAs, которая содержит деформационно-компенсационные барьерные слои GaAs, выращенные МПЕ из газового источника. Исследована серия образцов с разными температурными условиями образования слоя КЯ. Толщина слоя КЯ в большинстве образцов составляет 6,8 нм (12 атомных слоев).

Характерные экспериментальные КК до и после отжига одной из многослойных систем представлены на рис. 9.6. КК для других образцов очень близкие по форме и отличаются только местоположением максимумов интенсивности от КЯ и буферных слоев.

В отличие от предыдущих случаев многослойных структур на данных экспериментальных КК наблюдается система максимумов интенсивности, вызванная отражением как от подложки GaAs, так и от буферных слоев GaAs_{1-y}N_y – в правой части КК от основного пика, а также от КЯ – в левой части КК. Кроме того на распределениях интенсивности от буферных слоев

наблюдается тонкая осцилляционная структура, свидетельствующая о высокой степени когерентности слоев. При анализе экспериментальных КК для данной структуры использованы вышеприведенные варианты возможного размытия границ слоя КЯ (рис. 9.3). При этом рассмотрены разные количественные варианты наличия азота в слое КЯ и буферных слоях, а также их влияние на формирование структуры КК [60,61].

Как показано на рис. 9.5, интенсивность люминесценции для структуры с компенсированной деформацией выше, чем для структуры с барьером GaAs, что свидетельствует о лучшем качестве материала (рис. 9.5). ФЛ максимумы от только что выращенной квантовой ямы GaInNAs/GaAs не значительны из-за дефектов, связанных с N и повреждениями, которые вносятся ионами N в GaInNAs слой [27]. При меньших температурах много точечных дефектов внедряются в GaInNAs, это связано с уменьшением миграции катионов. Чтобы улучшить качество материала проводился отжиг образцов при разных температурных и временных интервалах. Для структур GaInNAs/GaAs интенсивность люминесценции значительно увеличивалась. На рис. 9.5b интенсивность ФЛ возрастает с ростом температуры отжига до 650°C на протяжении 10с и потом падает. При увеличении скорости температурного отжига ФЛ-пики смещались в "голубую" область для всех КЯ, возможно, это определяется диффузией In, Ga, N.

Анализ расчетных КК без учета и с учетом размытия границ слоя КЯ, дает возможность оценить концентрацию азота в буферных слоях и в КЯ. В целом наблюдается значительное уменьшение $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ в отличии от случая, когда система не содержит азота [60,61].

4.4. Многослойная система с двумя квантовыми ямами – $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-x}\text{N}_x$

Рассмотрим новую многослойную систему с двумя КЯ GaInNAs, которая содержит деформационно-компенсационные барьерные слои GaAsN, выращенные МЛЭ из газового источника (см. вставку на рис. 9.6).

Заметим, что морфология гетерограницы играет активную роль в формировании физических свойств такой многослойной структуры. При этом, несмотря на то, что добавление N в InGaAs уменьшает несоответствие решеток между InGaAs и GaAs, возможен, так называемый, 3D-рост (островковый) слоя InGaAsN [59].

Для данной многослойной структуры на экспериментальных КК наблюдается целая система максимумов интенсивности, вызванная последовательным отражением рентгеновских лучей от слоя КЯ (система осцилляций интенсивности – интерференционное взаимодействие отраженных волн от двух слоев КЯ), от подложки GaAs – в центре, и от буферных слоев $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$ – в правой части КК. Четко выраженная осцилляционная структура интенсивности на экспериментальных КК (рис. 9.6) слева от слоев КЯ свидетельствует о высокой степени когерентности и совершенства данной многослойной системы.

<i>i</i> - GaAs (10 нм)
<i>i</i> - Al _{0,6} Ga _{0,4} As (100 нм)
<i>i</i> - GaAs (75 нм)
<i>i</i> - GaAs _{0,98} N _{0,02} (30 нм)
<i>i</i> - In _{0,31} Ga _{0,68} N _{0,016} As _{0,984}
КЯ - <i>i</i> - In _{0,34} Ga _{0,66} N _{<i>x</i>} As _{1-<i>x</i>}
<i>i</i> - In _{0,31} Ga _{0,68} N _{0,016} As _{0,984}
<i>i</i> - GaAs _{0,98} N _{0,02} (80 нм)
<i>i</i> - In _{0,31} Ga _{0,68} N _{0,016} As _{0,984}
КЯ - <i>i</i> - In _{0,34} Ga _{0,66} N _{<i>x</i>} As _{1-<i>x</i>}
<i>i</i> - In _{0,31} Ga _{0,68} N _{0,016} As _{0,984}
<i>i</i> - GaAs _{0,98} N _{0,02} (20 нм)
<i>i</i> GaAs (75 нм)
<i>i</i> - Al _{0,6} Ga _{0,4} As (200 нм)
Подложка - <i>n</i> -GaAs

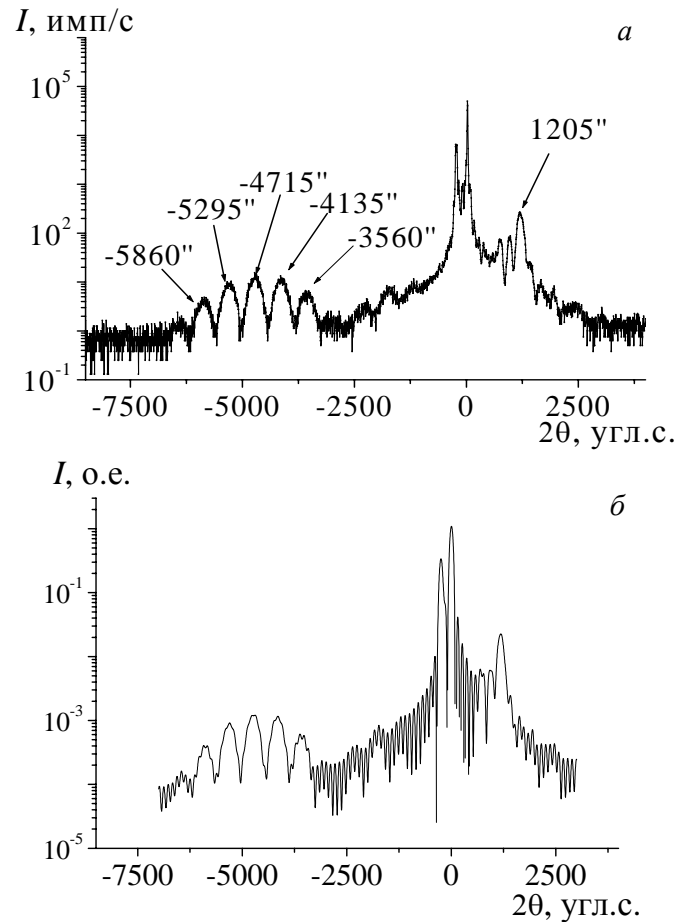


Рис. 9.6. Многослойная система, содержащая две квантовые ямы – In_{0,37}Ga_{0,63}As_{1-*y*}N_{*y*}, $\delta=6,8$ нм: экспериментальная (а); расчетная (б). $y=2,4\%$ в КЯ и 1% в буферных слоях

Как и в предыдущих случаях, можно допустить, что в результате взаимодействия атомов границ раздела между слоями может размываться (рис. 9.3). Поэтому, для удовлетворительного совпадения рассчитанных и экспериментальных КК учтены все возможные варианты размывания границ слоев КЯ. Наилучшее количественное и качественное соответствие расчетных и экспериментальных КК имеет место если: $y=2,4\%$ (N) в обеих КЯ и $y=1\%$ в буферных слоях. В то же время, для полного совпадения расчетных и экспериментальных КК необходимо учесть: нелинейность релаксации упругих напряжений между слоями; появление квантовых точек и дислокаций, а также атомную шероховатость границы раздела [23].

4.5. Система In_{0,37}Ga_{0,63}As_{1-*y*}N_{*y*}/GaAs

В данном пункте приведены исследования для двухслойной эпитаксиальной системы In_{0,37}Ga_{0,63}As_{1-*y*}N_{*y*}/GaAs (см. вставку на рис. 9.7). Толщина слоя In_{*x*}Ga_{1-*x*}As_{1-*y*}N_{*y*} – 4,8 нм (9 монослоев). Экспериментальная и расчетные кривые качания для данной системы приведены на рис. 9.7.

Из анализа расчетных КК для системы In_{0,37}Ga_{0,63}As_{1-*y*}N_{*y*}/GaAs на (рис. 9.7,в-г) следует, что увеличение толщины слоя на 1-2 нм значительно модифицирует КК – более четко проявляется тонкая структура максимумов и минимумов от слоя, появляются новые интерференционные осцилляции интен-

сивности. В то же время, расположение максимума не изменяется, а минимум двигается к максимуму от подложки (при $\Delta\delta=1$ нм на 700-800 угл.с).

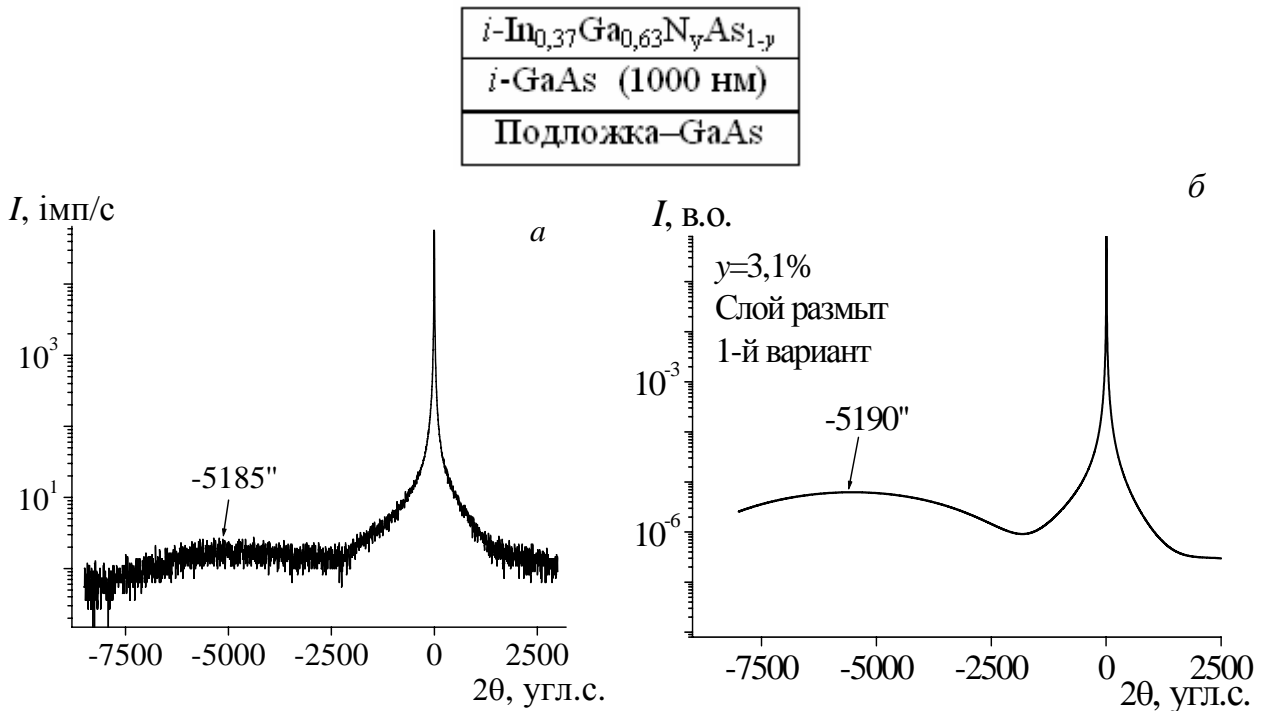


Рис. 9.7. Эпитаксиальный слой $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$: экспериментальная КК, толщина эпитаксиального слоя –4,8 нм (9 монослоев) (а); рассчитанная, $y=3,1\%$ (а)

Наличие азота в слое $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ уменьшает угловую разориентацию $\Delta\theta_{\text{КЯ}}$ и соответственно параметры рассогласования решеток [23]. При увеличении концентрации N на 1% угловая разориентация слой–подложка уменьшается на 500 угл.с. Релаксация напряжений на 1% на гетерогранице изменяет местоположение максимума отражения от слоя в среднем на 28-30 угл.с, то есть напряжение несоответствия уменьшается на $4,5 \cdot 10^{-4}$. Учет возможного размытия межслоевой границы также дает заметный вклад в $\Delta\theta$.

Анализ расчетных КК без учета и с учетом размытия КЯ (рис. 9.3) дает возможность оценить содержание азота в эпитаксиальном слое $\text{In}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$

§5. Выводы

1. Четырехкомпонентные соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ и гетероструктуры на их основе – $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ являются весьма перспективными для улучшения характеристик лазеров для волоконно-оптических линий связи, поскольку позволяют существенно увеличить длину волны излучения гетероструктур на основе GaAs и улучшить температурную стабильность лазеров, излучающих вблизи 1,3-1,5 мкм.

2. Параметрами, которые управляют длиной волны излучения в четверном соединении, является содержание индия x и азота y , а также ширина квантовой ямы. Увеличение каждого из этих параметров должно приводить к длинноволновому сдвигу максимума излучения. Однако, увеличение содержания азота ухудшает качество кристалла и дает меньшую интенсивность

люминесценции. В связи с этим, исследование зависимости структурного совершенства квантовых ям InGaAsN от химического состава четверного соединения не потеряло актуальности.

3. Двухкристальная рентгеновская дифрактометрия является эффективным неразрушающим методом диагностики ультратонких гетерофазных многослойных систем.

4. В связи с мощным развитием методов компьютерного моделирования в исследованиях многослойных систем с наноразмерными слоями, на данное время, преобладают численные моделирования дифракционных кривых отражения и получение структурных характеристик на основе сопоставления экспериментальных и расчетных кривых. Расчет кривых отражения основан на теоретических разработках, выполненных на основе как кинематической, так и динамической теорий рассеяния рентгеновских лучей многослойными системами.

5. Методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии исследованы многослойные полупроводниковые системы, содержащие слои квантовых ям. Показано, что в свежевращенных многослойных структурах со слоями КЯ происходят процессы взаимодиффузии, которые проявляются в размытии границ слоя КЯ вследствие диффузии In в буферные или защитные слои, а Ga в слой КЯ. Кратковременный температурный отжиг незначительно уменьшает угловую разориентацию между КЯ и подложкой.

6. Экспериментально полученные и теоретически рассчитанные КК свидетельствуют о том, что многослойная структура, созданная на подложке GaAs, имеет совершенную кристаллическую структуру, а границы раздела между защитными, буферными слоями, и слоем КЯ в системе типа GaAs/GaN_xAs_{1-x}/In_xGa_{1-x}As_{1-y}N_y/GaN_xAs_{1-x}/GaAs – когерентные.

7. Количество азота в слое КЯ и буферных слоях зависит от многих технологических факторов, например, температуры подложки. При этом, произвольное распределение примесей In и N в системах такого рода может приводить к увеличению или уменьшению степени локального разупорядочения и деформации.

ГЛАВА 10. ЭФФЕКТЫ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ ОТ ДЕФЕКТОВ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ

В данном разделе изложены результаты работы [70], в которой создана теоретическая модель для описания когерентной и диффузной компонент кривой дифракционного отражения (КДО) многослойных кристаллических структур со случайно распределенными дефектами во всех слоях. Модель описывает как интенсивность диффузного рассеяния (ДР), так и его влияние на ослабление и угловое перераспределение интенсивности когерентного рассеяния. Учтено также влияние дефектов на средние деформации в слоях. По измеренной КДО многослойной структуры с квантовой ямой установлены химический состав, деформации и характеристики дефектов в слоях. Показано влияние эффектов ДР на точность определения химического состава и деформаций в слоях.

§1. Введение

Современные технологии создания многослойных наноструктур основываются главным образом на процессе молекулярно-лучевой эпитаксии, который дает возможность получать пленочные структуры с наперед заданными физическими свойствами (см., например, [1-4]). Одной из основных проблем в управлении этими свойствами является однозначное определение химического состава слоев, деформаций в них, а также количественных характеристик структурных дефектов. Среди разных физических методов наблюдения и измерения параметров структуры та структурных несовершенств кристаллов и кристаллических пленок, таких как фотолюминесценция, резерфордское обратное рассеяние, электронная микроскопия, рентгеновские топография и дифрактометрия и т.д., наиболее чувствительными и информативными остаются рентгеновские дифракционные методы, которые к тому же являются неразрушающими (см., например, [5-8]). Однако однозначная интерпретация рентгеновских дифракционных профилей многослойных наноструктур имеет существенные ограничения вследствие использования в дифракционных моделях кинематической или динамической теорий дифракции в совершенных кристаллах без учета эффектов диффузного рассеяния (ДР) на дефектах в этих структурах и подложках, на которых они выращены. Эти упрощенные модели не позволяют надежно определять структурные параметры слоев в многослойных системах и характеристики их структурных несовершенств.

Кинематическая модель дифракции рентгеновских лучей в неоднородных кристаллических пленках [9] и в многослойных кристаллических системах [10] пренебрегает как многократным перерассеянием когерентных волн, так и ДР от структурных дефектов. Полукинематическое приближение динамической теории [11-13] учитывает многократное рассеяние когерентных волн в совершенной подложке, но ограничено тонкими нарушенными слоями и пренебрегает эффектами ДР.

Более корректное описание многократного рассеяния когерентных волн в толстых нарушенных слоях и многослойных структурах проводится путем числового решения уравнений Такаги [14-16] или сшивания их аналитических решений для системы совершенных тонких подслоев с постоянной деформацией в каждом [17-19]. В аналогичном подходе используются рекуррентные соотношения между аналитическими решениями Эвальда-Бете-Лауэ для волнового уравнения в тонких совершенных подслоях [20-24].

Все перечисленные выше теоретические модели в границах их справедливости дают прекрасные результаты, позволяя по измеренным кривым дифракционного отражения (КДО) определять толщины слоев, их химический состав, деформации в них и параметры разупорядочения на границах между слоями в многослойных кристаллических структурах. Однако, все эти модели имеют тот общий недостаток, что в них не учитываются эффекты ДР от структурных дефектов в несовершенных слоях.

В то же время для реальных монокристаллов и многослойных кристаллических структур неотделимым атрибутом является присутствие в них точечных дефектов и разного рода микродефектов. На практике существуют два подхода к преодолению проблемы эффектов ДР от дефектов в многослойных кристаллических структурах при измерении и обработке их КДО.

В первом (экспериментальном) подходе компонента интенсивности ДР в дифракционных профилях от таких структур исключается путем размещения узкой щели перед окном детектора двухкристального дифрактометра (ДКД) (см., например, [25]) или путем использования третьего кристалла-анализатора [26-31]. Недостаток этого подхода состоит в неполном угнетении диффузной компоненты вследствие вертикальной расходимости диффузно рассеянных лучей, которые проходят через щель или отражаются от третьего кристалла. Другим, еще более существенным недостатком является пренебрежение влиянием эффектов ДР на ослабление и угловое перераспределение интенсивности когерентного рассеяния.

В другом (теоретическом) подходе при обработке измеренных КДО их диффузные компоненты аппроксимируют произвольными функциями [32-35]. Недостаток этого подхода состоит в отсутствии прямой связи этих функций с характеристиками дефектов. Так же, как и в предыдущем подходе, еще одним недостатком является игнорирование влияния ДР на интенсивность когерентного рассеяния.

Общим недостатком обоих этих подходов является потеря информации о характеристиках дефектов, основными носителями которой являются именно угловые распределения интенсивности ДР [36]. Кроме того, игнорирование эффектов ДР на дифракционных профилях приводит к систематическим погрешностям в подгоночных оценках основных структурных параметров многослойных структур (см., например, [37]).

Целью данной работы является разработка более реалистической теоретической модели дифракции рентгеновских лучей в многослойных кристаллических структурах. Эта модель основывается на обобщенной динамиче-

ской теории рассеяния в несовершенных монокристаллах с случайно распределенными дефектами [38,39] и будет учитывать как влияние процессов многократного ДР на ослабление когерентного рассеяния, так и их непосредственный вклад в дифрагированную интенсивность. Разработанная модель будет применена для определения по измеренным КДО многослойной структуры с квантовой ямой InGaAs/GaAs не только деформаций и химического состава слоев, а также характеристик (концентраций и размеров) дефектов в слоях.

§2. Дифракционная модель

Реальные монокристаллические и многослойные материалы, в том числе те, что используются в полупроводниковой микроэлектронике, как правило, содержат в себе не только точечные дефекты, а и разные микродефекты (кластеры, дислокационные петли), которые появляются после выращивания кристаллических структур и/или в результате разных технологических обработок. Кроме этого, многослойные кристаллические структуры всегда имеют в большей или меньшей степени искаженные границы между слоями. Необходимо также учесть существование переходных подслоев с переменной деформацией как в каждом из слоев, так и в подкладке. Последовательное и самосогласованное описание картин рентгеновской дифракции от таких кристаллических структур, особенно при использовании высокочувствительного метода ДКД, должно учитывать влияние на измеряемую отражательную способность многослойной кристаллической структуры всех перечисленных выше факторов.

Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей в монокристалле с хаотично распределенными ограниченными дефектами состоит из когерентной и диффузной компонент [40]. В случае дифракции по Бреггу наиболее общие выражения для этих компонент, которые позволяют рассматривать случаи рассеяния на микродефектах как малых, так и больших размеров, а также учитывать эффекты многократности ДР в обоих компонентах, были получены в работах [38,39] (см. также [41-45]). В соответствии с результатами этих работ дифференциальное распределение отражательной способности несовершенных монокристаллов с однородно распределенными микродефектами можно представить как сумму брэгговской (когерентной) и диффузной компонент:

$$R(\vec{k}) = R_B(\vec{k}) + R_D(\vec{k}), \quad (10.1)$$

где вектор $\vec{k} = \vec{K}' - \vec{K} - \vec{H}$ описывает отклонение волнового вектора \vec{K}' рассеянной плоской волны от узла обратной решетки \vec{H} , который соответствует вектору обратной решетки \vec{H} , а \vec{K} является волновым вектором плоской волны, которая падает на кристалл. Эти же результаты можно применять при рассмотрении дифракции в многослойных кристаллических структурах, если считать, что в каждом слое дефекты распределены однородно и средняя деформация постоянна. При этом для описания КДО, измеренных на ДКД с широко открытым окном детектора, выражение (10.1) необходимо проинтегрировать по телесному углу выхода.

2.1. Когерентное рассеяние

Когерентная компонента дифференциальной отражательной способности кристалла в выражении (10.1) имеет вид:

$$R_B(\vec{k}) = R_{coh}(\Delta\theta)\delta(\Delta\theta' - b\Delta\theta)\delta(\varphi' - \varphi), \quad (10.2)$$

$$R_{coh}(\Delta\theta) = b^{-1} \left| E_H / E_0 \right|^2, \quad (10.3)$$

где $\delta(x)$ – δ -функция Дирака, $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$ – угловые отклонения волновых векторов падающей и рассеянной плоских волн в горизонтальной плоскости от соответствующих точных брэгговских направлений, φ и φ' – угловые отклонения тех же векторов в вертикальной плоскости, $b = \gamma_0 / |\gamma_H|$ – параметр асимметрии кристалла, γ_0 и γ_H – направляющие косинусы векторов \vec{K} и \vec{K}' , E_0 и E_H – амплитуды падающей и когерентно рассеянной плоских волн в вакууме. Для описания КДО выражение (10.1) необходимо проинтегрировать по телесному углу выхода, вследствие чего исчезнут δ -функции и когерентная компонента КДО будет описываться выражением (10.3).

При описании распространения когерентных волн в монокристалле с однородно распределенными микродефектами можно использовать, как и в случае совершенных кристаллов, нормированную амплитуду когерентного рассеяния, которая определяется выражением $X(z) = (\zeta b)^{-1/2} D_H / D_0$, где D_0 и D_H – амплитуды проходящей и дифрагированной когерентных волн в кристалле, z – координата вдоль внутренней нормали \vec{n} до входной поверхности кристалла. В приближении полубесконечного кристалла, то есть, при $\mu_0 t \gg 1$, где μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения, t – толщина кристалла, когерентную компоненту амплитуды отражения и отражающую способность кристалла в случае дифракции по Брэггу соответственно можно описать выражениями [38]:

$$X(0) = X_0 = (\zeta b)^{-1/2} \left(y - s\sqrt{y^2 - 1} \right), \quad (10.4)$$

$$R_{coh} = |\zeta| |X_0|^2, \quad (10.5)$$

где $\zeta = \left(CE\chi_H + \Delta\chi_{0H}^\delta \right) \left(CE\chi_{\bar{H}} + \Delta\chi_{H0}^\delta \right)^{-1}$, $s = \text{sgn}(y_r)$ $y_r = \text{Re } y$. Нормированное угловое отклонение волнового вектора падающей плоской волны от точного брэгговского направления \vec{K}_B в подложке описывается выражением:

$$y = (\alpha - \alpha_0) \sqrt{b} / \sigma, \quad \alpha = \left(\vec{K} + \vec{H} / 2 \right) \vec{H} / K^2 \approx -\Delta\theta \sin 2\theta_B, \quad (10.6)$$

$$\Delta\theta = \left| \vec{K} - \vec{K}_B \right| / K, \quad 2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^\delta + \left(\chi_0 + \Delta\chi_{00}^\delta \right) / b,$$

$$\sigma^2 = \left(CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^\delta \right) \left(CE\chi_{\bar{H}} + \Delta\chi_{0H}^\delta \right),$$

где χ_0 и $\chi_{\pm H}$ – Фурье-компоненты поляризованности кристалла, $\Delta\chi_{00}$, $\Delta\chi_{0H}$ и $\Delta\chi_{H0}$ – дисперсионные поправки, обусловленные ДР от дефектов, C – поляри-

зационный множитель, E – статический фактор Дебая-Валлера, θ_B – угол Брэгга, $K=2\pi/\lambda$, λ – длина волны рентгеновского излучения, \vec{K}_B – волновой вектор падающей плоской волны, который удовлетворяет условию Брэгга (или уравнению Лауэ $(\vec{K}_B + \vec{H}/2) \cdot \vec{H} = 0$).

Присутствие на монокристаллической подкладке эпитаксиальных слоев с разными кристаллическими структурами, которые имеют суммарную толщину d , приводит к модификации амплитуды рассеяния (10.4). Амплитуду рассеяния X можно найти из уравнения Такаги-Топэна, которое в случае дифракции в кристалле с произвольным (но не флуктуационным) одномерным полем деформации имеет вид [17-19]:

$$-i \frac{dX}{dZ} = X^2 - 2\eta X + 1 \quad (10.7)$$

с граничным условием

$$X(d) = X_0, \quad (10.8)$$

где $z=d$ соответствует поверхности подкладки, а $z=0$ – поверхности кристалла. В уравнении (10.7) использованы обозначения:

$$Z=\pi(z-d)/\Lambda, \quad \eta=y+y_S, \quad A=\lambda|\gamma_H|\sqrt{b}/\sigma, \quad (10.9)$$

$$y_S = \alpha_S \sqrt{b}/\sigma, \quad \alpha_S = (\vec{K} + \vec{H}) \Delta \vec{H} / K^2 = -\Delta\omega \sin 2\theta_B. \quad (10.10)$$

где вектор $\Delta \vec{H} = \vec{H}' - \vec{H}$ описывает отклонения локального вектора обратной решетки в слое \vec{H}' , который зависит от координаты z , от постоянного вектора обратной решетки \vec{H} в подложке. Соответствующее угловое отклонение $\Delta\omega$ в (10.10) углового вектора \vec{K} от точного брэгговского условия вследствие деформации определяется выражением [10]:

$$\Delta\omega = (\varepsilon_{\perp} \cos^2 \psi + \varepsilon_{\parallel} \sin^2 \psi) \operatorname{tg} \theta_B + (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel}) \sin \psi \cos \psi \operatorname{sign}(1-b), \quad (10.11)$$

в котором ε_{\perp} и ε_{\parallel} обозначают деформацию соответственно в направлениях взаимно перпендикулярных осей z и x , а ψ – угол между поверхностью кристалла и отражающими плоскостями. при наличии флуктуационной компоненты поля деформации, которая создается в кристалле хаотично распределенными точечными дефектами и микродефектами, в общем случае необходимо было бы заменить системой связанных дифференциальных уравнений для амплитуд когерентных и диффузно рассеянных волн, которая учитывает взаимодействие этих волн [46,47]. Но решение этой системы требует значительных расчетных затрат. В данном рассмотрении такое взаимодействие будет учитываться благодаря введению, кроме коэффициентов фотоэлектрического поглощения, также коэффициентов поглощения вследствие ДР, которые описывают ослабление как когерентных, так и диффузно рассеянных волн.

Решение уравнения (10.7) для амплитуд рассеяния когерентных волн в многослойной структуре с дефектами при постоянной средней деформации в каждом слое можно найти с помощью рекуррентного соотношения, аналогичного полученному в работе [19]:

$$X_j = \eta_j + \sqrt{\eta_j^2 - 1} \frac{S_1 + S_2}{S_1 - S_2}, \quad (10.12)$$

$$S_\delta = \left[X_{j-1} - \eta - (-1)^\delta \sqrt{\eta_j^2 - 1} \right] \exp \left[(-1)^\delta iT_j \sqrt{\eta_j^2 - 1} \right],$$

где

$$T_i = \pi d_j / \Lambda, \quad \eta_j = y + y_S^j, \quad y_S^j = \alpha_S^j \sqrt{b} / \sigma, \quad \alpha_S^j = -\Delta\omega_j \sin 2\theta_B, \quad (10.13)$$

$$\Delta\omega_j = \left(\varepsilon_\perp^j \cos^2 \psi + \varepsilon_\parallel^j \sin \psi \right) \operatorname{tg} \theta_B + \left(\varepsilon_\perp^j - \varepsilon_\parallel^j \right) \sin \psi \cos \psi \operatorname{sign}(1 - b), \quad (10.14)$$

где $\delta=1,2$; $j = \overline{1, M}$, M – количество слоев, d_j – толщина j -го слоя, ε_\perp^j и ε_\parallel^j – деформации в j -м слое, X_0 описывается выражением (10.4). Тогда когерентная компонента отражающей способности многослойной структуры будет иметь вид:

$$R_{coh} = |\zeta| |X(0)|^2 = |\zeta| |X_M|^2. \quad (10.15)$$

Если суммарная толщина слоев d мала по сравнению с длиной экстинкции Λ , то есть $d \ll \Lambda, \operatorname{Re} \Lambda$, то динамическими эффектами когерентного рассеяния в них можно пренебречь, что соответствует отбрасыванию квадратичного слагаемого в уравнении (10.7):

$$i \frac{dX}{dZ} = 2\eta X - 1. \quad (10.16)$$

Решение уравнения (10.16) для слоя толщиной d с постоянной деформацией имеет вид:

$$X(z) = X_0 e^{-2i\eta z} + \frac{1 - e^{-2i\eta z}}{2\eta}, \quad (10.17)$$

причем X удовлетворяет граничному условию $X(d)=X_0$.

В этом кинематическом приближении когерентную компоненту отражающей способности монокристалла, который содержит однородно распределенные дефекты и имеет тонкий поверхностный слой толщиной d с отличительной деформацией, можно представить в виде:

$$R_{coh} = R_{coh}^0 + R_{coh}^{int} + R_{coh}^{kin}, \quad (10.18)$$

где коэффициенты отражения подложки, слоя та интерференционная составляющая описываются выражениями:

$$R_{coh}^0 = |\zeta| |X_0|^2 \exp[-4 \operatorname{Im}(\eta T)], \quad T = \pi d / \Lambda, \quad (10.19)$$

$$R_{coh}^{kin} = |\zeta| |X_{kin}|^2, \quad X_{kin} = \frac{1 - \exp(2i\eta T)}{2\eta} = -i \frac{\sin \eta T}{\eta} \exp(i\eta T), \quad (10.20)$$

$$R_{coh}^{int} = 2|\zeta| \operatorname{Re} \left(X_{kin}^* X_0 \exp(2i\eta T) \right). \quad (10.21)$$

Решение уравнения (10.16) для многослойной структуры с постоянной средней деформацией в каждом слое легко находится путем итерационной процедуры, которая состоит в использовании решения (10.17) для первого

слоя (толщиной d_1), который прилегает к подложке, в качестве граничного условия при решении уравнения (10.16) для другого слоя (толщиной d_2) и так далее для каждого следующего слоя. В результате такой процедуры получим:

$$R_{coh}^0 = |\zeta| |X_0|^2 \exp(-2 \operatorname{Im} \varphi_0), \quad (10.22)$$

$$R_{coh}^{int} = 2|\zeta| \operatorname{Re}(X_{kin}^* X_0 \exp(i\varphi_0)), \quad (10.23)$$

$$X_{kin} = \sum_{j=1}^M e^{i\varphi_j} \frac{1 - \exp(2i\eta_j T_j)}{2\eta_j}, \quad (10.24)$$

где использованы обозначения: $\varphi_j = 2 \sum_{i=j+1}^M \eta_i T_i$, $j = \overline{0, M-1}$; $\varphi_M = 0$.

Необходимо подчеркнуть, что формулы кинематического приближения (10.22)–(10.24) в отличие от известных выражений, приведенных, например, в [9,10], содержат в своих параметрах поправки, обусловленные ДР от дефектов.

2.2. Диффузное рассеяние

Диффузная компонента рассеянной интенсивности определяется как отношение усредненного по хаотичному распределению дефектов квадрата модуля амплитуды ДР на бесконечности до интенсивности падающего на кристалл излучения:

$$R_D(\vec{k}) = \frac{\langle |f_H(\vec{K}', \vec{K})|^2 \rangle}{\gamma_0 S |E_0|^2}, \quad (10.25)$$

где амплитуда ДР:

$$f_H(\vec{K}', \vec{K}) = \sum_{\delta} \sum_{\vec{G}} D_G^{\delta}(\vec{K}) F_{HG}^{\delta}(\vec{K}', \vec{K}), \quad (10.26)$$

угловые скобки обозначают усреднение по однородному распределению дефектов, $f_H(\vec{K}', \vec{K})$ – амплитуда ДР в телесный угол $d\Omega_{\vec{K}'}$ в направлении \vec{K}' , S – освещенная площадь входной поверхности кристалла, $F_{HG}^{\delta}(\vec{K}', \vec{K})$ – парциальные амплитуды ДР когерентной волны с амплитудой D_G^{δ} в направлении \vec{K}' , индексы суммирования в формуле (10.26) пробегают значения $\delta = 1, 2$ и $\vec{G} = 0, \vec{H}$.

Для подложки можно считать справедливым приближение полубесконечного кристалла, при котором в динамических волновых полях, которые создаются как когерентными, так и диффузно рассеянными волнами, сохраняется только по одной квазиблоховской волне. В таком случае выражение (10.25) можно привести к приближенному виду [39]:

$$R_D(\vec{k}) \approx \frac{1}{\gamma_0 S} \left(\frac{CVK^2}{4\pi} \right)^2 F_{dyn} S(q), \quad S(q) = \langle |\delta\chi_{H+q}|^2 \rangle, \quad (10.27)$$

где $\vec{q} = \vec{k} + i\mu_i \vec{n}$, μ_i – интерференционный коэффициент поглощения, V – объем кристалла, F_{dyn} – интерференционный множитель порядка единицы, $\delta\chi_{H+q}$ – компонента Фурье флуктуационной части поляризованности кристалла. Так как в случае точечных дефектов и мелких кластеров существенную роль в интенсивности ДР играет антисимметричная компонента [48-50,36], то в дальнейшем рассмотрении будем пользоваться приближенным выражением, которое учитывает одновременное присутствие в кристалле нескольких типов дефектов [40]:

$$S(q) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(q), \quad S_{\alpha}(q) = \frac{V_c}{V} c_{\alpha} E_{\alpha} |\chi_H|^2 (F_{\alpha}^s(q) + F_{\alpha}^{as}), \quad (10.28)$$

$$F_{\alpha}^s(q) = |\vec{H}\vec{U}_{\vec{q}\alpha}|^2, \quad F_{\alpha}^{as}(q) = 4L_H^{\alpha} c_{\alpha}^{-1} |\vec{H}\vec{U}_{\vec{q}\alpha}|, \quad (10.29)$$

где $F_{\alpha}^s(q)$ и $F_{\alpha}^{as}(q)$ отвечают за симметричную та антисимметричную компоненты интенсивности ДР, c_{α} – концентрация дефектов типа α , $\vec{U}_{\vec{q}\alpha}$ – Фурье-компонента поля смещений дефекта типа α , L_H^{α} – показатель статического фактора Дебая-Валлера для дефектов типа α . Выражения (10.28) и (10.29) справедливы в области рассеяния Хуаня, то есть при $k \ll k_{m\alpha}$, $k_{m\alpha} = 2\pi / R_{\alpha}^{eff}$ – радиус границы в пространстве обратной решетки между областями рассеяния Хуаня и Стокса-Вильсона для каждого типа дефектов. Эффективный радиус дислокационных петель $R_L^{eff} = R_L \sqrt{H|\vec{b}|} E$, де R_L – радиус петель, \vec{b} – вектор Бюргера петли. Эффективный радиус кластеров $R_C^{eff} = \sqrt{H|A_C|} E$, де $A_C = \Gamma \epsilon R_C^3$ – мощность кластера, $\Gamma = (1 + \nu)(1 - \nu)^{-1} / 3$, ϵ – деформация на границе кластера, R_C – радиус сферического кластера. В области рассеяния Стокса-Вильсона, то есть при $k \gg k_{m\alpha}$, функции $F_{\alpha}^s(q)$ и $F_{\alpha}^{as}(q)$ необходимо умножить на $k_{m\alpha}^2 / |\vec{q}|^2$.

Для расчета диффузной компоненты КДО, которая измеряется с помощью ДКД с широко открытым окном детектора, необходимо проинтегрировать выражение (10.27) по телесному углу выхода:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = \int d\Omega_{\vec{k}'} R_D(\vec{k}). \quad (10.30)$$

В случае присутствия в кристалле нескольких типов однородно распределенных дефектов и при отсутствии корреляции между ними диффузная компонента коэффициента отражения имеет вид [43]:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = F_{dyn}(\Delta\theta) \mu_{00}(k_0) t / \gamma_0, \quad \mu_{00}(\Delta\theta) = \mu_{ds}(k_0) p(\mu t), \quad (10.31)$$

$$\mu_{ds}(k_0) = \sum_{\alpha} \mu_{ds}^{\alpha}(k_0), \quad p(\mu t) = (1 - e^{-2\mu t}) (2\mu t)^{-1}, \quad (10.32)$$

где μ – интерференционный коэффициент поглощения. Для дефектов типа α

коэффициент поглощения вследствие ДР описывается выражением:

$$\mu_{ds}^{\alpha}(k_0) = c_{\alpha} C^2 E^2 m_0 J^{\alpha}(k_0), \quad m_0 = \frac{\pi V_c}{4} (H |\chi_{rH}| / \lambda)^2, \quad (10.33)$$

где $k_0 = K \Delta \theta \sin(2\theta_B)$, V_c – объем элементарной ячейки кристалла. Одномерное распределение интенсивности ДР от дефектов типа α при учете антисимметричной компоненты можно описать функциями:

$$J^{\alpha}(k_0) = \begin{cases} J_H^{\alpha}(k_0) + J_{H-SW}^{\alpha}(k_0) + J_{Has}^{\alpha}(k_0) + J_{H-SWas}^{\alpha}(k_0), & |k_0| \leq k_{m\alpha}; \\ J_{SW}^{\alpha}(k_0) + J_{SWas}^{\alpha}(k_0), & |k_0| \geq k_{m\alpha}. \end{cases} \quad (10.34)$$

Распределение интенсивности ДР в области рассеяния Хуаня ($|k_0| \leq k_{m\alpha}$) и Стокса-Вильсона ($|k_0| \geq k_{m\alpha}$) дается соответственно функциями:

$$J_H^{\alpha}(k_0) = b_2 \ln \frac{k_{m\alpha}^2 + \mu^2}{k_0^2 + \mu^2} + (b_3 k_0^2 + b_4 \mu^2) \left(\frac{1}{k_{m\alpha}^2 + \mu^2} - \frac{1}{k_0^2 + \mu^2} \right); \quad (10.35)$$

$$J_{H-SW}^{\alpha}(k_0) = \frac{k_{m\alpha}^2}{k_{m\alpha}^2 + \mu^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu^2}{k_{m\alpha}^2 + \mu^2} \right); \quad (10.36)$$

$$J_{Has}^{\alpha}(k_0) = \frac{4L_H^{\alpha}}{n_{\alpha} V_c H \sqrt{B_{2\alpha}}} \left(\sqrt{k_{m\alpha}^2 + \mu^2} - \sqrt{k_0^2 + \mu^2} \right); \quad (10.37)$$

$$J_{H-SWas}^{\alpha}(k_0) = \frac{4L_H^{\alpha}}{n_{\alpha} V_c H \sqrt{B_{2\alpha}}} \sqrt{k_{m\alpha}^2 + \mu^2}; \quad (10.38)$$

$$J_{SW}^{\alpha}(k_0) = \frac{k_{m\alpha}^2}{k_0^2 + \mu^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu^2}{k_0^2 + \mu^2} \right); \quad (10.39)$$

$$J_{SWas}^{\alpha}(k_0) = \frac{4L_H^{\alpha}}{n_{\alpha} V_c H \sqrt{B_{2\alpha}}} \frac{k_{m\alpha}^2 + \mu^2}{\sqrt{k_0^2 + \mu^2}}; \quad (10.40)$$

$$b_2 = B_{1\alpha} + \frac{1}{2} B_{2\alpha} \cos^2 \theta_B, \quad b_3 = B_{2\alpha} \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta_B - \sin^2 \theta_B \right),$$

$$b_4 = B_{2\alpha} \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta_B - \cos^2 \psi \right),$$

где ψ – угол отклонения дифракционной плоскости от поверхности кристалла. В случае круговых дислокационных петель ($\alpha=1$):

$$B_{11} = \frac{4}{15} \left(\pi |\vec{b}| R_L^2 / V_c \right)^2, \quad B_{21} = \beta B_{11}, \quad \beta = \frac{1}{4} (3\nu^2 + 6\nu - 1) / (1 - \nu)^2. \quad (10.41)$$

Для сферических кластеров ($\alpha=2$):

$$B_{12}=0, \quad B_{22} = (4\pi A_C / V_c)^2. \quad (10.42)$$

В целом отражательную способность системы, которая состоит из толстой

подложки и эпитаксиальных слоев с суммарной толщиной $d < \Lambda_r$, можно представить как сумму диффузных компонент коэффициентов отражения подложки ($R_{diff}^S(\Delta\theta)$) и каждого из слоев ($R_{diff}^j(\Delta\theta)$) с учетом поглощения (фотоэлектрического и вследствие ДР) падающих и рассеянных лучей на пути к соответствующему слою:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = R_{diff}^S(\Delta\theta) + R_{diff}^L(\Delta\theta), \quad (10.43)$$

$$R_{diff}^S(\Delta\theta) = F_{abs}^0 F_{dyn} \frac{\mu_{ds}(\Delta\theta)}{2\mu_0(1+b)}, \quad (10.44)$$

$$R_{diff}^L(\Delta\theta) = \sum_{j=1}^M R_{diff}^j(\Delta\theta), \quad R_{diff}^j(\Delta\theta) = F_{abs}^j \mu_{ds}(\Delta\theta) d_j / \gamma_0, \quad (10.45)$$

$$F_{abs}^j = \prod_{i=j+1}^M e^{-\mu_L^i d_i}, \quad \mu_L^j = (\mu_0^j + \mu_{DS}^j)(1+b)/(2\gamma_0).$$

При записи формул (10.44) и (10.45) было учтено, что функция $p(\mu t)$ в выражении (10.32) для подложки ($\mu t \gg 1$) принимает значения $p \cong (2\mu t)^{-1} \cong (2\mu t / \gamma_0)^{-1}$, а для тонких слоев ($\mu_0^j d_j \ll 1$) – $p \cong 1$.

§3. Структурные и дифракционные параметры КЯ и буферных слоев

Для расчета постоянной решетки, структурных факторов (и соответствующих Фурье-компонент поляризованности) и силовых констант трехкомпонентных твердых растворов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ будем использовать известные соотношения (см., например, [37]):

$$\begin{aligned} a(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) &= x a(\text{InAs}) + (1-x) a(\text{GaAs}), \\ v(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) &= x v(\text{InAs}) + (1-x) v(\text{GaAs}) \end{aligned} \quad (10.46)$$

и аналогично для силовых констант C_{11} и C_{12} . Действительную и мнимую части структурных факторов и, соответственно, Фурье-компонент поляризованности вследствие их зависимости от химического состава многокомпонентных твердых растворов тоже можно рассчитывать с помощью аналогичных соотношений:

$$\begin{aligned} \chi_{Hr}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) &= x \chi_{Hr}(\text{InAs}) + (1-x) \chi_{Hr}(\text{GaAs}), \\ \chi_{Hi}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) &= x \chi_{Hi}(\text{InAs}) + (1-x) \chi_{Hi}(\text{GaAs}). \end{aligned} \quad (10.47)$$

Расчет нормальной (\perp) и тангенциальной (\parallel) компонент деформации несоответствия в слое i проводится в соответствии с выражениями:

$$\varepsilon_{\perp}^i = \frac{a_{\perp}^i - a_0}{a_0}, \quad \varepsilon_{\parallel}^i = \frac{a_{\parallel}^i - a_0}{a_0}, \quad (10.48)$$

где a_0 и a_i – параметры решетки в подложке и i -м слое. Для тонкой когерент-

но выращенной пленки на толстой подложке $a_{\parallel}^1 = a_0$ и соответственно $\varepsilon_{\parallel}^1 = 0$. Аналогичные соотношения считаются справедливыми для всех следующих слоев. Нормальная компонента постоянной решетки i -го слоя a_{\perp}^i рассчитывается следующим образом:

$$a_{\perp}^i = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} (a_0^i - a_0) + a_0, \quad (10.49)$$

где C_{11} и C_{12} – коэффициенты жесткости i -го слоя.

Кроме деформации несоответствия, каждый слой имеет дополнительную деформацию, вызванную присутствующими в нем микродефектами (кластерами и дислокационными петлями), а также точечными дефектами (междоузельными атомами и вакансиями). Для дислокационных петель эта деформация рассчитывается в соответствии с выражением [36]:

$$\varepsilon_L = \frac{\pi}{3} |\vec{b}| R_L^2 n_L, \quad (10.50)$$

а для кластеров и точечных дефектов как

$$\varepsilon_C = \Gamma \varepsilon R_C^3 n_C. \quad (10.51)$$

При обработке измеренных КДО возникла также необходимость учитывать плавное изменение деформаций с обеих сторон от границы между слоями. Эта деформация описывалась выражением:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\perp}^{j+1}(z) &= \varepsilon_{\perp}^j + \frac{\varepsilon_{\perp}^{j+1} - \varepsilon_{\perp}^j}{2} \left[1 + \operatorname{th} \left(\frac{z - z_j - z_j^0}{d_{tr}^{j+1}} \right) \right], \quad \text{при } z \geq z_j \\ \varepsilon_{\perp}^j(z) &= \varepsilon_{\perp}^j + \frac{\varepsilon_{\perp}^{j+1} - \varepsilon_{\perp}^j}{2} \left[1 + \operatorname{th} \left(\frac{z - z_j - z_j^0}{d_{tr}^j} \right) \right], \quad \text{при } z \geq z_j \end{aligned} \quad (10.52)$$

где d_{tr}^j , d_{tr}^{j+1} и ε_{\perp}^j , $\varepsilon_{\perp}^{j+1}$ – соответственно толщины переходных слоев и деформаций в соседних j и $(j+1)$ слоях, z_j – координата границы между этими слоями, z_j^0 – параметр смещения, характеризующий асимметрию профиля деформации на границе между слоями.

§4. Эксперимент

Исследуемый образец многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (рис. 10.1) с номинальным значением $x \approx 0,37$ был выращен методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложке GaAs (001). Толщина слоев многослойной структуры определялась с помощью метода дифракции высокоэнергетических электронов на отражение по осцилляциям интенсивности.

Измерения КДО образца были проведены с использованием ДКД фирмы *Vede* с рентгеновской трубкой с медным анодом. Хорошо коллимированный

монохроматический рентгеновский пучок (с длиной волны $\lambda=0,154056$ нм) получался с помощью асимметричного рефлекса (004) монохроматора GaAs. Отраженный пучок регистрировался с помощью сцинтилляционного счетчика с узкой щелью путем синхронного $\theta-2\theta$ сканирования исследуемого образца и счетчика относительно центра области симметричного отражения (004) подложки. Регистрация КДО проводилась в автоматическом пошаговом режиме, обеспечивающем точность регистрации в каждой точке измеряемого углового интервала на уровне не хуже 3%.

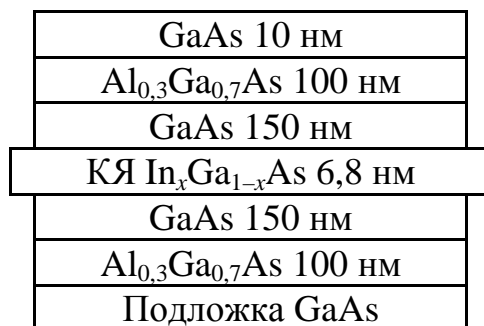


Рис. 10.1. Схема многослойной структуры с КЯ $In_xGa_{1-x}As$

§5. Обработка измеренной КДО и анализ результатов

Стандартная обработка измеренных рентгеновских КДО от многослойных структур с целью определения толщин слоев, их химического состава и деформаций в них проводится с помощью кинематических [10], или полукинематических [13] выражений для интенсивности дифракции. Более широко при обработке таких КДО используются рекуррентные соотношения между аналитическими решениями динамической теории для системы слоев с постоянной деформацией [17,19,22-24,33-35,51-55]. В обоих подходах дефектность многослойных структур описывается только фактором аморфизации границ между слоями. Учет наличия микродефектов в слоях многослойных структур до сегодняшнего времени проводилось только на основе полуфеноменологических моделей [56, 57].

Тут необходимо подчеркнуть, что современные методы выращивания подложек GaAs и эпитаксиальных слоев на них не обеспечивают получения полностью совершенных кристаллических структур. Как в подложках, так и в эпитаксиальных слоях неизменно присутствуют разного рода точечные дефекты и микродефекты (преципитаты и дислокационные петли). Это подтверждается разными экспериментальными наблюдениями. В том числе, методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) в кристаллах GaAs наблюдались дислокационные петли с радиусами около 50 и 10 нм [58, 59], а также мелкие преципитаты с радиусом около 3 нм [58]. Детальные исследования распределений интенсивности ДР в GaAs рентгеновскими методами ДКД и трехкристальной дифрактометрии (ТКД) установили присутствие дислокационных петель с радиусами между 1 и 0,3 мкм с концентрациями от 10^9 до 10^{14} см⁻³, а также мелких и крупных преципитатов с радиусами около

0,01 и 0,1 мкм [60]. В аналогичных исследованиях эпитаксиальных слоев GaAs методом ТКД были выявлены кластеры с радиусами от 3 до 5 нм и концентрацией около $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [61]. Рентгенодифрактометрические исследования образцов GaAs, которые выращивались с разными отклонениями от стехиометрии и проходили разные термообработки, также установили присутствие в них микродефектов с эффективными радиусами от 0,05 до 0,4 мкм [62-64]. Разными физическими методами было установлено также присутствие разных дефектов в эпитаксиальных слоях в InGaAs и AlGaAs [37, 65-67]. С другой стороны необходимо отметить, что даже при идеальных технологических условиях сам характер химических связей в указанных выше бинарных и тройных соединениях обуславливает появление структурных дефектов, что подтверждается результатами прямых расчетов из первопринципов (см., например, [68, 69]).

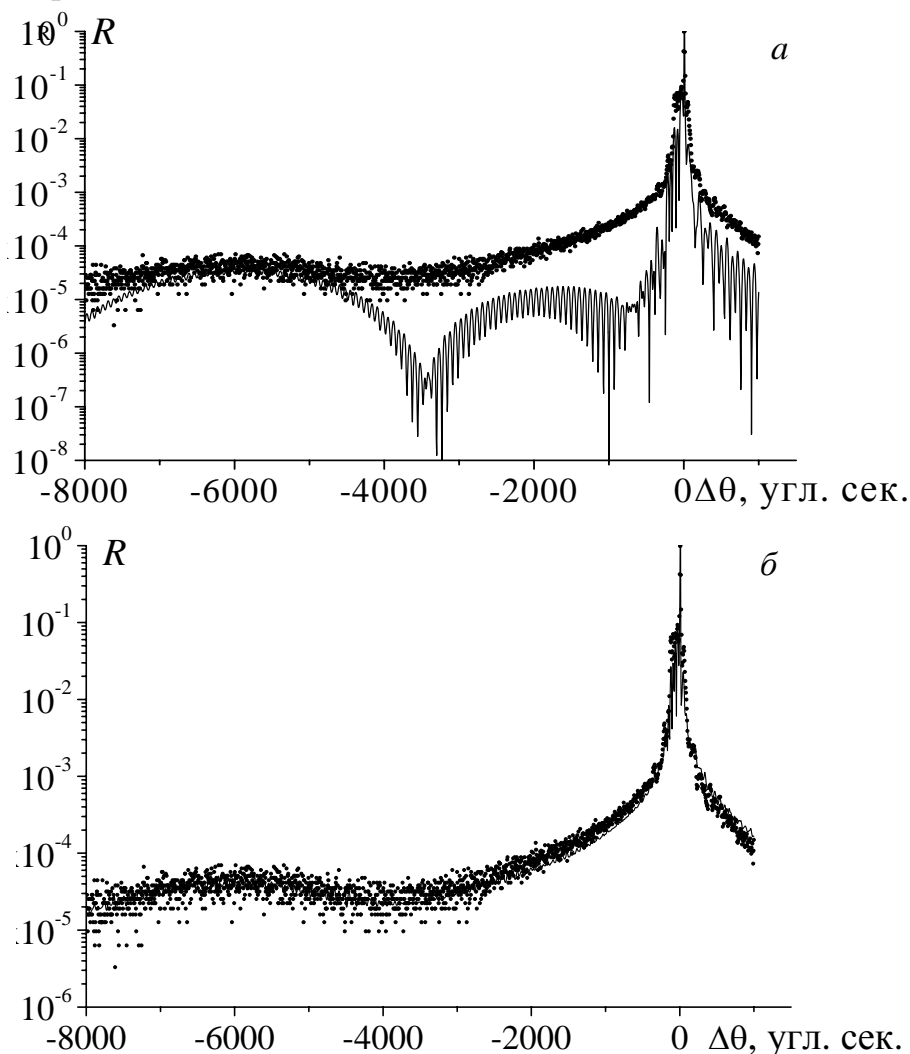


Рис.10.2. Экспериментальная КДО (точки) от многослойной системы с одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ и соответственные теоретические кривые без учета (а) и с учетом (б) ДР от дефектов в подложке и слоях

В данной работе стандартный подход к обработке КДО использовался только как первый шаг для получения стартовых значений химического состава КЯ и буферных слоев, их толщин и деформаций в них. Поскольку рас-

хождения между экспериментальной и стартовой теоретической КДО, учитывающей только когерентное рассеяние, существенное (рис. 10.2,а), то начальные значения параметров КЯ были найдены с существенной погрешностью. По этой же причине уточнить значения номинальных параметров других слоев было практически невозможно.

Следующим шагом были дополнительно заданы начальные значения радиусов и концентраций микродефектов (дислокационных петель и кластеров) и точечных дефектов в подложке и во всех слоях многослойной структуры. Выбор этих начальных значений осуществлялся в соответствии с данными из цитированных выше литературных источников. Вариация параметров дефектов в разных слоях позволяла приближать расчетную КДО к экспериментальной на разных участках угловой зависимости как по оси ординат (интенсивность), так и по оси абсцисс (изменение углового положения за счет дополнительной деформации от дефектов). Этот этап подгонки позволил значительно лучше согласовать расчетную и экспериментальную КДО.

На конечном этапе обработки КДО по обе стороны от границ между слоями были заданы переходные слои, профиль деформации в которых описывался выражениями (10.52). В этих же переходных слоях задавался дополнительный параметр аморфизации E_a . Варьирование параметров E_a и d_{tr} позволило окончательно согласовать расчетную и экспериментальную КДО (рис. 10.2,б). Результаты обработки КДО приведены в таблицах 10.1-10.6.

В первую очередь необходимо отметить отличие найденных параметров КЯ ($x \approx 0,35$, $\varepsilon_{\perp} \approx 4,9\%$) от их значений, найденных стандартным способом ($x \approx 0,34$, $\varepsilon_{\perp} \approx 4,8\%$). Найденные толщины других слоев тоже отличаются от их номинальных значений (ср. рис. 10.1). Однако, наиболее важным результатом данной работы является получение детальной количественной информации о характеристиках дефектов в исследованной многослойной структуре. Получение такого рода данных позволяет существенно углубить изучение количественных характеристик структурных искажений в многослойных кристалли-

Таблица 10.1. Химические составы и деформации в слоях многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Характеристики слоев	Подложка GaAs	Слои $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	Слои GaAs	КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	Верхний слой GaAs
Толщина слоя t , нм	–	95 105	155	6,8	10
Химический состав, x	–	0,3	–	0,35	–
Полная деформация, $\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_L + \varepsilon_C$	$3,93 \cdot 10^{-6}$	$7,82 \cdot 10^{-4}$	$7,73 \cdot 10^{-6}$	$4,93 \cdot 10^{-2}$	0
Толщина переходного слоя d_{tr} , нм	20		6		
Факторы аморфизации, E_a		0,8	0,8	0,7	0,8
		0,9	0,9	0,9	0,9
		1,0	1,0	1,0	1,0
		0,9	0,9	0,9	0,9

		0,8	0,4	0,7	0,8
--	--	-----	-----	-----	-----

Таблица 10.2. Характеристики дефектов в подложке GaAs многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Типы дефектов	Характеристики дефектов	
Точечные дефекты и тепловое ДР	M	$3,36 \cdot 10^{-5}$
	L_H	$1,67 \cdot 10^{-3}$
Дислокационные петли	Концентрация n_L , см^{-3}	$8 \cdot 10^{12}$
	Радиус R_L , нм	30
	Эффективный радиус	125,4
	R_L^{eff} , нм	
	M	$2,07 \cdot 10^{-2}$
	L_H	$8,08 \cdot 10^{-3}$
	Средняя деформация, ε_L	$3,01 \cdot 10^{-6}$
Сферические кластеры	Концентрация n_C , см^{-3}	$5 \cdot 10^{12}$
	Радиус R_C , нм	13
	Эффективный радиус	35,2
	R_C^{eff} , нм	
	M	$1,66 \cdot 10^{-3}$
	L_H	$3,23 \cdot 10^{-4}$
	Средняя деформация, ε_C	$9,20 \cdot 10^{-7}$

Таблица 10.3. Характеристики дефектов в слоях $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $x=0,3$ многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Типы дефектов	Характеристики дефектов	
Точечные дефекты и тепловое ДР	M	$3,14 \cdot 10^{-5}$
	L_H	$1,7 \cdot 10^{-5}$
Дислокационные петли	Концентрация n_L , см^{-3}	$7 \cdot 10^{15}$
	Радиус R_L , нм	6
	Эффективный радиус	23,9
	R_L^{eff} , нм	
	M	$3,06 \cdot 10^{-2}$
	L_H	$5,66 \cdot 10^{-2}$
	Средняя деформация, ε_L	$1,05 \cdot 10^{-4}$
Сферические кластеры	Концентрация n_C , см^{-3}	$2,28 \cdot 10^{14}$
	Радиус R_C , нм	8
	Эффективный радиус	17,0
	R_C^{eff} , нм	
	M	$4,15 \cdot 10^{-3}$
	L_H	$1,26 \cdot 10^{-4}$
	Средняя деформация, ε_C	$9,77 \cdot 10^{-6}$

Таблица 10.4. Характеристики дефектов в слоях GaAs многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Типы дефектов	Характеристики дефектов	
Точечные дефекты и тепловое ДР	M	$3,63 \cdot 10^{-5}$
	L_H	$1,67 \cdot 10^{-3}$
Дислокационные петли	Концентрация n_L , см^{-3}	$1,56 \cdot 10^{14}$
	Радиус R_L , нм	9,5
	Эффективный радиус	39,9
	R_L^{eff} , нм	
	M	$5,11 \cdot 10^{-3}$
	L_H	$5,03 \cdot 10^{-3}$
Сферические кластеры	Средняя деформация, ε_L	$5,90 \cdot 10^{-6}$
	Концентрация n_C , см^{-3}	$0,1 \cdot 10^{14}$
	Радиус R_C , нм	13
	Эффективный радиус	35,2
	R_C^{eff} , нм	
	M	$3,45 \cdot 10^{-3}$
	L_H	$6,47 \cdot 10^{-4}$
Средняя деформация, ε_C	$1,83 \cdot 10^{-6}$	

Таблица 10.5. Характеристики дефектов в КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $x=0,35$ многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Типы дефектов	Характеристики дефектов	
Точечные дефекты и тепловое ДР	M	$6,7 \cdot 10^{-5}$
	L_H	$1,69 \cdot 10^{-3}$
Дислокационные петли	Концентрация n_L , см^{-3}	—
	Радиус R_L , нм	—
	Эффективный радиус	—
	R_L^{eff} , нм	
	M	—
	L_H	—
Сферические кластеры	Средняя деформация, ε_L	—
	Концентрация n_C , см^{-3}	—
	Радиус R_C , нм	—
	Эффективный радиус	—
	R_C^{eff} , нм	
	M	—
	L_H	—
Средняя деформация, ε_C	—	

Таблица 10.6. Характеристики дефектов в верхнем слое GaAs многослойной структуры с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Типы дефектов	Характеристики дефектов	
Точечные дефекты и тепловое ДР	M	$3,57 \cdot 10^{-5}$
	L_H	$1,67 \cdot 10^{-3}$
Дислокационные петли	Концентрация n_L , см^{-3}	–
	Радиус R_L , нм	–
	Эффективный радиус	–
	R_L^{eff} , нм	–
	M	–
	L_H	–
Сферические кластеры	Средняя деформация, ε_L	–
	Концентрация n_C , см^{-3}	–
	Радиус R_C , нм	–
	Эффективный радиус	–
	R_C^{eff} , нм	–
	M	–
L_H	–	
	Средняя деформация, ε_C	–

лических структурах. При этом важно отметить, что хотя существенное увеличение количества подгоночных параметров (характеристик дефектов) формально дает возможность произвольного манипулирования ними и могло бы обеспечить существенное упрощение в проведении подгонки теоретической КДО к экспериментальной, в действительности, вследствие тесной взаимосвязи характеристик дефектов в параметрах когерентного и диффузного рассеяния, допустимые значения этих характеристик достаточно прочно ограничены и могут быть установлены со сравнительно высокой точностью.

§6. Резюме и выводы

Развита обобщенная динамическая теория и создана модель, дающая самосогласованное описание процессов многократного когерентного и диффузного рассеяния рентгеновских лучей в структурно несовершенных монокристаллических слоях и многослойных структурах, содержащих хаотично распределенные микродефекты и точечные дефекты. Тем самым создана теоретико-аналитическая база метода диагностики характеристик структурных дефектов и деформаций в реальных монокристаллических слоях и многослойных структурах по дифракционным профилям, измеряемым рентгеновским ДКД. С помощью полученных теоретических результатов проведено исследование многослойной структуры с одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Химический состав и деформации в КЯ и буферных слоях определены с уче-

том эффектов ДР от дефектов в слоях и подложке. Установлены также характеристики микродефектов (радиусы и концентрации) и точечных дефектов в слоях и подложке.

Разработанный рентгенодифракционный метод диагностики многослойных структур позволяет убрать систематические погрешности при определении химического состава слоев и деформаций в них, возникающих при применении стандартных методов обработки КДО, основанных на теориях исключительно когерентного рассеяния рентгеновских лучей. Наиболее существенной отличительной характеристикой нового метода является возможность установления количественных характеристик структурных дефектов в многослойных кристаллических структурах.

ГЛАВА 11 ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ И ЯМАМИ (СТЕНКАМИ)

Эта глава посвящена освещению некоторых вопросов, связанных с исследованиями методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии сверхрешеточных структур с квантовыми стенками и квантовыми точками, полученных молекулярно-лучевой эпитаксией. В нескольких параграфах обсуждаются особенности формирования спектров кривых дифракционного отражения в короткопериодных сверхрешетках (Ga,Al)As/GaAs для квазизапрещенных отражений. Установлено слабое влияние на интенсивности спектров слоев GaAs, за счет малости его атомного формфактора, а также причины возникновения периодичности сателлитов. Обсуждаются причины возникновения и погасания сателлитной картины спектров в зависимости от различных причин: структурное совершенство слоев, напряжения на границах раздела, неровности границ и толщины слоев. Показана высокая чувствительность интенсивности сателлитов CP к дефектам структуры в субслоях, а также показаны некоторые особенности применения квазизапрещенных рефлексов в этих структурах.

Проанализирована возможность контроля вариаций состава твердого раствора в слоях. Показана возможность контроля перехода к образованию квантовых точек в этих структурах. При исследовании с использованием двумерных карт рассеяния в обратном пространстве многослойных структур с квантовыми точками $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, установлена периодичность квантовых точек в этих структурах, как в направлении роста (нормальная), так и в плоскости интерфейса (латеральная). Показана возможность исследования параметров квантовых точек из анализа спектров кривых дифракционного отражения для симметричных отражений. Проанализировано влияние вариаций периода многослойной квантовой системы на характер распределения интенсивностей на кривых качания, а также на двумерных картах распределения интенсивности вокруг узлов обратного пространства. Дано объяснение расщеплению сателлитных пиков сверхрешеток, заключающееся либо в удвоении периода сверхрешеточной структуры при формировании решетки квантовых точек и в появлении соответствующих сверхструктурных сателлитов в одних случаях (рис. 11.33,б), либо в появлении в слоях двух областей с различными периодами в других (рис. 11.33,а).

§1. Исследование короткопериодных сверхрешеток GaAs/AlAs с помощью высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии

В последние годы значительное внимание уделяется изучению свойств квантово-размерных сверхрешеток (CP) GaAs/AlAs, что связано с перспективой их практического использования, в частности, в приборах оптоэлектроники. В этом плане чрезвычайно важной является информация о структуре этих объектов, относительно планарности границ между слоями, однородности

толщин слоев, диффузионных процессов на границах, о примесях и микродефектах в периодических структурах. Все эти несовершенства строения в значительной степени влияют на электрофизические и оптические характеристики СР.

Наиболее чувствительными и информативными методами неразрушающего контроля реальной структуры СР является высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия (ВРРД) [1-3]. В таком подходе дифракция рентгеновских лучей на структурах, в которых постоянная решетки, или интенсивность рассеяния модулированы вдоль одной из координат, характеризуются наличием сателлитов около брэгговского пика усредненной решетки [4,5]. Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей сателлитными пиками пропорциональна Фурье-компонентам координатной зависимости модуляции состава системы [4]. Поэтому, например, взаимодиффузию в СР GaAs и AlAs можно изучать, измеряя интенсивность сателлитов в зависимости от времени отжига при постоянной температуре [5]. Кроме этого, изменение ширины сателлитных пиков в обратном пространстве несет информацию о совершенстве пленок и в частности, о когерентности слоев СР.

Целью данного параграфа было исследование геометрических параметров и упругого состояния слоев короткопериодных СР GaAs/AlAs методами ВРРД. При этом было использовано сравнение экспериментально полученных кривых дифракционного отражения (КДО) с теоретически рассчитанными (используя так называемое полукинематическое приближение теории рассеяния рентгеновских лучей [3], когда толщины отдельных слоев СР являются малыми по отношению к экстинкционной длине).

При расчетах картины дифракции рентгеновских лучей с помощью первой итерации уравнения Топэна, предложенной в [4], однородный эпитаксиальный слой описывается такими параметрами: толщина t , коэффициентами Фурье поляризуемости кристалла χ , напряжениями ε и коэффициентом поглощения μ . Характеристиками дифракции и эпитаксиального слоя толщиной t будут величины A , которая обратно пропорциональна экстинкционной длине, и Y , которые определяются такими формулами [3]:

$$A = \frac{\pi\chi_h t}{\lambda\sqrt{|\gamma_0\gamma_h|}}, \quad (11.1)$$

$$Y = -\sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \cdot \frac{\sin(2\theta_B)}{|\chi_h|} \cdot \Delta\omega. \quad (11.2)$$

В этих формулах λ – длина волны рентгеновского излучения, θ_B – брэгговский угол для подложки, γ_0, γ_h – направляющие косинусы первичного и дифрагированного лучей относительно внутренней нормали к поверхности, $\Delta\omega$ – величина отклонения кристалла от брэгговского положения.

При рассмотрении отражающей способности реальной СР для заданного рентгеновского излучения необходимо принимать во внимание механические напряжения (деформации) в эпитаксиальной пленке, поскольку они могут

быть непосредственно определены из анализа формы КДО. Обозначим характеристики пленки и подложки индексами f и s соответственно. Разность межплоскостных расстояний зависит от конкретной деформации и ориентации атомных плоскостей $\Delta d = d_f - d_s$. Указанные напряжения (деформации), (как перпендикулярные ε_{\perp} , так и параллельные ε_{\parallel} поверхности кристалла), определяются в теории упругости относительным изменением межплоскостных расстояний в подложке и пленке:

$$\Delta d / d_s = \varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{\parallel} \sin^2 \Psi, \quad (11.3)$$

где Ψ – угол между плоскостями и поверхностью кристалла. Дифференциальный угол $\Delta \omega$ равен:

$$\Delta \omega = \theta - \theta_B + (\varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{\parallel} \sin^2 \Psi) \operatorname{tg} \theta_B \pm (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{\parallel}) \sin \Psi \cos \Psi, \quad (11.4)$$

где θ – угол скользющего падения рентгеновских лучей.

Произвольное распределение напряжений ε и структурного фактора F эпитаксиальной пленки по глубине можно представить дискретной структурой, которая состоит из N субслоев. Нормализованная амплитуда дифракции этой структуры может быть записана при помощи следующей формулы:

$$E_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_j^N a_j \exp[-i(A_j Y_j + \Phi_j)] \frac{\sin(A_j Y_j)}{Y_j}, \quad (11.5)$$

где $a_j = \exp\left[-\mu \left(\frac{\gamma_0 + |\gamma_h|}{2|\gamma_0 \gamma_h|}\right) \sum_{i=j+1}^N t_i\right]$ – абсорбционный множитель, $a_N = 1$,

$\Phi_j = 2 \sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i$, – фазовый фактор, причем $\Phi_1 = 0$.

Здесь СР представляет собой случай произвольной слоистой эпитаксиальной структуры. В простейшем случае ее период состоит из двух слоев (a и b), каждый из которых характеризуется своей толщиной, напряжениями, структурным фактором и параметрами A и Y . Амплитуда дифракции для M -периодной двухслоистой СР имеет вид [1,3]:

$$E_M = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \exp(-i\beta) F_S \frac{\sin(M(A_a Y_a + A_b Y_b))}{\sin(A_a Y_a + A_b Y_b)}, \quad (11.6)$$

где $\beta = (M-1)(A_a Y_a + A_b Y_b) + A_a Y_a$, а $F_S = \frac{\sin(A_a Y_a)}{Y_a} + \exp[-i(A_a Y_a + A_b Y_b)] \frac{\sin(A_b Y_b)}{Y_b}$

можно рассматривать как структурный фактор для одного периода СР. Синус в числителе (11.6) превращается в ноль с периодом $\Delta \theta_M$, который определяется из условия $M(A_a Y_a + A_b Y_b) = \pi$. Этот множитель описывает так называемые "быстрые" маятниковые осцилляции интенсивности на КДО. Принимая во внимание (11.1) и (11.2), найдем:

$$\Delta \theta_M = \frac{\lambda |\gamma_h|}{M(t_a + t_b) \sin(2\theta_B)}, \quad (11.7)$$

откуда можно определить полную толщину СР $T=M(t_a+t_b)$. Синусоидальный же знаменатель в (11.6) обуславливает другие (более медленные) колебания амплитуд рассеяния при регистрации КДО. Нулевые положения колебаний определяются из условия:

$$A_a Y_a + A_b Y_b = n\pi, \quad (11.8)$$

которые обозначаются, как $n=0, \pm 1, \pm 2...$ Из углового расстояния между этими пиками $\Delta\theta_p$ можно определить период p СР:

$$p = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_h|}{\Delta\theta_p \sin(2\theta_B)}. \quad (11.9)$$

Сверхрешеточный пик сателлита нулевого порядка расположен от пика подложки на угловом расстоянии $\Delta\theta_0$:

$$-\Delta\theta_0 = k_1 \langle \varepsilon_{\perp} \rangle + k_2 \langle \varepsilon_{\parallel} \rangle,$$

где

$$k_1 = \cos^2 \Psi \operatorname{tg} \theta_B \pm \sin \Psi \cos \Psi, \quad k_2 = \sin^2 \Psi \operatorname{tg} \theta_B \pm \sin \Psi \cos \Psi. \quad (11.10)$$

Скобки для величины деформации означают усреднение по периоду СР.

Амплитуда сателлитов n -го порядка пропорциональна величине структурного фактора СР при условии (11.8):

$$F_{Sn} = \frac{\sin(A_a Y_{an})}{A_a Y_{an}} \left(A_a + \frac{A_b}{1 - n\pi / (A_a Y_{an})} \right). \quad (11.11)$$

Поскольку угловой параметр сателлита Y_{an} связан с Y_{a0} формулой (11.9) и (11.2), то он зависит только от A_a, A_b и Y_{a0} . При $n=0$ (11.11) принимает простой вид:

$$F_{S0} = \frac{\sin(A_a Y_{a0})}{A_a Y_{a0}} (A_a + A_b) \cong A_a + A_b. \quad (11.12)$$

Измеряя отношение амплитуд рассеяния сателлитов n -го и нулевого порядков, можно рассчитать значение толщины одного из слоев СР, а также средние напряжения в нем. Однако, как показывает анализ формул (11.11) и (11.12), наиболее пригодным для этой цели являются так называемые квази-запрещенные рефлекссы (КЗР) типа 200.

Спектры дифракции от СР-структур для отражения 004 приведены на рис. 11.1. Анализ рисунка показывает, что на спектрах четко наблюдаются как сателлиты $\pm S_1$, вызванные периодом СР, так и ряд других пиков маятниковых осцилляций интенсивности. Некоторые из них, расположенные вблизи сателлита нулевого порядка S_0 , можно отнести к так называемым быстрым осцилляциям, периодичность которых описывается формулой (11.7). Другие, обозначенные на рис. 11.1 буквой A , вызваны наличием буферного слоя и определяют его толщину. Как видно из рисунка, нулевой сателлит имеет самую большую интенсивность, что является признаком короткопериодной СР [6]. В качестве первого приближения при количественном анализе экспериментальных кривых с помощью теоретической подгонки сначала были использованы величины технологических параметров структуры СР. Как видно из поведения расчетной кривой, технологические параметры не отвечают данным,

полученным в эксперименте, ни по значению периода CP , ни по соотношениям между толщинами этих слоев (см. вставку). При таком выборе стартовых условий подгонки было получено большое значение параметра $\chi^2=2300$.

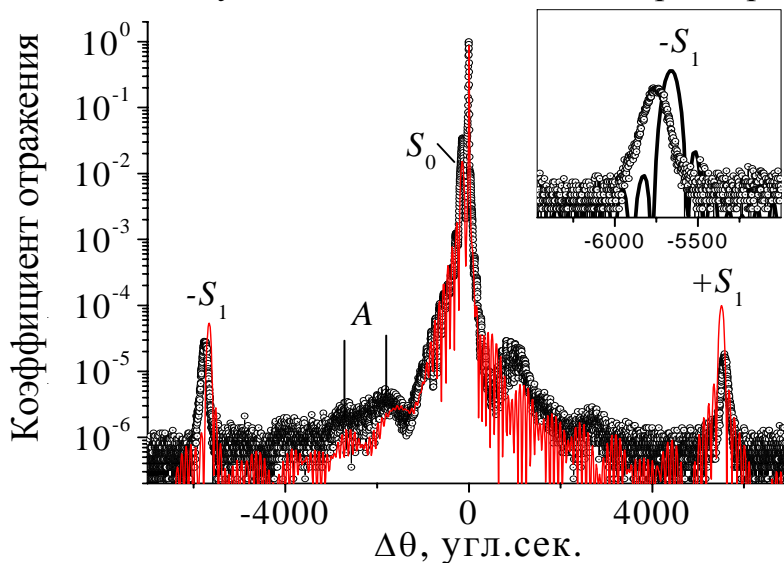


Рис. 11.1. КДО для 004 – отражения от CP GaAs–AlAs: точки – эксперимент, сплошная линия – результат расчета дифракционной картины с использованием технологических параметров. На вставке показано положение сателлитов первого порядка ($-S_1$)

На рис. 11.2 приведены экспериментальная (1) и расчетная (2) кривые отражения 004 для образца 1. На вставке к рисунку приведено положение экспериментального и расчетного сателлитов $-S_1$. Видно, что экспериментальные и расчетные КДО совпадают с очень высокой точностью ($\chi^2=4,67$). Полученные путем подгонки структурные характеристики слоев и значения параметров решеток приведены в таблице 11.1.

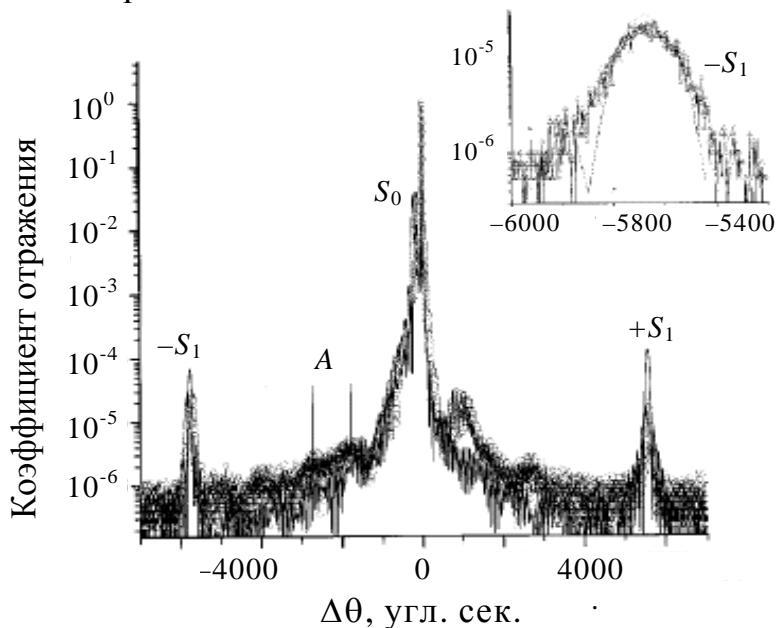


Рис. 11.2. КДО для 004 рефлекса от CP : точки – экспериментальные данные, сплошная линия – результат подгонки теоретической кривой к эксперименту (фитирование). Буквами ($-S_1$) ($+S_1$) (S_0) обозначены положения сателлитов, расстояние A – определяется толщиной буферного слоя (20 нм). На вставке показано положение расчетного и экспериментального сателлитов $-S_1$

Таблица. 11.1. Параметры слоев СР

Образец	Заданные технологически параметры СР, нм	Экспериментальные значения параметров СР из рефлекса 004, нм	Ошибка определения параметров, %
№1	1,13 (AlAs) 2,26 (GaAs)	1,1 (AlAs) 0,003 (AlGaAs) 2,24 (GaAs)	0,2
№2	1,413 (AlAs) 2,83 (GaAs)	1,414 (AlAs) 0,004 (AlGaAs) 2,863 (GaAs)	0,4
№3	3ML (AlAs) 6ML (GaAs)	0,835 (AlAs) 1,736 (GaAs)	0,134

Анализ данных таблицы 11.1 указывает на определенное несоответствие между экспериментальными и технологически заданными значениями толщин слоев СР. Из углового положения нулевого сателлита с помощью формулы (11.10) были получены данные о среднем уровне деформации в периоде СР, которые приведены в таблице 11.2. Зная толщины слоев СР, согласно [4] был определен период решетки каждого из слоев. Толщину периода можно также рассчитать из периода синусоидального знаменателя в (11.6). Несмотря на то, что соотношение между толщинами слоев СР, заданное технологически, одинаково для всех СР, средняя деформация – неодинакова. Этот факт еще раз подтверждает несоответствие заданных и реальных параметров СР.

Таблица. 11.2. Значения параметров деформации в периоде и отдельных слоях СР

Образец	Положение нулевого сателлита, угл. сек	Средний уровень деформации в периоде, %	Уровень деформации в слоях AlAs и GaAs, %	Экспериментальные значения межплоскостных расстояний (004) в AlAs и GaAs, нм	Рассчитанные значения межплоскостных расстояний (004) в AlAs и GaAs, нм
№1	-139	0,1038	0,175 -0,081	0,14330 0,14053	0,14155 0,14133
№2	-143	0,1068	0,178 -0,073	0,14341 0,14060	–
№3	-123	0,0925	0,140 -0,039	0,14295 0,14094	–

Из расстояния между указанными выше осцилляциями интенсивности, приведенными на рис. 11.3 (увеличенный масштаб участка КДО на рис. 11.2), были получены величины полной толщины СР, а также всей структуры. Дальнейшего уменьшения величины χ^2 можно достичь, если учесть согласно [7] наличие диффузной компоненты рассеяния рентгеновских лучей. Факт присутствия быстрых осцилляций интенсивности на КДО является свидетельством псевдоморфного роста СР, потому что дислокации несоответствия решеток размывают как нулевой, так и другие сателлиты [5].

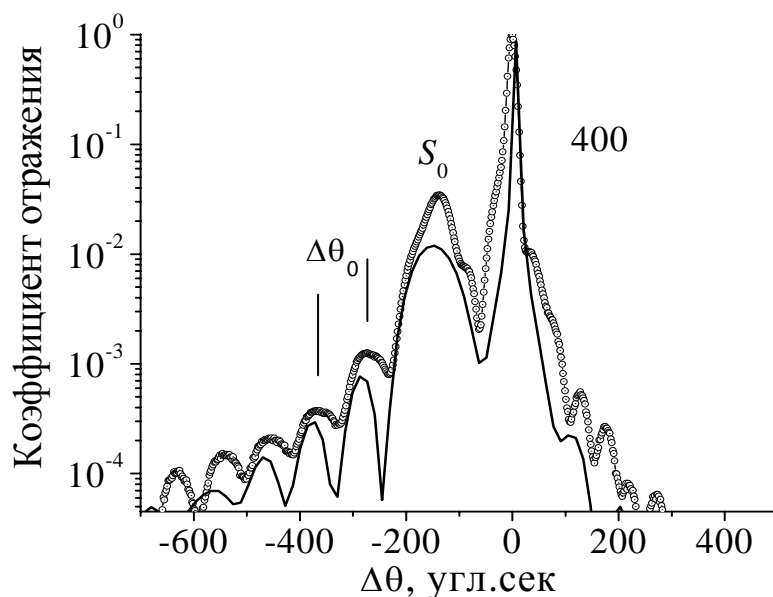


Рис. 11.3. Фрагмент КДО для 004 отражения от СР, приведенных на рис.11.2 в увеличенном масштабе: точки – эксперимент, сплошная линия – теория, с подогнанными параметрами. Показаны положения сателлита нулевого порядка S_0 , а также расстояние между максимумами быстрых осцилляций $\Delta\theta_0$, которые определяют толщину всей СР

Обращая внимание на относительно узкие полуширины сателлитов $\pm S_1$ (рис. 11.2), можно в полной мере утверждать, что структура СР имеет достаточно высокое структурное совершенство, кристаллическую когерентность и планарность слоев [8]. Так оценки среднего отклонения от толщины как периода СР, так и отдельных ее слоев, дали такие значения: 0,0003 нм и 0,0001 нм соответственно. Наконец несколько слов можно сказать относительно формы экспериментальных сателлитов. Как показывает анализ КДО (рис. 11.2, вставка), они являются асимметричными относительно значения пиковой интенсивности. Это, наверное, можно трактовать, как нарушение симметрии в распределении напряжений внутри слоев. Из соотношений интенсивностей сателлитов первого и нулевого порядков были определены также толщины слоев в периоде и значения деформаций в слоях.

Проведенные рентгенодифрактометрические исследования короткопериодных СР, показали возможность получения количественной информации об их структурных параметрах (истинном периоде СР, степени напряженности слоев, и параметре решетки каждого из них).

Показано определенное отличие в величине экспериментально определенного периода СР, по отношению к технологически заданным параметрам. Это отличие выходит за рамки ошибки определения указанных параметров. Как свидетельствуют результаты выполненных исследований, изученные СР наряду с большими значениями деформаций, имеют очень высокое структурное совершенство, с четкими границами раздела, о чем свидетельствуют малые значения полуширины сателлитов, а также наличие тонкой структуры спектра (быстрые осцилляции).

§2. Поведение спутниковых дифракционных максимумов короткопериодных сверхрешеток GaAs–AlAs с различной степенью кристаллического совершенства слоев

Как показано в работах [7,9,10], присутствие дефектов в СР вызывает некогерентное (диффузное) рассеяние и меняет профиль кривой дифракционного отражения (КДО) для когерентно рассеянных волн. Задача поведения спектров КДО в длиннопериодных СР в зависимости от степени дефектности слоев была решена в [9].

В данном параграфе рассмотрим особенности поведения КДО в короткопериодных сверхрешетках (СР) GaAs–AlAs, содержащих различные концентрации точечных дефектов, а также влияния этих дефектов на поведение спутниковых пиков с помощью полукинематического приближения теории рассеяния рентгеновских лучей.

Для СР, состоящей из двух слоев с различным межплоскостным расстоянием, рассеивающей способностью σ и величиной фактора аморфизации выражение для амплитудного коэффициента рассеяния (АКР) R с учетом статистического усреднения можно записать в виде [7]:

$$R = \langle R \rangle = i \sum_{n=1}^N \left\{ \int_{(n-1)T}^{(n-1)T+t_1} \sigma_1^n E_1^n \exp[i\eta z - g \langle u_1^n(z) \rangle] dz + \int_{(n-1)T+t_1}^{nT} \sigma_2^n E_2^n \exp[i\eta z - g \langle u_2^n(z) \rangle] dz \right\}, \quad (11.13)$$

где $E_{1,2}^n$ – статические факторы Дебая-Валлера для слоев 1 и 2, $u_{1,2}^n(z)$ – векторы атомных смещений в слоях СР, $\eta = (2\pi/\lambda \sin \theta)(\chi_0 + \sin 2\theta \Delta\theta)$ – угловая переменная, характеризующая положение кристалла относительно направления падающей волны, $\Delta\theta = \theta - \theta_0$, \vec{g} – вектор дифракции, $\sigma_h = \pi \chi_h C / (\lambda \sin \theta)$ – параметр рассеяния, $t_{1,2}$ – толщины слоев, $T = t_1 + t_2$, C – фактор поляризации, χ_h – коэффициент поляризуемости, N – число периодов СР.

Векторы атомных смещений выражаются через межплоскостные расстояния $d_{1,2}$ составляющих слоев СР. Среднее межплоскостное расстояние периода СР находится как $d = (d_1 t_1 + d_2 t_2) / T$. Величины рассогласования межплоскостных расстояний слоев относительно среднего определяются как, $\Delta d_{1,2} / d$, где $\Delta d_{1,2} = d_{1,2} - d$.

Для случая симметричной дифракции, учитывая однородное распределение дефектов в периодически повторяющихся слоях, запишем выражение для АКР когерентно рассеянных волн СР:

$$R^C = i F^C \exp(i\Psi) \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}, \quad (11.14)$$

где $y = A_1 t_1 + A_2 t_2$, $A_{1,2} = (\eta + 2\pi \Delta d_{1,2} / d^2) / 2$, $\Psi = (N - 1)y + A_1 t_1$.

Структурная амплитуда периода СР имеет вид:

$$F^C = \sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + \exp(iy) \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2}. \quad (11.15)$$

Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности можно охарактеризовать с помощью интерференционной функции Лауэ:

$$I^C(\Delta\theta) = |F^C|^2 \exp(-2 \operatorname{Im} \Psi) \left| \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)} \right|^2. \quad (11.16)$$

В кинематическом приближении угловое распределение диффузно рассеянных волн, для слоев с изменяющимся по глубине параметром решетки, исследовано в работах [11,12]. Для проведения численного анализа и сопоставления его с экспериментом удобно использовать модель дефектов кулоновского типа. Тогда выражение для статического фактора Дебая-Валлера, согласно [10], можно представить как:

$$E_{1,2} = \exp(-4\pi r_{1,2}^3 c_{1,2} / 3), \quad (11.17)$$

где $r_{1,2}$ и $c_{1,2}$ – соответственно, радиусы и концентрации дефектов в слоях периода решетки. Выражение для диффузно рассеянных волн на одном периоде запишется:

$$I_1^d = 2 \left\{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \int_0^{t_1} \tau_1(\eta, z) dz + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \int_0^{t_2} \tau_2(\eta, z) dz \right\}, \quad (11.18)$$

где $\tau_{1,2}$ – параметры длины корреляции Като, описывающие степень близкого порядка, для соответствующих слоев периода СР. Параметры $\tau_{1,2}$ для слоев короткопериодной СР не зависят ни от z , ни от периода СР. Угловая зависимость корреляционной длины с учетом (11.17) запишется в следующем явном виде:

$$\tau_i(\eta) = (6r_i / X_i^4) \left\{ (X_i^2 / 2) + 1 - \cos(X_i) - X_i \sin(X_i) \right\}, \quad (11.19)$$

где $X_i = 2r_i \gamma_0 A_i$. Тогда (11.18) запишется в виде:

$$I_1^d = 2 \left\{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \tau_1 t_1 + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \tau_2 t_2 \right\}. \quad (11.20)$$

Введем средний коэффициент поглощения на одном периоде СР $\mu = (\mu_1 t_1 + \mu_2 t_2) / T$. Угловое распределение диффузного фона в окрестности брэгговского рефлекса можно характеризовать с помощью выражения:

$$I^d(\Delta\theta) = \sum_{n=1}^N I_1^d \exp(-\mu T (N - 1) / 2). \quad (11.21)$$

Если интенсивности диффузно рассеянных волн одинаковы для всех периодов СР, то (11.21) имеет вид:

$$I^d(\Delta\theta) = N I_1^d \exp(-\mu T (N - 1) / 2). \quad (11.22)$$

Интерференционная функция Лауэ СР, присутствующая в выражении (11.16), принимает максимальное значение при $y = \pi m$, где $m = 0, \pm 1, \dots$. Тогда для m -го углового положения кристалла η получаем $\eta_m = 2\pi m / T$. Это выраже-

ние описывает угловые положения сателлита нулевого порядка при $\eta_m=0$ и сателлитов высших порядков. Отсюда выражение для интенсивности сателлитов принимает вид:

$$I_m = N^2 |F_m^s|^2,$$

а структурный фактор описывается выражением:

$$|F_m^s|^2 = \left(\sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + (-1)^m \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2} \right)^2. \quad (11.23)$$

Для короткопериодных СР структурный фактор нулевого максимума можно представить в виде $|F_m^0|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2$. В случае же, когда один из слоев в периоде СР имеет сильно выраженную аморфизированную структуру ($E_i=0$), интенсивность основного сателлита будет определяться лишь более совершенным кристаллическим слоем. Из анализа выражения (11.23) следует еще один интересный вывод. Он касается использования квазизапрещенных рефлексов (КЗР). Для таких отражений вследствие малости рассеивающей способности одного из слоев, состоящих из атомов с близкими порядковыми номерами, интенсивность сателлитов будет определяться лишь рассеивающей способностью другого слоя с более отличающимися атомными номерами составляющих его компонентов [13]. Отсюда вытекает, что использование КЗР, позволяет сепарировать влияние одного из слоев на величину интенсивности рассеяния. При изучении СР GaAs–AlAs/GaAs(001) с помощью рефлексов 200 или 600 такими слоями, которые оказывают малое влияние на общую картину рассеяния, являются субслои GaAs.

Численные расчеты картины рассеяния CuK_α -излучения выполнялись для симметричных рефлексов 400 и 200.

На рис. 11.4 приведены расчетные спектры КДО (фрагменты в области сателлитов первого порядка) для рефлекса 400 от решетки с толщиной слоев $t_1=2,24$ и $t_2=1,1$ нм при различных значениях статического фактора $E=\exp(-L)$.

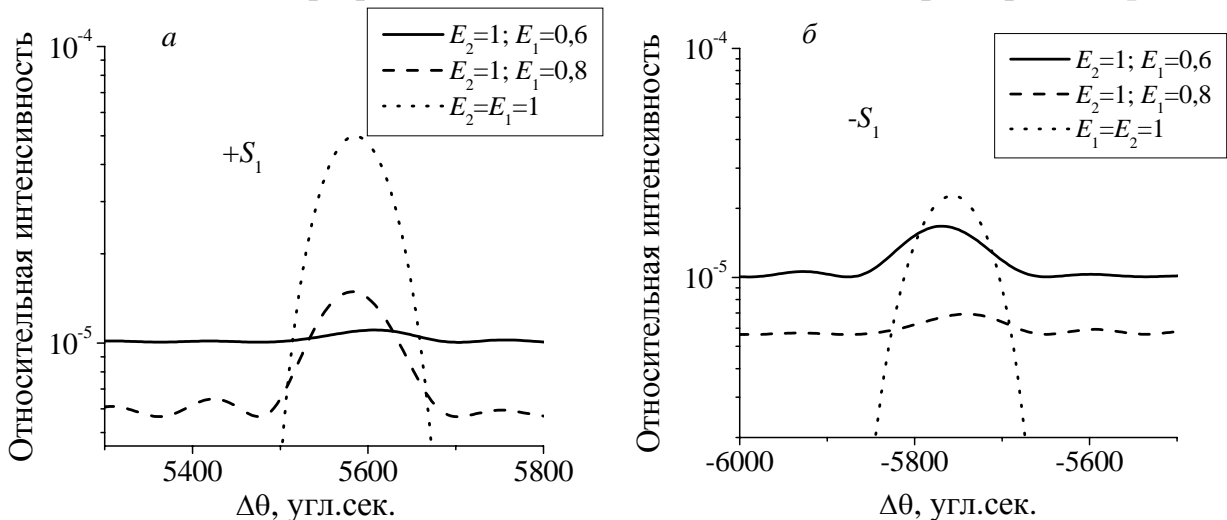


Рис. 11.4. Фрагменты кривых дифракционного отражения в области положительных (а) и отрицательных (б) сателлитов в зависимости от величины статфактора верхнего E_1 и нижнего E_2 субслоев

Как следует из анализа этого рисунка, поведение интенсивности спутников в зависимости от степени структурного совершенства верхнего или нижнего слоев СР соответствует результатам, полученным в работе [14,15], в которой отмечается тот факт, что несовершенство верхнего слоя СР уменьшает интенсивность положительных спутников, а нарушения же структуры нижнего слоя приводят к погасанию отрицательных спутников.

Здесь следует отметить, что в отличие от [9] при расчетах КДО [15] учитывалась как когерентная, так и диффузная составляющие отражения.

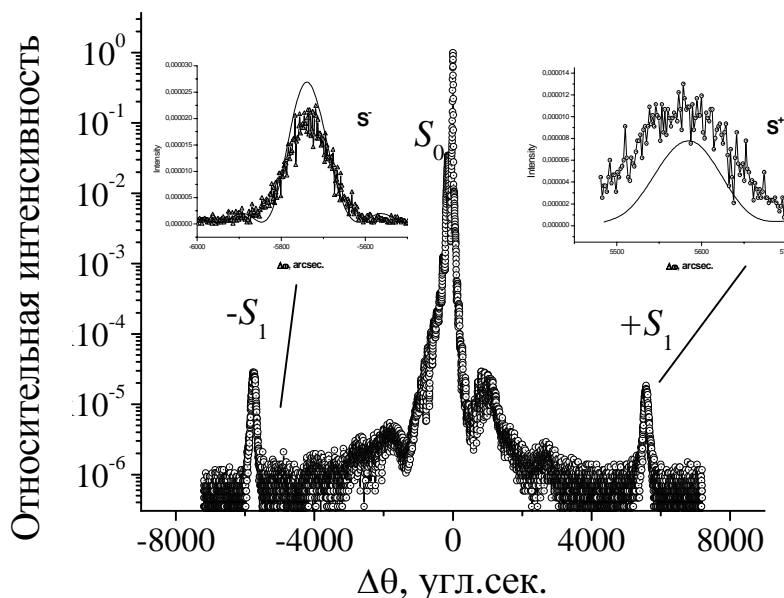


Рис. 11.5. Экспериментальная кривая дифракционного отражения для рефлекса 400 в области спутников первого порядка. На вставках приведены фрагменты КДО в области спутников первого порядка: сплошные кривые – расчет; точки – эксперимент

Сравнивая поведение спутников на расчетных и экспериментальных КДО (рис. 11.5), можно сделать вывод, что в исследуемых СР более совершенным является нижний слой AlAs. При этом соотношение интенсивностей экспериментальных спутников первого порядка $I_+/I_- = 0,56$ при величине статфактора 0,68 для слоя GaAs, удовлетворительно коррелирует с данными результатов подгонки КДО. Зависимость указанного отношения I_+/I_- от величины статфактора одного из слоев L_i при фиксированном уровне искажений структуры другого слоя $L_j = \text{const}$ в отличие от [7,9] носит отчетливо выраженный нелинейный характер (рис. 11.6) как при одинаковой толщине слоев ($t_1 = t_2$), так и в случае, когда толщина одного из слоев больше другого ($t_1 = 2t_2$).

Причем, как следует из рис. 11.16, изменение совершенства нижнего слоя, AlAs, влияет практически монотонно на соотношение интенсивностей спутников. Несовершенство же верхнего слоя, GaAs, изменяет отношение интенсивностей положительных и отрицательных спутников немонотонным образом. Особенно чувствителен этот параметр к размеру дефектов. В последнем случае наблюдаются как максимум, так и минимум на кривых зависимости отношения интенсивностей спутников от величины статфактора. Для рефлекса 400 такая картина поведения интенсивности спутников качественно не зависит от соотношения толщин слоев СР.

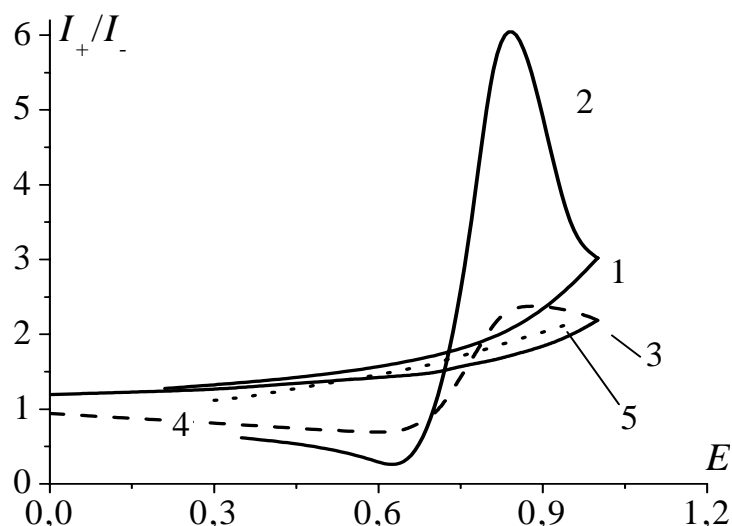


Рис. 11.6. Зависимость отношения интенсивностей спутников первого порядка для 400 отражения от величины статфактора одного из субслоев при фиксированном уровне структурного совершенства другого слоя. Для кривых 1 и 3 совершенным является первый (верхний) слой $E_1=1$ при $t_1=2t_2$ (1) и $t_1=t_2$ (3). В случае кривых 2 и 4 совершенную структуру имеет нижний слой $E_2=1$ при $t_1=2t_2$ (2) и $t_1=t_2$ (4), $E_1=E_2 \neq 1$ (5)

Для квазизапрещенного отражения 200 наблюдается монотонный спад интенсивности спутников с ростом статфактора для несовершенного верхнего слоя и рост – при увеличении степени несовершенства нижнего слоя. Однако, эффект изменения отношения интенсивностей спутников для КЗР значительно меньше, чем для структурного отражения 400, что согласуется с нашими результатами, полученными раньше [13]. Следует отметить, что уровень механических напряжений в слоях СР, значительно меньше влияет на соотношение интенсивностей спутников, чем величина статического фактора Дебая-Валлера.

Весьма интересным моментом, на наш взгляд, является поведение такого параметра как длина корреляции Като в зависимости от дефектности того или иного субслоя. Как показывают расчеты по (11.19) и (11.20), параметр $\tau_{1,2}$ весьма чувствителен к дефектам кулоновского типа, как для структурных, так и КЗР рефлексов. Зависимости отношения интенсивностей спутников от величины параметра корреляции для двух субслоев СР (1 – верхний слой GaAs; 2 – нижний слой AlAs) приведены на рис. 11.7.

Легко видеть, что увеличение параметра τ , описывающего степень корреляции случайных фазовых соотношений для верхнего слоя СР при использовании структурных отражений приводит к росту и уменьшению отношения интенсивностей спутников, соответственно для верхнего и нижнего слоев (рис. 11.7,б). В случае же использования КЗР чувствительность к параметру корреляции сохраняется в значительной степени лишь для слоя AlAs. Зависимость отношения интенсивностей спутников от τ для нижнего слоя имеет ярко выраженный минимум (рис. 11.7,а).

Исследование зависимостей интенсивности спутников от $\tau_{1,2}$ может быть интересным и в плане возможной чувствительности этой величины к

уровню нестехиометричности слоев, поскольку она в какой-то мере характеризует ближний порядок в решетке [10].

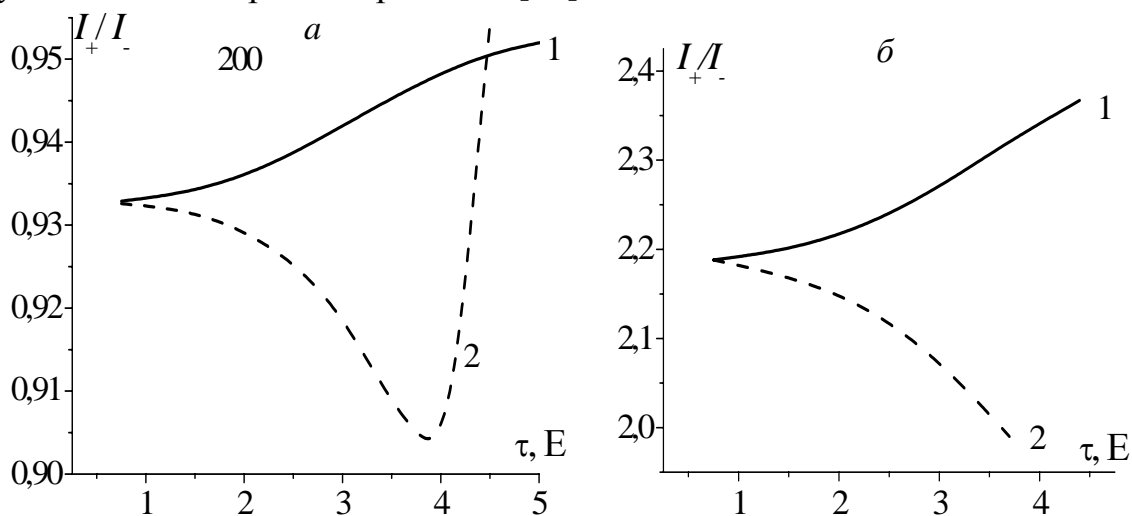


Рис. 11.7. Характер изменения зависимости отношения интенсивностей спутников первого порядка для отражений 200 (а) и 400 (б) от значений корреляционного параметра Като. Номера кривых соответствуют: 1 – верхнему слою GaAs, 2 – нижнему AlAs

Приведенные здесь экспериментальные результаты и численные расчеты КДО с применением полукинематического приближения теории рассеяния рентгеновских лучей, дали возможность сделать вывод о том, что в короткопериодных СР изменение соотношения интенсивностей спутников, расположенных слева и справа от главного (нулевого) спутника, зависят как от степени структурного совершенства (фактора Дебая-Валлера, параметра ближнего порядка Като), так и от уровня упругой деформации отдельных слоев. Показано, что для верхнего слоя, которым является GaAs, это отношение интенсивностей имеет немонотонный характер. Указанный факт может быть вызван, вероятнее всего, неравнозначными фазовыми изменениями в структурном множителе каждого из реальных слоев. Для сравнительно высокого уровня искажений структуры, ($E \sim 0,8$), соотношение I_+/I_- может в несколько раз превышать значение, характерное для совершенного слоя. Вариации характеристики I_+/I_- в случае КЗР имеют значительно меньшую амплитуду по сравнению со структурными отражениями. Это обстоятельство качественно согласуется с малой чувствительностью КЗР к искажениям структуры, обнаруженной нами ранее. Выполненные в [15] расчеты показывают возможность проведения качественных оценок степени структурного совершенства выращенных слоев СР даже по внешнему виду КДО (соотношению между интенсивностями спутников).

§3. Формирование кривых отражения для квазизапрещенных отражений в короткопериодных сверхрешетках GaAs–AlGaAs

В последние годы значительное внимание уделяется изучению дифракции рентгеновских лучей в периодических сверхрешетках (СР) в связи с их уникальными свойствами. Однако, для короткопериодных сверхрешеток, где толщина отдельных составляющих периода СР составляет несколько моно-

слоев, многие эффекты рассеяния рентгеновских лучей не выяснены до сих пор. Открытым в общем случае является и вопрос причины погасания или усиления сателлитов различных порядков при использовании структурных и квазизапрещенных рефлексов.

Целью данного параграфа является анализ результатов исследования влияния фазовых изменений в структурном факторе, вызванных толщинами слоев, напряжениями между ними, структурным совершенством слоев, на особенности образования системы сателлитов в спектрах КЗР отражений СР, а также интерпретация экспериментальных спектров КДО на основе проведенных расчетных исследований.

При расчетах картины дифракции рентгеновских лучей однородным эпитаксиальным слоем используются следующие параметры: толщина t , коэффициент поляризуемости χ , который пропорционален структурному фактору F_h и напряжение (или деформация) ε . Полная амплитуда рассеяния рентгеновских лучей сложной многослойной системой описывается при помощи структурного фактора, который имеет вид [3,16]:

$$F(\vec{h}) = F_{Cap}(\vec{h}) + F_{ML}(\vec{h}) \cdot \exp(-i\vec{h} \cdot t_{Cap}) + \\ + F_B(\vec{h}) \cdot \exp(-i\vec{h} \cdot (t_{Cap} + t_{ML})) + F_{Sub}(\vec{h}) \exp(-i\vec{h} \cdot (t_{Cap} + t_{ML} + t_{Buf})), \quad (11.24)$$

где t_{Cap} , t_{ML} , t_B – соответственно, толщины верхнего, сверхрешеточного и буферного слоев, h – вектор дифракции. Экспоненциальные множители в (11.24) учитывают изменение фазы амплитуды рассеяния при прохождении рентгеновских лучей через субслои структуры.

Эффект влияния толщинных флуктуаций слоев был учтен в расчетах за счет изменения фазового фактора

$$\varphi_i = \exp(-h^2 \cdot (\Delta t_i)^2). \quad (11.25)$$

При однородном распределении дефектов в периодически повторяющихся слоях двух типов, каждый из которых характеризуется своим межплоскостным расстоянием d , рассеивающей способностью σ и величиной статического фактора Дебая-Валлера E , выражение для амплитудного коэффициента рассеяния (АКР) когерентно рассеянных волн СР в случае симметричной дифракции может быть записано в виде (11.13).

Выражение (11.13) будет иметь максимумы при следующих значениях синусоидального знаменателя

$$A_a t_a + A_b t_b = n\pi, \quad (11.26)$$

которые обозначим как сателлиты n -го порядка ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Период СР может быть определен из углового расстояния $\Delta\theta_p$ между этими пиками:

$$T = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_h|}{\Delta\theta_p \sin(2\theta_B)}. \quad (11.27)$$

Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности можно охарактеризовать с помощью интерференционной функции Лауэ (11.16). В общем случае для проведения численного анализа и сопоставления его с экс-

периментом необходимо учитывать не только влияние дефектов на когерентную составляющую интенсивности, но и вклад диффузной компоненты, возникающей на структурных дефектах в одном слое. Учет рассеяния в буферном, защитном слоях и подложке незначительно усложняет задачу, приводя к необходимости учета их толщин и фазовых соотношений в выражениях для АКР.

Сателлит нулевого порядка СР отстоит от пика подложки на расстоянии $\Delta\theta_0$,

$$-\Delta\theta_0 = \text{tg}\theta_B \langle \varepsilon_{\perp} \rangle, \quad (11.28)$$

где $\langle \varepsilon_{\perp} = \Delta a / a \rangle$ – относительное изменение параметра решетки вдоль направления роста, и $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по периоду СР [3,17]. Структурный фактор для 200 КЗР (который, как известно, пропорционален разности между Ga и As атомными факторами рассеяния) является очень малым в случае GaAs двухслойной системы.

В случае пренебрежения поглощением и вкладом от подложки, а также диффузным рассеянием $I^d(\Delta\theta)$, выражение для нормализованной интенсивности в centrosymmetric случае запишется как [16]:

$$R = |F_{ML}|^2 = \left(\sigma_a E_a \frac{\sin(A_a t_a)}{A_a} + \cos(y) \sigma_b E_b \frac{\sin(A_b t_b)}{A_b} \right)^2. \quad (11.29)$$

Учитывая малый вклад в отражательную способность от слоя GaAs, после некоторых преобразований получим:

$$R \cong |F_{ML}|^2 = \cos^2(y) \left(\sigma_b E_b t_b \frac{\sin(A_b t_b)}{A_b} \right)^2. \quad (11.30)$$

Рассмотрим сначала поведение рассчитанных согласно (11.29) кривых дифракционного отражения (КДО) (кривая 1) для сверхрешеточной структуры с одинаковыми толщинами субслоев (рис. 11.8).

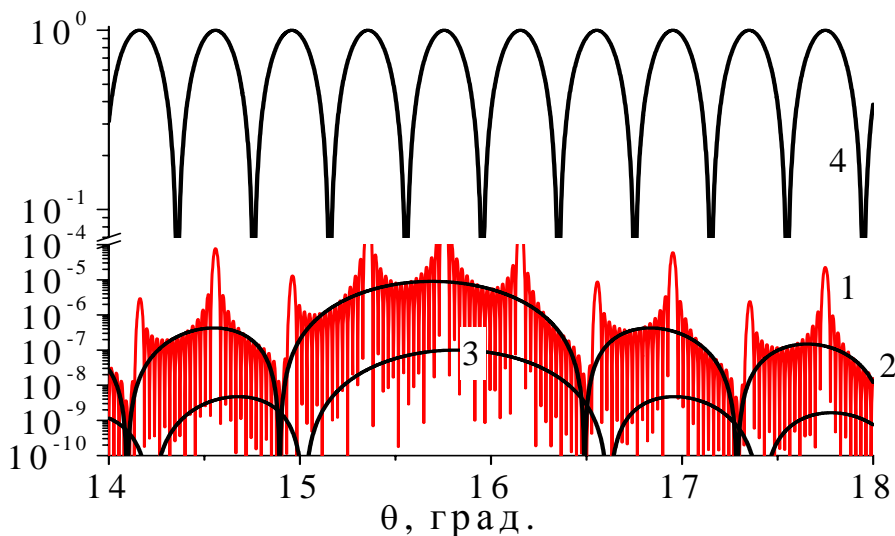


Рис. 11.8. Расчетные КДО для рефлекса 200 (кривая 1) для СР GaAs–AlAs, синусоидальный (2,3), косинусоидальный (4) факторы в соотношении (11.11)

Из рис.11.8 видно, что можно выделить области с разными периодами маятниковых осцилляций интенсивности. Косинусоидальный член в формулах (11.29) и (11.30) описывает период СР (кривая 4), а синусоидальные – толщину слоя и вклад в отражательную способность как AlAs (кривая 2), так и GaAs (кривая 3). Легко видеть, что вклад в АКВ слоя арсенида галлия на два порядка меньше, чем от слоя AlAs, поскольку его структурный фактор при использовании КЗР 200, как уже отмечалось, является очень малым. Поэтому в данном случае существует возможность из простого углового анализа формы КДО определить как толщину всей структуры, так и каждого из слоев в отдельности.

Экспериментальные и расчетные КДО для СР с применением КЗР 200 приведены на рис. 11.9 (ω -сканы) и рис.11.10 (ω -2 θ -сканы). Видно, что на КДО наблюдается не только сателлитная структура, отвечающая за период СР, но и тонкая интерференционная структура спектра. При этом наблюдается хорошее согласование в тонких деталях экспериментальных и теоретических спектров КДО. Это относится как к значениям интенсивностей возле пика нулевого порядка, так и к его угловому положению.

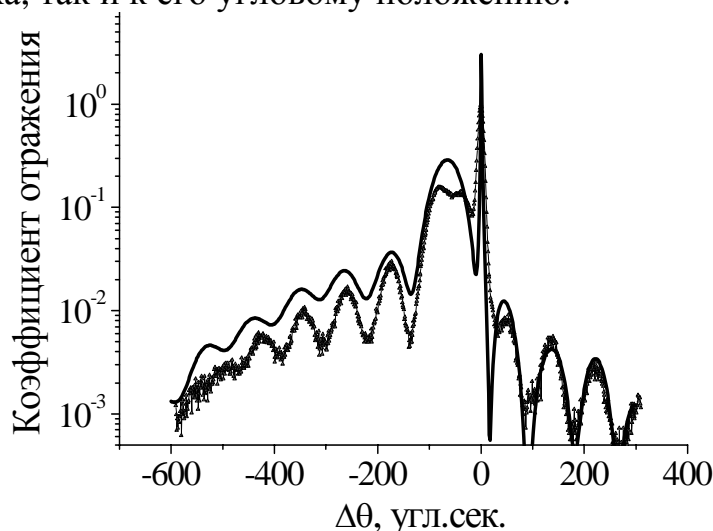


Рис. 11.9. Экспериментальная (точки) и смоделированные (сплошная линия) КДО для КЗР 200 (ω -режим сканирования)

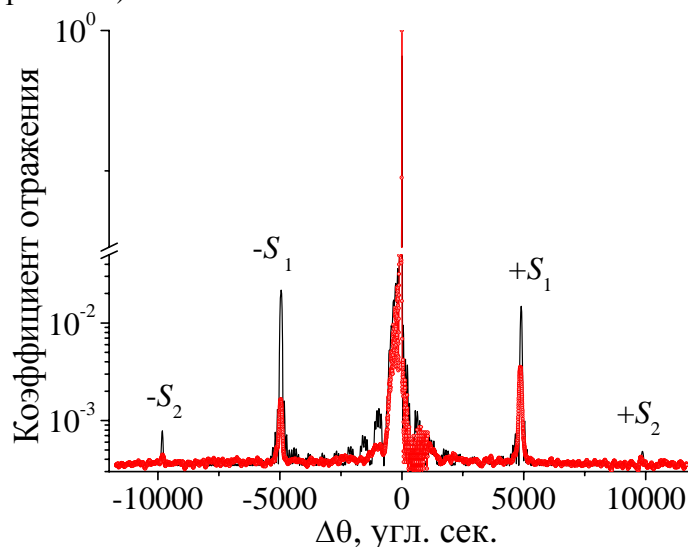


Рис. 11.10. КДО для КЗР 200 (ω -2 θ -сканы) от СР: эксперимент (точки), смоделированная (сплошная линия). +S, -S – обозначены сателлиты 1-го порядка

Этот результат также свидетельствует о том, что вклад диффузной компоненты является незначительным для КЗР 200.

Кроме этого все результаты свидетельствуют, что вклад в интенсивность КЗР от слоя (а), состоящего из компонентов с близкими атомными номерами (GaAs) является очень малым. Таким образом, слой (б), с отличающимися атомными номерами компонентов определяет картину рассеяния для 200 КЗР.

Проведенные расчеты показывают, что на угловое положение сателлитов, а также на их интенсивность влияет вариация толщины периода. На рис. 11.11 показано погасание сателлитов 3 порядка при соотношении толщин $t_b/t_a=2$. Кроме того, максимумы сателлитов различных порядков могут, как увеличиваться, так и ослабляться даже в совершенных структурах. Для выяснения основных причин этого явления рассмотрим поведение действительной (ReF) и мнимой (ImF) частей структурного фактора CP (11.15). На рис. 11.11 для сопоставления формы КДО с характером вариаций ReF и ImF приведены и расчетные спектры КДО CP для отражений 400 и 200. Оказалось, что именно соотношение между этими двумя частями структурного фактора определяет наличие или погасание сателлитов тех или иных порядков. Дифракционные пики наблюдаются в тех местах, где (ReF_{ML}) достигает максимума.

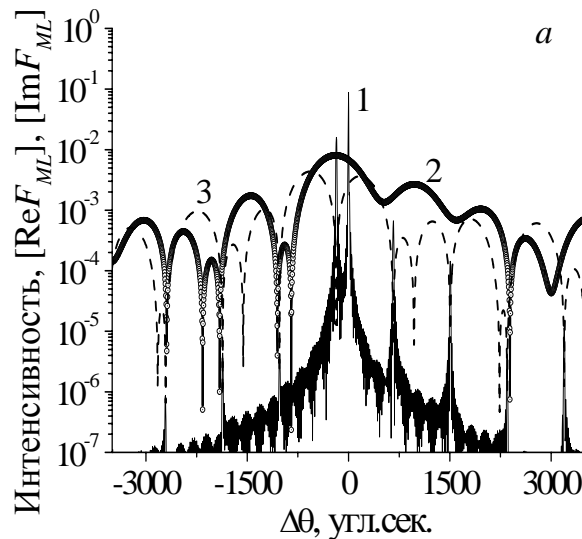


Рис. 11.11. КДО 400 (а) и КЗР 200 (б) (кривая 1), рассчитанные для AlGaAs и GaAs слоев при соотношении толщин 2:1 и ReF_{ML} (2) и ImF_{ML} (3)

В отличие от результатов, показанных на рис. 11.11, для равнотолщинных слоев имеет место погасание сателлитов вторых порядков (особенно для КЗО). Эти результаты позволяют сформулировать количественный критерий погасания сателлитов в зависимости от соотношения толщин слоев, образующих CP . Его можно записать в виде эмпирической формулы:

$$m = p(t_a/t_b + 1), \quad (11.31)$$

где p – целое число, равно 1,2, ...; а m – порядок погашаемого сателлита.

В качестве примера рассмотрим поведение системы сателлитов на экспериментальных спектрах (рис. 11.12) для рефлексов 400 (1) и 200 (2), для CP

второго типа с соотношением толщин слоев 2:1. Для 400 отражения отчетливо просматриваются только сателлиты нулевого, а также первого, второго и третьего порядков (положительные), разрешенные структурным фактором для СР. Более богатая сателлитная структура проявляется в случае 200 отражения, где наблюдаются как отрицательные, так и положительные сателлиты разрешимых порядков.

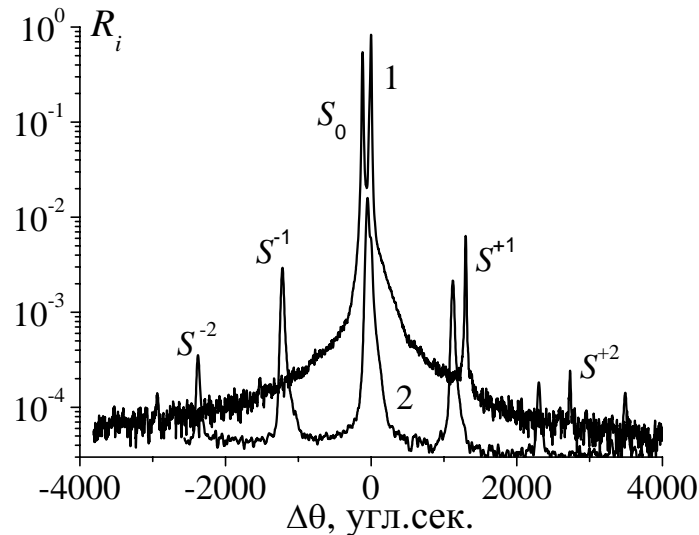


Рис. 11.12. Экспериментальные КДО 400 (1) и КЗР 200 (2) для СР AlGaAs–GaAs с соотношением толщин слоев 2:1

Другой, важной причиной возможности формирования системы сателлитов является структурное совершенство отдельных слоев СР. Как было показано ранее [7,15], даже при хорошем инструментальном разрешении картина наблюдаемой сателлитной структуры для структурных рефлексов сильно зависит от наличия дефектов в том или ином слое СР. Эти эффекты проявляются как для структурных, так и для квазизапрещенных рефлексов [15]. Результаты наших расчетов показывают, однако, что наличие дефектов в слое арсенида галлия не оказывает практически никакого влияния на интенсивности сателлитов. Этот вывод согласуется с полученными ранее данными о слабом влиянии дефектов на интенсивности КЗР в массивных монокристаллах. Так, влияние совершенного слоя ($E=1$) GaAs в случае КЗО неотличимо от такого же слоя с полностью аморфизированной структурой ($E=0$) по указанным выше причинам. Слой GaAs, однако, как фазовый объект определенной толщины играет важную роль в формировании осциллирующей структуры спектра СР.

Для слоя же AlAs влияние структурных дефектов на интенсивность сателлитов оказывается заметным, что было показано в расчетах путем варьирования величины статического фактора E в пределах $0 \leq E \leq 1$. Таким образом, использование КЗР позволяет в отдельности изучать структурное совершенство одного из субслоев (AlAs) СР, что является существенным преимуществом данного подхода по сравнению с применением только структурных рефлексов 400.

Процедура фитирования (подгонки расчетных спектров к экспериментальным) показала, что неровности поверхности слоев на межфазных границах в значительной степени влияют на смазывание дифракционной картины, особенно в области сателлитов высоких порядков (рис. 11.13).

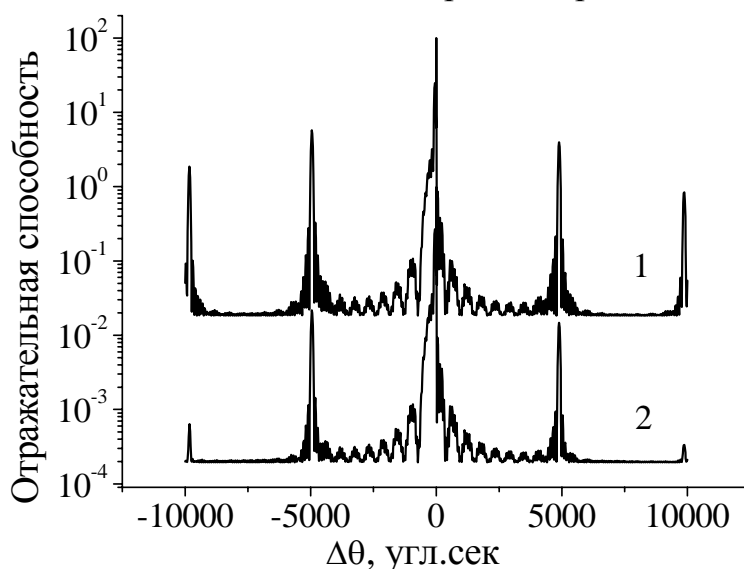


Рис. 11.13. Расчетные КДО для КЗР 200 в случае идеальных слоев (1) и слоев с неровностями 0,3-0,4 нм (2)

Этот результат расчетов хорошо согласуется с экспериментальными КДО (рис. 11.9), на которых наблюдается уменьшение интенсивности сателлитов второго порядка. Сателлиты первого порядка и нулевой проявляют более слабую чувствительность к этому параметру структурного несовершенства. Величина статистически распределенных неоднородностей поверхности раздела между слоями СР составляет около 0,3-0,4 нм. Следует также отметить, что асимметрия в интенсивностях максимумов сателлитов (слева и справа от нулевого максимума) наблюдается только при наличии обоих типов нарушений (изменение межплоскостного расстояния и рассеивающей способности).

Суммируя полученные результаты можно отметить относительно хорошее согласие между экспериментальными и расчетными дифракционными спектрами для КЗР. Применение этих рефлексов для контроля структурных параметров СР имеет ряд преимуществ перед обычными (структурными) рефлексами. Во-первых, могут быть использованы более простые математические выражения, связывающие такие важные параметры как толщины слоев и напряжения в них. Во-вторых, незначительный вклад слоев с малым значением структурной амплитуды (GaAs) в рассеяние делает возможным сепарировать вклад каждого из слоев в процесс рассеяния. И, наконец, в третьих, незначительность вклада GaAs в общую картину рассеяния дает возможность получить информацию о структуре отдельных слоев СР, например, слоя (AlAs).

§4. Применение квазизапрещенных рентгеновских рефлексов для исследования многослойных периодических структур

Широкое применение напряженных слоев InGaAs/GaAs, AlGaAs/GaAs требует широкомасштабных исследований свойств этих структур с целью оптимизации технологических режимов формирования слоев и границ раздела. В частности, при отработке технологии получения квантовых слоев InGaAs/GaAs необходимо знать основные параметры слоев, такие как молярная доля индия и толщина слоя, а также уровень механических напряжений. Кроме того, возможно, что морфология гетерограницы раздела играет активную роль в формировании физических свойств такой многослойной структуры.

В ряде работ, была показана перспективность применения квазизапрещенных рефлексов (КЗР) для исследования спектров кривых дифракционного отражения (КДО) [13,15,16,18]. Поскольку эти рефлексы являются очень чувствительными к химическому составу соединения, то представляет интерес определение влияния состава квантовой ямы на спектры дифракции рентгеновских лучей для КЗР.

Эти работы были выполнены для слоев с толщинами нескольких десятков ангстрем. Проблема становится более сложной, если КЯ имеет толщины порядка нескольких монослоев. В СР с одним подслоем, являющимся значительно более тонким, чем другой, более тонкие вставки не вносят непосредственно вклада в рассеивающую способность, и дифракционные кривые формируются произведением напряжения и толщины этих тонких слоев [17].

Кроме этого, не установлены физические причины формирования сателлитной структуры КДО, а также влияние соотношения между толщинами субслоев, структурными факторами и уровнем напряжений в этих структурах на интенсивности сателлитов при использовании КЗО. Открытым в общем случае является и вопрос о причинах погасания или усиления сателлитов различных порядков при использовании КЗО.

Поэтому цель настоящего параграфа – исследование влияния изменений состава и толщины квантовых ям, а также структурных и фазовых изменений, вызванных перечисленными параметрами, на эволюцию спектров отражения СР для КЗР и интерпретация экспериментальных спектров КДО на основе проведенных расчетов. Показана также возможность контроля перехода от двухмерного к трехмерному механизму роста квантовых точек.

Интерференционная функция Лауэ СР, присутствующая в выражении (11.16), принимает максимальное значение при $y=\pi t$, где $t=0, \pm 1, \dots$. Тогда для m -го углового положения кристалла η получаем $\eta_m=2\pi t/T$. Это выражение описывает угловые положения сателлита нулевого порядка при $\eta_m=0$ и сателлитов высших порядков. Отсюда выражение для интенсивности сателлитов принимает вид:

$$I_m = N^2 |F_m^S|^2,$$

а структурный фактор описывается выражением:

$$\left| F_m^S \right|^2 = \left(\sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + (-1)^m \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2} \right)^2. \quad (11.32)$$

Для короткопериодных СР структурный фактор нулевого максимума можно представить в виде $\left| F_m^0 \right|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2$. В этом случае должны выполняться условия, $\varepsilon_i t_i \leq 1$ и $\frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1 t_1}$ т.е. небольшие модуляции напряжения в

слоях. Отношение интенсивностей сателлитов высоких порядков к интенсивности нулевого можно записать в виде простого выражения, которое показывает чувствительность к различным параметрам СР [19].

$$I_m / I_0 = \left(\frac{\sin(n\pi t_2 / T)}{n\pi t_2 / T} \right)^2 \frac{\left(t_2 \left(1 - k \cdot \frac{(\varepsilon_2 + m/T)}{(\varepsilon_1 + m/T)} \right) \right)^2}{(t_1 + t_2 k)^2}, \quad (11.33)$$

здесь $k = F_2 / F_1$, $\varepsilon_i = \Delta d_i / d^2$. Отсюда следует, что для слоев с близкими значениями структурных факторов появление сателлитов высоких порядков невозможно. Еще один вывод, который следует из этого выражения, зависимость отношения интенсивностей от знака сателлита (положительный или отрицательный), а также от деформационного параметра $\varepsilon_i t_i$. Из анализа выражения (11.33) следует, что интенсивность сателлитов на КДО становится чувствительной к наличию тонкого слоя, если отношение толщины между тонкими и толстыми подслоями – приблизительно 0,1 и выше. В этом случае сигнал от тонких слоев может быть обнаружен, в предположении, что их средний состав остается постоянным. Если один из слоев в периоде СР имеет сильно выраженную аморфизированную структуру ($E_i = 0$), интенсивность основного сателлита определяется только вторым субслоем [15].

Все образцы были выращены на полуизолирующем арсениде галлия (100) на установке *MBE*. Для выращивания слоев 8x(14ML (In, Ga)As/40ML арсенид галлия) температура подложки уменьшалась до 500°C. Образцы были выращены, с содержанием индия соответственно 0,28, 0,3 и 0,35. Поверхностная структура в процессе выращивания контролировалась методом *RHEED*.

Экспериментальные КДО для симметричного отражения 200 от образцов 1-4 (таблица 11.3) с различным содержанием индия в твердом растворе (ТР) представлены на рис. 11.14. Наблюдаемые на них особенности можно качественно просто объяснить. Нулевой максимум, образованный длиннопериодными осцилляциями, свидетельствует о формировании в приповерхностной области образцов периодической структуры монокристаллических слоев, отличающихся от подложки на величину среднего параметра решетки $\Delta a = -a_0 \operatorname{ctg} \theta \cdot \Delta \theta$.

Таблица 11.3. Экспериментальные и технологические параметры и состав исследуемых структур

Образец	Состав x (технол.), атомн.доля	Состав из РДВР x , атомн.доля	Толщины – яма/барьер, нм	Отношения $I(+)/I(0)/$ $I(-)/I(0)$
№1 InGaAs	0,2	0,23	4,5/15,9	0,09
№2 InGaAs	0,28	0,63	5,0/17,31	2
№3 InGaAs	0,3	0,59	0,7 4,0/16,94	1,57
№4 InGaAs	0,35	0,673	0,7 4,4/17,88	2,2
№5 AlGaAs	0,28	0,3	7,6/15	0,93 0,97

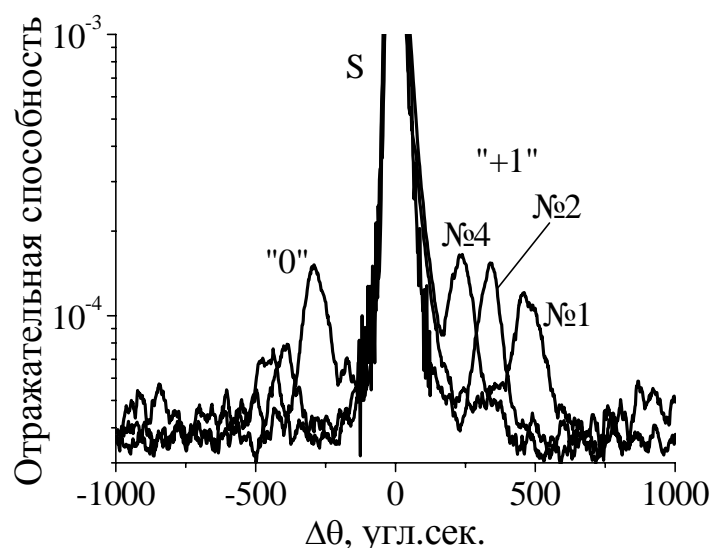


Рис. 11.14. Экспериментальные КДО для 200 рефлекса для структуры InGaAs с различным содержанием индия. "0" и "+1" соответственно сателлиты нулевого и первого порядков, значения соответствующие номерам образцов, приведенным в таблице 11.3

Видно, что кроме пика подложки и основного максимума, вызванного средней решеткой структуры (нулевого сателлита "0"), на хвостах КДО наблюдается интерференционная структура, представляющая собой взаимодействие волн с одинаковыми периодами колебаний. Это выражается в проявлении еще одного сателлита (положительный первого порядка "+1"). Причем интенсивность его превышает пик основного (нулевого) сателлита. Это, вообще говоря, является неожиданным результатом, поскольку все расчеты для толщин и составов ТР, заданных технологически или близких к ним дают немного другие соотношения между интенсивностями сателлитов (см. рис. 11.15).

Кроме этого, учет структурного совершенства слоев также не может повлиять в такой степени на асимметрию распределения интенсивностей сателлитов. Отсутствие отрицательных сателлитов на экспериментальных спектрах объясняется тем, что их интенсивность на несколько порядков ниже,

чем положительных и при данном соотношении сигнал–шум они не проявляются. Для выяснения причин такого поведения спутников высоких порядков на спектрах КДО для 200 отражений были проведены численные расчеты согласно формуле (11.33).

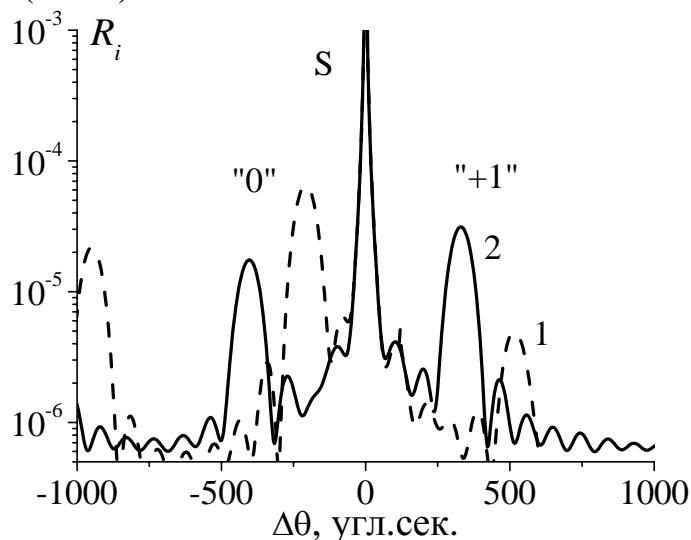


Рис. 11.15. Расчетные КДО для 200 рефлекса для структуры InGaAs: 1 – для состава, заданного технологически; 2 – определенного из соотношения (11.33)

На рис. 11.16 приведены зависимости отношения интенсивностей спутников первых порядков к нулевому от состава твердого раствора в слоях InGaAs для рефлексов 200 и 400. Из анализа результатов следует, что отношение интенсивностей спутников первого порядка к интенсивности нулевого для рефлекса 200 очень чувствительно к составу ТР. При определенных значениях состава это отношение для положительных спутников может значительно превышать 1 (зависимость 1). Однако асимметрия в отношении интенсивностей спутников проявляется только при условии учета напряжений, как в первом, так и во втором подслоях.

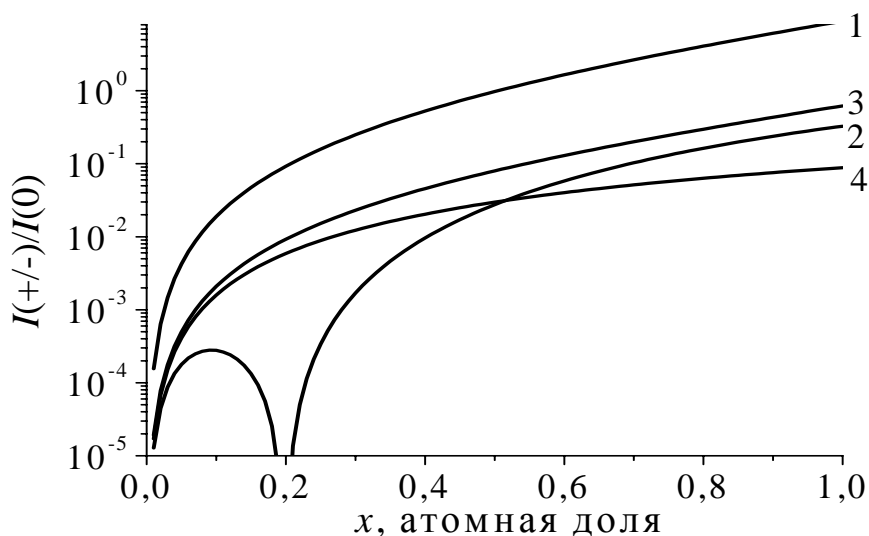


Рис. 11.16. Зависимости отношения интенсивностей спутников первого порядка к нулевому от содержания индия (случай $a_2 > a_1$ и $F_2 > F_1$): рефлекс 200 (1, 2), рефлекс 400 (3,4). $I(+)/I(0)$ (1, 3), $I(-)/I(0)$ (2, 4)

То есть только при условии, что оба слоя являются напряженными, так как неучет этого обстоятельства приводит к одинаковым значениям интенсивностей положительных и отрицательных сателлитов. Для рефлекса 400 этот эффект выражен не так сильно (кривые 3,4). Поэтому КЗР позволяют очень эффективно контролировать состав ТР субслоев СР.

Приведенные на рис. 11.16 результаты соответствуют случаю, когда при изменении состава ТР изменение параметров решеток и структурных факторов слоев происходит в одном направлении ($a_2 > a_1$ и $F_2 > F_1$). В случае, когда изменение этих параметров происходит в противофазе ($a_2 > a_1$ и $F_2 < F_1$), зависимость отношения интенсивностей сателлитов для 200 отражений получается противоположная (см. рис. 11.17). Однако, для СР $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ при определенном соотношении толщин слоев получается такая же ситуация с отношением сателлитов, хотя выполняется первое условие (синфазность параметра решетки и структурного фактора). Для этих СР толщина КЯ (GaAs) меньше чем, барьера (AlGaAs) и поэтому соотношение знаков между параметрами несоответствия решеток изменяет соотношение между сателлитами. Это подчеркивает важность еще одного параметра – среднего уровня напряжений в слоях.

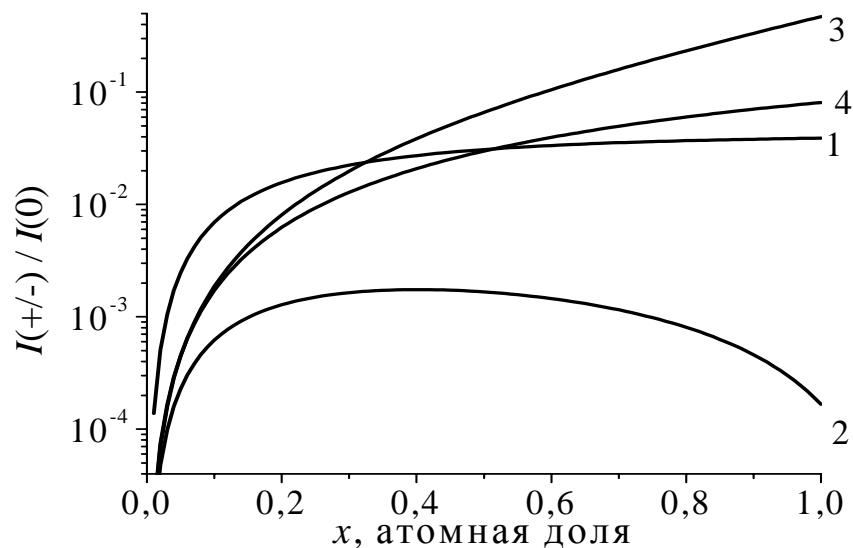


Рис. 11.17. Зависимости отношения интенсивностей сателлитов первого порядка к нулевому от содержания индия (случай $a_2 > a_1$ и $F_2 < F_1$): рефлекс 200 (1, 2), рефлекс 400 (3, 4). $I(+)/I(0)$ (2, 3), $I(-)/I(0)$ (1, 4)

Таким образом, анализ экспериментальных спектров СР для КЗО позволяет проводить контроль такого важного параметра как состав ТР. Кроме того, он позволяет определить и кристаллографическую структуру этого твердого раствора на атомном уровне, поскольку она определяется двумя параметрами: постоянной решетки и структурным фактором (положениями и типами атомов).

Определенный из экспериментальных спектров для 200 рефлекса состав для всех образцов значительно превышает заданный технологически (таблица 11.3).

Структура квантовой ямы такова, что верхние и нижние ее слои оказы-

ваются размытыми и с меньшим содержанием индия, чем более глубокие по отношению к интерфейсу части квантовой ямы. Если учесть повышенную подвижность индия, то можно предположить наличие некоторого размытия КЯ. Изменение состава происходит при внутренней диффузии некоторого количества индия из двух граничных слоев в объем КЯ. Это приводит к формированию областей с повышенным содержанием индия – квантовых точек. Таким образом, можно заключить, что формирование точек связано с уменьшением эффективного содержания индия в смачивающем слое. Так как перенасыщение In должно быть исключено при наших температурах роста порядка 500°C , то, следовательно, индий мог быть накоплен в больших областях только за счет перераспределения. Переход к формированию точек активно происходит при заданных значениях состава квантовых ям $x=0,28$. Об этом отчетливо свидетельствует поведение кривых на рис. 11.18, где представлены результаты зависимости измеренных значений состава ТР в структурах как функции технологически заданного x . Резкое отклонение этой зависимости от заданных значений свидетельствует о прохождении этих процессов.

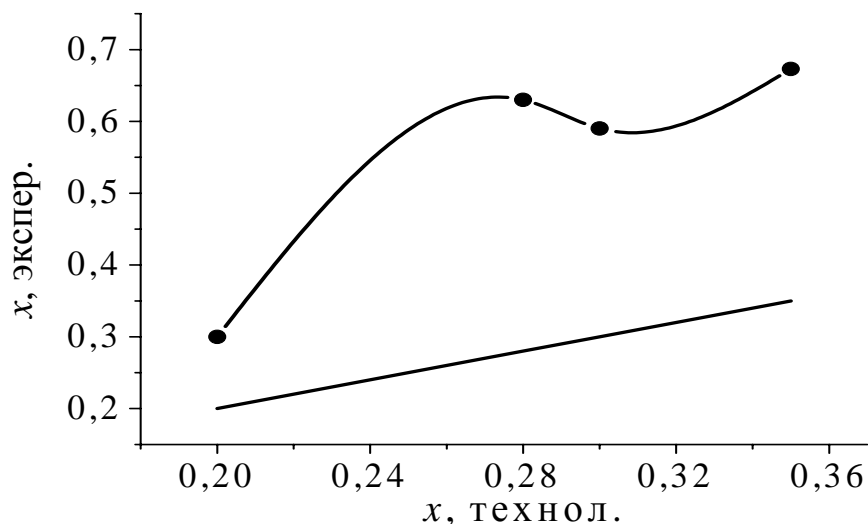


Рис. 11.18. Экспериментальные значения состава ТР в структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в зависимости от технологически заданного: точки – экспериментальные данные; сплошная линия – состав КЯ без точек

Модуляция таких структур поддерживается решеткой смачивающих слоев, а высота островков может флуктуировать. Островки могут быть неупорядоченными в плоскости, что, однако, не скажется на профиле симметричного отражения [20]. В идеальной решетке модулированы и дифракционные пики от островка и от усредненной решетки слоев. Разброс высоты островков не гасит модуляцию, поскольку сверхпериод поддерживается решеткой смачивающих слоев. Небольшие отклонения сверхпериода подавляют модуляцию пика островка, но не решетки слоев, так как слои в этой модели составляют кристаллическую решетку, а для островков прослойка ближе к аморфной.

В качестве стартовых условий для подгонки теоретических КДО к экспериментальным значениям, использовались параметры структур, получен-

ные из анализа спектров для 400 отражения. В результате этой процедуры были получены спектры, которые очень хорошо описывают поведение экспериментальных КДО СР с квантовыми точками (рис. 11.19).

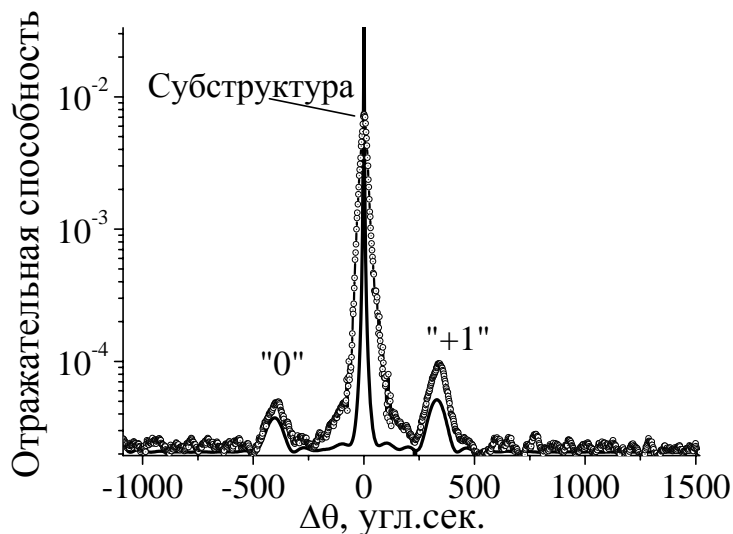


Рис. 11.19. Экспериментальная (точки) и расчетная (сплошная линия) КДО для 200 рефлекса в структуре $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для состава 0,25

Другой важной причиной разрешения структуры спутников является их структурное совершенство. Как было показано ранее [10,15], даже при хорошем инструментальном разрешении картина спутниковой структуры для структурных рефлексов сильно зависит от наличия дефектов в том или ином слое СР. Это справедливо также и для квазизапрещенных рефлексов [18]. Как показывают результаты расчетов, наличие дефектов в слое арсенида галлия не оказывает практически никакого влияния на интенсивности спутников. Хотя даже совершенный слой GaAs в случае КЗО ведет себя как аморфная структура. Сверхрешетки AlGaAs/GaAs, таким образом, можно рассматривать как составленные только из AlGaAs пленок (вставок), которые отделены недифрагирующим материалом (в данном случае GaAs). Этот слой, однако, как фазовый объект, имеющий толщину, вносит вклад в формирование осциллирующей структуры спектра СР [21].

Таким образом, применение КЗР для исследования квантово-размерных СР показало, что эти отражения являются очень чувствительными к составу ТР КЯ. Причем в зависимости от соотношения величин параметров a_2/a_1 и F_2/F_1 изменяется поведение спутниковой структуры. Анализ отношения интенсивностей спутников высших порядков к интенсивности нулевого позволяет определить как состав ТР, так и наличие напряжений в субслоях (асимметрия интенсивностей спутников высших порядков). Удовлетворительное согласие между экспериментальными и теоретически рассчитанными КДО для 200 рефлекса свидетельствует о том, что теоретические предположения, используемые в работе, являются правомочными.

Проведенные исследования ясно свидетельствуют о том, что дифракционные характеристики 002 отражений являются очень чувствительными для обнаружения неоднородностей границ раздела многослойных структур.

Наконец, дифракция рентгеновских лучей с высоким разрешением является подходящей для анализа скрытых квантовых точечных структур. При сравнении рентгеновских спектров InGaAs слоев с точками и без них, уменьшение эффективного содержания индия в смачивающих слоях найдено в образцах с точками.

§5. Рентгенодифракционные исследования $2d-3d$ структурных переходов в многослойных периодических структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Многослойные структуры с напряженными слоями InGaAs/GaAs позволяют повысить эффективность размерного квантования. Ансамбли наностроек сформированные в матрице широкозонного материала имеют большой практический интерес [22,23]. Поэтому их применение требует проведения широкомасштабных исследований свойств этих структур с целью оптимизации технологических режимов формирования слоев и границ раздела. В частности, при отработке технологии получения квантовых слоев InGaAs/GaAs необходимо знать основные параметры слоев, такие как молярная доля индия и толщина слоя, а также уровень механических напряжений. Следует также отметить, что спонтанная поперечная модуляция состава в пленках полупроводниковых сплавов III-V приводит к сильным изменениям оптоэлектрических свойств полупроводниковых материалов, которые представляют технический интерес для производства квантово-размерных лазеров и фотодетекторов [24,25].

Целью настоящего параграфа являлось выяснение возможностей определения основных параметров многослойных напряженных квантовых ям InGaAs/GaAs с различным составом твердого раствора (ТР), а также влияния состава квантовых ям (КЯ) на переход от двумерного к трехмерному росту квантовых слоев с островками (квантовыми точками (КТ)).

Многослойную систему, какой является структура с несколькими квантовыми ямами, можно представить как систему однородных субслоев [4]. Расчет кривой дифракционного отражения (КДО) будем проводить по формулам динамической теории рассеяния рентгеновских лучей, которая сводится к рекуррентным соотношениям, связывающим амплитуду отражения от N слоев $R_{h,N}$ с амплитудами отражения $R_{h,1}$ и прохождения $R_{0,1}$ от верхнего слоя и амплитудой отражения от последующих $(N-1)$ слоев:

$$R_{h,N} = [R_{h,1} + R_{h,N-1}(R_{0,1}R_{0,1} - R_{h,1}R_{h,1})](1 - R_{h,N-1}R_{h,1})^{-1}. \quad (11.34)$$

Каждый из слоев характеризуется: толщиной t_j , параметром кристаллической решетки a_j и степенью аморфизации f_j , которая связана со смещением атомов из регулярной позиции.

Для проведения численного анализа и сопоставления его с экспериментом удобно использовать модель дефектов кулоновского типа с выражением для статического фактора Дебая-Валлера, согласно [7].

Все исследуемые образцы выращивались на полуизолирующем арсениде галлия (100) на установке MBE. Пять серий образцов были выращены, с

содержанием индия 0,2, 0,25, 0,28, 0,3 и 0,35, соответственно. Измерения КДО для симметричных 400, 200 и асимметричных 311 рефлексов проводились на двухкристальном спектрометре (кристалл–монокроматор GaAs(100), CuK_α -излучение, 400 отражение).

Используя приведенные выше соотношения, были проведены расчеты спектров КДО для данных структур. В качестве стартовых условий для подгонки теоретических спектров КДО к экспериментальным, использовались технологические параметры структур. Окончательной подгонки до значения параметра $\chi=1,43$ добивались путем введения в расчеты дополнительных слоев с различным содержанием индия.

Экспериментальные КДО, а также результаты подгонки теоретических кривых для симметричного отражения 004 от некоторых образцов с различным содержанием индия в твердом растворе представлены на рис. 11.20. Видно, что кроме пика подложки и основного максимума, вызванного средней решеткой структуры (нулевого сателлита), на хвостах КДО наблюдается сложная интерференционная структура, представляющая собой взаимодействие волн с одинаковыми периодами колебаний [4]. Осцилляции с малым периодом

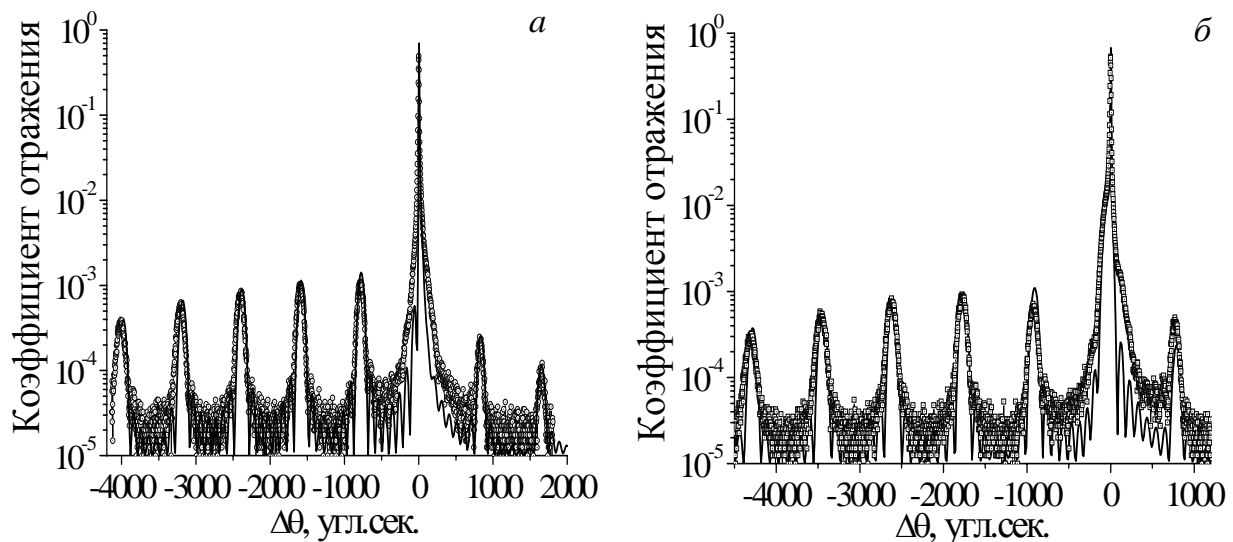


Рис. 11.20. Расчетные (сплошная линия) и экспериментальные (точки) КДО для рефлекса 004 в структурах с содержанием индия: $x=0,25$ (а), $x=0,28$ (б)

Таблица 11.4. Состав и параметры квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ по данным рентгеновской дифрактометрии

Структура	Состав	Толщина КЯ, нм	Толщина слоя GaAs, нм	Период СР, нм
№1	0,2	4,5	15,9	20,38
№2	0,25	5,5	17,91	23,41
№3	0,28	5,0	17,31	22,31
№4	0,2	0,7	16,94	21,69
	0,3	4,0		
№5	1	0,7	17,88	22,98
	0,17	4,4		

$\Delta\theta$ определяются толщиной всей структуры, а более длиннопериодные осцилляции имеют ярко выраженный максимум, свидетельствующий о формировании в приповерхностной области образцов периодической структуры монокристаллических слоев. Анализ КДО (как симметричных 400, так и асимметричных 311) показал, что все структуры, в той или иной степени являются псевдоморфными. С учетом этого обстоятельства была проведена оценка содержания индия в квантовых ямах. Эти оценки приведены в таблице 11.4.

В результате процедуры подгонки для рефлекса 400 были получены толщины слоев в периоде сверхрешетки (СР), распределение примеси в пределах КЯ, а также изменение параметра решетки в направлении роста структуры. Эти результаты обобщены в таблицах 11.5 и 11.6. В предпоследней колонке таблицы 11.5 приведены значения усредненного параметра деформации по периоду СР вдоль направления роста для всех структур, который рассчитывается по формуле:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon_1 t_1 + \varepsilon_2 t_2}{t_1 + t_2}. \quad (11.35)$$

Таблица 11.5. Деформационные параметры квантовых ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ по данным рентгеновской дифрактометрии (симметричный рефлекс 400)

Образец	Деформация в слоях		$\Delta a/a$ в релаксированном периоде СР	$\langle \varepsilon \rangle$ в периоде СР, формула (7.35)	$\langle \varepsilon \rangle$ в периоде СР, определенная по положению 0 сателлита
	ε_1 , InGaAs	ε_2 , GaAs			
№1	0,023	0,000185	0,0032	0,00529	0,00501
№2	0,025	0,000185	0,00419	0,00599	0,00586
№3	0,0285	0,000851	0,0045	0,00705	0,00696
№4	0,03 0,029	0,00185	0,00444	0,00779	0,00754
№5	0,045 0,0322	0,00075	0,00453	0,00834	0,00799

Таблица 11.6. Значения параметров деформации слоев в плоскости интерфейса, полученные в резко асимметричной геометрии съемки КДО (рефлекс 311)

Образец	Деформация в <i>Cap layer</i> GaAs	Деформация, параллельная интерфейсу	Положение нулевого сателлита угл.сек.
№1	0,00035	0,00047	-806
№2	0,00023	0,00026	-952
№3	0,00031	0,00091	-1092
№4	0,00501	0,00067	-1206
№5	0,00083	0,00060	-1285

В последней колонке таблицы 11.5 приведены средние значения деформаций в периоде СР, полученные из углового положения нулевого сател-

лита 004 отражения. Как видно из этого сравнения, результаты, полученные разными подходами, хорошо коррелируют между собой. Однако, сравнение этих значений с данными для релаксированной структуры, имеющей аналогичный состав, показывает, что все образцы находятся в деформированном состоянии.

Если учесть повышенную подвижность индия, то можно предположить наличие некоторого размытия КЯ. Изменение состава КЯ происходит при внутренней диффузии некоторого количества индия из двух граничных слоев КЯ в барьерный слой GaAs, а атомы Ga диффундируют в КЯ. Структура квантовых ям такова, что верхние и нижние ее слои оказываются размытыми и с меньшим содержанием индия, чем более глубокие по отношению к интерфейсу части квантовой ямы. Возможные профили размытия КЯ для образцов 4 и 5 представлены на рис. 11.21.

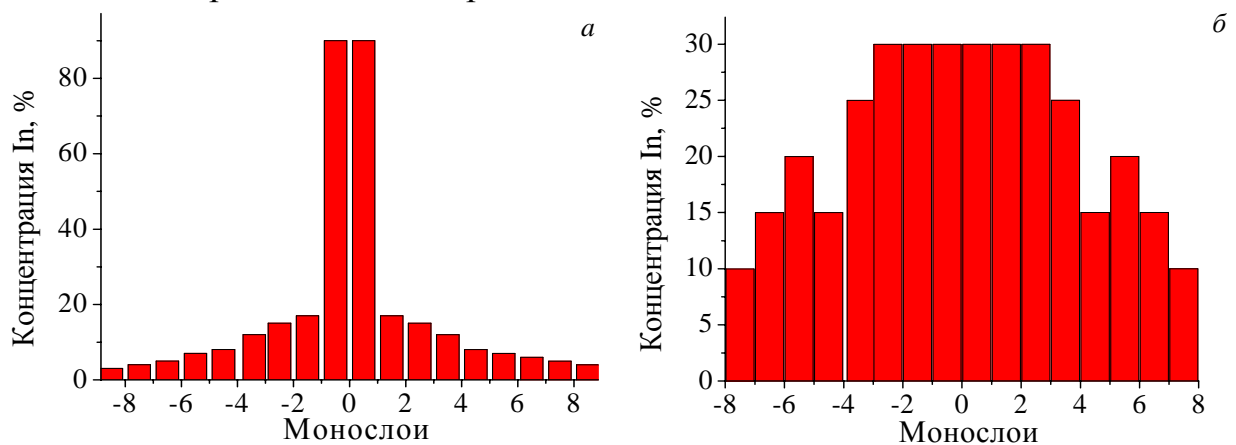


Рис. 11.21. Профили распределения индия в монослоях КЯ для образцов №5 (а) и №4 (б)

На рис. 11.22 приведены зависимости КДО (расчетные и экспериментальные) от состава твердого раствора (ТР) для рефлекса 311 в геометрии падающего скользящего пучка. Их анализ также свидетельствует о возможных релаксационных и диффузионных (индий) процессах в образцах 3-5. Данные о структурах, полученные в процессе подгонки для рефлексов 311 приведены в таблице 11.6. Уширение пиков спутников для 400 и 311 рефлексов может быть вызвано перераспределением индия внутри слоя.

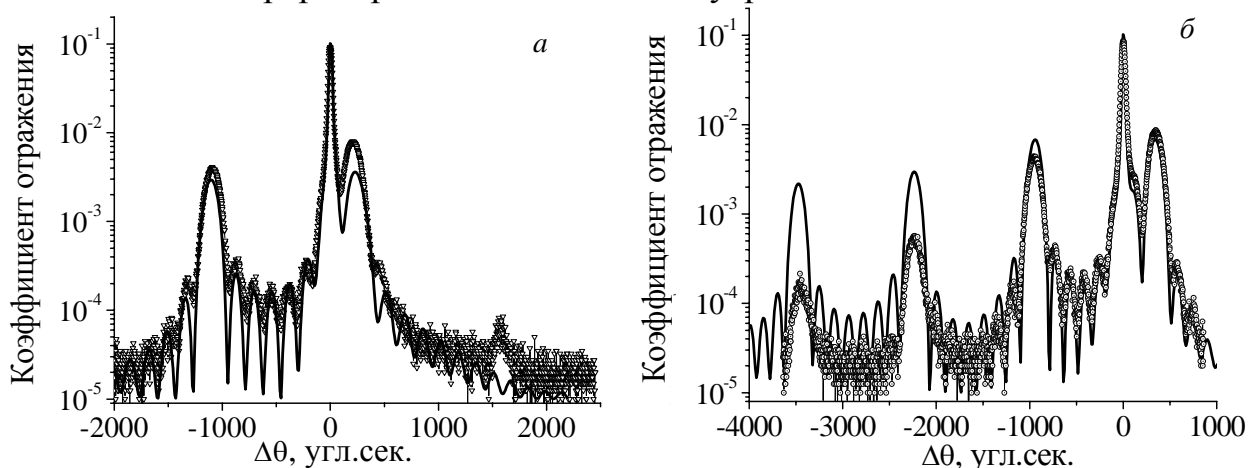


Рис. 11.22. Расчетные (сплошная линия) и экспериментальные (точки) КДО для рефлекса 113 в структурах с содержанием индия: $x=0,28$ (а), $x=0,25$ (б)

Полученные значения деформации для направления параллельного гетерогранице, в образцах №3, 4 и 5 свидетельствуют о значительной релаксации решетки, т.е. о частичном срыве псевдоморфного роста. Это позволяет сделать некоторые заключения о том, что здесь появляется трехмерный рост островковых структур.

Особенность модуляции таких структур состоит в том, что период поддерживается решеткой смачивающих слоев, а высота островков флуктуирует. Сами островки могут быть неупорядоченными в плоскости, на профиле симметричного отражения это не скажется [20,26]. В условиях малой плотности островков, когда смачивающий слой остается плоским, рассеивающую плотность ρ можно представить как решетку смачивающих слоев ρ_1 , из которой убрали области островков ρ_2 , а затем эти места заполнили материалом островков с другим периодом решетки ρ_3 . В идеальной решетке модулированы и дифракционные пики от островка и от усредненной решетки слоев. Сбои высоты островков не гасят модуляцию, поскольку идеальный сверхпериод поддерживается решеткой смачивающих слоев. Небольшие сбои сверхпериода подавляют модуляцию пика островка, но не решетки слоев, так как слои в этой модели составляют кристаллическую решетку, а для островков прослойка ближе к аморфной структуре.

Экспериментальные КДО 004 для образцов 4 и 5 свидетельствуют о том, что основной объем квантового слоя состоит из двух областей, отличающихся по составу от заданного. Основной слой ($x=0,17$) и возникает дополнительный слой с большим составом ($x=0,9$), вероятно, в виде островковых структур. Об образовании трехмерных островковых структур свидетельствует как уширение пиков сателлитов низких порядков, так и смещение их огибающей в сторону меньших углов. Ярким примером, свидетельствующим в пользу трехмерной структуры для образца с ($x=0,35$) является спектр КДО от многослойной системы для рефлекса 400, представленный на рис. 11.23.

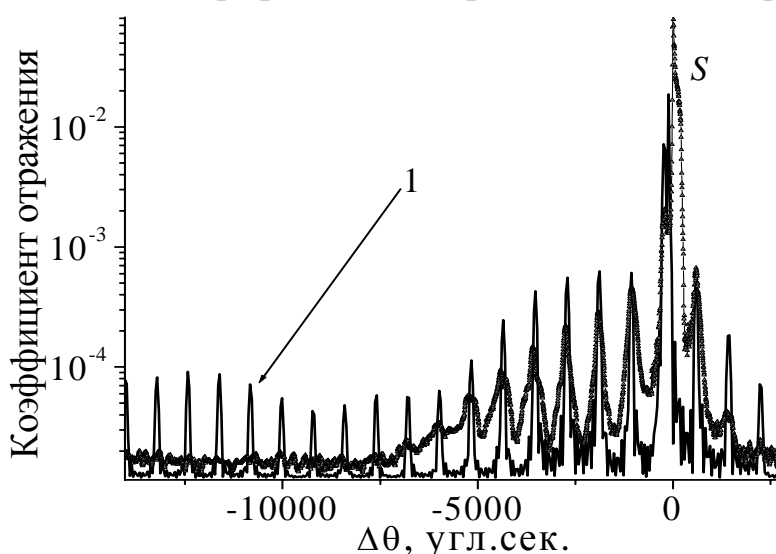


Рис. 11.23. Расчетная (сплошная линия) и экспериментальная (точки) КДО для рефлекса 004 в структуре с содержанием индия $x=0,35$. Стрелкой с цифрой 1 обозначена область квантовых точек, S – пик от подложки

Рис. 11.23 наглядно демонстрирует подавление сателлитной периодической структуры, вызванной островками в области больших отрицательных углов (образец 5). Расчетные КДО обеспечивают наилучшее согласие с экспериментальными результатами для процентного содержания In в КЯ, представленного на рис. 11.21. Наконец отметим, что в пользу образования трехмерной островковой структуры свидетельствует и спектр КДО, снятый при сканировании кристалла на удалении от точного положения Брэгга [27]. В этом случае на фоне подавленных когерентных пиков хорошо виден пик, образованный диффузной компонентой от квантовых точек. По его полуширине была проведена оценка размеров КТ вдоль направления интерфейса, которая составила в нашем случае 73,5 нм. Это значение близко по величине к полученным в работе [28] средним размерам квантовых островков.

Согласие между экспериментальными и теоретически рассчитанными КДО свидетельствуют о том, что многослойная структура, созданная на подложке GaAs, имеет хорошее кристаллическое качество, а граница раздела между барьерными слоями GaAs и КЯ $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ для образцов с содержанием индия 0,2-0,25 четкая и когерентная. Дальнейшее повышение концентрации индия в твердом растворе приводит к некоторому нарушению псевдоморфного роста и возникновению трехмерных образований в виде островков. При этом произвольное распределение In в системах такого рода может приводить к увеличению степени локального беспорядка и деформации, что соответственно влияет на подвижность и длину диффузии носителей заряда.

При подгонке теоретических КДО к экспериментальным анализировались наиболее возможные и вероятные ситуации. Для нахождения более полного соответствия между теоретическими и экспериментальными КДО исследования проводились с использованием не только кинематической, но и динамической теории рассеяния рентгеновских лучей. Максимально полного совпадения расчетных и экспериментальных КДО можно достичь лишь с учетом инструментальных факторов, что, в принципе нетрудно, и с включением в теоретическую модель эффектов диффузного рассеяния от микродефектов в слоях и от шероховатостей межслойных границ [15].

§6. Влияние упорядочения квантовых точек на характер брэгговской дифракции в периодических структурах

Ансамбли наноструктур, сформированные в матрице материала, имеют большой практический интерес [29,30]. Поэтому требуется проведение широкомасштабных исследований свойств этих структур с целью оптимизации технологических режимов формирования квантовых точек (КТ) в слоях и границ раздела. В частности, при отработке технологии получения КТ в слоях InGaAs/GaAs необходимо знать их основные параметры: размеры и форму, распределение индия в КТ, уровень механических напряжений, а также степень упорядочения в вертикальном (направление роста слоев) и латеральном направлениях. Система самоорганизованных КТ с упорядоченной структурой

в вертикальном и латеральном направлениях очень мало изучена, поскольку ее получение является очень сложной технологической задачей. Поэтому изучение таких систем важно как с точки зрения определения параметров таких объектов, так и влияния упорядочения системы квантовых точек на характер рассеяния рентгеновских лучей.

Из распределения рассеянной интенсивности в обратном пространстве может быть получена информация относительно формы, а также относительно распределения напряжений в наноструктурах (рис. 11.24, а). Просвечивающая электронная микроскопия (*TEM*) и рентгеновская дифракция (*XRD*) чувствительны к формам и к напряжениям, и разделение обоих эффектов – главная проблема в анализе экспериментальных данных. Такие методы исследования как атомный силовой микроскоп (*AFM*) или туннельный микроскоп (*STM*) – не чувствительны к напряжениям в решетке, они могут исследовать только свободную типовую поверхность. В отличие от *TEM*, *XRD* – нелокальный метод, поэтому исследуются параметры структуры, усредненные по области облучения.

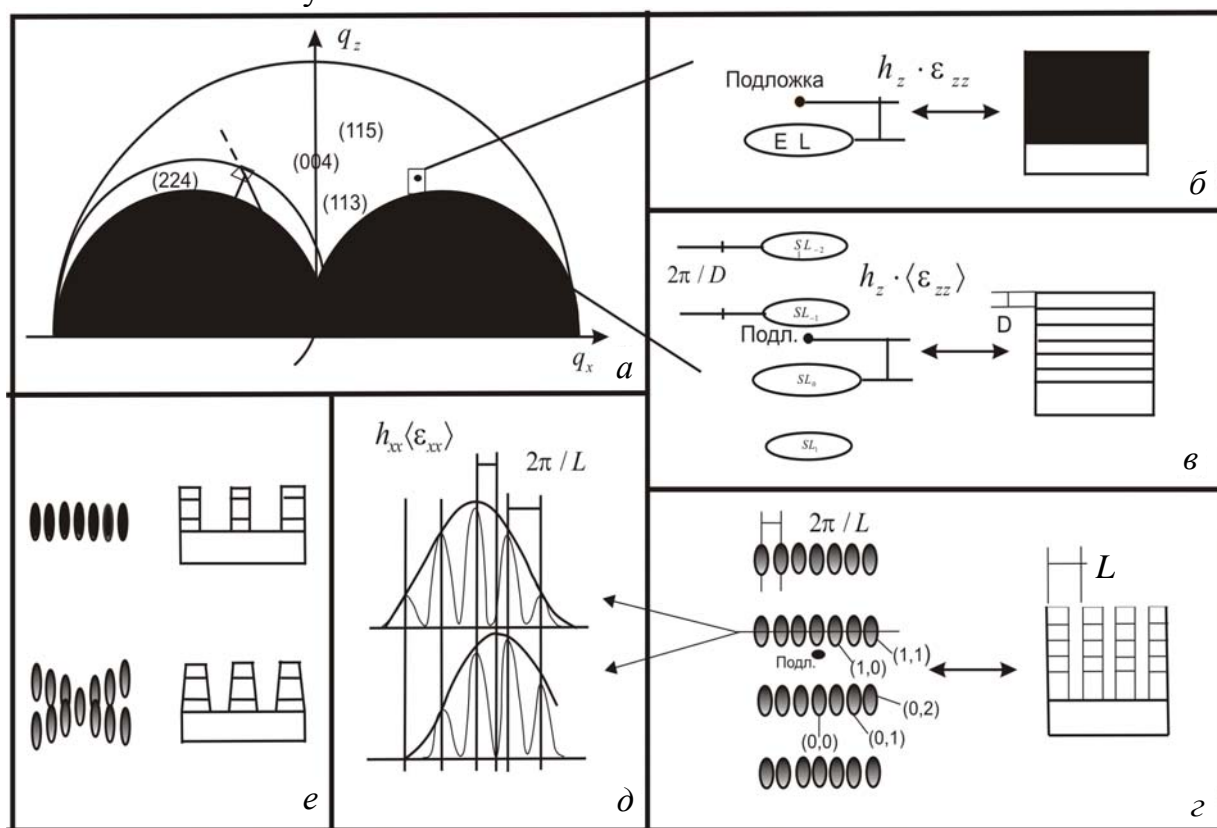


Рис. 11.24. Схематическое изображение распределения интенсивности в обратном пространстве для компланарной дифракции (а), а также для различных структур: эпислой(б), СР (в), СР с проводниками (г)

Дифрагированная интенсивность может быть выражена как функция вектора рассеяния $\vec{Q} = \vec{K}_f - \vec{K}_I$, где $\vec{K}_{f,I}$ – векторы первичной и рассеянной волн, соответственно. Латеральные структуры в СР – очень маленькие, поэтому динамические дифракционные эффекты, играют незначительную роль, и ими можно пренебречь [31]. Тогда, распределение дифрагированной интен-

сивности в обратном пространстве $I(Q)$ пропорционально квадрату абсолютного значения Фурье-преобразования электронной плотности в образце. На электронную плотность воздействуют и форма горизонтальных образцов и поле смещения $\vec{u}(\vec{r})$ в образце, то есть поля напряжений в слоях. Последний фактор определяется произведением $(\vec{h} \cdot \vec{u}(\vec{r}))$, где \vec{h} – вектор дифракции. Это делает возможным отличить влияние формы и напряжения на распределение дифрагированной интенсивности $I(Q)$ на картах обратного пространства (RSM).

Распределение интенсивности вокруг точек обратной решетки (RLP) эпислоев, которые вырастают псевдоморфно на подложке, показано на рис. 11.24,б. Расстояние пика от подложки определяется вертикальным напряжением, $\Delta q_z = -h \cdot \epsilon_{zz}$. Если, вместо эпитаксиального слоя выращена периодическая СР с периодом T , пик, соответствующий слою "расщепляется" на ряд последовательных пиков вдоль Q_z , обозначенных как $SL_1, SL_0, SL_{-1}, \dots$ на рис. 11.24,в). Расстояние между пиками по Q_z обратно пропорционально периоду СР, $\Delta Q_z = 2\pi/T$, ширина пиков обратно пропорциональна полной толщине СР. Расстояние между пиком подложки и SL_0 теперь определяется средним напряжением в СР, $\Delta Q_z = -h_z \langle \epsilon_{zz} \rangle$.

Теперь рассмотрим одномерное периодическое множество квантовых проводов, произведенное литографией и последующим реактивным ионным травлением этой СР. Трансляционная группа симметрии этой структуры содержит трансляционную симметрию обычной кристаллической решетки, вертикальную периодичность СР, и горизонтальную периодичность проводной структуры L . Все эти элементы симметрии появляются в RSM . Кристаллическая периодичность решетки представлена трехмерной обратной решеткой, и одним из ее трансляционных векторов есть дифракционный вектор \vec{h} . Рассмотрим карту обратного пространства около точки обратной решетки H ($\vec{HO} = \vec{h}$). Вертикальная периодичность СР вызывает точки сателлитов СР SL_m , где $H \cdot SL_m = \vec{n} \cdot 2\pi m / T$, где \vec{n} – нормаль к поверхности, m – целое число, и T , период СР (т.е. RLP H СР идентична SL_0). Горизонтальная периодичность проводного множества вызывает горизонтальные сателлиты в точках $M_{m,p}$, где $M_{m,p} \cdot SL_m = \vec{\tau} \cdot 2\pi p / L$, $\vec{\tau}$ – единичный вектор, находящийся на поверхности и нормальный к проводам, p – целое число, и L период проводного множества. Распределение интенсивности поэтому состоит из ряда максимумов в обратном пространстве, и находится близко к точке обратной решетки H , они могут быть характеризованы 2 индексами (m, p) , показанными на рис. 11.24,г). Вертикальная ширина снова обратно пропорциональна полной толщине СР. Горизонтальная ширина максимумов будет определяться освещенной типовой областью (в пределах кинематической теории).

В Странски-Крастанова способе роста из напряженной эпитаксиальной СР самоорганизованная структура может быть создана при росте на поверхности напряженного слоя. Структура состоит из двухмерного множества маленьких островов (квантовые точки). С увеличением числа слоев в СР, рас-

пределение точечных размеров становится гомогенным, и упорядочение точек улучшается [32,33]. Точки создают двухмерное, почти периодическое множество, оси которого совпадают с направлениями самого малого упругого модуля кристалла, то есть в алмазной структуре по [100] направлению. В вертикальном направлении, положения точек на соседних интерфейсах коррелированные и вызваны полями напряжений, размножающимися от захороненной точки к растущей поверхности [32]. Таким образом, точки имеют тенденцию быть устроенными в беспорядочной трехмерной решетке, чей вертикальный параметр решетки равняется периоду СР.

На рис. 11.25, показаны сканы вдоль направления Q_x вместе с моделируемыми профилями интенсивности [34].

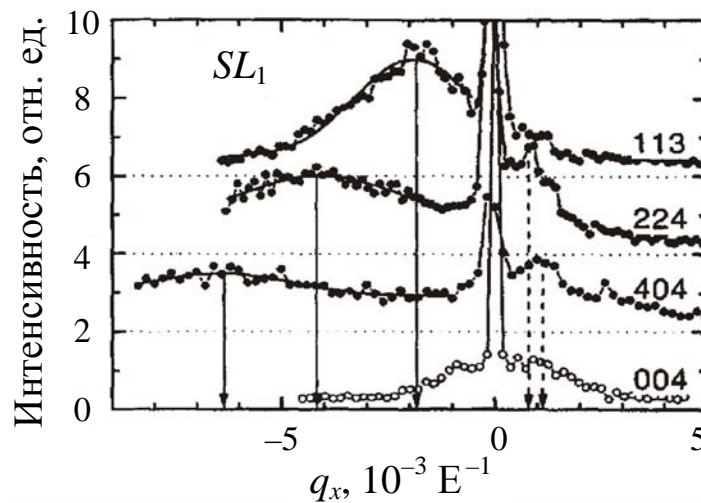


Рис. 11.25. Проекция диффузного пика около SL_1 , на ось q_x для разных отражений

В асимметричных схемах дифракции распределение интенсивности близко к SL_1 , смещено к меньшим значениям Q_x . Этот сдвиг пропорционален горизонтальной компоненте дифракционного вектора, таким образом, это вызвано напряжением и дифрагированная интенсивность формируется областями с большим параметром решетки в плоскости a . Как показано в [35] это следует из числовых расчетов распределения напряжений вокруг точки б. При этом между точкой и кремниевой решеткой находится область сжатия, в то время как в области этих точек решетка расширена (см. рис. 11.26). Поэтому, интенсивность близко к SL_1 происходит главным образом от объема точки. Из этого сдвига можно определять среднее горизонтальное напряжение $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ в точках [35].

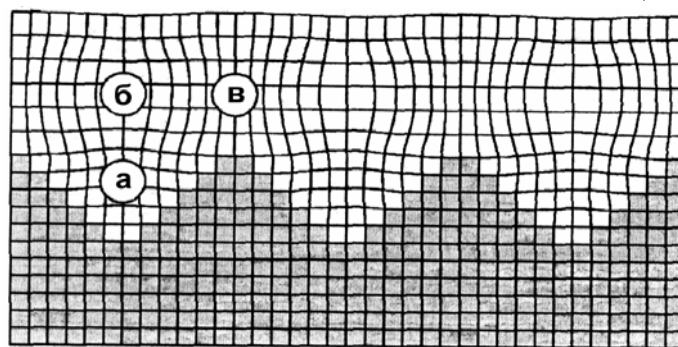


Рис. 11.26. Схема возможных распределений деформаций в верхнем слое, вызванных скрытой латеральной решеткой треугольной формы

В области близко к пику SL_0 интенсивность проявляет противоположную асимметрию; это перемещение к большему Q_x . Однако, этот сдвиг не пропорционален \bar{h} , но положение Q_x максимума интенсивности зависит только от азимута рассеивающей плоскости, т.е. Q_x тот же самый при 113 и 224 дифракции и увеличивается на фактор $\sqrt{2}$ в 404. Таким образом, этот максимум есть первый горизонтальный сателлит от точечного множества, ячейка множества квадратная, и ее оси параллельны (100) [36].

Основным методом исследования многослойных квантовых структур является рентгенодифрактометрия высокого разрешения [4]. Этим методом исследованы как технологические параметры (толщина слоев, состав квантовой ямы (точки)), так и структурные – уровень деформации в слоях, степень их структурного упорядочения и совершенства. Однако, в последних работах [37,38], несмотря на наличие на экспериментальных спектрах пиков от квантовых точек, отсутствует объяснение механизма формирования этих спектров, а также их математическое моделирование. Кроме этого, отсутствует интерпретация наблюдаемого на экспериментальных спектрах расщепления сателлитных пиков основной сверхрешетки (СР) [39]. Некоторые особенности влияния образования КТ на размытие сателлитной структуры спектров отмечено в [40], а также выдвинуто предположение об уменьшении параметра дальнего порядка.

В [41,42] (см. также главу 10) развита теория рассеяния рентгеновских лучей такими объектами, включающая рассмотрение как когерентной, так и диффузной (вызванной наличием дефектов в слоях) составляющих интенсивности. Используя основные представления этих работ, мы попробовали решить следующие задачи:

1) определить возможности различных схем брэгговской дифракции для получения информации из экспериментальных спектров сверхрешеточных структур с квантовыми точками;

2) используя моделирование кривых качания определить основные параметры многослойных напряженных сверхрешеточных структур с квантовыми точками из двух – и трехкристалльных экспериментальных спектров;

3) объяснить расщепление пиков на кривых дифракционного отражения от напряженных сверхрешеточных структур InGaAs/GaAs с квантовыми точками;

4) проанализировать влияние дефектов различных типов на спектры КДО в многослойных СР с квантовыми точками.

Расчет кривой дифракционного отражения (КДО) будем проводить по формулам динамической теории рассеяния рентгеновских лучей, которая сводится к рекуррентным соотношениям, связывающим амплитуду отражения от N слоев $R_{h,N}$ с амплитудами отражения $R_{h,1}$ и прохождения $R_{0,1}$ от верхнего слоя и с амплитудой отражения от последующих $(N-1)$ слоев (11.34). Для расчета диффузной части рассеяния используем модель, предложенную в [43] (см. также [44-48] и главу 10).

Исследовались сверхрешеточные структуры с квантовыми точками

8x(11ML (In,Ga)As/67ML GaAs), выращенные на полуизолирующем арсениде галлия (100) на установке MBE. Измерения КДО для симметричных 400 и асимметричных 224 рефлексов проводились на двухкристальном спектрометре (кристалл–монохроматор GaAs(100), CuK_α -излучение, 400 отражение), а также дифрактометре фирмы "Philips MRD X-Pert".

Образец сканировался вблизи точного положения Брэгга в диапазоне около 3° в так называемом $\omega/2\theta$ – режиме. Регистрировались как ω -сканы (без анализатора), так и $\omega-2\theta$.

Основные экспериментальные спектры КДО для симметричного 400 отражения в режиме ω -сканирования (1) и $\omega-2\theta$ – с анализатором (2) приведены на рис. 11.27.

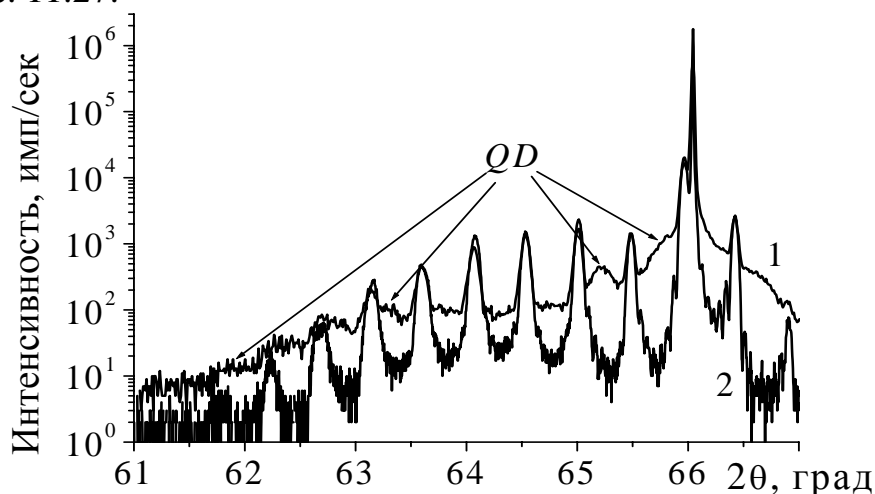


Рис. 11.27. Экспериментальные дифракционные спектры для 400 отражения: ω -сканирование (двухкристальный вариант) (1), $2\theta-\omega$ -сканирование (трехкристальных вариант) (2). *QD* – пики от квантовых точек

На спектрах наблюдается сателлитная структура пиков основной СР также, вызванная наличием КТ. Наблюдаемые на них особенности можно качественно объяснить просто. Видно, что кроме пика подложки и основного максимума, вызванного средней решеткой структуры (нулевого сателлита), на хвостах КДО наблюдается сложная интерференционная структура, представляющая собой взаимодействие волн с одинаковыми периодами колебаний [6]. В идеальной решетке модулированы дифракционные пики за счет островков (КТ) и усредненной решетки слоев. Кроме сателлитов, отвечающих за период СР, на КДО наблюдается также система широких сателлитов, смещенных по углу относительно сверхрешеточных. При этом период их аналогичен периоду основной сверхрешетки. Эти сателлиты предположительно должны быть обусловлены самоорганизацией решеток квантовых точек. Особенно четко эти дополнительные сателлиты проявляются при ω -сканировании без анализатора (1).

Сравнение двух- и трехкристальных (с анализатором) кривых качания показывает, что пики, обозначенные на графике как (*QD*), действительно вызваны наличием решетки квантовых точек с примерно той же периодичностью. Анализируя сдвиг этой системы сателлитов относительно нулевого для

основной СР, можно определить среднее напряжение в решетке КТ. Отсюда, используя уравнения Пуассона, получим средний состав КТ. Эти данные приведены в таблице 11.7.

Таблица 11.7. Состав и параметры СР с квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ по данным рентгеновской дифрактометрии

Структура	Состав	Средняя деформация в периоде СР, %	Толщина слоя GaAs, нм	Период СР, нм
№1	0,2	4,5	18,91	22,9±0,2
№2	0,25	5,5	15,87	17,8±0,3

Рис. 11.27 также наглядно демонстрирует подавление сателлитной периодической структуры, вызванной островками в области больших отрицательных углов. Сбои высоты островков не гасят модуляцию, поскольку идеальный сверхпериод поддерживается решеткой смачивающих слоев. Небольшие сбои сверхпериода подавляют модуляцию пика средней решетки слоев, так как слои в этой модели составляют совершенную кристаллическую решетку, а решетка островков ближе к мозаичной структуре. В этом случае на фоне подавленных когерентных пиков хорошо виден пик, образованный диффузной компонентой от квантовых точек. По его полуширине была проведена оценка размеров КТ вдоль направления интерфейса (таблица 11.8). Эти значения близки по величине к полученным в работе [51] средним размерам квантовых островков для этого соединения.

Подтверждением вышесказанному являются двухмерные карты обратного пространства вокруг узлов 400 и 224. На рис. 11.28 приведены карты, снятые в симметричном 400 (а) и асимметричном 224 (б) отражениях.

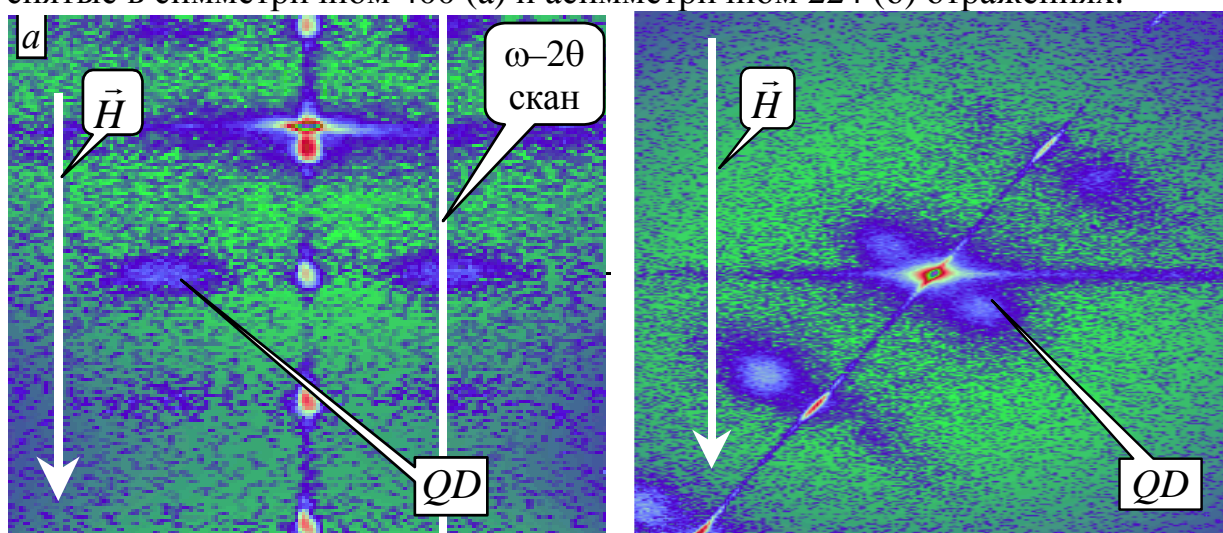


Рис. 11.28. Карты распределения дифрагируемой интенсивности в обратном пространстве вблизи узлов 400 (а) и 224 (б) для структуры $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$. Излучение – $\text{CuK}\alpha_1$. \vec{H} – вектор дифракции, QD – рассеяние от квантовых точек

Из рис. 11.28 следует, что дополнительные сателлиты на КДО 400 действительно соответствуют системе упорядоченных максимумов интенсивности. Причем это упорядочение наблюдается как в направлении роста q_z (вдоль век-

тора дифракции), так и в плоскости интерфейса (в направлениях q_x, q_y). Период этих упорядоченных максимумов отличается в двух взаимоперпендикулярных направлениях. Вдоль вектора дифракции он совпадает с периодом СР, и немного увеличивается в латеральном направлении. Само наличие упорядоченной системы максимумов уже свидетельствует о высоком качестве СР с квантовыми точками, наличие которых и подтверждается картиной рассеяния [47].

Еще более детальную информацию о структуре деформационных полей в этих СР можно получить из анализа асимметричных двумерных карт рассеяния рентгеновских лучей в обратном пространстве. На этих картах отчетливо наблюдается рассеяние от подложки, сателлитная структура от СР, а также пики, вызванные упорядоченной структурой квантовых точек. Сравним сечение, показанное прямой на карте узла обратной решетки 400 со спектром ω -сканирования (рис. 11.29). Видно, что максимумы сечения двумерной карты распределения интенсивности, отвечающие рассеянию от КТ и КДО совпадают, что дает основание считать двухкристальную ω -кривую качания очень информативным инструментом для исследования структур с квантовыми точками.

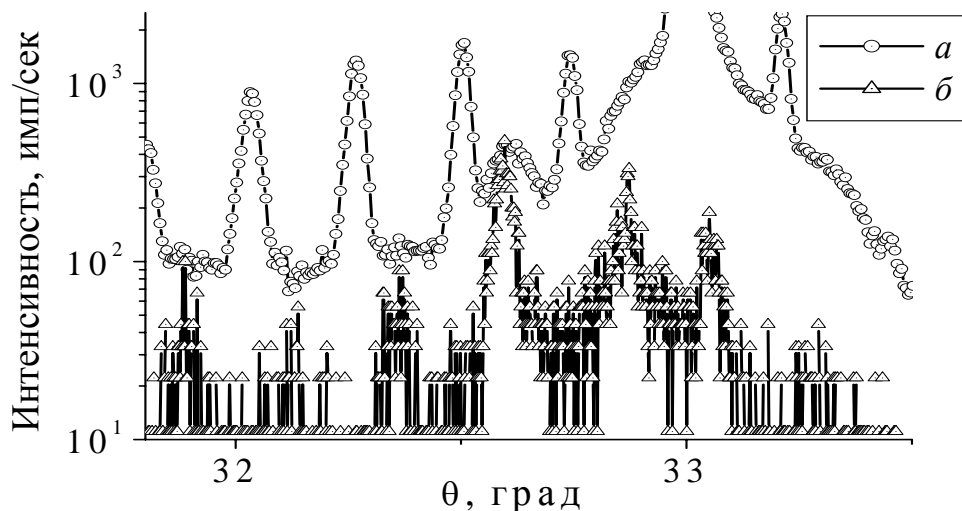


Рис. 11.29. Фрагменты экспериментальных дифракционных спектров: ω -сканирование (двухкристальный вариант) (а), $\omega-2\theta$ - сечение (с анализатором) двумерной карты рассеяния (б) вдоль направления указанного ($\omega-2\theta$ скан) на рис.11.28 (а)

Проанализируем теперь сечение вдоль вектора q_x вблизи сателлита первого порядка (рис. 11.30).

В отличие от аналогичных сечений, приведенных в работе [47], в нашем случае наблюдаются диффузные пики по обе стороны от когерентного сателлита основной сверхрешетки. Положение максимумов диффузных пиков вдоль q_x отвечает вкладу деформационных полей вокруг квантовых точек в латеральной плоскости. Поэтому их положение можно связать с напряжениями в латеральной плоскости $q_x^{\max} \sim \varepsilon_{xx}$. Полученные значения латеральных напряжений в КТ приведены в таблице 11.8.

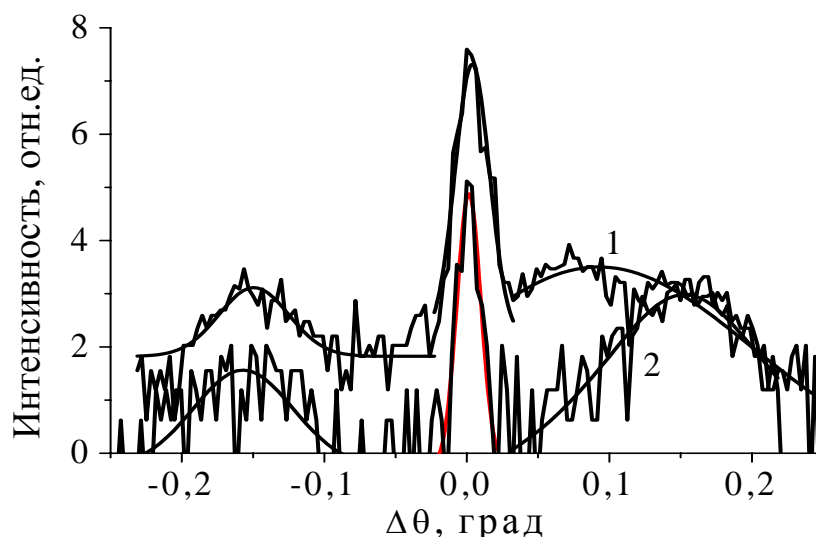


Рис. 11.30. Проекция сечения пиков диффузного рассеяния возле сателлита CP_{-1} на ось q_x , полученная из *RSM* вокруг узла 400 (1) и 224 (2) для структуры InGaAs/GaAs

Таблица 11.8. Параметры квантовых точек $In_xGa_{1-x}As$ по данным рентгеновской дифрактометрии

Структура	Средний состав КТ, %	Латеральные напряжения в КТ, %	Средний латеральный размер КТ, нм	Высота КТ, нм
№1	58	0,0004	98	7,0
№2	63	0,0003	86	7,8

Как отмечалось в постановке работы, одной из ее задач являлось выяснение причин расщепления спектров КДО, особенно в области больших отрицательных углов отклонения от точного брэгговского положения. Используя соотношения [4,15,19], а также формулы главы 10, были проведены расчеты спектров КДО для данных структур. В качестве стартовых условий для подгонки теоретических спектров КДО к экспериментальным, использовались технологические параметры структур. На рис. 11.31 приведены в качестве примера экспериментальный и расчетный спектры для многослойной системы InGaAs/GaAs с квантовыми точками. На графиках отчетливо наблюдаются системы расщепленных сателлитных пиков.

Проведенные численные расчеты КДО показали, что такая картина дифракции может появиться в случае, когда сверхрешеточная многослойная структура состоит из двух областей с различными периодами. Расчетные зависимости с большой точностью описывают эти экспериментальные кривые, что свидетельствует о правомочности еще одной возможной версии о происхождении механизма расщепления (удвоения) сателлитов. Причем дисперсия величины периода в данном случае должна быть небольшой, т.е. эти две области CP должны быть когерентными. В противном случае структура сателлитных пиков сильно замывается. Некоторое смазывание дифракционной картины на экспериментальных КДО в области сателлитов высоких порядков вызвано подавлением сателлитов диффузной компонентой вызванной рассеянием от КТ.

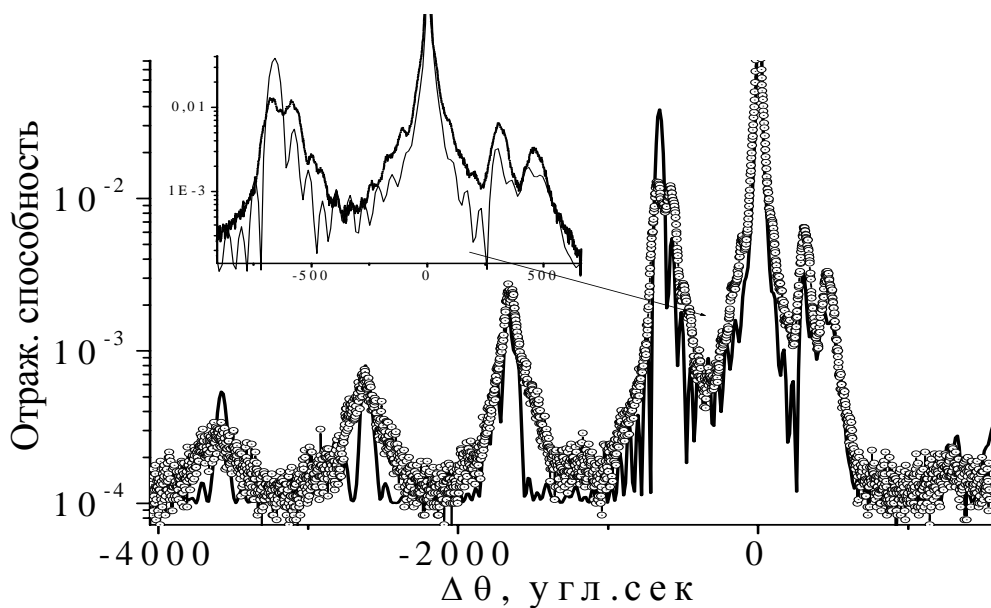


Рис. 11.31. Экспериментальные (точки) и расчетные (сплошная кривая) дифракционные спектры для 400 отражения: ω -сканирование (двухкристальный вариант) для СР InGaAs/GaAs

Анализ КДО (для симметричных 400 отражений) показал, что структуры, в той или иной степени являются псевдоморфными. С учетом этого обстоятельства проводилась оценка среднего содержания индия в квантовых ямах. В результате процедуры подгонки для рефлекса 400 были получены толщины слоев в периоде СР, а также изменение параметра решетки в направлении роста структуры для двух систем периодов СР, которые для приведенного на рис. 11.31, спектра составляют, соответственно, 0,045 и 0,03.

Другой важной причиной разрешения тонкой структуры сателлитов является совершенство слоев и их однородность по площади. Как было показано ранее [15,19], даже при хорошем инструментальном разрешении картина сателлитной структуры для структурных рефлексов сильно зависит от наличия дефектов в том или ином слое СР.

Наличие дальнего порядка в расположении максимумов на двумерных картах в обратном пространстве свидетельствует о латеральном и нормальном упорядочении квантовых точек с разными периодами. Об этом также свидетельствует и форма ω -кривых вблизи сверхструктурных максимумов. Однако следует заметить, что фазовые корреляции в направлении вектора дифракции (обратной решетки) более сильны, чем в параллельном направлении. Отметим также, что наличие деформированных областей в структурах, вызванных квантовыми точками, в отличие от других типов нарушений, не оказывает существенного влияния на когерентность дифрагированного излучения и, следовательно, на пространственное разрешение метода ВРРД.

§7. Исследование латерального и вертикального упорядочения квантовых точек в многослойных наноструктурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ с помощью двумерных карт рассеяния рентгеновских лучей в обратном пространстве

Выращивание (*MBE*) короткопериодных СР (КПСР) часто приводит к гетероструктурам с непреднамеренными латеральными изменениями в составе сплава. Особенно сильная и упорядоченная композиционная модуляция возникает при росте номинально согласованной КПСР при наличии в периодах около четырех монослоев (МЛ). Эта вынужденная ростом модуляция сначала наблюдалась [48]. В зависимости от системы сплава, горизонтальная модуляция может быть или одномерной [49,50] или двумерной [51] по характеру.

Одномерная (*1-D*) модуляция в КПСР, которая формирует горизонтальную длину волны, производит подобные проводу области, в то время как двумерная (*2-D*) модуляция производит коробку, или подобные точке области. В более толстых КПСР модулируемые области могут непрерывно самовыравниваться вертикально; *1-D* подобные проводу области удлинятся по направлению роста, чтобы формировать подобные листу области или горизонтальные квантовые ямы. Точно так же *2-D* подобные точке области удлинятся, чтобы формировать колонки (рис. 11.32).

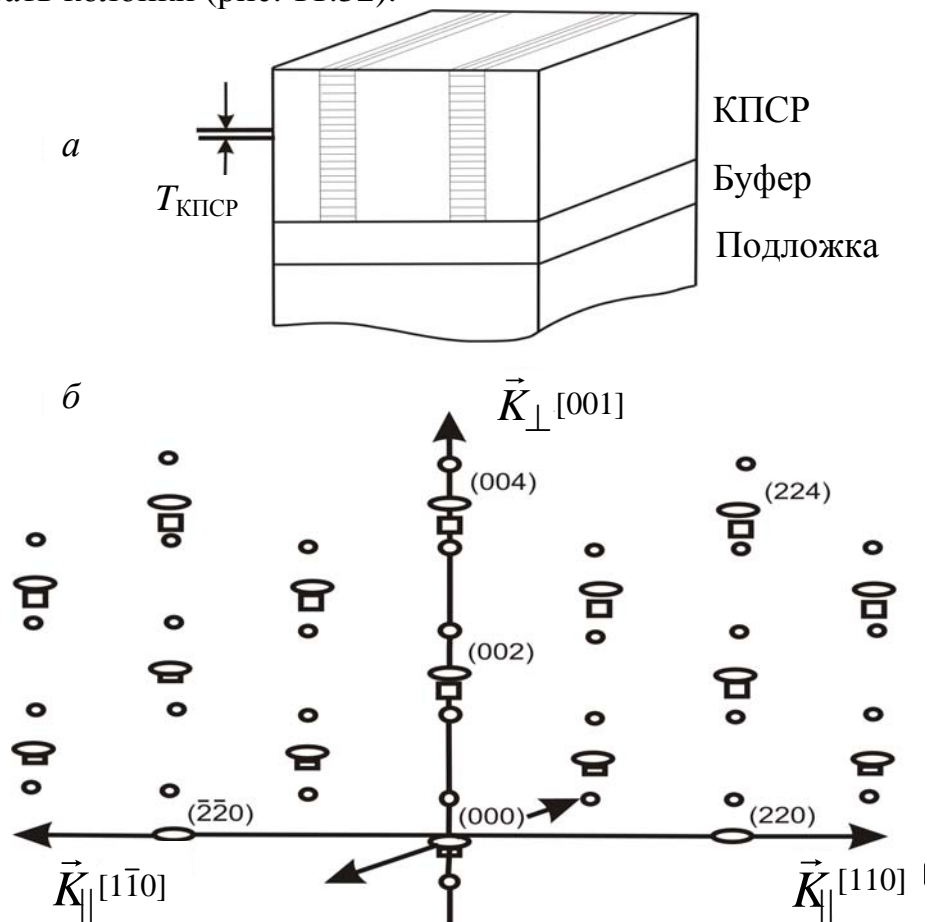


Рис. 11.32. Структура короткопериодной СР с латеральными модуляциями состава в реальном пространстве (а) и обратном пространстве (б)

Эта горизонтальная сверхструктура создает соответствующие горизонтальные сателлиты в обратном пространстве, которые могут быть проанализированы неразрушающим методом ВРРД.

Рассмотрим сначала латерально совершенный кристалл, включающий индивидуальные ламели, которые являются однородными; все структурные изменения происходят нормально к ламелям, например, идеально когерентная СР, выращенная на сингулярной подложке. Структура реального пространства по нормальному направлению к поверхности проявляется в обратном пространстве как соответствующее удлинение точек обратной решетки в расширенные, модулируемые стержни, ориентированные нормально к ламелям, формирующим кристалл. Обычные, одномерные КДО формируют карту распределения дифрагированной интенсивности, которые возникают вдоль этих стержней. Если ламели латерально совершенны, полная локальная структура обратного пространства известна из кривой качания.

Теперь, рассмотрим, что случается, когда мы нарушаем совершенство в плоскости слоистых кристаллов, вставляя дефекты (например дислокации, пустоты, или преципитаты), микроструктуры (например квантовую точку или проводные множества, поверхностную морфологию, или грубость интерфейса), или горизонтальные вариации состава (например отделенные фазы или атомно-упорядоченные домены). Вставка этих латеральных дефектов приводит к ламелям, которые являются теперь неоднородными по направлению в плоскости. Латеральная структура в плоскости в реальном пространстве соответствует латеральной структуре в обратном пространстве. Эта горизонтальная структура видна в рентгеновских дифракционных экспериментах как трехмерное распределение диффузного рассеяния рентгеновских лучей, в области обратного пространства, со стороны смежного с положениями стержней кристаллического усечения. Основная цель картографии обратного пространства состоит в том, чтобы определить детальную трехмерную структуру, которая возникает при наличии горизонтальных неоднородностей в кристалле. Надлежащая интерпретация карт обратного пространства (и кривых качания также) часто требует понимания их трехмерного характера.

Латеральная композиционная модуляция в короткопериодной СР – всего лишь один определенный тип латеральной неоднородности, которая может быть изучена, картографированием ее соответствующей структуры в обратном пространстве. Латеральная сверхструктура в реальном пространстве производит соответствующие латеральные сателлиты в каждой точке обратной решетки. Латеральное [110] разделение сателлитов, вызванных композиционной модуляцией $2\pi/p_{CM}$, где p_{CM} – период латеральной модуляции. Нормальная к поверхности КПСР модуляция частично пересекается с латеральной композиционной модуляцией. Таким образом, пятна КПСР ожидаются вдоль нормали [001] к поверхности. Влияние 2-D композиционной модуляции в реальном пространстве (1-D непосредственная модуляция по [110] и SPS модуляция по [001]) предоставляют 2-D сеть сателлитов в каждой точке обратной решетки.

В отличие от нашего схемного решения, фактическая интенсивность горизонтальных сателлитов изменяется для каждой точки обратной решетки, и задается Фурье-преобразованием модуляции состава в решетке реального пространства. Глас в [52] вычислил упругие деформации решетки эпитаксиального слоя, параметр решетки которого синусоидально модулирован вдоль поверхности подложки. Для слоев более толстых, чем длина волны модуляции, большая часть горизонтальной сверхрешетки тетрагонально напряжена подобно нормальной CP, но модуляции напряжения теперь поперечны к нормали к поверхности. Эта симметрия изменяет поле (001) плоскости, которая не имеет никакой модуляции их d -интервала: модулируемые смещения только происходят параллельно (001) плоскостям.

Следовательно, скалярное произведение $(\vec{K} \cdot \vec{r})$ рассеивающегося вектора \vec{K} и положения упруго искаженной ячейки решетки \vec{r} , не производит никаких связанных с напряжением вкладов в латеральную сателлитную интенсивность для (002) и (004) отражений. Сателлитная интенсивность зависит только от химических модуляций, которые выражены через структурный фактор ячейки. Сателлитные амплитуды пропорциональны амплитуде локальных фракций двойного сплава, умноженных на разность атомных факторов рассеяния. Слабые (002) сателлиты заметны, потому что сравнительно слабый квазизапрещенный (002) рефлекс дает слабый фон, позволяющий их обнаружение. Слабые (004) сателлиты также существуют; но они не наблюдаются, потому что самый сильный (004) рефлекс производит высокий рассеянный фон, который их затеняет. В отличие от этих симметричных отражений, асимметричные отражения представлены связанным с напряжением ненулевым фазовым сдвигом $(\vec{K} \cdot \vec{r})$, который связан с вкладом в интенсивность латеральных сателлитов, пропорциональным фундаментальному структурному фактору. Сателлит около узла (224), который не является квазизапрещенным отражением, является, таким образом, более сильным.

Возникновение латеральной упорядоченности в системе сателлитов может быть вызвано наличием модуляций состава по плоскости роста. Волнистости толщины в бислоях сверхрешетки являются основной причиной латеральных модуляций состава (ЛМС), стандартная модель которых, изображена на рис. 11.33,а [53]. Другая модель заключается в том, что самые толстые части слоев волнистости смещены друг относительно друга на определенную часть длины волны волнистости, заканчивающейся вертикальным периодом, измененным относительно исходной CP. Параллелограмм изображает ячейку единицы сверхструктуры, соответствующей и вертикальным и горизонтальным структурам. Наклон основы ячейки относительно (001) плоскости ведет к равному наклону вертикальных спутниковых пиков относительно [001] направления. Рис. 11.33,б изображает схематично соответствующие дифракционные пики в обратном пространстве для обеих моделей. Хотя волнистости толщины наблюдаются и в ТЭМ, это не обязательно подразумевает, что существует латеральная модуляция химического состава.

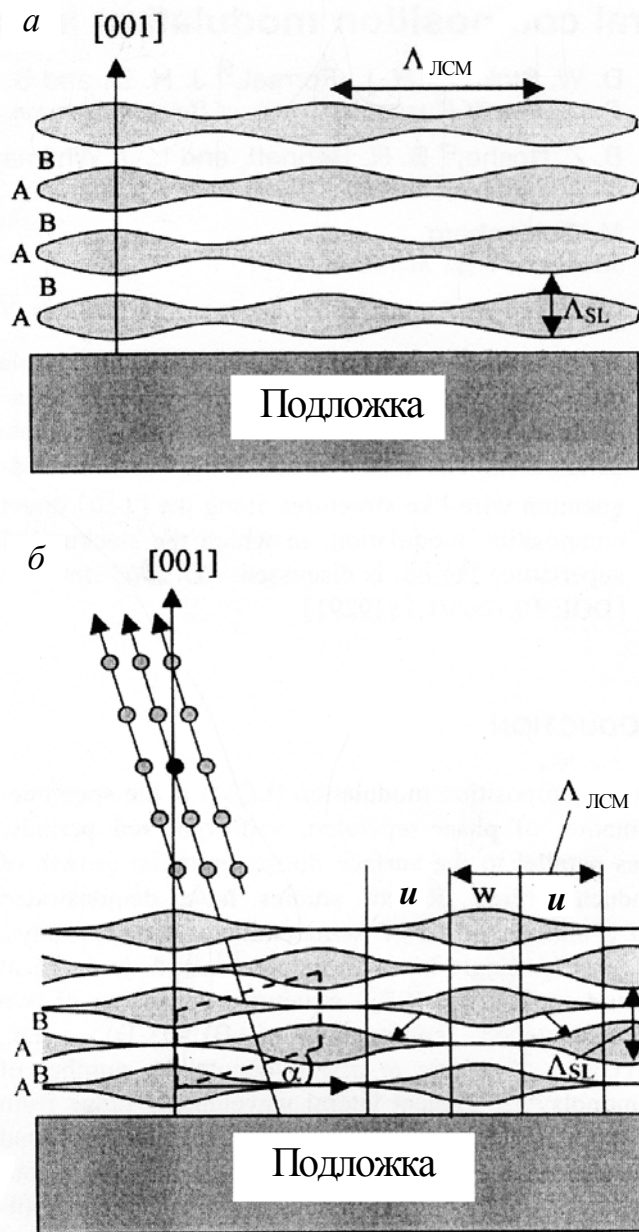


Рис. 11.33. Схематическое изображение структур с латеральными модуляциями состава: стандартная модель (а), со смещенными слоями (б). Точками обозначено положение вертикальных и горизонтальных спутников в обратном пространстве. Буквами u и w – обозначены, соответственно, области с избытком Ga и In

Для периодической горизонтальной структуры, то есть волнистостей толщины, и модуляции состава брэгговские дифракционные пики окружены набором латеральных спутников. Волнистости толщины приводят к латеральным спутникам, присутствующим в высоких порядках, вертикальных спутников, однако, только ЛМС будут окружать латеральные спутники нулевого порядка. На рис. 11.34 приведена одна из таких карт, снятая в симметричном 400 отражении для не отожденного образца.

Из рис. 11.34 следует, что дополнительные спутники на КДО 400 действительно соответствуют системе упорядоченных максимумов интенсивности. Причем это упорядочение наблюдается как в направлении роста q_z (вдоль вектора дифракции), так и в плоскости интерфейса (в направлениях q_x, q_y).

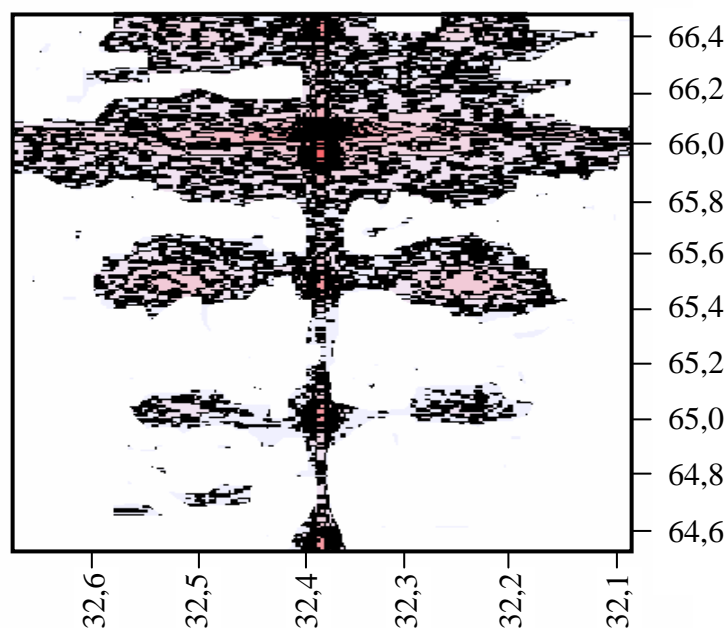


Рис. 11.34. Карта распределения интенсивности в обратном пространстве вокруг узла 004 для многослойной структуры InGaAs/GaAs с квантовыми точками

Период этих упорядоченных максимумов отличается в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Вдоль вектора дифракции он совпадает с периодом СР, и немного увеличивается в латеральном направлении. Еще более детальную информацию о структуре деформационных полей в этих СР можно получить из анализа асимметричных двумерных карт рассеяния рентгеновских лучей в обратном пространстве. На рис. 11.35 приведены сечения в плоскости рассеяния двумерных карт для асимметричного отражения 224 в исходном (а) и отожженном (б) образцах.

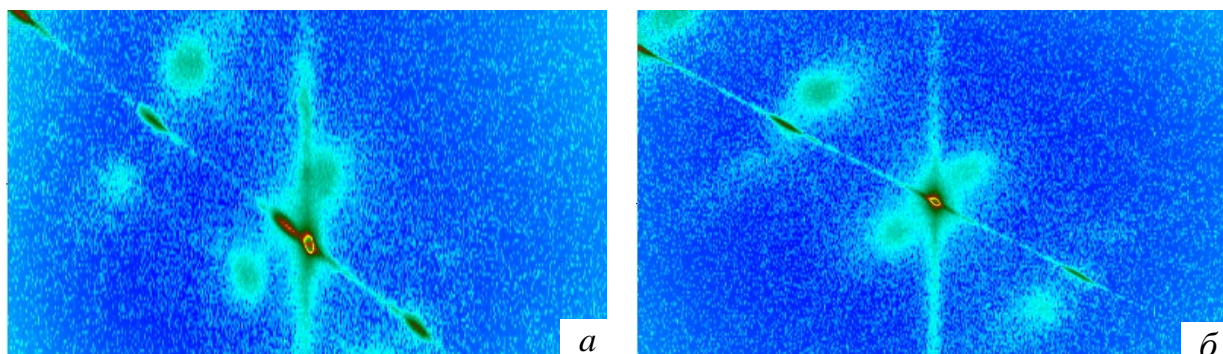


Рис. 11.35. Карта распределения интенсивности в обратном пространстве вокруг узла 224 для многослойной структуры InGaAs/GaAs с квантовыми точками в исходном (а) и отожженном образцах (б)

Как следует из рис. 11.35, существенной релаксации слоев системы не наблюдается ни на одном из образцов. Об этом свидетельствует расположение спутников основной СР, вытянутое вдоль направления роста, а также пиков от квантовых точек. Однако, отжиг, как следует из рисунка, привел к некоторому размытию максимумов от квантовых точек. Отличительной особенностью *RSM*-карт является наличие тяжелой вдоль направления q_x не только возле сверхструктурных пиков, но и у пиков подложки.

Измеряя смещение системы сателлитов от квантовых точек, относительно основной СР, получим усредненное изменение параметра решетки в этих точках. В результате появляется возможность оценить среднее содержание индия в квантовых точках до и после отжига. По полуширине пиков сателлитов от квантовых точек можно также оценить их размеры (рассеивающих областей) в двух направлениях. Описание процессов происходящих в результате отжига показывает незначительное уменьшение степени планарной корреляции в системе КТ. Слой, содержащий КТ, обладает конечными размерами во всех направлениях (латеральном и нормальном). При наличии периодичности в направлении роста появляется диффузное рассеяние вблизи сверхструктурных максимумов.

Изменения периода СР с КТ при отжиге происходит за счет внутренней диффузии некоторого количества индия из двух граничных слоев КТ в барьерный слой GaAs, а атомы Ga диффундируют в КТ. При этом происходит релаксация напряжений в слоях, приводящая к некоторому эффективному изменению параметров решеток. Это, по-видимому, и может дать некоторый эффект эффективного уменьшения периода сверхрешетки при последующих отжигах. При сканировании кристалла вдоль вектора дифракции наряду со сверхструктурными максимумами, вызванными наличием СР, образуется система сателлитов, отвечающих квантовым точкам. Наличие дальнего порядка в расположении этих максимумов на двухмерных картах в обратном пространстве свидетельствует о латеральном и нормальном упорядочении квантовых точек с разными периодами. Однако следует заметить, что фазовые корреляции в направлении вектора дифракции (обратной решетки) более сильны, чем в параллельном направлении.

При переходе от (004) к (224) рефлексу наблюдаются простые, но важные детали, которые подтверждают, что горизонтальные спутники являются результатом эффектов корреляции в латеральной плоскости. Поскольку обе обратной решетки указывают, на то, что наблюдаемые сателлиты остаются расположенными вдоль [110], кроме того, расстояние между сателлитами на обеих картах почти равно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей монографии изложены результаты работ, в которых при учете динамических эффектов многократности рассеяния созданы теоретические и экспериментальные основы нового поколения количественной неразрушающей диагностики характеристик дефектов нескольких разных типов, в том числе и наноразмерных, и других структурных параметров изделий нанотехнологий на основе монокристаллов со сложной гетерогенной структурой, в частности: нарушенными поверхностными слоями, макроскопически однородной упругой деформацией, гетерослоями и квантовыми ямами и периодической гетерослоистой структурой (сверхрешетками) с самоорганизованными решетками квантовых точек.

При этом рассмотрены результаты проведенного в последние годы существенного обобщения теоретических основ и методов диагностики четвертого поколения, которое обеспечило возможность их использования в том числе и для указанных сложных систем с наноразмерными и крупными, соизмеримыми с длиной экстинкции, дефектами и гетерослоями.

Описаны результаты создания основ и продемонстрированы новые уникальные возможности интегральной дифрактометрии наноразмерных и крупных дефектов как в идеальных, так и в упруго изогнутых монокристаллах, а также в монокристаллах с нарушенным поверхностным слоем.

В обсуждаемых в монографии работах экспериментально получено подтверждение, установлены физическая природа, качественные и количественные особенности нового явления – нарушения при динамической дифракции закона сохранения полной интегральной отражательной способности (ПИОС) монокристаллов с дефектами. В качестве количественной меры описания этого явления предложено рассматривать отклонение ПИОС реального кристалла, нормализованной на ПИОС идеального кристалла, от значения соответствующей величины в кинематической теории, равного единице. Установлена динамическая природа и уникальная чувствительность к характеристикам дефектов этого явления. Показано, что в случае Брэгга нормализованная ПИОС существенно (в несколько раз) превышает единицу даже для слабых искажений ($L < 0,01-0,1$, где L – показатель статического фактора Дебая-Валлера, характеризующий степень искажений) за счет экстинкционного динамического эффекта аномально большого роста вклада диффузной составляющей, преобладающего над уменьшением когерентной составляющей ПИОС с ростом концентрации и мощности дефектов. Этот аномальный вклад диффузной составляющей при динамическом рассеянии обусловлен существенным превышением как угловой ширины диффузного пика над шириной динамического брэгговского пика, так и объема кристалла, формирующего диффузное рассеяние, пропорционального длине абсорбции или при отсутствии поглощения длине экстинкции из-за диффузного рассеяния, над объемом кристалла, формирующим брэгговское рассеяние и определяемым длиной его экстинкции. При дифракции по Лауэ демонстрируется динамический эффект изменения

знака влияния дефектов на нормализованную ПИОС при переходе от приближения "толстого" ($\mu_0 t > 6$) к приближению "тонкого" ($\mu_0 t \leq 1$) кристаллов. Здесь μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения, t – толщина кристалла. В "толстом" кристалле с ростом концентрации и мощности дефектов наблюдается резкое уменьшение нормализованной ПИОС до десятых – сотых долей единицы за счет определяющей роли эффекта аномального прохождения, который практически зануляет вклад диффузной составляющей, но сам подавляется рассеянием на дефектах. В "тонком" кристалле, где влияние поглощения и проявление аномального прохождения слабы, как и в случае Брэгга наблюдается существенное превышение единицы в несколько раз, за счет аномально большого вклада диффузной составляющей.

Таким образом, как показывают приведенные в монографии результаты исследований, нормализованная ПИОС уникально чувствительна к дефектам в монокристаллах. Однако кинематическая теория принципиально предсказывает для всех этих случаев кристаллов с дефектами только одно постоянное значение нормализованной ПИОС, равное единице. То есть монография демонстрирует принципиальную неадекватность кинематической теории экспериментальным данным относительно толщинных, спектральных и других зависимостей ПИОС монокристаллов с дефектами разного типа, нормализованной на ПИОС идеального монокристалла. Таким образом, кинематическая теория не только количественно, но даже и качественно принципиально является неадекватной этим экспериментальным данным интегральной дифрактометрии. Это показывает ее непригодность для количественной диагностики дефектов в монокристаллах и изделиях из них также и дифференциальными методами дифрактометрии.

Обсуждаются работы, в которых экспериментально подтверждено предсказанное теоретически новое явление – изменение за счет эффектов многократности диффузного рассеяния рентгеновского излучения избирательности чувствительности ПИОС к дефектам разных типов при изменении условий дифракции.

На основе указанных явлений и эффектов созданы уникальные методы нового поколения, обеспечивающие принципиально новые функциональные возможности диагностики, в частности, впервые – количественную характеристику нескольких типов дефектов в кристаллах (сертификацию 21 века).

Для кристаллов с нарушенным поверхностным слоем (НПС) и дефектами установлено, что путем управления соотношениями между длинами пути луча в нарушенном поверхностном слое (НПС), экстинкции и абсорбции можно целенаправленно изменять избирательность чувствительности ПИОС в геометрии Брэгга к характеристикам НПС и дефектов, и, следовательно, разделять вклады в ПИОС от НПС и случайно распределенных в объеме даже наноразмерных дефектов (СРНД). На этой основе разработаны методы интегральной дифрактометрии количественных характеристик одновременно присутствующих НПС и СРНД в кристаллах.

Изложены результаты разработки новых высокоинформативных мето-

дов, применимых также и для диагностики наноразмерных дефектов, которые не могут наблюдаться традиционными неразрушающими методами, такими как рентгеновская топография, для которой такие мелкие (наноразмерные) дефекты оказываются за пределами чувствительности метода.

В частности, даны теоретические и экспериментальные основы нового уникального метода деформационных зависимостей (ДЗ) полной интегральной отражательной способности (ПИОС), который оказался эффективным и для диагностики количественных характеристик наноразмерных дефектов в кристаллах. Рассмотрена подробно разработанная совсем недавно (в 2004 году) адекватная теоретическая модель для описания влияния наноразмерных дефектов на ПИОС при наличии упругого изгиба, который увеличивает чувствительность ПИОС к дефектам. В этой модели впервые учтены зависимости от упругого изгиба экстинкционных факторов за счет рассеяния на дефектах когерентной и диффузной составляющих ПИОС, а также непосредственно интегральной диффузно дифрагированной интенсивности рассеяния. Приведены результаты экспериментального подтверждения этих зависимостей, а также описаны эмпирически установленные параметры и характерные особенности указанных зависимостей.

Обсуждается природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияний упругих деформаций (УД) и случайно распределенных в объеме динамически рассеивающего монокристалла наноразмерных дефектов (СРНД) на ПИОС при разных степенях асимметрии отражений, которая позволяет существенно увеличивать эффект влияния УД на ПИОС. Показано, что неаддитивность совместного влияния СРНД и УД на величину ПИОС Лауэ-рефлексов свидетельствует о наличии в исследуемом монокристалле дефектов больших размеров (т.е. не нано, а микро) достаточно в одном или в двух и тем более в трех измерениях, влияние которых на величину ПИОС остается соизмеримым с влиянием упругой деформации при любой силе изгиба и при любой степени асимметрии использованных Лауэ-рефлексов, благодаря существенной роли эффектов экстинкции из-за рассеяния на этих СРНД и относительному увеличению их влияния на ПИОС с ростом УД. Мелкие, т.е. наноразмерные, во всех трех измерениях, дефекты из-за слабого проявления для них указанных экстинкционных эффектов приводят к аддитивному влиянию СРНД и УД на ПИОС при любой степени асимметрии отражений. При этом в обоих случаях для малой степени асимметрии отражений ПИОС практически чувствительна только к СРНД, а для большой в случаях аддитивного влияния только к УД, а в случаях неаддитивного – как к УД, так и к СРНД. Доказана возможность разделения влияний на ПИОС СРНД и УД путем факторизации всех параметров ПИОС на множители, которые зависят только от СРНД или только от УД, в том числе и деформационных поправок к факторам экстинкции в деформационных зависимостях брэгговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с дефектами. При этом найдены феноменологически в явном виде зависимости указанных поправок от характеристик СРНД. Это впервые обеспечило уникальную возмож-

ность адекватного количественного определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС.

Рассмотрены точные аналитические решения задач рентгеновской кристаллооптики для структур с переменным градиентом деформации.

Как известно, ряд реальных кристаллических структур с той или иной степенью точности описывается точно решаемыми моделями: идеальный кристалл, кристалл с постоянным градиентом деформации (например изогнутый кристалл или эпитаксиальная пленка твердого раствора с линейным изменением концентрации – варизонная структура), система пленка-подложка с переходным слоем на границе раздела, некоторые модели сверхрешеток (СР).

Описаны результаты работ, в которых предложен метод анализа кривых дифракционного отражения (КДО) от таких кристаллических структур, основанный на отыскании точных аналитических решений для модельных задач дифракции.

Качественные аналитические методы в теории динамического рентгеновского рассеяния, заключающиеся в качественном исследовании решений дифференциальных уравнений, осуществляемом с позиций математической теории устойчивости, используются для выяснения влияния толщин деформированных слоев, градиентов и амплитуды деформации на характеристики КДО. Они могут быть использованы для широкого класса моделируемых профилей деформации, включающих не только СР, но и структуры с монотонными произвольными градиентами деформации. Достижимая степень общности качественного анализа позволяет выявить ряд закономерностей дифракционной картины при минимальной конкретизации характера распределения деформации по глубине кристалла. Основные закономерности КДО в кристалле с заданным законом изменения деформации по глубине могут быть получены без решения уравнений Такаги, на основании только параметрических соотношений, которые задаются угловой отстройкой от точного угла Брэгга и структурными характеристиками кристалла и деформационного профиля. Такой подход остается эффективным, даже при отсутствии полной информации о деформационном профиле (как чаще всего и бывает на практике), а наличии только некоторых общих сведений (например, монотонного уменьшения деформации по глубине или дополнительной периодичности).

Взаимно дополняющее использование качественного и аналитического подходов для анализа закономерностей процессов когерентного рассеяния рентгеновских волн в модулированных кристаллических решетках позволило для конкретного класса кристаллических структур с переменным градиентом деформации в случае динамической рентгеновской дифракции по Брэггу получить новые точные аналитические решения рентгеновской динамической дифракции в кристаллах с переменным градиентом деформации. Описано рентгенодифрактометрическое исследование двухслойной гетероструктуры с переходным слоем с учетом изменения электронной плотности.

В монографии изложены результаты изучения возможности исследова-

ния методами рентгеновской дифракции в сочетании с атомно-силовой микроскопией структурных изменений в поверхностных слоях кремния, подвергнутого ионной имплантации, химическому травлению, а также их совместному действию, проявляющемуся в образовании многочисленных разупорядоченных областей, в которых концентрируются значительные плотности точечных дефектов.

В косонесимметричном случае дифракции для определенных плоскостей отражения, поворотом кристалла вокруг нормали к входной поверхности можно постепенно уменьшать экстинкционную длину более чем на два порядка. По величине она может стать меньше или соизмеримой с эффективной толщиной поврежденного поверхностного слоя. Для моделирования рентгеновской дифракции в кристаллах с поврежденными поверхностными слоями используется кинематическая и динамическая теории.

Путем функционального задания профиля деформаций и нарушений поверхностного слоя в рамках кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей рассчитывались кривые качания, удовлетворительно соответствующие экспериментальным. Функциональные зависимости профиля деформаций и нарушений поверхностного слоя задавались в виде набора экспоненциальных и синусоидальных пиков разной высоты и ширины, размещенных на определенных глубинах. При этом ордината каждой точки кривой качания является функцией всего профиля деформации, который в первом приближении определяется путем решения обратной задачи рентгеновской дифракции по экспериментальной кривой качания.

Анализ кривых дифракционного отражения рентгеновских лучей показывает, что отмеченные выше воздействия на поверхность образца приводят к изменению формы кривой качания – особенно ее "хвостов" по отношению к исходной части образца. Имеет место также незначительное увеличение полуширины кривой качания и максимального значения интенсивности. Вид кривой качания свидетельствует о наличии разных по характеру, протяженности и степени повреждения приповерхностных слоев в отмеченных частях образца.

По данным атомно-силовой микроскопии минимальные размеры сечений кремниевых нитей и их изолированных участков (кластеров) после химического травления составляют несколько нанометров. Поэтому, повреждения поверхности в целом незначительны как по изменению межплоскостного расстояния так и по протяженности. Это в целом подтверждается "поведением хвостов" экспериментальных кривых качания.

Основной вклад в прирост диффузной составляющей рассеяния на "хвостах" кривой качания вносит, по-видимому, изменение плотности приповерхностного слоя (степень пористости ~40%) и рельеф поверхности.

Методами рентгеновской дифрактометрии выявлено наличие значительных знакопеременных деформаций в направлении, перпендикулярном поверхности. Установлены характерные величины (сотни нм) области протяженности деформаций по толщине и глубин залегания максимумов отри-

цательных деформаций.

Описаны комплексные рентгенодифракционные исследования влияния продолжительности температурного отжига на структурные изменения поверхностных слоев кремния имплантированных ионами фосфора.

Представлено теоретическое моделирование распределения напряжений, которые возникают в переходных слоях границ раздела при формировании имплантацией ионов фосфора скрытого под поверхностью тонкого аморфизированного слоя. Для этого использованы возможности косонесимметричной схемы дифракции на отражение - неразрушающего, селективного послойного анализа структурных изменений в поверхностных слоях и на границах раздела. Такой подход позволяет из серии кривых отражения от различных по толщине слоев определить распределения деформаций в тонких ($\sim 0,01$ мкм и меньших) поверхностных слоях кристаллов. Функциональное задание профилей на первом этапе значительно повышает точность воспроизведения реальных профилей деформаций и отклонений атомных плоскостей в приповерхностных слоях.

В монографии обобщены результаты экспериментальных исследований ряда эпитаксиальных композиций, освещены методические аспекты использования рентгеновской дифрактометрии для определения состава и толщины отдельных слоев гетероструктур, последовательности их расположения, резкости гетерограниц и деформации слоев, а также параметров дислокаций в слоях.

Показано, что использование дифференциальной дифрактометрии и комбинации нескольких геометрий дифракции с последующим анализом как полуширин, так и формы дифракционных пиков позволяет определять типы дислокационных ансамблей, оценивать плотности дислокаций и судить о регулярности их распределения в эпитаксиальных слоях.

С целью разработки теоретических и экспериментальных основ диагностики структуры наноразмерных многослойных систем с квантовыми ямами и процессов взаимодиффузии атомов компонентов между слоями с использованием высокоразрешающей рентгеновской двухкристальной дифрактометрии, исследованы многослойные системы, содержащие квантовые ямы типа $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$. Из анализа кривых дифракционного отражения определено содержание азота в квантовых ямах (КЯ) и буферных слоях. Показано, что значительное перемешивание In–Ga на границе раздела происходит еще в процессе роста КЯ. В результате взаимодиффузии атомов In в барьерный слой GaAs и атомов Ga – в КЯ размывается граница раздела на глубину $\sim 1,2$ нм. Установлено, что при незначительных концентрациях азота в КЯ ($N < 3\%$) и в буферных слоях ($N < 1\%$) многослойные системы имеют достаточно совершенную кристаллическую структуру. При этом многослойные системы с деформационно-компенсационными слоями GaAs более совершенны.

Высокоразрешающая двухкристальная дифрактометрия многослойных наноструктур с квантовыми ямами впервые выполнена с учетом диффузной составляющей во всех слоях, которая обеспечивает полное совпадение расчета в

рамках динамической теории с экспериментом. Это впервые позволило осуществить количественную диагностику дефектов в каждом слое такой гетероструктуры.

Изложены также результаты работ, в которых методами двух- и трехкристальной дифрактометрии с применением новых теоретических моделей четвертого поколения проведена количественная диагностика характеристик многослойных периодических структур (сверхрешеток) с самоорганизованными решетками квантовых точек и продемонстрирована высокая информативность этих новых методов в исследованиях таких уникальных наноструктур.

Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку УНТЦ (проект № 3085), ФФИУ (грант № 02.07/ 00008 Министерства образования и науки Украины) и РФФИ (грант № 05-02-16137).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Список литературы к главе 1

1. Thomas J.E., Baldwin T.O., and Dederichs P.H. Diffuse X-Ray Scattering in Fast-Neutron-Irradiated Copper Crystals. // *Phys.Rev. B* –1971. – Vol.3.- P.1167-1173.
2. Dederichs P.H. Diffuse scattering from defect clusters near Bragg reflections // *Phys.Rev.B.*-1971.-Vol.4.- P. 1041-1050.
3. Larson B.C., Young F.W. (Jr.). A Comparison of Diffuse Scattering by Defects Measured in Anomalous Transmission and Near Bragg Reflections. // *Z. Naturforsch.* – 1973. – Vol.28a. – P.626-632.
4. Larson B.C. X-ray Studies of Defect Clusters in Copper. // *J. Appl. Cryst.* – 1975.-Vol.8. –P.150-160.
5. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. - Киев: Наук. думка, 1983.- 408с.
6. Trinkaus H. Der reflexferne Teil der Streuung von Rontgenstrahlen an Kristallen mit stark verzerrenden Defecten. // *Z. Angew. Phys.*-1971.-Vol.31.- No.5-6.-P.229-235.
7. Trinkaus H. On the investigation of small dislocation loops in cubic crystals by diffuse X-ray scattering. // *Phys. Status Solidi. B.*-1972.-Vol.51.-No.1. –P.307-319;.
8. Dederichs P.H. The theory of X-ray scattering and its application to the study of point defects and their clusters. // *J. Phys. (London) F: Metal.Phys.*-1973.- Vol.3, No.2. – P.471-496.
9. Larson B.C., Schmatz W.G. Huang diffuse scattering from dislocation loops and cobalt precipitates in copper. // *Phys. Rev,B.* –1974.-Vol.10, No.6.-P.2307-2314. Larson B.C.and Schmatz W., *phys.stat.sol. (b)* 99, 267 (1980).
10. Ehrhart P., Trikaus H., Larson B.C. Diffuse scattering from dislocation loops. // *Phys. Rev.B.* – 1982. – Vol.25, No.2. –P.834-848.
11. Larson B.C., Young F.W. (Jr.).Effect of temperature on irradiation-induced dislocation loops in copper. // *J.Appl.Phys.* –1977.-Vol.48, No.3.-P.880-886.
12. Narayan J., Larson B.C. Defect clusters and annealing in self-ion-irradiated nickel. // *J.Appl.Phys.* –1977.-Vol.48, No.11.-P.4536-4539.
13. Larson B.C.,Young F.W.X-ray diffuse scattering study of irradiation induced dislocation loops in copper. // *Phys.StatusSolidi.A.*-1987.-Vol.104,No.1.– P.273-286.
14. Morozov A.N., Bublik V.T. X-ray diffuse scattering identification of interstitial atom aggregates in Si-doped GaAs single crystals. // *J.Cryst.Growth.*–1989.- Vol.97. –P.475-482.
15. Charniy L.A., Morozov A.N., Bublik V.T.,Scherbachev K.D.,Stepantsova I.V., Kaganer V.M. Study of microdefects and their distribution in dislocation-free Si-doped HB GaAs by X-ray diffuse scattering on triple-crystal diffractometer. // *J.Cryst.Growth.* – 1992.- Vol.118. –P.163-175.

16. Franzosi P. Study of microdefects in GaAs by X-ray diffuse scattering. // J.Cryst.Growth. – 1993.- Vol.126. –P.85-90.
17. Matvi R.J., Melloch M.R., Zhang K., Miller D.L. Structural characterization of GaAs grown at low temperatures by molecular beam epitaxy. // J. Phys. (London) D: Appl.Phys.-1995.-Vol.28, No.4A. – P.A139-A143.
18. Karsten K., Ehrhart P. Frenkel pairs in low-temperature electron-irradiated InP: X-ray diffraction. // Phys. Rev.B. – 1995. – Vol.51, No.16. –P.10508-10519.
19. Pillukat A., Karsten K., Ehrhart P. Point defects and their reactions in e^- - irradiated GaAs investigated by X-ray diffraction methods. // Phys. Rev.B. – 1996. – Vol.53, No.12. –P.7823-7835.
20. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Осиновский М.Е. Динамические эффекты при диффузном рассеянии рентгеновских лучей и электронов в кристаллах, содержащих дефекты кулоновского типа. // Металлофизика.- 1983.–Т.5,№1.– С.3 –15.
21. Holy V. Dynamical X-ray diffraction from crystals with precipitates. I. Theory of Bragg-case. // Acta Cryst.A.- 1984.- Vol.40, No.6.- P. 675 -679.
22. Дмитриенко В.Е., Каганер В.М. Рассеяние рентгеновских блоховских волн в слабо искаженных кристаллах. // Металлофизика, - 1987.– Т.9, №1. – С.71 –76.
23. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Осиновский М.Е. Динамическая теория диффузного рассеяния в кристаллах с дефектами кулоновского типа (лауэ-дифракция). // Металлофизика, -1983. – Т.5, №5. – С.3 –11.
24. Каганер В.М., Инденбом В.Л. Анализ диффузного рассеяния при наличии эффектов динамической дифракции.//Металлофизика.-1986.–Т.8,№1.– С.25– 34.
25. Kochelab V.V., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Osinovskii M.E. The thickness dependence of the X-ray diffuse scattering intensity for crystals with microdefects at Laue-case diffraction. // Phys. Status Solidi.A. -1988.-Vol.108.- No.1.–P.67-79.
26. Бушуев 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.
27. Ратников В.В., Ковьев Э.К., Сорокин Л.М. Распределение диффузного рассеяния вблизи брэгговских отражений и его особенности при дифракции рентгеновских лучей монокристаллами германия с примесью мышьяка. //ФТТ.-1984.-Т.26, №7. –С.2155-2158.
28. Ратников В.В., Сорокин Л.М. Экспериментальное наблюдение динамических эффектов при диффузном рассеянии рентгеновских лучей. //ФТТ.- 1984.-Т.26, №11. –С.3445-3449.
29. Ратников В.В., Кютт Р.Н. Измерение углового распределения диффузного рассеяния рентгеновских лучей на трехкристальном спектрометре в случае Лауэ-дифракции. // ЖТФ.-1985.-Т.55, №2.-С.391-393.
30. Кютт Р.Н., Ратников В.В. Наблюдение динамических эффектов в диффузном рассеянии при лауэ-дифракции рентгеновских лучей. // Металлофи-

- зика.-1985.-Т.7, №1.-С.36-41.
31. Dederichs P.H. Dynamical scattering theory for crystals with point defects. // *phys.stat.sol.*-1967.-Vol.23, No.1.-P.377-386.
 32. Dederichs P.H. Effect of defect clustering on anomalous X-ray transmission.// *Phys. Rev. B –Solid State.*-1970.-Vol.1, No.4. – P. 1306-1317.
 33. Dederichs P.H. Dynamical diffraction theory by optical potential methods. // *Solid State Phys.* – 1972. - Vol.27. – P.135-236.
 34. Kohler R., Mohling W., and Paseman M. Microdefects in silicon different from swirls. // *phys.stat.sol. (a).*-1979.- Vol.53.-P.509-517.
 35. Chikaura Y., Imai M., Suzuki Y., Yatsurugi Y. Synchrotron X-radiation plane-wave topography for imaging microdefects in thinned silicon crystals. // *J. Cryst. Growth.* -1990.-Vol.103. – P.141-149.
 36. Lefeld-Sosnowska M., Gronkowski J., and Kovalski G. A study of defects generated in Czochralski-grown Si during two-step annealing. // *J.Phys.D: Appl.Phys.* –1995. –Vol.28, No.4A.-P. A42-A46.
 37. Holy V. and Kubena J. On the integrated intensity of X-ray diffraction in crystals with randomly distributed defects.//*phys.stat.sol.(b).*-1989.-Vol.151, No.1.- P.23-28.
 38. Holy V., Kubena J. X-ray double and triple crystal diffractometry of silicon crystals with small defects. // *Phys. Status Solidi.B.* -1992.-Vol.170, No.1. – P.9-25.
 39. Holy V. and Gabrielyan K.T. Dyson and Bethe-Salpeter equations for dynamical X-ray diffraction in crystals with randomly placed defects // *phys.stat.sol. (b)*-1987.-Vol.140.- No.1.-P.39-50.
 40. Kato N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. 1.General formulation.// *Acta Crystallogr.*- 1980.- Vol. A 36, No.5. – P. 763-769.
 41. Kato N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. II.Intensity distribution and integrated intensity in Laue cases.//*Acta Crystallogr.*-1980.-Vol.A36, No.5. – P. 770-778.
 42. Al Haddad M and Becker P. On the statistical dynamical theory of diffraction. Application to silicon. // *Acta Crystallogr. A.* – 1988.- Vol.44, No.3.-P.262-270.
 43. Becker P. and Al Haddad M. Concerning order parameters in the statistical dynamical theory of diffraction. // *Acta Crystallogr.* –1989. - Vol. A 45.-P.333-337.
 44. Becker P. and Al Haddad M. Diffraction by a randomly distorted crystal. General theory. // *Acta Crystallogr.* –1992.- Vol. A 48.-P.121-134.
 45. Поляков А.М., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в неупорядоченных кристаллах. // *ЖЭТФ.*-1991. – Т.99, №2. –С.589-609.
 46. Guigay J.P. and Chukhovskii F.N. Reformulation of the dynamical theory of coherent wave propagation by randomly distorted crystals. // *Acta Crystallogr.*- 1992.- Vol. A48.- P. 819 – 841.
 47. Guigay J.P. and Chukhovskii F.N. Reformulation of the statistical theory of dy-

- namical diffraction in the case $E=0$ // *Acta Crystallogr.* - 1995. - Vol. A51. – P. 288 - 294.
48. Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion. // *Acta Crystallogr.*-1962.-Vol.15, No.12.-P. 1131-1312.
 49. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal // *J.Phys.Soc.Jpn.* –1969.-Vol.26, No.5. – P.1239-1253.
 50. Taupin D. Theorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux deformes. // *Bull.Soc.Franc.Miner.Cryst.*- 1964.-Vol.87, No.2.- P. 469-511.
 51. Kato N. A foundation for the statistical dynamical theory of diffraction. // *Acta Crystallogr.*- 1991.- Vol.A47. – P.1-11.
 52. Молодкин В.Б., Тихонова Е.А. Влияние диффузного рассеяния на эффект Бормана. // *ФММ.*-1967.-Т.24, №3. – С.385-394.
 53. Тихонова Е.А. Основные уравнения динамической теории рассеяния рентгеновских лучей для несовершенных кристаллов // *ФТТ.* – 1967.- Т.9, №2. – С.516-525.
 54. Молодкин В.Б. Классификация дефектов кристалла по их влиянию на дифракцию излучений в рамках динамической теории рассеяния. I. Когерентное рассеяние (обзор) // *Металлофизика.*-1980.-Т.2, №1.-С.3-24; II. Динамическая теория диффузного рассеяния кристаллами с хаотически распределенными дефектами // *Металлофизика.*-1981.-Т.3, №4.-С.27-38.
 55. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. –Киев: Наук. Думка, 1988.- 200с.
 56. Ewald P.P. Zur Begrundung der Kristalloptik. Teil II. Theorie der Reflektion und Brechung // *Ann.Phys.* -1916.- Bd.49, F.4.-S.117-143.
 57. Bethe H., *Ann.Phys.* 87, 55 (1928).
 58. Laue M, *Rontgenstrahlinterferezen*, Akademische Verlagsges., Leipzig 1948.- 410s.
 59. Kohler M., *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wissensch. Math. Physik. Kl.* 334 (1935).
 60. Moliere G., *Ann.Phys.* 35, 272 (1939); *Ann.Phys.* 35, 297 (1939); *Ann.Phys.* 36, 265 (1939).
 61. Afanasev A.M. and Kagan Yu. The role of lattice vibration in dynamical theory of X-rays. // *Acta Crystallogr.* – 1968. – Vol. A 24, No.2.-P.163-170.
 62. James R.W. The dynamical theory of X-ray diffraction. // *Solid State Phys.*- 1963.-Vol.15.-P.55-222.
 63. Batterman B.W. and Cole H. Dynamical diffraction of X-rays by perfect crystals // *Rev.Mod.Phys.*-1964.- 36, 681-717.
 64. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. –М.: Наука – 1982. – с.392.
 65. Kostyuk A.N., Molodkin V.B., and Olikhovskii S.I. Dynamical theory of X-ray diffraction by elastically bent crystals with microdefects. I. Basic equation // *phys.stat.sol. (b)*- 1993.-Vol.178, No.1.- P.45-54.
 66. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., and Kostyuk A.N. Dynamical theory of X-ray diffraction by elastically bent crystals with microdefects. II. Diffraction inten-

- sity // *phys.stat.sol. (b)*.-1994.-Vol.183, No.1.- P.59-72.
67. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Len E.G., and Pervak E.V. Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects I.Generalized Dynamical Theory, *phys.stat.sol. (b)* 227, No2, 429-447 (2001).
 68. Рябошапка К.П. Физика рассеяния рентгеновских лучей деформированными кристаллами. – Киев: Наук. Думка, 1993. –316с.
 69. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Osinovskii M.E., Gureev A.N., Datsenko L.I., Nizkova A.I., and Zhuravlev B.F. The integrated intensities of the laue-diffracted X-rays for monocrystals containing macroscopically homogeneously distributed defects// *Phys.Status solidi.A.*, 87, №2: 597-608 (1985).
 70. Nemoshkalenko V.V., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kovalchuk M.V., Litvinov Yu.M., Kislovskii E.N., Nizkova A.I. Energy dispersive analysis of total integrated intensity of diffracted synchrotron radiation in monocrystals with defects // *Nucl.Instrum. and Meth. in Physics. A.* -1991. -308. -P.294-296.
 71. Барьяхтар В.Г., Гаврилова Е.Н., Молодкин В.Б., Олиховский С.И. Брэгг-дифракция рентгеновских лучей в реальных поглощающих монокристаллах конечной толщины. 2. Диффузная составляющая интегральной отражательной способности и коэффициенты эффективного поглощения // *Металлофизика* -1992. -14, N11, -С.68-79.
 72. Кочелаб В.В., Молодкин В.Б., Олиховский С.И. Интегральная интенсивность диффузного рассеяния в кристаллах с микродефектами при аномальном прохождении рентгеновских лучей // *Металлофизика*. – 1991. – 13, №6. –С.84-91.
 73. Воронков С.Н., Чуховский Ф.Н. Исследование реальных кристаллов рентгенодифракционным методом наклона. Обратная задача. // *Кристаллография*. –1981.-36, №4. – С.1041-1056.
 74. Iida A. Applications of X-ray triple crystal diffractometry to studies on the diffusion-induced defects in silicon crystals // *Phys.status solidi.*-1979.-54, N2,- P.701-706.
 75. Немошкаленко В.В., Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И., Шпак А.П., Когут М.Т., Школьников О.Л. Новые принципы и возможности однокристалльной рентгеновской дифрактометрии монокристаллов методом полной интегральной интенсивности // *Металлофизика* -1992. -14, N8,-С.79-86.
 76. Weber E.R., *Appl. Phys. A* 30, 1 (1993).
 77. Solberg J.K. The crystal structure of η -Cu₃Si precipitates in silicon // *Acta Crystall.A* 1978 34, 684 -698.
 78. Seibt M. and Schroter W., *Solid State Phenom.* 19&20 283 (1991).
 79. Nes E. The mechanism of repeated precipitation on dislocations // *Acta Metall.*- 1974.-Vol. 22.-No.1-p.81-87.
 80. Solberg J.K.and Nes E., *J.Mater. Sci.* 13, 2233 (1978).
 81. Livingston F.M., Messoloras S., Newman R. C., Pike B. C., Stewart R.J., Binns W.J. An infrared and neutron scattering analysis of the precipitation of oxygen in dislocation-free silicon // *J. Phys. (London) C: Solid State Phys.*-

- 1984.- 17.- No34. –P.6253-6276.
82. Bar'yakhtar V.G., Kovalchuk M.V., Litvinov Yu.M., Nemoshkalenko V.V., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Nizkova A.I. Total integrated intensity of Bragg-diffracted synchrotron radiation for crystals with defects //Nucl. Instrum. And Meth. In Physics. A. –1991.- 308: 291-293.
83. Гаврилова Е.Н., Кисловский Е.Н., Молодкин В.Б., Олиховский С.И. Брэгг-дифракция рентгеновских лучей в реальных поглощающих монокристаллах конечной толщины. // Металлофизика – 1992. –Т.14.- № 3.-С.70-78.
84. Барьяхтар В.Г., Немошкаленко В.В., Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Гаврилова Е.Н., Кисловский Е.Н., Кочелаб В.В., Низкова А.И. Брэгг-дифракция рентгеновских лучей в реальных поглощающих монокристаллах конечной толщины.3.Полная интегральная отражательная способность // Металлофизика, 1993.-15, №12.-с.18-26.
85. Nemoshkalenko V.V., Molodkin V.B., Kislovskii E.N., Kogut M.T., Nizkova A.I.,Gavrilova E.N., Olikhovskii S.I. and Sul'zhenko O.V. Energy and azimuth dependences of the integrated reflection power of real single crystals in the case of X-ray bragg diffraction// Металлофизика и новейшие технологии – 1994 - 16, №2.-С.48-51.
86. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др. Металлофизика и новейшие технологии, 2002, 24, №5, с.585-596.
87. Обработка полупроводниковых материалов // под ред. Новикова Н.В., Бертольди В. - Киев, Наукова Думка, 1982.-254с.

Список литературы к главе 2

1. Livingston F.M., Messoloras S., Newman R. C., Pike B. C., Stewart R.J., Binns W.J. An infrared and neutron scattering analysis of the precipitation of oxygen in dislocation-free silicon // J. Phys. (London) C: Solid State Phys.- 1984.- 17.- No34. -P.6253-6276.
2. Bourret A. Inst.Phys. Conf. Ser.– 1987.- No.87, Section 1. - P.39 - 48.
3. Bergholz W., Binns M.J., Booker J.R., Hutchison J.C., Kinder S.H., Messoloras S., Newman R.C., Stewart R.J. and Wilkes J.G. A study of oxygen precipitation in silicon using high-resolution transmission electron microscopy, small-angle neutron scattering and infrared absorption // Philos. Mag.– 1989.- Vol.B59. –No.5.- P.499 - 522.
4. Patel J.R. and Authier A. X-ray topography of defects produced after heat treatment of dislocation-free silicon containing oxygen // J.Appl.Phys. – 1975.- Vol.46.-P.118-125.
5. Partanen J. And Tuomi T. J. X-ray Sci. Technol.. – 1990.- Vol.2.-P.165-171.
6. Patel J.R. and Batterman B.W. Impurity clustering effects on the anomalous transmission of X-rays in silicon.// J.Appl.Phys. – 1963.- Vol.34.-P.2716-2721.
7. Курбаков А.И., Рубинова Э.Э., Соболев Н.А., Трунов В.А., Шеек Е.И. Исследование кластеров точечных дефектов в монокристаллах кремния с помощью дифракции γ -квантов // Кристаллография.- 1986.-Т.31.-№5.-

C.979-985.

8. Magerl A., Schneider J.R. and Zulehner W. A neutron backscattering study of lattice deformations in silicon due to SiO₂ precipitation // J.Appl.Phys. – 1990.- Vol.67.- No1.-P.533-539.
9. Patel J.R. X-ray diffuse scattering from silicon containing oxygen clusters // J.Appl.Cryst. – 1975.- Vol.8.-P.186-191.
10. Dietrich B. and Zaumseil P. Gettering and defect engineering in the semiconductor technology, Garzau, 8 –18 October 1985, edited by H.Richter. – P. 161-167.
11. Stoyanoff V., Pimentel C.A., Bulla D.A., Castro W.E.Jr.,Hahn S. and Ponce F.A. Semiconductor Silicon 1986, edited by H.R. Huff, T. Abe and B.Kolbesen – P.800-812.
12. Schneider J.R., Nagasawa H., Liss K.D., Magerl A. and Zulehner W. –1991.- HASYLAB annual report 1990. -P.394-395. HASYLAB at DESY, Hamburg, Germany.
13. Messoloras S., Schneider J.R., Stewart R.J. and Zulehner W. Anisotropic small-angle neutron scattering from oxide precipitates in silicon single crystals // Semicond. Sci. Technol. – 1989.- Vol.4.-P.340-344.
14. Gupta S., Messoloras S., Schneider J.R., Stewart R.J. and Zulehner W. Orientation of oxygen precipitates in silicon // Semicond. Sci. Technol. – 1990.- Vol.5.-P.783-784.
15. Kato N., Lang A.R. A study of pendellosung fringes in X-ray diffraction //Acta Cryst. – 1959.- Vol.A12.No.4 -P.787-794.
16. Sippel D., Kleinstuck K. and Schulze G.E.R. Phys.Lett. – 1965.- Vol.14.- P.174-175.
17. Lawrence J.L., Mathieson A. Mcl. Variable-path Laue measurements and extinction. // Acta Cryst. – 1977.- Vol.A33.-P.288-293.
18. Somenkov V.A., Shilstein S.Sh., Belova N.E. and Utemisov K. Observation of dynamical oscillations for neutron scattering by Ge crystals using the inclination method // Solid State Commun. – 1978.- Vol.25.-P.593-595.
19. Olekhovich N.M., Karpey A.L., Olekhovich A.I. and Puzenkova L.D. Effect of dislocation density on integrated intensity by silicon crystals in Laue geometry. // Acta Cryst. – 1983.- Vol.A39.-P.116-122.
20. Kato N. Spherical wave theory of dynamical X-ray diffraction for absorbing perfect crystals. 1. The crystal wave fields.-J.Appl.Phys. – 1968.- Vol.39.- No.5.-P.2225-2230; II Integrated reflection power. –P.2231-2237.
21. Kato N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. 1.General formulation.// Acta Crystallogr.- 1980.- Vol. A **36**, No.5. – P. 763-769.
22. Kato N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. II.Intensity distribution and integrated intensity in Laue cases.//Acta Crystallogr.-1980.-Vol.A**36**, No.5. – P. 770-778.
23. Olekhovich N.M. and Karpey A.L. Dynamical effects of X-ray scattering in Laue geometry for Si crystals with structure defects // Phys.Status Solidi A– 1984.- Vol.82.-P.365-371.

24. Воронков С.Н., Пискунов Д.И., Чуховский Ф.Н., Максимов С.К. Экспериментальное исследование методом наклона особенностей динамического рассеяния при лауэвском отражении рентгеновских лучей от монокристаллов с микродефектами // ЖЭТФ, – 1987.- Т.92.-вып.3-С1099-1108.
25. Воронков С.Н., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И. Исследование совершенства структуры кристаллов с однородно распределенными дефектами. // ФТТ – 1985.- Т.27,№6.-С.1911-1912.
26. Shull G.G. Observation of pendellosung fringe structure in neutron diffraction.// Phys.Rev.Lett. – 1968.- Vol.21.-P.1585-1589.
27. Shull G.G. and Oberteuffer J.A. Spherical-wave neutron propagation and pendellosung fringe structure in silicon. // Phys.Rev.Lett. – 1972.- Vol.29.- No.13.-P.871-874.
28. Takama T., Harima H., and Sato S.Acta Cryst. – 1990.- Vol. A46.- P.412, 783-784.
29. Schneider J.R. and Bouchard R. Experimental tests of the dynamical theory. Acta Cryst. – 1992.- Vol.A48,№6.-P.804-819.
30. Becker P. and Al Haddad M. Diffraction by a randomly distorted crystal. I. The case of short-range order. // Acta Cryst. – 1990.- Vol.A46.-P.123-129.
31. Молодкин В.Б., Тихонова Е.А. Влияние диффузного рассеяния на эффект Бормана. // ФММ.-1967.-Т.24, №3. – С.385-394.
32. Тихонова Е.А. Основные уравнения динамической теории рассеяния рентгеновских лучей для несовершенных кристаллов // ФТТ. – 1967.- Т.9, №2. – С.516-525.
33. Молодкин В.Б. Классификация дефектов кристалла по их влиянию на дифракцию излучений в рамках динамической теории рассеяния. I.Когерентное рассеяние (обзор) // Металлофизика.-1980.-Т.2, №1.-С.3-24; II. Динамическая теория диффузного рассеяния кристаллами с хаотически распределенными дефектами // Металлофизика.-1981.-Т.3, №4.-С.27-38.
34. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. –Киев: Наук. Думка, 1988.- 200с.
35. Кочелаб В.В., Молодкин В.Б., Олиховский С.И. Интегральная интенсивность диффузного рассеяния в кристаллах с микродефектами при аномальном прохождении рентгеновских лучей // Металлофизика. – 1991. – **13**, №6. –С.84-91.
36. Ewald P.P. Zur Begrundung der Kristallogoptik. Teil II. Theorie der Reflektion und Brechung // Ann.Phys. -1916.- Bd.49, F.4.-S.117-143.
37. Bethe H., Ann.Phys. **87**, 55 (1928).
38. Laue M, Rontgenstrahlinterferezen, Akademische Verlagsges., Leipzig 1948.- 410s.
39. Hu S.M. // Appl. Phys. Lett. - 1986. - **48**, - P.115.
40. Patrick W., Hearn E., Westdorp W., Bohg A. Oxygen precipitation in silicon. // J. Appl. Phys. - 1979. – Vol.50, No.11. - P.7156-7164.
41. Bender H. Investigation of the oxygen-related lattice defects in Czochralski

- silicon by means of electron microscopy techniques. // *Phys. Status Solidi (a)*. – 1984. – Vol.86. – P.245-261.
42. Tan T.Y. and Tice W.K. Oxygen precipitation and the generation of dislocations in silicon. // *Philos. Mag. B*. –1976. –Vol.34, No.4. – P.615-631.
43. Vanhelemont J., Amerlinckx S., and Claeys C. Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. I.Theoretical model.// *J. Appl. Phys.* – 1987.- **61**. –P.2170-2188.
44. Комбинированные методы интегральной рентгеновской дифрактометрии для диагностики несовершенных монокристаллов В.Б. Молодкин, В.В.Немошкаленко, А.И.Низкова и др. // *Металлофизика и новейшие технологии* 2000, т.22, №3, с.3-16.
45. Borghesi A., Pivac B., Sassella A., and Stella A. Oxigen precipitation in silicon // *J. Appl. Phys.* – 1995. – **77**, No.9.-P.4169-4244.
46. Оліховський С.Й., Кисловський Є.М., Молодкін В.Б., та ін. Дифракційна рентгенівська діагностика складної дефектної структури в монокристалах кремнію // *Металлофиз. и новейшие техн.* – 2000. – Т.**22**, №6. –С.3-19.

Список литературы к главе 3

1. Proc.of the 1-rst Int. Autumn School “Gettering and Defect Engineering in the Semiconductor Technology”/ Ed. by H. Richter. Jarzau, Oct.8-18, 1985, DDR.
2. Афанасьев, А.М., Александров, П.А., и Имамов, Р.М. Рентгеновская диагностика субмикронных слоев. Москва, Наука.-1986.-195с.
3. Гуреев, А.Н., Прокопенко, И.В. // *Завод.лаб.*-1979.-Т.45,№6.-С.536-538.
4. Даценко Л.И., Короткевич Н.Ф. // *УФЖ* -1973.-Т.18,№1.-С.145-152.
5. Даценко Л.И. // *Вісн. АН УРСР* -1975.- N3.-С.19-28.
6. Даценко Л.И. // *УФЖ* -1979.- Т.24, N5.-С.577-590.
7. Кисловский Е.Н.,Кладько, В.П., Фомин А.В. и др. //Заводская лаб.-1985.- Т.51,№7.-С.30-31.
8. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. –Киев: Наук. Думка, 1988.-200с.
9. Даценко Л.И., Кисловский Е.Н., Крыштаб Т.Г. и др. //Поверхность.-1985.- N8.С.69-73.
10. Кисловский Е.Н., Крыштаб Т.Г., Хрупа В.И., Даценко Л.И. //Металлофизика.-1986.-Т.8, N3.-С.52-55.
11. Крыштаб,Т.Г., Кисловский,Е.Н., Хрупа В.И. //Металлофизика.-1986.-Т.8, N4.-С.109-110.
12. Барьяхтар В.Г., Гуреев А.Н., Кочелаб В.В. и др //Металлофизика.-1989.- Т.11, N3.-С.73-78.
13. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др. // *Металлофиз.новейшие технол.*-2002.-Т.24,№4. – С.521-532.
14. Обработка полупроводниковых материалов // под ред. Новикова Н.В., Бертольди В. - Киев, Наукова Думка, 1982.-254с.

15. Русак Т.Ф., Енишерова К.Л. // Электронная техника. Полупроводниковые приборы. -1983.- N3.-С.3-9.
16. Мильвидский М.Г., Фомин В.Г., Хацкевич М.М. и др. // Физика и химия обработки материалов. -1986.- N2.-С.122-125.
17. Andrew W. Stevenson (1993) *Acta Cryst.* **A49**,174-183.
18. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др. *Металлофизика и новейшие технологии*, 2002, 24, №5, с.585-596.
19. Hu S.M. // *Appl. Phys. Lett.* - 1986. - **48**, - P.115.
20. Patrick W., Hearn E., Westdorp W.et.al. // *J. Appl. Phys.* - 1979. – Vol.50, No.11. - P.7156-7164.
21. Weber E.R., *Appl. Phys. A* **30**, 1 (1993).
22. Shimura F., Tsuya H. and Kawamura T.// *J. Electrochem Soc.* **128**, 1578 (1981).
23. Graff K., Hefner H.A., and Hemmerici W.// *J. Electrochem Soc.*-1988.-Vol. **135**.-N0.4.-P. 952-956.
24. Shen B., Sekiguchi T., Jablonski J. et al // *J. Appl. Phys.* - 1994. - **76**, N8. - C.4540-4546.
25. Молодкин В.Б., Немошкаленко В.В., Низкова А.И.и др. // *Металлофизика и новейшие технологии* 2000, т.22, №3, с.3-16.
26. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др. *Металлофизика и новейшие технологии*, 2002, 24, №8, с.1089-1101.
27. Fox R.I. // *IEEE* - 1966. - **13**, - S.367.
28. Wenzl H.F. //*Z. Naturforsch.* -1971.- **26a**, N3 -S.495-501.
29. Weltzin K.D., Swalin R.A., and Hutchinson T.F. // *Acta Met.* - 1965 - **13**, - P.115-122.
30. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. - Киев: Наук. думка, 1983.- 408с.
31. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Низкова А.И., Когут М.Т., Первак Е.В. Влияние нарушенного поверхностного слоя на динамическое рассеяние в кристаллах с дефектами, *Успехи физики металлов*, 2004,т.5,с50-72.

Список литературы к главе 4

1. Hunter L.P.//*J. Appl. Phys.*-1959 - **30**, №6.-P.874 - 884.
2. Кушнир В.И., Суворов Э.В., Мухин К.В. К вопросу о лауэвской дифракции рентгеновских лучей однородно изогнутым кристаллом // *ФТТ*.-1980.- Т.22, №7. – С.2135-2143.
3. Chen H., *Mater.Letters*, **4**.№2:p.65(1986).
4. Datsenko L.I., Khrupa V.I., Kislovskii E.N. Bormann effect in elastically bent silicon crystals with structural defects // *Phys.Status solidi.A.* – 1981. – Vol.68, No.2. – P.399-404.
5. Хрупа В.И., Даценко Л.И., Кисловский Е.Н. Рассеяние рентгеновских лучей тонкими упруго деформированными кристаллами кремния, содержащими дислокационные петли // *Металлофизика*. -1980.-Т.2, №4.-С.55-59.

6. Хрупа В.И., Даценко Л.И., Кисловский Е.Н., Васильковский А.С. Особенности рассеяния рентгеновских лучей тонкими упруго изогнутыми реальными кристаллами в случае асимметричной лауэ-дифракции // *Металлофизика*. -1984.-Т.6, №6.-С.70-74.
7. Хрупа В.И., Кисловский Е.Н., Даценко Л.И. Рассеяние рентгеновских лучей толстыми упруго изогнутыми кристаллами, содержащими локализованные дефекты структуры // *Металлофизика*. -1981.-Т.3, №4.-С.96-101.
8. Даценко Л.И., Хрупа В.И. Аномальное прохождение рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах Si с равномерно распределенными дефектами структуры // *УФЖ*. – 1981. – Т.26, №12. – С.1995-1998.
9. Даценко Л.И., Хрупа В.И. Особенности нарушения закона Фриделя в упруго изогнутых реальных кристаллах // *Металлофизика*.- 1982. – Т.4, №3.- С.112-117.
10. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. –М.: Наука – 1982. – с.392.
11. Чуховский Ф.Н. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. I.Лауэ-дифракция // *Металлофизика*.- 1980. – Т.2, №6.-С.3-27.
12. Чуховский Ф.Н. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. II. Брэгг-дифракция // *Металлофизика*.- 1981. – Т.3, №5.-С.3-29.
13. Valibar F., Chukhovskii F.N., Malgrange C., *Acta Crystallogr.A*, **39**, №4:387(1983).
14. Chukhovskii F.N., Kharachev Yu.P.Exact solution of the Takagi-Taupin equation for dynamical X-ray Bragg diffraction by a crystal with a transition layer.// *Phys.status solidi.A*.-1985.-Vol.88, №1. P.69 - 76.
15. Chukhovskii F.N., Malgrange C. Theoretical study of X-ray diffraction in homogeneously bent crystals – the Bragg case // *Acta Crystallogr.A*.-1989.- Vol.45.-№10.-P.732-738.
16. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. –Киев: Наук. Думка, 1988.- 200с.
17. Гринь Г.В., Кисловский Е.Н., Петрашень П.В., Разумовский А.Ю. Влияние структурных дефектов на интегральную интенсивность лауэ-дифракции в тонком изогнутом кристалле, *Металлофизика*, **12**, №5:113-115(1990).
18. Кисловский Е.Н., Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Гринь Г.В., Низкова А.И. Влияние дефектов кулоновского типа на интегральную отражающую способность упруго изогнутого кристалла в случае лауэ-дифракции *Металлофизика*, **12**, №6: 37-43 (1990).
19. Молодкин В.Б., Классификация дефектов кристалла по их влиянию на дифракцию излучений в рамках динамической теории рассеяния // *Металлофизика* -1980.-т. **2**.-№1.-с.3-24.
20. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. - Киев: Наук. думка, 1983.- 408с.

21. Дубровский И.М., Молодкин В.Б., Тихонов Л.В. и Тихонова Е.А. Основные уравнения динамической теории рассеяния в кристаллах с дислокациями. // ФММ. – 1969. –Т.27,№1.- С.21-28.
22. Костюк А.Н., Молодкин В.Б., Олиховский С.И. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в упруго изогнутых монокристаллах с микродефектами.- Киев, 1991.-32с.-(Препр. АН Украины. ИТФ, N91-60P).
23. Kostyuk A.N., Molodkin V.B., and Olikhovskii S.I. Dynamical theory of X-ray diffraction by elastically bent crystals with microdefects. I. Basic equation // phys.stat.sol. (b)- 1993.-Vol.178,№1.- P.45-54.
24. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., and Kostyuk A.N. Dynamical theory of X-ray diffraction by elastically bent crystals with microdefects. II. Diffraction intensity // phys.stat.sol. (b).-1994.-Vol.183, No.1.- P.59-72.
25. Datsenko L.I., Kislovskii E.N. Effect of elastic strain on the X-ray intensity at laue diffraction in slightly asymmetrical case // Phys.Status solidi. A.- 1974.- Vol.25a, №2.- P.551-557.
26. Kato N., *J.Phys.Soc.Jap.*, **19**, № 6: 971 (1964).
27. Chukhovskii F.N., Petrashen P.V., *Acta crystallogr. A.*, **33**, № 2: 311 (1977).
28. Kato N., *X-ray diffraction* (Ed. By L.V. Azaroff, R. Karlow, N.Kato et al. – New York: John Wiley 1974).
29. Kalman Z.N., Weissmann S., *J. Appl. Crystallogr.* **12**, № 2: 209 (1979).
30. Хрупа В.И., Кисловский Е.Н., Даценко Л.И., *Металлофизика*, **2**, № 4: 55 (1980).
31. Хрупа В.И., Даценко Л.И., Кисловский Е.Н., Васильковский А.С., *Металлофизика*, **6**, № 6: 70 (1984).
32. Khrupa V.I., Kislovskii E.N., Datsenko L.I., *Phys. Status solidi*, **63**, № 1: 439 (1981).
33. Петрашень П.В., *Металлофизика*, **8**, № 1: 35 (1986).
34. Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н., *Металлофизика*, **8**, № 3: 45 (1986).
35. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Osinovskii M.E. et al., *Phys. Status solidi A*, **87**, № 2: 597 (1985).
36. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Низкова А.И., Интегральная дифрактометрия наноразмерных дефектов в упруго изогнутом монокристалле, *Успехи физики металлов*, 2004, **5**, №1, с.51-88.
37. Borghesi A., Pivac B., Sassela A., and Stella A., *J. Appl. Phys.*, **77**, № 9: 4169 (1995).
38. Молодкин В.Б., Немошкаленко В.В., Низкова А.И. и др., *Металлофизика и новейшие технологии*, **22**, № 3: 3 (2000).
39. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Костюк А.Н., Ткачук Л.Г., *Металлофизика и новейшие технологии*, - **23**, №7: 861 (2001).
40. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И.и др., *Металлофиз. Новейшие технол.* **25**, №1:107 (2003).
41. Hu S.M., *Appl.Phys.Lett.*, **48**, №2:115 (1986).
42. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Олиховский С.И.и др., *Металлофиз. Новейшие технол.* **24**, №11:1483 (2002).

43. Livingston F.M., Messoloras S., Newman R.C., Pike B.C., Stewart R.J., Binns W.J., Brown W.P., and Wilkes J.G. *J.Phys.* - **17**, p.6253 (1984).

Список литературы к главе 5

1. Афанасьев А.М., Фанченко С.С. О восстановлении профилей нарушений тонких приповерхностных слоев по рентгенодифракционным данным. // Доклады АН СССР. 1986. Т.287. №6. С.1395-1399.
2. Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н. Восстановление фазы рентгеновской волны, дифрагированной на слоистой монокристаллической структуре.// Доклады АН СССР. 1989. Т.309. №1. С.105-109.
3. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М: Наука, 1982. 390 с.
4. Лидер В.В., Чуховский Ф.Н., Хапачев Ю.П., Барашев М.Н. Рентгенодифрактометрическое исследование нарушенных приповерхностных слоев Si(111) и $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}/\text{GaAs}(111)$ на основе модели постоянного градиента деформации. // ФТТ. 1989. Т.31. Вып.4. С.74-81.
5. Хапачев Ю.П., Чуховский Ф.Н. Брэгговская дифракция рентгеновских лучей в кристалле с переходным слоем. // ФТТ. 1984. Т.26, Вып.5. С.1319-1325.
6. Хапачев Ю.П. Точное аналитическое решение задачи динамической дифракции в кристалле с переходным слоем. В сб.: Физика и химия поверхности. Нальчик: КБГУ. 1982. С.36-39.
7. Chukhovskii F.N., Kharachev Yu.P. Exact solution of the Takagi-Taupin equation for dynamical X-ray Bragg diffraction by a crystal with a transition layer.// Phys. stat. sol.(a). 1985. V.88. No 1. P.69-76.
8. Бушуев В.А., Кютт Р.Н., Хапачев Ю.П. Физические принципы рентгенодифрактометрического определения параметров реальной структуры многослойных эпитаксиальных пленок. Под ред. Ю.П. Хапачева. Рекомендовано Госкомитетом РФ по высшему образованию для использования в учебном процессе. Нальчик: Кабардино-Балкарский госуниверситет, 1996. 186 с.
9. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П., Тарасов Д.А. Динамическая рентгеновская дифракция в сверхрешетках с различным градиентом деформации в переходной области. // ФТТ. 1996. Т.38. Вып.5. С.1375-1386.
10. Dyshekov A.A., Kharachev Yu.P., and Tarasov D.A. Peculiarities of X-ray dynamical diffraction on superlattices with different layer interfaces. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 1996. №3-4. С.206-212.
11. Хапачев Ю.П., Чуховский Ф.Н. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в кристаллических сверхрешетках (обзор). // Металлофизика. 1991. Т.13. №7. С.65-85.
12. Элаши Ш. Волны в активных и пассивных периодических структурах. Обзор. // ТИИЭР. 1976. Т.64. № 12. С.22-59.
13. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Теория динамической рентгеновской ди-

- фракции в кристаллах с переменным градиентом деформации // Тезисы II Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов Москва. 1999. С.190.
14. Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. М.: Наука. 1972. 720 с.
 15. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 472 с.
 16. Kharachev Yu.P. The theory of dynamical X-ray diffraction on a superlattice. // Phys. stat. sol.(b). 1983. V.120. P.155-163.
 17. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П., Тарасов Д.А. Динамическая рентгеновская дифракция в сверхрешетках с различным градиентом деформации в переходной области. // ФТТ. 1996. Т.38. Вып.5. С.1375-1386.
 18. Dyshekov A.A., Kharachev Yu.P., and Tarasov D.A. Peculiarities of X-ray dynamical diffraction on superlattices with different layer interfaces. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 1996. №3-4. С.206-212.
 19. Dyshekov A.A., Kharachev Yu.P., Tarasov D.A. X-ray dynamical diffraction on superlattice with unequal layer thicknesses. // II Nuovo cimento. 1997. V.19. P.531-536.
 20. Молодкин В.Б., Шпак А.П., Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическое рассеяние рентгеновского и синхротронного излучения в сверхрешетках. Рентгенодифракционная кристаллооптика сверхрешеток. (монография). Киев. Академперіодика. 2004. 120 с.
 21. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Особенности дифракции в кристаллах с переменным градиентом деформации, следующие из характеристик решений уравнений Такаги. // Поверхность. 1999 №2 С. 101-105.
 22. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Характер рентгенодифракционного рассеяния и определение структурных параметров пленки с переменным градиентом деформации. // ЖТФ. 1999. Т.69. Вып. 6. С.67-70.
 23. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках.(Обзор). // Успехи физики металлов. 2001. Т.2, №4. С 281-351.
 24. Хапачев Ю.П., Дышеков А.А. Теория динамической рентгеновской дифракции в сверхрешетках. Допущено Министерством образования Российской Федерации в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений. КБГУ. Нальчик. 2002. 96 с.
 25. Молодкин В.Б., Шпак А.П., Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическое рассеяние рентгеновского и синхротронного излучения в сверхрешетках. Рентгенодифракционная кристаллооптика сверхрешеток. (монография). Киев. Академперіодика. 2004. 120 с.
 26. Chukhovskii F.N., Kharachev Yu.P. Exact solution of the Takagi-Taupin equation for dynamical X-ray Bragg diffraction by a crystal with a transition layer.//

- Phys. stat. sol.(a). 1985. V.88. No 1. P.69-76.
27. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П., Шидов Э.Х. Дифракция рентгеновских лучей в структуре с экспоненциальным градиентом. // II Межреспубл. сем. Современные методы и аппаратура рентгеновских дифрактометрических исследований материалов в особых условиях. Тез. докл. Киев, 1991. С.93.
 28. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. I. Точное аналитическое решение и основные качественные особенности волнового поля. // Поверхность. 1998. № 3. С.20-26.
 29. Тихонова Е.А. Точное решение уравнений Такаги для экспоненциально убывающего поля смещений. // Субструктурное упрочнение металлов и дифракционные методы исследования. Материалы конференций. Киев: Наукова думка, 1985. С.203-205.
 30. Справочник по специальным функциям. Под ред. М.Абрамовица и И.Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.
 31. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. II. Дифракция в случае резкого градиента деформации. // Поверхность. 1998. Вып.6. С.21-30.
 32. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П., Оранова Т.И., Бушуев В.А. Критерий неоднозначности в определении структурных параметров пленки с переменным градиентом деформации. // Поверхность. 2003. №1. С.100-103.
 33. Afanasev A.M., Kovalchuk M.V., Kovev E.K., and Kohn V.G. X-ray diffraction in a perfect crystal with distributed surface layer. // Phys. stat. sol. (a). 1977. V.42. P.415-422.
 34. Найфэ А. Методы возмущений. М.: Наука, 1976. 456 с.
 35. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Качественные закономерности динамической рентгеновской дифракции в сверхрешетках и в пленках с переменным градиентом деформации, вытекающие из анализа типов решений уравнений Такаги. // Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов. Дубна. 1997. Т.3 С.113-118.
 36. Dyshekov A.A. The new exact analytical solutions of the problems of dynamic X-ray diffraction on crystal with variable strain gradient. IV European Conference on high resolution X-ray diffraction and topography XTOP 98. Programme and abstracts. P.3.49.
 37. Дышеков А.А. Исследование характера аналитического решения задачи динамической дифракции для профиля деформации $1/z$. // Тезисы II Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов Москва. 1999. С.189.
 38. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Новые аналитические решения в динамической теории рентгеновской дифракции. //Металлофизика и новейшие технологии. 2002. Т.24. №4.С. 513-519.

39. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. // Точные решения модельных задач динамической теории рентгеновской дифракции. Доклады Академии наук высшей школы. 2003. №1 С.24-29.
40. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Аналитические свойства новых решений дифракционных задач для гетероструктур с переменным градиентом деформации. // Поверхность. 2002. №8. С.73-77.
41. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П., Молодкин В.Б. Особенности аналитических решений задач рентгенодифракционной кристаллооптики. // Актуальные вопросы современного естествознания. Межрегиональный сборник научных трудов. Альманах, посвященный 100-летию со дня рождения академика А.Н.Колмогорова. КБГУ. Нальчик. 2003 С.68-78.
42. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур.// ЖТФ. 1998. Т.32. № 1. С. 3-18.
43. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическая рентгеновская дифракция в эпитаксиальной сверхрешетке с различной электронной плотностью в слоях. // Рентгеновская оптика-2003. Материалы совещания. Нижний Новгород. 2003. С. 233.

Список литературы к главе 6

1. Buttard D., Dolino G., Bellet D.//Solid State Communications. -1999. - №109.- P. 1-5.
2. Астрова Е.В., Ратников В.В., Витман Р.Ф.//ФТП- 1997. – **31**, №5. - С. 1261 - 1268.
3. Горечев Д.Н., Белеков Л.В., Сресели О.М //ФТП - 2000.- **34**, №6. - С. 1130 - 1134.
4. Астрова Е.В., Васюнькина Т.Н.//ФТП - 2002. – **36**, №5. - С. 593 - 596.
5. Зимин С.П. //ФТП. - 2000. - **34**, №3. - С. 359 - 363.
6. Компан М.Е., Харциев В.Е., Шабанов И.Ю.//ФТТ - 1997.- **39**, №12.- С.2137-2140.
7. Риссел У., Руге Х. Ионная имплантация.- М.: Наука, 1983. 234с.
8. Кузницкий З.Т.// Неорганические материалы.- 1997.- **33**, №2.- с.142-146.
9. Казанский А.Г., Петрушко С.М., Рыжов Н.В. // ФТП.- 1999.- т. **33**.- вып. 3.- с.332-335.
10. Chamard V., Pichat C., Dolino G. //Solid State Communications.- 2001.-118, с.135-139.
11. Servidori M., Gembali F. // J. Appl. Cryst.- 1988.- 21.- P.176-181.
12. Nemiroff M., Speriosu V.S.// J. Appl. Phys. - 1985. - 58 (10).
13. Гончарский А.В, Колпаков А.В. Степанов А.А. // Метрология, 1986. - № 11 -С.19-23.
14. Степанов С.А., Кондрашкина Е.А.,Чузо А.Н.//Поверхность.-1988.-№9.- С.112-118.
15. Fabbri R., Lulli G., Nipoti R., Servidori M. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B80/81.- 1993.- P.624-627.

16. Фодчук И.М, Кшевецкий О.С. // Металлофизика.-1992.- **14**,№5.- С.57-62.
17. Афанасьев А.М, Александров П.А, Имамов Р.П. Рентгендифракционная диагностика субмикронных слоев. - М.: Наука, 1989.- 152с.

Список литературы к главе 7

1. Мильвидский М.Г. Полупроводниковые материалы в современной электронике.- М.: Наука. - 1986.
2. Зорин Е. И., Павлов А.В., Тетельбаум Д.И. Ионное легирование полупроводников: Библиотека радиотехнолога. Вып. 6.- М.: Энерг., 1975.-128с.
3. Вавилов В. С. Действие излучений на полупроводники. 1988.
4. Литовченко В.Г., Попов В.Г. Физика поверхности и микроэлектроника // М. Знание: серия "Физика". -1990.-№1.-С.23-28.
5. Таиров Ю. М. Технология полупроводниковых приборов:.
6. Риссел У., Руге Х. Ионная имплантация.- М.: Наука, 1983. - 234с.
7. Kuzniki Z.T. // J.Appl. Phys.- 1993.- 74.- P.2058-2063.
8. Кузницкий З.Т. // Неорганические материалы.- 1997.- 33, №2.- С.142-146.
9. Svensson S.G., J. Lalita, N.Keskitalo, A.Hallen and C. Jagadish. // New Photovoltaic Materials for Solar Cells. First Polish-Ukrainian Symposium, October 21-22, 1996.- Cracow- Przegorzaly, 1997.p.27-37.
10. Nemiroff M., Speriosu V.S. // J.Appl.Phys.- 1985. -58 (10).
11. Fukuhara A., Takano Y., Namba M., Maki M. // J.Appl.Cryst. -1980.13.P.31-33.
12. Fabbri R., Servidory M., Zani A. // J.Appl. Phys. 1989.-66 (10).
13. Cellini C., Carnera A., Berti M., Gasparotto A., Steer D., Servidori M., Milita S. // Nuclear Instruments and Methods of Physics Research. – 1995. –B96.- P.227-231.
14. Fabbri R., Lulli G., Nipoti R., Servidori M. X-ray Diffraction Analysis of Damage Accumulation Due to the Nuclear Energy Loss of 50 keV and 1-2.2 MeV B ions Implanted in Silicon // Nuclear Instruments and Methods of Physics Research. – 1993. - B80/81. – P.624-627.
15. Sealy L., Barklie R.C., Lulli G., Nipoti R., Balboni R., Milita S., Servidori M. EPR and X-ray Diffraction Study of Damage Produced by Implantation of B Ions (50 keV, 1 MeV) or Si Ions (50 keV, 1.5 MeV) Into Silicon //Nuclear Instruments and Methods of Physics Research. – 1995. - B96. – P.215-218.
16. Danilin A.B., Dvurechenskii A.V., Ryazantsev I.A., Timofeev P.A., Verner V.D. // Phys. Stat. Sol A.- 1981.-65.-P.453.
17. Servidori M. Characterization of Lattice Damage In Ion Implanted Silicon by Multiple Crystal X-Ray Diffraction // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1987. - B19/20. P.443-449.
18. Zielinska-Rohozinska E., Lefeld-Sosnowska M., Gronkowski J., Krylow J. // Phys. Stat. Sol. A.-1073.-20.-P.93.
19. Zammit U., Madhusoodanan K.N., Marinelli M., Scudieri F., Mercuri F., Wendler E., Wesch W. // Nuclear Instruments and Methods of Physics Re-

- search. 1995. - В96. – Р.241-244.
20. Павлов П.В., Скупов В.Д., Тетельбаум Д.И. //Физика и химия обработки материалов. - 1987.- №6.- С. 19-24.
 21. Мукашев Б.И., Кусаинов Ж.А., Иусупов К.Х., Смирнов В.В., Токмолдин С.Ж. // Поверхность. Физика, химия, механика.- 1983. - №7. – С.68-72.
 22. Степанова С.В., Финарев М.С. // Поверхность. Физика, химия, механика.- 1982. - №8. – С.36-40.
 23. Kyutt R.N., Petrashen P.V., Sorokin L.M. Strain profiles in iondoped silicon obtained from X-ray rocking curves // Phys.Sol., - Vol.A60. - P.381-389.
 24. Golovin A.L., Imamov R.M., Kondrashkina E.A. Potentialities of New X-Ray Diffraction Methods in Structural Studies of Ion-Implanted Silicon Layers // Phys. Stat. Sol. A.- 1985.- 88.- P.505-514.
 25. Burgeat J., Taupin D. Application de la theorie dynamique de dans les cristaux de silicium // Acta Cryst., 1968, -Vol. A24. - P.99-102.
 26. Лабунов В.А., Кондрашкина Е.А., Полонин А.И., Прохоренко А.И. // Поверхность.- 1989, №4.-С.90.
 27. Кон В.Г, Прилепский М.В, Суходрева И.М. Простой метод определения структуры нарушенного поверхностного слоя. монокристаллов из рентгенодифракционных данных // Поверхность. Физика, химия, механика, 1984. - № 11. -С.122-128.
 28. Мордкович В.Н, Суходрева И.М., Черюканова Л.Д. Рентгенодифракционные исследования нарушенного поверхностного слоя в случае ионного легирования // Поверхность.- 1983.- №4.- С.90-95.
 29. Степанов С.А., Кондрашкина Е.А., Чузо А.Н. // Поверхность.-1988.- №9.- С.112-118.
 30. Гончарский АД, Колпаков А.Д, Степанов А.А. Обратные задачи вычислительной диагностики нарушенных приповерхностных слоев кристаллов по рентгенодифракционным данным // Поверхность. Физика, химия, механика, 1986. -№ 12.- С.66-71.
 31. Кшевецкий С.А., Стецко Ю.П., Фодчук И.М., Мельничук И.В., Полянко В.С. // УФЖ.- 1990.- **30**,№3.-С.344-348.
 32. Фодчук И.М, Кшевецкий О.С. // Металлофизика.-1992.- **14**,№5.- С.57-62.
 33. Афанасьев А.М, Александров П.А, Имамов Р.П. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. - М.: Наука, 1989.- 152с.
 34. Афанасьев А.М., Фанченко С.С. // ДАН СССР. -1986. -**287**, №6. –С.1395-1399.
 35. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. - Киев: Наукова думка, 1988.-200 с.
 36. Барьяхтар В.Г., Гаврилова Е.Н., Молодкин В.Б. и др. // Металлофизика. - 1992. - Т.14, №11. - С.68-79.
 37. Барьяхтар В.Г., Немошкаленко В.В., Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Гаврилова Е.Н., Кисловский Е.Н., Кочелаб В.В., Низкова А.И. // Метал-

- лофизика.- 1993.- **15**,№12.- С.18-26.
38. Бригинец А.В., Красуля С.М., Хрупа В.И. // Кристаллография,-1994.- Т.39, №2.
39. Барьяхтар В.Г., Гуреев А.Н., Кочелаб В.В., Молодкин В.Б. и др. //Металлофизика.-1989.-Т.11. №3.-С.73-78.
40. Фодчук И.М., Раранский Н.Д., Гимчинский А.Г, Евдокименко А.В., Кузницкий З.Т., Свянтек З.// Металлофизика и новейшие технологии.- 1998.- т.20, N12.-с.73-76.

Список литературы к главе 8

1. Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокорастворимая рентгеновская дифрактометрия и топография. Перевод с англ. Под редакцией И.Л.Шульпиной. Санкт-Петербург, "Наука", 2002. 274 с.
2. Тхорик, Л.С.Хазан. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев, Наукова думка. 1983, 304с.
3. Speriosu V.S., Glass H.L., Kobayashi T. Appl.Phys.Lett., 34, 539 (1979).
4. Fukuhara A., Takano J. Acta Cryst., A33, 137 (1977).
5. Kharachev Yu.P. Phys.stat.sol. (b) **120**, 155, 1983.
6. Bartels W.J., Honstra J., Lobeek D.J.W. Acta Cryst., **A42**, 539, 1986.
7. Klappe J.G.E., Fewster P.F. J.Appl.Cryst., 27, 103 (1994).
8. Taupin D. Bull. Soc. Fr. Mineral Cystallogr., 57, 469 (1964).
9. Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгеновская диагностика субмикронных слоев. Москва, Наука.-1986.-195с.
10. Петрашень П.В. ФТТ, 16, 2168 (1974).
11. Петрашень П.В. ФТТ, 17, 2814 (1974).
12. Kyutt R.N., Petrashen' P.V., Sorokin L.M. Phys.stat.sol., 60, 381 (1980).
13. Zolotoyabko P.E. J.Appl.Cryst. 31, 241 (1998).
14. Speriosu V.S., Vreeland T. J.Appl.Phys., **56**, 1591, 1984.
15. Feranchuk I.D., Feranchuk S.I., Minkevich A.A.and Ulyamenkov A. Phys. Rev. B68, 235307 (2003).
16. Yousif M.J.A., Nur O., Willander M., Patel C.J., Hernandez C., Campidelli Y., Bensahel D., Kyutt R.N. Solid State.Electronics, 45, 1869 (2001).
17. Korakakis D, Ludwig K.F., Moustakas T.D. Appl.Phys.Lett. **72**, 1004, 1998.
18. S.Yamaguchi, M.Kosaki, Y.Watanabe et al. Appl.Phys.Lett., **79**, 3062, 2001.
19. Saxler A., Debray P., Perrin R.et al. J.Appl.Phys., **87**, 369, 2000.
20. Heying B., Wu X.H., Keller S., Li Y., Kaponek D., Keller B.P., DenBaars S.P. and Speck J.S. *Appl. Phys. Lett.* **68**, 643, 1996.
21. Metzger T., Hopler R., Born E., Ambacher O., Stutzmann M., Stommer R., Schuster M., Gobel H., Christiansen S., Albrecht M. and Strunk H.P. *Phil. Mag.* **A 77**, 1013, 1998.
22. Ratnikov V., Kyutt R., Shubina T., Pashkova T., Valcheva E., Monemar B. J.Appl.Phys., 88, 6252, 2000.
23. Gay P., Hirsch P.B.and Kelly A. *Acta Met.* **1**, 315. (1953).

24. Hordon M.J. and Averbach B.L. *Acta Met.* **9**, 237 (1961).
25. Williamson G.K., Hall W.H. *Acta Metall.*, 1, 22 (1953).
26. Ayers J.E., *J. Crystal Growth*, **135**, 71 (1994).
27. Kaganer V.M., Kohler R., Schmidbauer M., R. Opitz and B. Jenichen. *Phys. Rev B* **55** 1793 (1997).
28. Kaganer V.M., Brandt O., Trampert A., Ploog K.H. (в печати).
29. Кютт Р.Н., Аргунова Т.С. *ФТТ*, **31**, 40 (1989).
30. P. van der Sluis. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **26**, A186 (1993).
31. Кютт Р.Н., Аргунова Т.С., Рувимов С.С., Сорокин Л.М. *ФТТ*, **36**, 2700 (1994).
32. Heying B., Wu X.H., Keller S., Li Y., Kopolnek D., Keller B.P., Den Baars S.P., Speck J.S. *Appl. Phys. Lett.*, **68**, 643 (1996).
33. Ferrari C., Francesio L., Franzosi P., Gennari S. *Nuovo cimento*, **19D**, 277 (1997).
34. Кютт Р.Н., Ратников В.В., Мосина Г.Н., Щеглов М.П. Т, *ФТТ*, **41**, 30 (1999).
35. Ratnikov V., Kyutt R., Shubina T., Pashkova T., Valcheva E., Monemar B. *J. Appl. Phys.*, **88**, 6252 (2000).
36. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. Наука. М., 1967.
37. Srikant V., Speck J.S. and Clarke D.R.J. *Appl. Phys.*, 82,N9, 4286-95 (1997).
38. Ratnikov V.V., Kyutt R.N., Shubina T.V., Pashkova T., Monemar B. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34**, A30 (2001).
39. Усиков А.С., Третьяков В.В., Бобыль А.В., Кютт Р.Н., Лундин В.В., Пушный Б.В., Шмидт Н.М. *ФТП*, **39**, 1300 (2000).
40. Balzar D. *J. Appl. Cryst.*, 25, 559 (1992).
41. Groma I. *Phys. Rev.*, B 57, 7535 (1998).
42. Wilkens M. *Kristal und Technik*. 11, 1159 (1976).

Список литературы к главе 9

1. Zah C.E., Bhat R., Pathak B.N., Favire F., Lin W., Wang M.C., Andreadakis N.C., Hwang D.M., Koza M.A., Lee T.P., Wang Z., Darby D., Flanders D., Heieh J.J. // *Journal of Quantum Electronic*. - 1994. - 30. - P.511-523.
2. Жуков А.Е., Егоров А.Ю., Устинов В.М., Цацульников А.Ф., Максимов М.В., Фалеев Н.Н., Копьев П.С. // *Физика и техника полупроводников*. - 1997. - Т.31, №1. - С.19-22.
3. Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. // *ФТП*. - 1998.-32.-С.385-411.
4. Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Устинов В.М., Мамутин В.В., Иванов С.В., Жмерик В.Н., Цацульников А.Ф., Бедарев Д.А., Копьев П.С. // *Письма в ЖТФ*. - 1998. - Т.24, № 3. - С.81-87.
5. Kondow M., Kitatani T., Larson M.C., Nakahara K., Uomi K., Inoue H. // *Journal of crystal Growth*.-1998.-188.-P.255-259.

6. Чжень Ч., Бедарев Д.А., Воловик Б.В., Леденцов Н.Н., Лунев А.В., Максимов М.В., Цацульников А.Ф., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Устинов В.М., Копьев П.С. // Физика и техника полупроводников. - 1999. - Т.33, №1. - С.91-96.
7. Mars D.E., Babic D.I., Kaneko Y., Chang Y.-L. // Journal of Vacuum Science and Technology. - 1999. - 17B. - P.1272-1275.
8. Hoehnsdorf F., Koch J., Leu S., Stolz W., Borchert B., Druminsk M. // Electron. Lett. - 1999. - 35, No.7. - P.571.
9. Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R. Band parameters for III-IV compound semiconductors and their alloys // Journal of Applied Physics. - 2001. - 89, No.11. - P.5815-5875.
10. Soo Y.L., Huang S., Kao Y.H., Chen J.G., Hulbert S.L. // Physical review B.- 1999.-Vol.60.-№19.-P.13605-13610.
11. Цырлин Г.Э., Петров В.Н., Масалов С.А., Голубок А.О. // Физика и техника полупроводников. - 1999. - Т.33, вып.6. - С. 733-737.
12. Чжень Ч., Бедарев Д.А., Воловик Б.В., Леденцов Н.Н., Лунев А.В., Максимов М.В., Цацульников А.Ф., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Устинов В.М., Копьев П.С. // Физика и техника полупроводников. - 1999. - Т.33, №1. - С.91-96.
13. Жуков А.Е., Ковш А.Р., Егоров А.Ю., Малеев Н.А., Устинов В.М., Воловик Б.В., Максимов М.В., Цацульников А.Ф., Леденцов Н.Н., Шерняков Ю.М., Лунев А.В., Мусихин Ю.Г., Берт Н.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И. // Физика и техника полупроводников. - 1999. - Т.33, вып.2. - С.180-183.
14. Lin Y-S., Ma K-J, and Hsu C., Feng S-W., Cheng Y-C., Liao C-C., Yang C. C., Chou C-C., Lee C-M., Chyi J-I. // Applied physics letters.-2000.-Vol.77, №19.-P.2988-2990.
15. Jones E.D., Modine N.A., Allerman A.A., Kurtz S.R., Wright A.F., Tozer S.T., Wei X. // Physical review B.-1999.-Vol.60.-№7.-P.4430-4433.
16. Kondow M., Kitatani T., Nakahara K., Tanaka T. // IEEE Photonics Technol. Lett. - 2000. - 12. - P.777-779.
17. Соболев М.М., Кочнев И.В., Лантратов В.М., Берт Н.А., Черкашин Н.А., Леденцов Н.Н., Бедарев Д.А. // Физика и техника полупроводников. - 2000. - Т.34, вып.2. - С. 200-210.
18. Воловик Б.В., Ковш А.Р., Passenberg W., Kuenzel H., Леденцов Н.Н., Устинов В.М. // Письма в ЖТФ. - 2000. - Т.26, вып.10. - С.88-94.
19. Soo Y.L., Huang S., Kao Y.H., Chen J.N., Hulbert S.L., Geisz J.F., Kurtz S., Olson J.M., Kurtz S.R., Jones E.D., Allerman A.A // Physical Review. - 1999. - 60B, No.19. - P.13605-13611.
20. Harmand J.C., Ungaro G., Largeau L., Le Roux G. // Applied physics letters.- 2000.-Vol.77, №16.-P.2482-2488.
21. Arora B.M., Chandrasekaran K.S., Gokhale M.R., Nair G., Rao V., Amarendra G., Viswanathan B. // Journal of applied physics.-2000.-Vol.87, №12.-P.8444-8450.
22. Sato S. // Japanese Journal of Applied Physics. - 2000. - 39. - P.3403-3405.

23. Yang X., He´roux J.B., Mei L.F., Wang W.I // Applied Physics Letters. - 2001. - 78, No.26. - P.4068-4070.
24. Li W., Turpeinen J., Melanen P., Savolainen P., Ususimaa P., Pessa M. // Applied physics letters.-2001.-Vol.78, №1.-P.91-92.
25. Kurtz S., Webb J., Gedvilas L., Friedman D., Geisz J., Olson J., King R., Joslin D., Karam N. // Applied physics letters.-2001.- Vol.78, №6.- P.748-750.
26. Li W., Pessa M., Likonen J. // Applied physics letters.-2001.-Vol. 78, № 19.- P.2864-2866.
27. Li W., Pessa M., Ahlgren T., Decker J. // Applied physics letters.-2001.-Vol. 79, №8.- P.1094-1096.
28. Pinault M.-A., Tournie E. // Applied physics letters.-2001.- Vol.78, №11.- P.1562-1564.
29. Chan M.C.Y., Surya C., Wai P.K.A. // Journal of applied physics.-2001.- Vol.90, №1.-P. 197-201.
30. Сахаров А.В., Крестников И.Л., Малеев Н.А., Ковш А.Р., Жуков А.Е., Цацульников А.Ф., Устинов В.М., Леденцов Н.Н., Vimberg D., Lott J.A., Алфёров Ж.И. // ФТП.- 2001.-35.-С.889-896.
31. Одноблюдов В.А., Егоров А.Ю., Крыжановская Н.В., Гладышев А.Г., Мамутин В.В., Цацульников А.Ф., Устинов В.М. //Письма в ЖТФ. - 2002. - Т.28, вып.22. - С.82-88.
32. Sanoprim S., Nakajima F., Imura S., Katayama R., Wu J., Onabe K., Shiraki Y.// phys. stat. sol. B. - 2002. - 234, No.3. - P.782-786.
33. Тонких А.А., Егоров В.А., Поляков Н.К., Цырлин Г.Э., Крыжановская Н.В., Сизов Д.С., Устинов В.М. // Письма в ЖТФ. - 2002. - Т.28, вып.10. - С.72-77.
34. Сизов Д.С., Максимов М.В., Цацульников А.Ф., Черкашин Н.А., Крыжановская Н.В., Жуков А.Б., Малеев Н.А., Михрин С.С., Васильев А.П., Селин Р., Устинов В.М., Леденцов Н.Н., Бимберг Д., Алфёров Ж.И. // Физика и техника полупроводников. - 2002. - Т.36, вып.9. - С. 1097-1104.
35. Segmuller A., Kristina P., Esaki L.//J.Appl.Phys. – 1977.-10. – P.1.
36. Kervarec J., Baudet M., Callet J., Aunray P., Emery J., Regbeny A.//J.Appl.Cryst.-1984.-17.-p.196.
37. Spriusu V.S., Vreeland T.//J.Appl.Phys. – 1984.- 56.-p.1591.
38. Flemming R.M.,McWhan D.B., Gossard A.C., Wiegmann W., Logan R.//J.Appl.Phys.-1980.-5.- p.337.
39. Bartels W.J., Honstra J., Lobeek D.J.W.//Acta Cryst.- 1986.- A42.- P.539/.
40. Fewster P.F., Curling C. J. // J.Appl.Phys.- 1987. - Vol.62 - P.4154-4158.
41. Fewster P.F. // Inst. Phys. Conf. - 1999. - 164. - P.197-206.
42. Chut X., Tanner B.K. // Semicond. Sci. Technol. - 1987. - 2. - P.765-771.
43. Афанасьев А.М, Александров П.А, Имамов Р.П. Рентгендифракционная диагностика субмикронных слоев. - М.: Наука, 1989.- 152с.
44. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамов Р.М., Ломов А.А. // Кристаллография. - 2000.-т.45, №4.-С.715-721.
45. Vreeland T.Jr., Pain B.H. // J.Vac. Sci. Technol.- 1989. - Vol. A4. - P.3153-

3159.

46. Аргунова Т.С., Баранов А.Н., Рувимов Л.М. С.С., Сорокин Л.М., В.В. Шерстнев. // ФТТ.-1989.- т.31, №8.-С.158-164.
47. Гончарский А.В, Колпаков А.В. Степанов А.А. // Метрология, 1986. - № 11 -С.19-23.
48. Zaus R. // Appl. Cryst.-1993.-26.-Р.801-811.
49. Кютт Р.Н. // Физика твердого тела. - 1997. - Т.39, №7.-С.1188-1193.
50. Фалеев Н.Н., Чалдышев В.В., Куницын А.Е., Преображенский В.В., Путьто М.А., Семягин Б.Р., Третьяков В.В. // Физика и техника полупроводников. - 1998. - Т.32, №1. - С.24-31.
51. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. // Журнал технической физики. - 1999.-том 69, вып. 6.-С.67-70.
52. Евтихийев В.П., Котельников Е.Ю., Кудряшов И.В., Токранов В.Е., Фалеев Н.Н. // Физика и техника полупроводников. - 1999. - Т.33, вып.5. - С.634-638.
53. Lones E.D., Modine N.A., Allerman A.A., Kurtz S.R., Wright A.F., Tozer S.T., Wei X. // Physical Review. - 1999. - 60B, No.7. - P.4430-4433.
54. Кютт Р.Н., Ратников В.В., Мосина Г.Н., Щеглов М.П. // Физика твердого тела. - 1999. - Т.41, №1. - С.30-37.
55. Нестерец Я.И., Пунегов В.И., Павлов К.М., Фалеев Н.Н. // Журнал технической физики. - 1999. - Т.69, вып.2. - С.44-53.
56. Xu S.J., Wang H., Li Q., Xie M.H., Wang X.C., Fan W.J., Feng S.L. // Applied physics letters.-2000.-Vol.77, №14.- P.2130-2132.
57. Pan Z., Wang Y.T., Li L.H., Zhang W., Lin Y.W., Zhou Z.Q., Wu R.H. // Journal of Crystal Growth.-2000.-217.- P.26-32.
58. Фалеев Н.Н., Мусихин Ю.Г., Суворова А.А., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Устинов В.М., Tabuchi M., Takeda Y. // Физика и техника полупроводников. - 2001. - Т.35, вып.8.-С.969-978.
59. Yang X., Heroux J.B., Mei L.F., Wang W.I. // Applied physics letters.-2001.- Vol.78, №26.-P.4068-4070.
60. Molodkin V.B., Pessa M., Palevscu E.M., Fodchuk I.M., Kislovskii E.N., Olikhovskii S.I., Vladimirova T.P., Gimchinnsky O.G., Kroitor O.P., Skakunova E.S. // Металлофизика и новейшие технологии. - 2002. - т.24, №4. - С.477-495.
61. Фодчук И.М., Кройтор О.П., Гевик В.Б., Гимчинский О.Г., Молодкин В.Б., Кисловский Е.М., Олиховский С.И., Песса М., Павелеску Е.М. // Металлофизика и новейшие технологии. - 2003. - т.25, №8. - С.1019-1031.
62. Попов Н.Л., Успенский Ю.А., Турьянский А.Г., Пиршин И.В., Виноградов А.В., Платонов Ю.Я. // Физика и техника полупроводников. - 2003. - Т.37, вып.6. - С.700-705.
63. Кладько В.П., Даценко Л.И., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б. // Металлофизика и новейшие технологии.-2003.-т.25, №5.-С.635-645.
64. Кютт Р.Н. // Актуальные вопросы современного естествознания. - Нальчик: Каб.-Балк. ун-т. - 2003. – С.79-95.

65. Takagi S.A. // J. Phys. Soc. Japan. - 1969. - 26, No.5. - P.1239-1253.

Список литературы к главе 10

1. *Semiconductor heteroepitaxy*, edited by B. Gil and R.L. Aulombard (Singapore: World Scientific: 1995).
2. H. Amano and I. Akasaki, Properties, processing, and applications of gallium nitride and related semiconductors, edited by J. Edgar (London: IEE/INSPEC: 1999).
3. Bimberg D., Grundman M., and Ledentsov N.N., *Quantum dot heterostructures* (Chichester: John Wiley & Sons: 1999).
4. Nakamura S. and Fasol G., *The blue laser diode* (Berlin: Springer: 1997).
5. Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М., *Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев* (М.: Наука: 1989).
6. Bowen D.K. and Tanner B.K., *High resolution X-ray diffractometry and topography* (London: Taylor & Francis: 1998).
7. Holy V., Pietch U., and Baumbach T., *High-resolution X-ray scattering from thin films and multilayers* (Berlin: Springer: 1998).
8. Fewster P.F., *X-ray scattering from semiconductors* (London: Imperial College Press: 2000).
9. Speriosu V.S., *J. Appl. Phys.*, **52**, No. 10: 6094 (1981).
10. Speriosu V.S. and Vreeland T., *J. Appl. Phys.*, **56**, No. 6: 1591 (1984).
11. Петрашень П.В., *ФТТ.*, **17**, №9: 2814 (1975).
12. Петрашень П.В., *ФТТ.*, **16**, №8: 2168 (1974).
13. Tapfer L. and Ploog K., *Phys. Rev. B.*, **33**, No. 8: 5565 (1986).
14. Burgeat J. and Taupin D., *Acta Crystallogr. A*, **24**: 99 (1968).
15. Fukuhara A. and Takano Y., *Acta Crystallogr. A*, **33**: 137 (1977).
16. Larson B.C. and Barhorst J. F., *J. Appl. Phys.*, **51**, No. 6: 3181 (1980).
17. Halliwell M. A.G., Lyons M.H., and Hill M. J., *J. Cryst. Growth.*, **68**: 523 (1984).
18. Wie C.R., Tombrello T.A., and Vreeland T., *J. Appl. Phys.*, **59**, No. 11: 3743 (1986).
19. Bartels W.J., Hornstra J., and Lobeek D.J., *Acta Crystallogr. A*, **42**, No. 6: 539 (1986).
20. Belyaev Yu.N. and Kolpakov A.V., *Phys. Stat. solidi. A*, **76**: 641 (1983).
21. Vardanyan D.M., Manoukyan H.M., and Petrosyan H.M., *Acta Crystallogr. A*, **41**: 212 (1985).
22. Holý V., Kuběna J., and Ploog K., *Phys. Stat. solidi. B*, **162**, No. 2: 347 (1990).
23. Dimer M., Gerdau E., Ruffer R. et al., *J. Appl. Phys.*, **79**, No. 12: 9090 (1996).
24. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамов Р.М. и др., *Кристаллография*, **42**, №3: 514 (1997).
25. Mukhamedzhanov E.Kh., Bocchi C., Franchi S. et al., *J. Appl. Phys.*, **87**, No. 9: 4234 (2000).
26. Zaumseil P., *Phys. Stat. solidi. A.*, **91**, No. 2: K31 (1985).

27. Zaumseil P., Winter U., Cembali F. et al., *Phys. Stat. solidi. A.*, **100**, No. 1: 95 (1987).
28. Servidori M., Angelucci R., Cembali F. et al., *J. Appl. Phys.*, **61**, No. 5: 1834 (1987).
29. Balboni R., Milita S., and Servidori M., *Phys. Stat. solidi. A.*, **148**, No. 1: 95 (1995).
30. Zaumseil P. and Winter U., *Phys. Stat. solidi. A.*, **120**, No. 1: 67 (1990).
31. Kazimirov A., Faleev N., Temkin H. et al., *J. Appl. Phys.*, **89**, No. 11: 6092 (2001).
32. Cembali F., Servidori M., and Zani A., *Solid State Electron*, **28**: 933 (1985).
33. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамове Р.М., Ломов А.А., *Кристаллография*, **45**, №4: 715 (2000).
34. Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамове Р.М., Ломов А.А., *Кристаллография*, **46**, №5: 781 (2001).
35. Афанасьев А.М., Имамове Р.М., *Кристаллография*, **48**, №5: 786 (2003).
36. Кривоглаз М.А., Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах (Киев: Наук. Думка: 1983).
37. Ferrari C., Bruni M.R., Martelli F., and Simeone M.G., *J. Cryst. Growth*, **126**: 144 (1993).
38. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N. et al., *Phys. Stat. solidi. B*, **227**: 429 (2001).
39. Olikhovskii S.I., Molodkin V.B., Kislovskii E.N. et al., *Phys. Stat. solidi. B*, **231**: 199 (2002).
40. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е., *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наук. Думка: 1988).
41. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Осинковский М.Е., *Металлофизика*, **5**, №1: 3 (1983).
42. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Кисловский Е.Н. и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **19**, №12: 25 (1997).
43. Оліховський С.Й., Кисловський Є.М., Молодкін В.Б. и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, №6: 3 (2000).
44. Кисловський Є.М., Оліховський С.Й., Молодкін В.Б. и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, №7: 21 (2000).
45. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N. et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34**, No. 5: A82 (2001).
46. Петрашень П.В., *Металлофизика*, **8**, № 1: 35 (1986).
47. Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н., *Металлофизика*, **8**, № 3: 45 (1986).
48. Dederichs P.H., *Phys. Rev. B*, **4**, No. 4: 1041 (1971).
49. Larson B.C., *J. Appl. Cryst.*, **8**, No.2: 150 (1975).
50. Larson B.C. and Young F.W. (Jr.), *Phys. Stat. solidi. A*, **104**, No. 1: 273 (1987).
51. Molodkin V.B., Pessa M., Pavelescu E.M. et al., *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **24**, No. 4: 477 (2002).
52. Фодчук И.М., Кройтор О.П., Гевик В.Б. и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **25**, №9: 1219 (2003).

53. Молодкин В.Б., Кисловский Е.Н., Олиховский С.И. и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **25**, №12: 1605 (2003).
54. Стрельчук В.В., Кладько В.П., Валах М.Я. и др., *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології*, **1**, №1: 309 (2003).
55. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Прокопенко И.В. и др., *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології*, **1**, №2: 447 (2003).
56. Fewster P.F., *J. Appl. Cryst.*, **25**, No. 6: 714 (1992).
57. Holý V., Kuběna J., Abramof E. et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **26**, No. 4: A146 (1993).
58. Lee B.-T., Gronsky R., and Bourret E.D., *J. Appl. Phys.*, **64**, No. 1: 114 (1988).
59. Frigeri C., *J. Cryst. Growth.*, **126**: 91 (1993).
60. Charniy L.A., Morozov A.N., Bublik V.T. et al., *J. Cryst. Growth.*, **118**: 163 (1992).
61. Bloch R., Bahr D., Olde J. et al., *Phys. Rev. B*, **42**, No. 8: 5093 (1990).
62. Бублик В.Т., Щербачев К.Д., *Кристаллография*, **39**, №6: 1105 (1994).
63. Бублик В.Т., Воронова М.И., Марков А.В., Щербачев К.Д., *Кристаллография*, **45**, №5: 893 (2000).
64. Марков А.В., Бублик В.Т., Воронова М.И., Щербачев К.Д., *Поверхность*, № 10: 40 (2001).
65. Tapfer L. and Ploog K., *Phys. Rev. B*, **40**, No. 14: 9802 (1989).
66. Fleischer S., Beling C.D., Fung S. et al., *J. Appl. Phys.*, **81**, No. 1: 190 (1997).
67. Arora V.M., Chandrasekaran K.S., Gokhale M.R. et al., *J. Appl. Phys.*, **87**, No. 12: 8444 (2000).
68. Staab T.E.M., Nieminen R.M., Gebauer J. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **87**, No. 4: 045504-1 (2001).
69. Branicio P.S., Rino J.P., Shimojo F. et al., *J. Appl. Phys.*, **94**, No. 6: 3840 (2003).
70. Олиховский С.И., Молодкин В.Б., Кисловский Е.Н., и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, №1: 1605 (2005).

Список литературы к главе 11

1. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. (М.: Мир: 1989).
2. Holy V., Kubena J., Ploog K. *Phys. Stat. Sol. (b)*. **162**, No.3: 347 (1990).
3. Speriosu V.S., Vreelang T. X-ray rocking curve analysis of superlattice. // *J. Appl. Phys.* –1984. – **56**, №6. – P.1591-1600.
4. Holy V., Pietch U., Baumbach T. *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers*. (Berlin: Springer: 1998).
5. Herzog H.-J. *Sol. Stat. Phenomena*. **32-33**, 523 (1993).
6. Tapfer I., Ploog K. *Phys. Rev. B*. **33**: 5565 (1986).
7. Пунегов В.И. *ФТТ*. **37**, №4: 1134 (1995).
8. Kladko V.P., Datsenko L.I., Kuchuk A.V., Shalimov A.V., Domagala J., Korchovy A.A. (2004) *Ukr.Phys.Journ.* **49**, No 1. 345-356.
9. Пунегов В.И. *Письма в ЖТФ*. **18**, №4: 66 (1992).

10. Пунегов В.И. Кристаллография. **35**, №3: 576 (1990).
11. Kyutt R.N., Petrashen P.V., Sorokin L.M. Phys. Stat. Sol. (a), **60**, No.11: 381 (1980).
12. Бушуев В.А. ФТТ. **31**, №11: 70 (1989).
13. Даценко Л.И., Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии. (Киев: Академперіодика: 2002).
14. Пунегов В.И., Павлов К.М. Кристаллография. **38**, №5: 34 (1993).
15. Кладько В.П., Даценко Л.И., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б. // Металлофизика и нов. технологии. – 2003. – **25**, №4. – С.556-564.
16. Kladko V., Datsenko L., Machulin V., Domagala J., Lytvyn P., Bak-Misiuk J., Kuchuk A., Korchovy A. // J.Appl.Cryst. (2004). **37**. P.150-155..
17. Tapfer I., Ploog K. X-ray interference in ultrathin epitaxial layers: A versatile method for the structural analysis of single quantum wells and heterointerfaces. // Phys. Rev. B. – 1989. – **40**, N14. – P.9802-9810.
18. Kladko V., Datsenko L., Korchovy A., Machulin V., Lytvyn P., Shalimov A., Kuchuk A., Kogutyuk P. // Semicond. Phys. Quantum & Optoelectr. (2003). **6**, No3. P.293-298.
19. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Прокопенко И.В., Литвин П.М., Когутюк П.П., Корчевой А.А. // Металлофизика и нов. технологии. – 2004. – **26**, №2. – С.217-227.
20. Дроздов Ю.Н., Гусев С.А., Садова Е.Н., Данильцев В.М., Хрыкин О.И., Шашкин В.И. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. (2003). №2. 67.
21. Kyutt R.N., Shubina T.V., Sorokin S.V., Solnyshkov D.D., Ivanov S.V., Willander M. // J. Phys. D: Appl. Phys. (2003). **36**, No3. P.A166-A171.
22. Mukai K., Nakata Y., Otsubo K., Sugawara M., Yokoyama N., Ishikawa H. IEEE J. Quantum Electron. **36**, 556 (2000).
23. Li H., Zhuang Q., Wang Z., Daniels-Race T. Appl. Phys. Lett. **87**, 188 (2000).
24. Brussaferi L., Sanguinatti S., Grilli E. Appl. Phys. Lett. **69**, 3354 (1996).
25. Chu L., Zrenner A., Bohm G., Abstraiter G. Appl. Phys. Lett. **76**, 1944 (2000).
26. Пунегов В.И. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. №2. 21 (2003).
27. Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Стрельчук В.В., Прокопенко И.В., Гудыменко А.И., Корчевой А.А. // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології, **1**, №2, 447 (2003).
28. Zhang K., Cheyn h., Hansen W. Appl. Phys. Lett. **77**, No9 1295 (2000).
29. Mano T., Notzel R., Hamhuis G.J., Eijkemans T.J., Wolter J.H. J. Appl. Phys., (2004), **95**, No1. P.109-114.
30. Hóly V., Stangl J., Springholz G., Pinczolits M., Bauer G., Kegel I., Metzger H. Physica (B), **283**, 65 (2000).
31. Zhuang Z., Stangl J., Darchuber A.A., Bauer G., Mikulik P., Holy V., Darowski N., Pietsch U.. J. Mater. Science. – 1999. - **10**, 215-221.
32. Tersoff J., Teichert C., Lagalli M.G. Phys. Rev. Lett. – 1996. – **76**. 1675-1679.

33. Xie Q., Madhukar A., Chen P., Kobayashi N.P. Phys. Rev. Lett. – 1995. – **75**. 2542-2549.
34. Holy V., Darchuber A.A., Stangl J., Zerlauth S., Shaffler F., Bauer G., Darowski N., Lubbert D., Pietsch U., Varva I. Phys. Rev. – 1998. – **B58**. 7934-7945.
35. Darchuber A.A., Schittenhelm P., Holy V., Stangl J., Bauer G. Phys. Rev. – 1997. – **B55**. 15652-15661.
36. Hu S.M. J. Appl. Phys. – 1989. – **66**. 2741-2748.
37. Darchuber A.A., Schittenhelm P., Hóly V., Stand J., Bauer G., Abstreiter G. // Phys. Rev. B. **55**, No23. 15652 (1997).
38. Kegel I., Metzger T.H., Lorke A., Pai J., Stangl J., Bauer G., Garcia J.M., Petroff P.M. Phys. Rev. Lett. **85**, No8. 1694 (2000).
39. Нестерец Я.И., Пунегов В.И., Павлов К.М., Фалеев Н.Н. Журнал технической физики, **69**, №2. 44. (1999).
40. Zhuang Q.D., Li J.M., Zeng Y.P., Pan L., Li H.X., Kong M.Y., Lin L.Y. J.Cryst.Growth. **200**. 375 (1999).
41. Nesterets Y.I. and Punegov V.I. Acta Cryst.(A), **A56**, 540 (2000).
42. Pavlov K.M., Punegov V.I. Acta Cryst.(A), **A56**, 227 (2000).
43. Darchuber A.A., Schittenhelm P., Hóly V., Stand J., Bauer G., Abstreiter G. // Phys. Rev. B. **55**, No23. 15652 (1997).
44. Darchuber A.A., Koppensteiner E., Bauer G., Wang P.D., Song Y.P., Sotomayor Torres C.M., Holland M.C. // J. Phys. D.: Appl.Phys. **28**, No 4. 195-199 (1995).
45. Dederichs P.H., Phys. Rev. (B), **B4**, 1041 (1971).
46. Molodkin V.B., Olikhovski S.I., Osinovski M.E., Phys. Metals, **5**, 1 (1984).
47. Фалеев Н.Н., Павлов К.М., Пунегов В.И., Егоров А.Ю., Жуков А.Е., Ковш А.Р., Михрин С.С., Устинов В.М., Tabuchi M., Takeda Y. ФТП, **33**, №11. 1359 (1999).
48. Hsieh K.C., Baillargeon J.N., Cheng K.G. Appl. Phys. Lett. – 1990. – **57**. P.2244-2252.
49. Chen A.C., Moy A.M., Chou L.J., Hsieh K.C., Cheng K.Y. // Appl. Phys. Lett. – 1995. – **66**, No1. – P.2694-2697.
50. Chou S.T., Cheng K.Y., Chou L.J., Hsieh K.C. // J. Appl. Phys. – 1995. – **78**, P.6270-6273.
51. Normann A.G., Achrenkiel S.P., Moutinho H., Al-Jassim M.M., Mascarenhas A., Mirecki-Millunchick J. // Appl. Phys. Lett. – 1998. – **73**, – P.1844-1849.
52. Glas F. J. Appl. Phys. – 1987. – **62**. P.3201-3206.
53. Stokes D.W., Forrest R.L., Li J.H., Moss S.C., Noshu B.Z., Bennett B.R., Whitman L.J., Goldenberg M. J. Appl. Phys. – 2003. – **93**. No 1. P.311-315.

Молодкін Вадим Борисович
Низкова Ганна Іванівна
Шпак Анатолій Петрович
Мачулін Володимир Федорович
Кладько Василь Петрович
Прокопенко Ігор Васильович
Кютт Регінальд Миколайович
Кисловський Євгеній Миколайович
Оліховський Степан Йосипович
Фодчук Ігор Михайлович
Дишеков Артур Альбекович
Хапачев Юрій Пшиканович

**ДИФРАКТОМЕТРІЯ
НАНОРОЗМІРНИХ ДЕФЕКТІВ
І ГЕТЕРОШАРІВ КРИСТАЛІВ**

Видавничий дім „Академперіодика” НАН України

01004, Київ-4, вул. Терещенківська, 4.

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру суб'єктів
видавничої справи серії ДК №544 від 27.07.2001 р.

Підписано до друку 09.12.2004. Формат.

Папір офсетний. Друк ризографічний.

Ум. друк. Арк.8,66. Обл.-вид.арк.9,20.

Наклад 300 прим. Зам. № 1025

Друкарня видавничого дому „Академперіодика”

01004, Київ-4, вул.Терещенківська, 4.