

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ
ім.В.Є. ЛАШКАРЬОВА

В.П. КЛАДЬКО, В.Ф. МАЧУЛІН,
Д.О. ГРИГОР'ЄВ, І.В. ПРОКОПЕНКО

РЕНТГЕНООПТИЧНІ ЕФЕКТИ В БАГАТОШАРОВИХ ПЕРІОДИЧНИХ КВАНТОВИХ СТРУКТУРАХ

За редакцією
доктора фізико-математичних наук
В.П. Кладька

*ПРОЕКТ
«НАУКОВА КНИГА»*

КИЇВ НАУКОВА ДУМКА 2006

Наукове видання
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ ІМ. В.Є. ЛАШКАРЬОВА

КЛАДЬКО Василь Петрович
МАЧУЛІН Володимир Федорович
ГРИГОР'ЄВ Данило Олегович
ПРОКОПЕНКО Ігор Васильович

РЕНТГЕНООПТИЧНІ ЕФЕКТИ В БАГАТОШАРОВИХ ПЕРІОДИЧНИХ КВАНТОВИХ СТРУКТУРАХ

Київ, видавництво «Наукова думка»

Оформлення художника *І.Р. Сільман*
Художній редактор *Є.І. Муштенко*
Технічний редактор *С.Г. Максимова*
Коректор *В.М. Яценко*
Оператор *В.Г. Каменькович*
Комп'ютерна верстка *О.І. Фуженко*

Підп. до друку 31.01.2006. Формат 60 × 90/16.
Папір офс. № 1. Гарн. Таймс. Друк. офс.
Ум. друк. арк. 18,0. Ум. фарбо-відб. 18,75.
Обл.-вид. арк. 16,8. Тираж 300 прим. Зам. 6–109.

Видавництво «Наукова думка»
Р.с. № 05417561 від 16.03.95
01601 Київ 1, вул. Терещенківська, 3

ЗАТ фірма «Віпол» 03151 Київ 151, вул. Волинська, 60

ПЕРЕДМОВА

На сьогодні дослідження рентгенодифракційних явищ в багат шарових структурах і надґратках є дуже актуальними, оскільки галузь застосування цих структур займає значне місце в сучасному напівпровідниковому приладобудуванні завдяки своїм неординарним властивостям. Методи рентгенівської дифрактометрії, особливо високороздільної, дозволяють отримати інформацію про ці структури, яка недоступна для інших методів. Зокрема, це дослідження форми, складу, симетрії граней окремих квантових точок за допомогою синхротронного випромінювання. Рентгенодифракційні методи дозволяють контролювати також закриті квантові точки.

Кожних два роки проблемам високороздільної дифрактометрії присвячуються міжнародні конференції (ХТОР). На цих конференціях обговорюються сучасні досягнення теорії та експерименту в області високороздільної рентгенівської дифрактометрії, включаючи нові можливості, пов'язані із застосуванням синхротронного випромінювання, а також питання, які стосуються розвитку теорії розсіяння рентгенівських променів (РП) і визначення характеристик квантових багат шарових структур.

У світовій літературі невпинно зростає кількість праць, присвячених цим питанням. Відділ структурних досліджень інституту також має певні напрацювання в цьому напрямі. Тому виникла думка: вперше в Україні систематизувати досягнення щодо дифракційних досліджень багат шарових структур у вигляді окремого видання.

Дана монографія розрахована на читача з певним рівнем підготовки з основ кристалографії та теорії розсіяння рентгенівських променів, а також з математики.

На сьогоднішній день у світі видано близько десяти монографій, присвячених методам високороздільних досліджень квантово-розмірних структур. Найбільш відомі з них — [18—21]. У перших двох монографіях велика увага приділяється технологічним аспектам експериментів з високороздільною здатністю, особливо техніці монохроматизації випромінювання, а також різним схемам високороздільної дифрактометрії. Тому ці питання в даній книзі практично не висвітлюються. Однак навіть у цих працях, які скоріше є навчальними посібниками, не відзначені останні досягнення в галузі рентгенівських досліджень багатoshарових структур, зокрема із вбудованими квантовими точками і дротами.

Такі дослідження становлять самостійну задачу, яка на жаль ще далека від повного розв'язання. Добре відомо, що дифракція РП адекватно описується динамічною теорією розсіяння випромінювань в ідеальному періодичному середовищі великої протяжності (товщина кристала перевищує екстинкційну довжину, на якій формується дифракційний максимум). Завдяки багатократності актів розсіяння (друге наближення Борна в задачі розсіяння випромінювань) у кристалі формуються самоузгоджені блохівські хвилі, модульовані тривимірним періодичним середовищем.

За умов динамічної дифракції РП навіть слабкі (порядку діелектричної сприйнятливості кристала 10^{-7} — 10^{-6}) деформації кристалічної ґратки призводять до істотних змін дифракційних параметрів унаслідок порушення когерентності хвильових полів (блохівських хвиль). Ця обставина служить основою діагностики реальної структури слабо спотворених кристалів.

За останні роки досягнуті значні успіхи в розробці динамічної теорії дифракції РП на неідеальних кристалах з дефектами різного роду, які однорідно розподілені в об'ємі кристала.

У даній монографії приділено увагу основним принципам дифракції випромінювання в періодичних структурах (розд.1). А також коротко наведено аналіз дифракції Френеля, фур'є-зображень та фур'є-перетворення. Проведений також аналіз дифракційних ефектів у двовимірній та тривимірній ґратках прямо-го простору.

Розділ 2 присвячений короткому огляду сучасних методів аналізу тонких епітаксійних структур, структур з квантовими точками і надґраток.

У розділі 3 розглянуті основні рентгенодифракційні ефекти, що виникають у багат шарових структурах — надґратках(НГ). Проаналізовані принципи формування спектрів дифракції в таких структурах. Велика увага приділена питанням дифракції в НГ при використанні квазізаборонених рефлексів. Значна частина розділу присвячена можливостям аналізу параметрів надґраткових структур. Зокрема, досить детально розглянуте питання впливу форми гетероінтерфейсу (різного градієнта складу на границях шарів) на дифракційні спектри в багат шарових структурах.

Розділ 4 присвячений методам трикристальної дифрактометрії. Зокрема, велика увага приділяється методам побудови і аналізу карт двовимірного розподілу інтенсивності навколо вузлів ґратки. Відзначається висока інформативність цього методу для отримання параметрів епітаксійних шарів, наприклад рівня релаксації, деформаційного стану і т.д.

У розділі 5, найбільшому за обсягом, наведено основні результати по дослідженню цікавих і складних структур з квантовими точками та дротами. Зокрема, досить детально проаналізовані геометрія оберненого простору, різні перерізи навколо вузлів оберненої ґратки, які дозволяють отримати максимум інформації про ці структури. Проаналізовані також можливості теоретичної симуляції як карт оберненого простору, так і окремих перерізів розподілу інтенсивності навколо вузлів. Показана можливість отримання даних про деформаційний стан, розподіл компонентів за висотою квантових точок (КТ), інформації про форму і симетрію їх граней.

Розділ 6 присвячений дослідженням анізотропії залишкових деформацій в багатошарових (In,Ga)As/GaAs-структурах з квантовими нитками, підданих швидкому термічному відпалу методом високороздільної рентгенівської дифрактометрії.

Автори висловлюють щире подяку співробітникам інституту В.Б. Молодкіну, В.В. Стрельчуку, П.М. Лит-вину, О.Й. Гудименку, А.А. Корчовому та аспіранту О.М. Єфанову за активну участь в дослідженнях розсіяння рентгенівських променів багатошаровими структурами, Ю.І. Мазуру за надані для досліджень зразки, а також Н.М. Проскуренко та Ю. Рябченку за допомогу в підготовці рукопису.

СПИСОК СКОРОЧЕНЬ ТА ОСНОВНИХ УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

АСМ — атомна силова мікроскопія
ДКС — двокристальний спектрометр
ДР — дифузне розсіяння
КТ — квантові точки
НГ' — надґратки
БШС — багат шарові структури
КЯ — квантова яма
КДВ — крива дифракційного відбиття
КОП — карта оберненого простору
МСЕ — метод скінчених елементів
DWBA — спотворена хвиля в борнівському наближенні
ДРРП — динамічне розсіяння рентгенівських променів
ДП — дисперсійна поверхня
ПЕМ — просвітлювальна електронна мікроскопія
II — інтегральна інтенсивність
ІВЗ — інтегральна відбивна здатність (R_i)
КЗР — квазізаборонені рефлексії
МОІ — маятникові осциляції інтенсивності
МСВІ — мас-спектрометрія вторинних іонів
ТКС — трикристальний спектрометр
ОГ' — обернена ґратка
ПІВЗ — повна інтегральна відбивна здатність ($R_i = R_B + R_D$)
РП — рентгенівські промені
ТД — точкові дефекти
ТОГ' — точка оберненої ґратки
ТДР — термодифузне розсіяння
ВОГ' — вузол оберненої ґратки
ШТВ — швидкий термічний відпал
КН — квантові нитки
q, k — хвильові вектори
 R_B — когерентна частина ПІВЗ

- R_D — дифузна складова ПІВЗ
 $\exp(-L)$ — статичний фактор Дебая—Валлєра
 $\exp(-M)$ — динамічний фактор Дебая—Валлєра
 F — структурний фактор
 C, P — фактор поляризації, що дорівнює 1 або $\cos 2\theta$
 λ — довжина хвилі рентгенівських променів
 χ — сприйнятливість кристала
 $\chi_{r,i}$ — дійсна і уявна частини χ
 t — товщина кристала
 ϑ, ϑ_B — брегівський кут
 Λ — екстинкційна довжина
 μ_0 — нормальний коефіцієнт фотоелектричного поглинання
 f_0 — функція атомного розсіяння
 f', f'' — дійсна і уявна поправки до f_0
 J_0, I_0 — функція Бесселя дійсного і уявного аргументу
 d — міжплощинна відстань
 δ, φ, β — фазові кути
 h, \mathbf{H} — порядок відбиття, дифракційний вектор
 \mathbf{Q}, \mathbf{G} — вектори оберненої ґратки
 $\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_h$ — хвильові вектори
 C — поляризаційний множник (1 або $\cos 2\vartheta_B$)
 N_d — густина дислокацій, см^{-2}
 u, w — безрозмірні параметри відхилення падаючого променя від точного кута Бреґга (порядку $\vartheta_i - \vartheta_B$)



1.1. ВСТУП

Цей розділ присвячено основним поняттям теорії розсіяння рентгенівських променів. Тут розглянуто інтенсивності рентгенівського відбиття в кінематичному наближенні для тонкого кристала; проведено аналіз результатів динамічної теорії, зокрема поняття дисперсійної поверхні, граничні умови, області дифракції, формули інтенсивності. Розглянуто також методи чисельних розрахунків кривих дифракційного відбиття: теорію Такагі—Топена, методи рекурентних співвідношень та матричного наближення. А також наведено деякі співвідношення для специфічних (ковзних) геометрій дифракції. Крім того, тут подано основні співвідношення для багатозарових періодичних структур (надґраток).

1.2. ОПТИЧНІ ПРИНЦИПИ РОЗСІЯННЯ

1.2.1. ЕЛЕКТРОМАГНІТНІ ХВИЛІ, ХВИЛЬОВЕ РІВНЯННЯ

Для вивчення процесів розповсюдження і розсіяння пучків будь-яких випромінювань широко застосовується підхід з використанням хвильових функцій. Хвильова функція є комплексна функція просторових координат $\psi(\mathbf{r})$, що характеризується довжиною хвилі (періодичністю) λ та хвильовим вектором \mathbf{k} , модуль якого традиційно визначаємо $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Інтенсивність або пере-

несення енергії задається величиною $|\psi(\mathbf{r})|^2$. Ці функції є розв'язками диференціальних рівнянь одного типу — хвильового рівняння. Якщо розглядати лише процеси, які відбуваються без помітних втрат

енергії, то підхід, заснований на використанні хвильових функцій і відносно простої напівкласичної хвильової механіки, а не квантової, є цілком виправданим.

У випадку електромагнітних хвиль хвильове рівняння, як правило, записується для векторів електричного і магнітного полів \mathbf{E} або \mathbf{H} :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} \equiv \nabla^2 \mathbf{E} = \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (1.1)$$

де ε — діелектрична проникність; μ — магнітна проникність середовища. У більшості випадків, коли використовується неполяризоване випромінювання, його векторний характер нас цікавить мало і може бути врахований введенням поляризаційних коефіцієнтів. А тому перейдемо до скалярної форми запису хвильового рівняння:

$$\nabla^2 \psi = \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}. \quad (1.2)$$

За винятком окремих випадків $\mu = 1$, а діелектрична проникність ε та відповідно показник заломлення $n = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}$ є функції положення в просторі і залежать від електронної густини.

Для пружної взаємодії, коли частота випромінювання не змінюється, хвильова функція має вигляд

$$\psi = \psi_s \exp(i\omega t).$$

При цьому, оскільки $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\omega^2 \psi$, хвильове рівняння (1.2) приймає вигляд

$$\nabla^2 \psi = -\varepsilon \mu \omega^2 \psi,$$

або

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0, \quad (1.3)$$

де k хвильове число, яке дорівнює $\sqrt{\varepsilon \mu} \omega$.

Для частинок у потенціальному полі хвильове рівняння є рівнянням Шредінгера і має схожу форму:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi + \mu \varphi(\mathbf{r}) \psi = 0, \quad (1.4)$$

де $\varphi(\mathbf{r})$ — потенціал поля; μ — деякий параметр, що визначає силу взаємодії частинки з потенціальним полем.

Простий розв'язок хвильового рівняння (1.3), (1.4) будемо шукати в формі

$$\psi = \psi_0 \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

він є плоскою хвилею, що розповсюджується в напрямі, визначеному вектором \mathbf{k} ; $|\mathbf{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Ще один важливий розв'язок відповідає сферичній хвилі, яка випромінюється точковим джерелом, розміщеним у початку координат:

$$\psi = \psi_0 \frac{\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})}{r}. \quad (1.6)$$

1.2.2. ПРИНЦИП ГЮЙГЕНСА. ФОРМУЛЮВАННЯ КІРХГОФА

Таким чином, хвильові функції для електромагнітних хвиль (а також і для частинок) є розв'язки лінійних диференціальних рівнянь подібних (1.3). Фундаментальною властивістю розв'язків таких рівнянь є те, що їх сума також є розв'язок. Тобто, якщо в просторі існує певне число хвиль, поданих хвильовими функціями ψ_n , то результуюче збудження буде задане хвильовою функцією $\psi = \sum_n \psi_n$. Це твердження — так званий *принцип суперпозиції*, є

основою для розгляду явищ розсіяння.

Розповсюдження хвилі в просторі також буде демонстрацією цього універсального принципу.

Ідея, на якій ґрунтується принцип Гюйгенса, полягає в тому, що хвилі розповсюджуються в просторі так, що кожна точка початкового хвильового фронту служить джерелом нової, вторинної

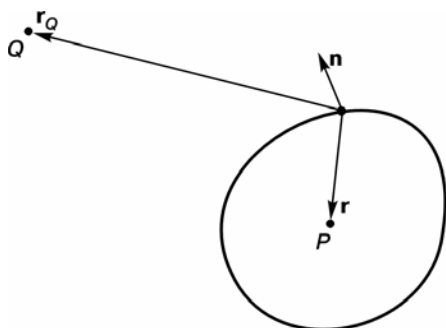


РИС. 1.1. Ілюстрація до формули Кірхгофа. Q — джерело хвилі; P — точка спостереження

Тоді маємо

$$u_P = \frac{1}{4\pi} \oint_S \left(\frac{\exp(-ikr)}{r} \text{grad } u - u \text{grad} \left[\frac{\exp(-ikr)}{r} \right] \right) dS.$$

Якщо хвильове поле викликане точковим джерелом, яке знаходиться в точці Q (рис. 1.1), то одержимо

$$u_P = \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\exp(-ikr)}{r} \frac{\exp(-ikr_Q)}{r_Q} \times \left(\left[\frac{1}{r} + ik \right] \cos(\angle \mathbf{n}, \mathbf{r}) - \left[\frac{1}{r_Q} + ik \right] \cos(\angle \mathbf{n}, \mathbf{r}_Q) \right) dS, \quad (1.7)$$

де $\angle \mathbf{n}, \mathbf{r}$ і $\angle \mathbf{n}, \mathbf{r}_Q$ — кути між нормаллю до поверхні та векторами \mathbf{r} і \mathbf{r}_Q до точок P і Q . Якщо вважати, що всі розміри набагато більші, ніж довжини хвиль, то величинами r^{-1} і r_Q^{-1} можна знехтувати порівняно з k . При цьому отримуємо:

$$u_P = \frac{i}{2\lambda} \oint_S \frac{\exp(-ikr)}{r} \frac{\exp(-ikr_Q)}{r_Q} [\cos(\angle \mathbf{n}, \mathbf{r}) - \cos(\angle \mathbf{n}, \mathbf{r}_Q)] dS. \quad (1.8)$$

З точки зору принципу Гюйгенса це означає, що вторинні сферичні хвилі $r^{-1} \exp(-ikr) dS$, які випромінюються кожним елементом поверхні, мають амплітуду, пропорційну амплітуді хвилі $r_Q^{-1} \exp(-ikr_Q)$, яка виходить з точки Q . При цьому зсув фази вто-

хвилі s , а обвідна вторинних хвиль стає новим хвильовим фронтом.

Цей інтуїтивно зрозумілий принцип був виражений математично в формулюванні Кірхгофа (рис. 1.1). Збурення, викликане в точці P яким-небудь полем u , що є розв'язком хвильового рівняння, може бути визначене шляхом інтегрування по довільній замкнутій поверхні, яка містить у собі точку P .

ринної хвилі відносно первинної на $\frac{\pi}{2}$ задається множителем i , а член в квадратних дужках ілюструє той факт, що хвилі не йдуть назад, тобто лише в напрямі розповсюдження амплітуди хвиль будуть додаватись до максимальних значень.

1.2.3. ПЕРШЕ НАБЛИЖЕННЯ БОРНА

Якщо розглядати не просто процес розповсюдження хвилі (частинки) в просторі, а додаткові процеси, пов'язані з розсіянням у деякому середовищі, то вдалою альтернативою хвильовим рівнянням буде інтегральне рівняння з використанням функції Гріна. У даному випадку функція Гріна є амплітуда в точці спостереження A , яка виникає за рахунок наявності на шляху хвилі деякої точки B , розсіювальна здатність в якій до-рівнює одиниці (рис.1.2). Тоді відповідно до принципу суперпозиції запишемо

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^0(\mathbf{r}) + \mu \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1.9)$$

де $\psi^0(\mathbf{r})$ — падаюча хвиля, а інтеграл являє собою розсіяне випромінювання. Відповідна форма функції Гріна буде мати вигляд

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (1.10)$$

Зазначимо, що на відміну від підходу Гюйгенса—Кірхгофа інтегрування в (1.10) проводиться не по замкнутій поверхні, побудованій навколо точки спостереження A , а по об'єму, в якому падаюча хвиля перерозсіюється. При цьому в кожній точці розсіювального об'єму зароджується сферична хвиля, амплітуда якої визначається потенціалом розсіяння $\varphi(\mathbf{r}')$, а також хвильовою функцією $\psi(\mathbf{r}')$, яка встановлюється в розсіювальному об'ємі.

Варто зазначити, що прямо визначити функцію $\psi(\mathbf{r}')$ неможливо, оскільки розсіяне випромінювання саме дає внесок в значення $\psi(\mathbf{r}')$. Однак, якщо амплітуда розсіяної хвилі значно менша ніж падаючої, то в першому наближенні можна вважати, що $\psi(\mathbf{r}')$ під інтегралом можна замінити на $\psi^0(\mathbf{r}')$. Це так зване **перше борнівське наближення**.

Для плоскої падаючої хвилі $\psi^0(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{r})$ перше борнівське наближення дає

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \psi^{(1)}(\mathbf{r}) = \\ &= \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + \frac{\mu}{4\pi} \int \frac{\exp(-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi(\mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.11)$$

За звичайних умов спостереження дифракційного експерименту відстань до точки спостереження велика порівняно з розмірами розсіювального об'єкта. Тоді, позначивши віддалену точку спостереження як \mathbf{R} і ввівши вектор розсіяння $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, одержимо асимптотичну форму рівняння:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \psi^{(1)}(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{R}) + \\ &+ \frac{\mu}{4\pi} \frac{\exp(-ik_0R)}{R} \int \varphi(\mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Вираз (1.12) можна переписати в формі, яка більш наглядно відтворює процес перерозсіяння хвилі на збуренні, ввівши амплітуду розсіяння $f(\mathbf{q})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{R}) + R^{-1} \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{R}) f(\mathbf{q}), \quad (1.13)$$

де

$$f(\mathbf{q}) = \frac{\mu}{4\pi} \int \varphi(\mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (1.14)$$

Це перше блохівське наближення для амплітуди розсіяння, яке отримуємо в припущенні, що амплітуда падаючої хвилі дорівнює амплітуді заломленої хвилі, тобто що амплітуда розсіяної хвилі є надзвичайно малою. Розсіяна хвиля утворюється за рахунок внесків, одержаних при безпосередньому розсіянні падаючої хвилі. Таким чином, **перше борнівське наближення — це наближення однократного (чи кінематичного) розсіяння**. Відзначимо також, що вираз (1.14) для амплітуди роз-

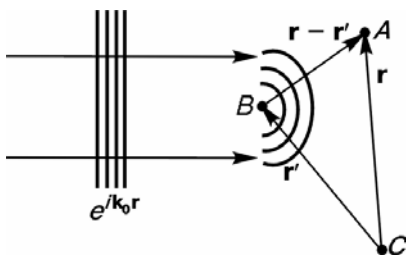


РИС. 1.2. Перерозсіяння плоскої хвилі в точці B з утворенням вторинної сферичної хвилі

сіяння відповідає за формою фур'є-перетворенню. Це одна із перших чітких вказівок на те, що **розсіяння хвиль на об'єктах є фізична реалізація перетворення Фур'є** просторової функції розподілу розсіювального потенціалу в простір хвильових векторів \mathbf{q} .

1.2.4. ПРИНЦИП ВЗАЄМНОСТІ

Відзначимо одну важливу властивість, притаманну і формулі Кірхгофа (1.8), і вираз (1.12) для однократного розсіяння (перше наближення Борна): ці вирази симетричні (зворотні) щодо джерела та точки спостереження.

Так, якби джерело знаходилося у точці P (рис. 1.1), а точка Q стала точкою спостереження, то вектори \mathbf{r} і \mathbf{r}_q помінялися б місцями, а результуюча амплітуда залишилася б незмінною.

Вираз (1.12), у свою чергу, пов'язує плоску падаючу хвилю, що визначається вектором \mathbf{k}_0 , та плоску вихідну хвилю з хвильовим вектором \mathbf{k} у випадку, коли джерело і точка спостереження знаходяться на нескінченності. Якщо в цьому випадку джерело і точку спостереження поміняти місцями, то ніяких змін результуючої амплітуди не відбудеться.

Ці спостереження узгоджуються з загальною теоремою хвильової оптики, сформульованою Гельмгольцем [1]: амплітуда збурення в точці P , що виникло завдяки випромінюванню із точки Q , і котре пройшло через яку-небудь систему, де відбуваються лише процеси пружного розсіяння, буде такою самою, як і амплітуда збурення, що спостерігалася б в точці Q , якби точкове джерело знаходилося в точці P .

Принцип взаємності широко використовується при розв'язанні задач розсіяння [2, 3] і буде застосовуватись надалі при чисельному моделюванні дифракційного експерименту.

1.3. РОЗСІЯННЯ НА СУКУПНОСТІ АТОМІВ

1.3.1. РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНАМИ І ОКРЕМИМИ АТОМАМИ

Розсіяння рентгенівських променів речовиною розглядається поетапно: починаючи з розсіяння окремим електроном і поступово ускладнюючи систему.

Нехай на електрон, зафіксований в початку координат деякою пружною силою, падає плоска хвиля, яка розповсюджується вздовж осі z (рис. 1.3):

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[i(\omega t - \mathbf{kr})].$$

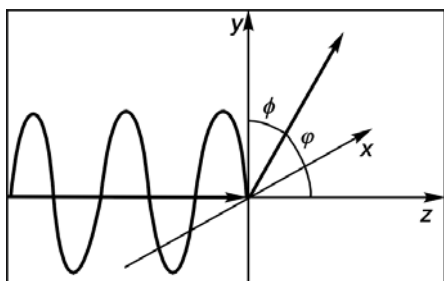


РИС. 1.3. Розсіяння рентгенівських променів окремим електроном

напрямом прискорення електрона в полі падаючої хвилі.

Якщо вибрати систему координат таким чином, щоб падаюча і розсіяна хвиля, яка нас цікавить, знаходились у площині $y-z$ (площині розсіяння), то можна вважати, що компоненти падаючого випромінювання поляризовані в площинах $y-z$ і $x-z$. Для першого випадку так званої π -поляризації $\phi = \frac{\pi}{2} - \varphi$ і амплітуда розсіяної хвилі буде визначатися за формулою

$$|\mathbf{E}| = E_0 \frac{e^2}{mc^2} \frac{1}{R} \cos \varphi,$$

де φ — кут розсіяння. Для поляризації в площині $x-z$ $\phi = \frac{\pi}{2}$ (так звана σ -поляризація) амплітуду можна розрахувати так:

$$|\mathbf{E}| = E_0 \frac{e^2}{mc^2} \frac{1}{R}.$$

Для неполяризованого падаючого випромінювання повна інтенсивність розсіяного в даному напрямі випромінювання до-рівнює сумі інтенсивностей для двох станів поляризації, тобто

$$I = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1}{R^2} \left(\frac{1 + \cos^2 \varphi}{2} \right). \quad (1.16)$$

Формула (1.16) дійсна для будь-якого типу заряджених частинок, але із-за наявності множника m^{-2} інтенсивністю розсіяння на важких

У цьому випадку класична теорія Томсона дає амплітуду розсіяння

$$\mathbf{E}_s = -\mathbf{E}_0 \frac{e^2}{mc^2} \frac{1}{R} \sin \phi \times \exp[i(\omega t - \mathbf{k}R)], \quad (1.15)$$

де R — відстань до точки спостереження; ϕ — кут між напрямом розсіяної хвилі і

об'єктах, таких, як атомні ядра, можна знехтувати. Відповідно до принципу невизначеності положення електрона повинно характеризуватися не координатами, а імовірнісною функцією розподілу електронної густини $\rho^e(\mathbf{r})$. При цьому чисто пружне розсіяння буде визначатись такою усередненою за часом функцією розсіяння на електронній густині. Амплітуду розсіяння електронною хмарою прийнято записувати в скалярній формі і, щоб уникнути констант, у так званих електронних одиницях розсіяння

$\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1}{R^2}$. Поляризаційний фактор $\left(\frac{1 + \cos^2 \varphi}{2}\right)$ може бути врахований лише на кінцевій стадії розрахунків. Адаптовану формулу амплітуди розсіяння в першому борнівському наближенні для електронів отримаємо заміною $-\varphi(\mathbf{r})$ на $\rho^e(\mathbf{r})$ і, виразивши в електронних одиницях розсіяння, одержимо

$$f^e(\mathbf{q}) = \int \rho^e(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r} . \quad (1.17)$$

Для всіх електронів, зв'язаних з одним атомом, пружне розсіяння відповідає усередненій за часом функції електронної густини

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \rho^e(\mathbf{r}) ,$$

тоді

$$f(\mathbf{q}) = \sum f^e(\mathbf{q})$$

і амплітуда атомного розсіяння визначається так:

$$f(\mathbf{q}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r} . \quad (1.18)$$

Всі наведені до сьогодні вирази, які стосуються розсіяння РП на електронах і атомах, ґрунтувались на припущенні, що енергія кванта падаючого випромінювання далека від будь-якої із енергій збудження даного атома. Однак, якщо енергія падаючого випромінювання близька до полоси поглинання атома, то і показник заломлення, і амплітуда атомного розсіяння стають комплексними величинами. У цьому випадку до амплітуди f^0 додається уявна і незначна дійсна частини — так звані дисперсійні поправки:

$$f = f^0 + f' + f''.$$

Більш повний аналіз закономірностей зміни амплітуди розсіяння поблизу країв поглинання наведено в праці [4], присвяченій аномальному поглинанню РП.

1.3.2. ДИФРАКЦІЯ ЯК ПЕРЕТВОРЕННЯ ФУР'Є, ПРЯМИЙ І ОБЕРНЕНИЙ ПРОСТІР. ФУНКЦІЯ ФОРМИ

Як уже вказувалося, дифракційні процеси часто математично описуються мовою фур'є-перетворень. Якщо не вдаватись до міркувань про математичні вимоги, які висуваються до перетворюваних функцій, то класичний запис фур'є-перетворення в експоненційній формі має такий вигляд:

$$F(u) = \int f(r) \exp(2\pi iur) dr . \quad (1.19)$$

Таким чином, вираз (1.19) є класичним записом фур'є-перетворення функції розподілу електронної густини з точністю до нормувальної константи 2π . Наявність чи відсутність цієї константи є лише питання зручності і залежить від початкових домовленостей. Можна сказати, що існує два підходи: кристалографічний і фізичний. У рамках першого підходу для збереження класичної чистоти запису вважаємо, що хвильовий вектор випромінювання $|\mathbf{k}| = \frac{1}{\lambda}$.

З точки ж зору фізики розсіяння зручно вважати, що різниця фаз між двома рознесеними на відстань \mathbf{r} точками повинна визначатись так: $\alpha = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, тобто формула неявно вимагає, щоб $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Будемо віддавати перевагу «фізичній» системі запису, хоча, підкреслюємо, що різниці між ними немає, і вираз, записаний в «фізичній» системі, можна перетворити до кристалографічної простою заміною змінних $q \rightarrow 2\pi u$ з урахуванням того, що $|\mathbf{k}| = \frac{1}{\lambda}$.

Таким чином, все, що спостерігається в експерименті з розсіяння РП, що фіксують детектори — не що інше, як фур'є-образи розподілу електронної густини в матеріальних тілах, подані в оберненому просторі, чи, якщо виходити із розмірності цього простору, в просторі імпульсів. Цей простір не дає інформації про абсолютні координати розсіювальних об'єктів у реальному просторі, а лише про напрям перерозсіяння РП, структуру розсіювальних

об'єктів і опосередковано, в окремих випадках, про їх розміри і взаємне розташування.

У зв'язку зі сказаним вище має сенс розглянути деякі приклади фур'є-перетворень, важливих для подальшого вивчення. Приклади будуть приводитись спочатку для одновимірного випадку з наступною, у випадку необхідності, інтерпретацією дво- і тривимірних випадків.

1.3.2.1. Розсіяння точковим об'єктом

Точковий об'єкт прийнято подавати у вигляді дельта-функції Дірака, яка задається так: $\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & x \neq a, \\ \infty, & x = a. \end{cases}$ При цьому

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) dx = 1. \quad (1.20)$$

Фур'є-образ вказаної функції, або (говорячи фізично) функція розподілу амплітуди розсіяння, буде пропорційна $F(q) = \int \delta(x - a) \exp(iqx) dx$:

$$F(q) = \int \delta(x - a) \exp(iqx) dx = \exp(iqa). \quad (1.21)$$

Спостережувана інтенсивність буде пропорційна $|F(q)|^2 = 1$. Це вказує на добре відомий факт, що картина розсіяння від точкового джерела однорідна за напрямками розсіяння.

1.3.2.2. Розсіяння лінійним об'єктом

Уявимо собі лінійний об'єкт довжиною a , який характеризується однорідною електронною густиною $f(x)$, що дорівнює одиниці (рис. 1.4, а), тобто

$$\rho(x) = \begin{cases} 1, & |x| \leq \frac{a}{2}, \\ 0, & |x| > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (1.22)$$

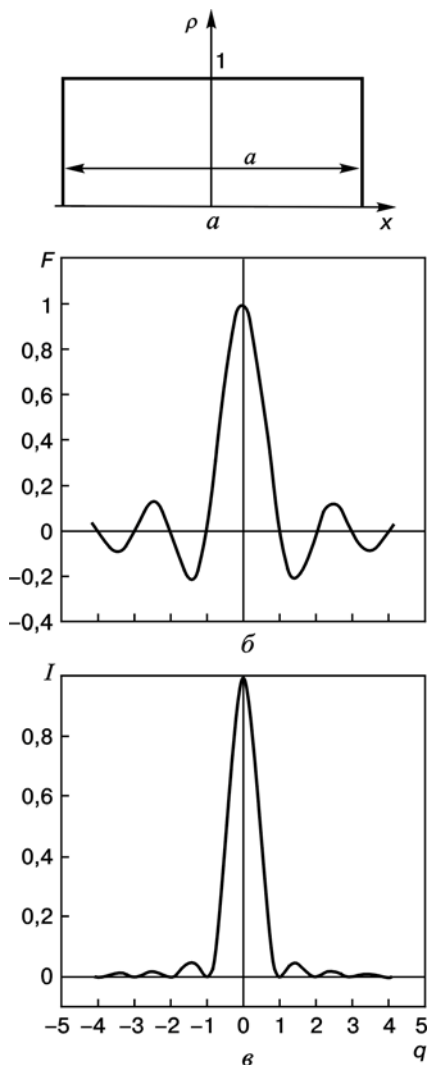


РИС. 1.4. Розподіл електронної густини для лінійного об'єкта довжиною a (а), амплітуда (б) і інтенсивність розсіяння (в) в оберненому просторі. Вісь q градуєвана в від-носних одиницях $\frac{2\pi}{a}$

Фур'є-перетворення цієї функції буде мати вигляд

$$F(q) = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \exp(iqx) dx = \frac{2 \sin\left(\frac{1}{2} qa\right)}{q}, \quad (1.23)$$

а інтенсивність пропорційна квадрату модуля цієї функції. На рис. 1.4, б, в зображено графіки відповідних функцій.

Відзначимо одну важливу закономірність розподілу інтенсивності в оберненому просторі (рис. 1.4, в): положення мінімумів інтенсивності відповідає цілим значенням $\frac{2\pi}{a}$, а максимумів — дро-

бовим. При цьому висота максимальної інтенсивності пропорційна квадрату розміру об'єкта a^2 , а інтегральна інтенсивність пропорційна a , що інтуїтивно зрозуміло, і узгоджується з законом збереження енергії. Сказане означає, що чим більші лінійні розміри розсіювального об'єкта, тим вужчим і яскравішим буде його зображення в оберненому просторі. Ця закономірність має

загальний характер і дозволяє оцінити розміри розсіювального об'єкта.

Функція розподілу електронної густини для лінійного об'єкта (1.22) була вибрана симетричною відносно початку координат. Що ж буде відбуватись при трансляції об'єкта вздовж осі x ? Очевидно, в наближенні Фраунгофера, коли відстані джерело—об'єкт—точка спостереження великі, картина розсіяння повинна залишатися незмінною. У той же час, керуючись строгими математичними уявленнями, маємо висновок, що при зміщенні об'єкта, який характеризується електронною густиною $\rho(x)$ на відстань Δx його образ $F(q)$ зазнає таких змін:

$$F'(q) = \int \rho(x) e^{iq(x+\Delta x)} dx = e^{iq\Delta x} \int \rho(x) e^{iqx} dx = e^{iq\Delta x} F(q). \quad (1.24)$$

Присутній у виразі додатковий фазовий зсув $iq\Delta x$, якщо він однаковий для всієї спостережуваної системи, а не застосовується лише до її окремих компонентів, не впливає на результати розсіяння, оскільки за час спостереження нівелюється ще одним фазовим фактором: часовим $i\omega t$ (див. вираз (1.15)), який зазвичай опускають для компактності, але який є неявно в усіх виразах.

1.3.2.3. Розсіяння групою прямокутних об'єктів

Розглянемо прямокутний об'єкт одиничної електронної густини (1.22) розмірами $a \times b$. Аналогічно (1.23) можна отримати вираз для амплітуди і інтенсивності в оберненому просторі:

$$F(q) = \frac{2 \sin(\frac{1}{2} q_x a)}{q_x} \frac{2 \sin(\frac{1}{2} q_y b)}{q_y}, \quad (1.25)$$

$$I(q) = \left[\frac{2 \sin(\frac{1}{2} q_x a)}{q_x} \frac{2 \sin(\frac{1}{2} q_y b)}{q_y} \right]^2. \quad (1.26)$$

На рис. 1.5,а наведено розподіл інтенсивності прямокутним об'єктом, лінійні розміри котрого дорівнюють a і $2a$ вздовж осей x і y

відповідно. Вказане співвідношення розмірів нічим не гірше від інших і може бути довільним. Двовимірний q_x — q_y розподіл

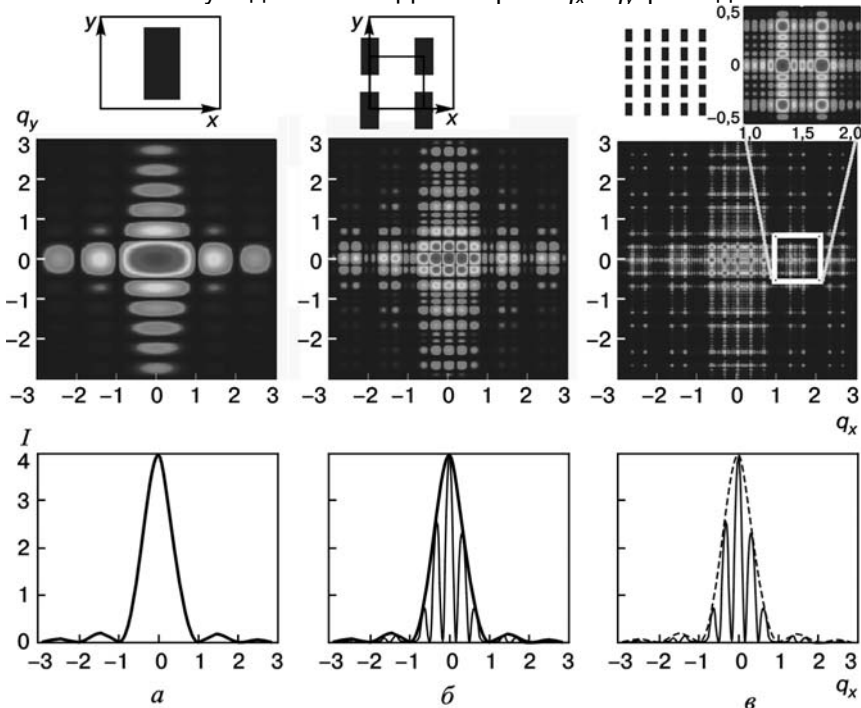


РИС. 1.5. Розподіл інтенсивності розсіяного випромінювання одиночним об'єктом (а) і групою (б, в) прямокутних об'єктів в оберненому просторі

інтенсивності виражений в квазікольорах, шкала інтенсивності для наочності логарифмічна. Зазначимо, що компоненти вектора розсіяння q_x та q_y паралельні осям x і y реального простору. Нижній рисунок — переріз двовимірного розподілу інтенсивно-сті вздовж осі q_x при $q_y = 0$. Як і варто чекати, характер розподілу інтенсивності розсіяння на нижньому рисунку повторює розпо-діл, одержаний для лінійного об'єкта (рис. 1.4), оскільки визначається першим співмножником у виразі (1.26).

У той же час двовимірний розподіл інтенсивності явно ілюструє важливу закономірність оберненого простору: розмір образу зразка в тому чи іншому напрямі обернено пропорційний реальним розмірам об'єкта в цьому напрямі. І ширина піка інтенсивності, і

період осциляцій інтенсивності пропорційні $\frac{2\pi}{l}$, де l — характерний розмір розсіювального об'єкта.

При розрахунку амплітуди і інтенсивності розсіяння об'єктом нехтували його фізичними властивостями, матеріалом, реальними розмірами і т.п. Навіть вибір електронної густини був своєрідним, вона відображала не структурні властивості об'єкта, а лише «маркувала» в булівському сенсі елементи координатного поля, при цьому приймаючи ненульові значення, якщо деякий елемент належав розсіювальному тілу. Іншими словами, електронна густина $\rho(x, y)$ є **функція форми** даного об'єкта (shape function), а вираз (1.25) — перетворення форми. Функція форми для протяжних об'єктів відіграє таку ж важливу роль, як і дельта-функція при описі точкових об'єктів.

Розглянемо цікавіший випадок попарної інтерференції прямокутних розсіювальних об'єктів. Для цього уявимо, що вже знайомі нам прямокутні об'єкти розмірами a і $2a$ знаходяться в вершинах квадрата зі стороною, наприклад, $D = 3a$ (див. рис. 1.5, б).

Результуюча амплітуда розсіяння таким ансамблем дорівнює сумі амплітуд його складових об'єктів з урахуванням їх взаємного розташування (трансляцію об'єкта описує вираз (1.25)):

$$F(q) = \sum_i F_i \exp(iq r_i), \quad (1.27)$$

де r_i — координати центрів усіх чотирьох прямокутників. При вибраній системі координат в прямому і оберненому просторах підсумовування вздовж напрямів q_x і q_y можна провести незалежно і перейти до відносних координат об'єктів:

$$F(q) = F^u(q) (1 + e^{iq_x D_x}) (1 + e^{iq_y D_y}), \quad (1.28)$$

де F^u — амплітуда розсіяння елементом ансамблю, і для прямокутника розраховується за формулою (1.26); D_x і D_y — трансляції в напрямках x і y , в нашому випадку дорівнюють $3a$. У даному випадку трансляція, будучи мірою відносного розташування об'єктів є не зміщення всієї групи об'єктів відносно початку координат, котре, як відомо, ніяк не впливає на результат, а трансляція визначає різницю фаз між ними, тобто як будуть розсіювати об'єкти при тому чи іншому значенні вектора q : синфазно чи в протифазі.

Інтенсивність розсіяння, як завжди, дорівнює квадрату модуля амплітуди i , після елементарних перетворень, визначається так:

$$I(q) = |F^u(q)|^2 4(1 + \cos[q_x D_x])(1 + \cos[q_y D_y]). \quad (1.29)$$

Вираз (1.29) містить у собі два співмножники, перший із яких відповідає власне розсіянню на прямокутному об'єкті, а другий описує модуляції інтенсивності, пов'язані з періодичністю об'єктів, які складають ансамбль. Двовимірна карта розподілу інтенсивності вдало ілюструє викладене: загальний характер розподілу був успадкований від одиничного об'єкта, але тут проявилась більш тонка структура піків, зумовлена періодичністю елементів ансамблю. Відстані між піками тонкої структури дорівнюють, за законами Фур'є-перетворення, $\frac{2\pi}{D_{x,y}}$.

Нижній графік на рис. 1.5, б відповідає інтенсивності вздовж горизонтального ($q_y = 0$) перерізу оберненого простору, суцільна лінія — розсіянню від ансамблю, штрихпунктирна обвідна — розсіянню від одиничного об'єкта. Зазначимо явно тригонометричну форму піків інтенсивності, що витікає з виразу (1.29).

Ускладнимо систему ще більше. Замість ґратки 2×2 елементи розглянемо ґратку 5×5 прямокутних елементів з однаковим кроком $D = 3a$ в обох напрямках (рис. 1.5, в). Розподіл інтенсивності на карті і на графіку на перший погляд несуттєво відрізняється від даних рис. 1.5, б. Піки стали помітно вужчими і яскравішими щодо деякого мінімального фону, і далеко від центра проявились навіть ті тонкі піки, які були не помітними на попередніх картинках. Проте, якщо розглядати вказані піки тонкої структури уважніше, то виявляється, що вони мають квадратну, а не прямокутну форму (див. збільшену ділянку карти), і між більш інтенсивними піками можна побачити три додаткові піки малої яскравості. Вказані метаморфози стають абсолютно зрозумілими, якщо взяти до уваги, що модель, окрім основної періодичності D в розташуванні елементів, характеризується тепер і деякою загальною формою, котра являє собою квадрат зі стороною $12a$ і містить у собі чотири повних періоди D . Таким чином, відстані між «головними» піками дорівнюють $\frac{2\pi}{D}$, а між «побічними» — $\frac{2\pi}{4D}$, а сам розподіл інтенсивності поблизу кожного із яскравих піків нагадує образ прямокутного об'єкта (рис. 1.5, а) з тою різницею, що під об'єктом у даному випадку треба розуміти весь ансамбль із 25 елементів як

одне ціле. Проте щоб впевнитись, що це дійсно так необхідно розглянути більш детально питання розсіяння на періодичних об'єктах.

1.3.2.4. Дифракція на періодичних об'єктах

Розглянемо нескінченну двовимірну періодичну ґрат-ку, в вузлах якої знаходяться однакові об'єкти, кожний із яких характеризується деякою електронною густиною $\rho^u(x, y)$ і відповідною амплітудою розсіяння $f^u(q_x, q_y)$. Тут індекс u означає характеристики одиничного об'єкта. Загальний для ґратки періодичний розподіл електронної густини можна записати так:

$$\rho(x, y) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho^u(x, y) * [\delta(x - ma)\delta(y - nb)], \quad (1.30)$$

де m, n — цілі числа; a, b — періоди ґратки відповідно у напрямках x і y ; знак «*» означає згортку. Дельта-функції були використані для визначення періодичності, оскільки за властивістю згортки $f(x) * \delta(x - a) = f(x - a)$. Фур'є-образом функції $\rho(x, y)$ буде функція

$$F(q_x, q_y) = f^u(q_x, q_y) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(iq_x ma) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(iq_y nb). \quad (1.31)$$

Були використані загальновідомі властивості фур'є-перетворення, згідно з якими образом операції згортки буде множення і, навпаки, що образом дельта-функції є експонента. Нескінченні суми у виразі (1.31) дорівнюють нулю (як результат усереднення тригонометричних функцій) для всіх значень q_x, q_y , крім набору дискретних значень, що задовольняють умову

$$\begin{cases} q_x = \frac{2\pi m}{a}, \\ q_y = \frac{2\pi n}{b}. \end{cases} \quad (1.32)$$

Ця умова виділяє із всього можливого спектра векторів розсіяння ті вектори, для котрих набіг фази на періоді ґратки пропорційний 2π , іншими словами, вираз (1.32) визначає геометричні умови, за яких об'єкти розсіюють хвилю *синфазно*. Амплітуда розсіяння в точках оберненого простору, що визначається векторами (1.32), буде дорівнювати сумі амплітуд від

усіх розсіювальних елементів, тобто є нескінченною для нескінченно великої ґратки. По суті розподіл амплітуди розсіяння в оберненому просторі буде поданий набором дельта-функцій. У цьому випадку вираз (1.31) можна записати інакше:

$$F(q_x, q_y) = \sum_{m,n} F_{mn} = \sum_{m,n} f_{mn}^u \delta\left(q_x - \frac{2\pi m}{a}\right) \delta\left(q_y - \frac{2\pi n}{b}\right). \quad (1.33)$$

Коефіцієнти f_{mn}^u відповідають значенням функції $f^u(q_x, q_y)$ у точках оберненого простору, визначених в (1.32), і являють собою не що інше, як *коефіцієнти розкладу функції $\rho(x, y)$ в ряд Фур'є*. Щоб впевнитись у цьому, достатньо здійснити обернене фу-р'є-перетворення виразу (1.33).

Двовимірна періодичність, яка введена для функції розподілу електронної густини в реальному просторі (1.30), передбачає, що основні напрями періодичності (чи вектори трансляції) взаємно перпендикулярні і збігаються з осями системи координат. Ця умова була прийнята авторами із міркувань простоти. Взагалі кажучи, при наявності в об'єкта трансляційної симетрії структури неколінеарними векторами трансляції \mathbf{a} і \mathbf{b} , що визначають *елементарну комірку як найменший елемент структури, який реалізує цю симетрію* (див. рис. 1.5, б), образом структури об'єкта буде періодична ґратка в оберненому просторі (обернена ґратка), елементарна комірка котрої буде побудована на векторах \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* таких, що $\mathbf{a}^* \perp \mathbf{b}$, $\mathbf{b}^* \perp \mathbf{a}$. Довжини однойменних векторів у прямому і оберненому просторі пов'язані співвідношенням $\mathbf{a} \mathbf{a}^* = 2\pi$, під $\mathbf{a} \mathbf{a}^*$ розуміємо скалярний добуток двох векторів. Вираз, що відповідає тривимірній періодичній ґратці має дещо складніший вигляд, але принципівих відмінностей не містить. На рис. 1.6 показані взаємні співвідношення в орієнтації і розмірах ґраток, побудованих в прямому і оберненому просторі.

Таким чином, образом двовимірної необмеженої періодичної функції є обернена ґратка, задана своїми вузлами, і значення образу функції в цих вузлах відповідає фур'є-компонентам розкладу функції. Вузли оберненої ґратки мають нульовий розмір, і є, таким чином, математичною абстракцією, яка цілком відповідає математичній абстракції нескінченно великого розсіювального об'єкта. Виникає питання, як зміниться форма вузлів оберненої ґратки у випадку об'єкта скінчених розмірів. Скінченність розмірів об'єкта чи, іншими словами, обмеженість функції $\rho(x,y)$ простіше всього врахувати за допомогою функції форми, накладеної на нескінченну функцію $\rho(x,y)$:

$$\rho(x, y) = S(x, y) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho^u(x, y) * [\delta(x - ma)\delta(y - nb)]. \quad (1.34)$$

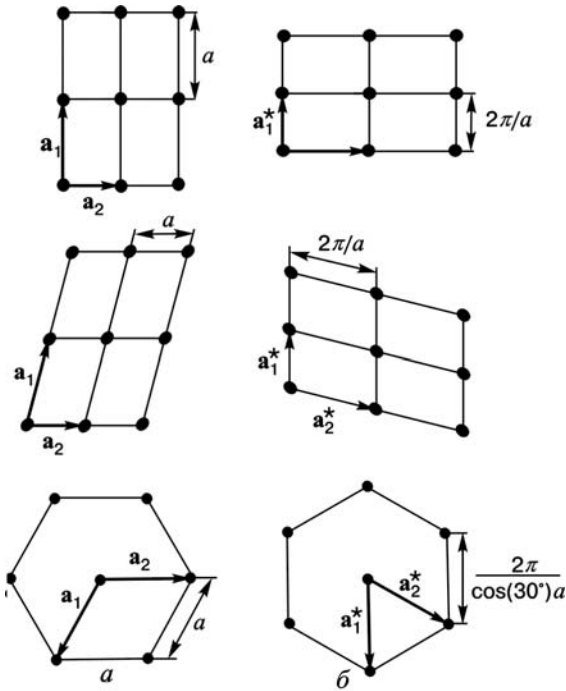


РИС. 1.6. Метричні та орієнтаційні відношення між ґратками в прямому (а) і оберненому просторах (б)

Функція $S(x, y)$ дорівнює 1, якщо x, y належать об'єкту, і 0 поза межами об'єкта. Для простого випадку прямокутного об'єкта зі стороною D (рис. 1.4, в) цю функцію можна записати так:

$$S(x, y) = \begin{cases} 1, & |x| < \frac{D}{2} \quad \cap \quad |x| < \frac{D}{2}, \\ 0, & |x| > \frac{D}{2} \quad \cup \quad |x| > \frac{D}{2}. \end{cases} \quad (1.35)$$

Тоді образом функції $\rho(x, y)$ буде

$$F(q_x, q_y) = F^S(q_x, q_y) * \sum_{m,n} f_{mn}^u \delta\left(q_x - \frac{2\pi m}{a}\right) \delta\left(q_y - \frac{2\pi n}{b}\right), \quad (1.36)$$

де $F^S(q_x, q_y)$ — фур'є-образ функції форми має цілком знайомий вигляд, дуже схожий на (1.26), а саме

$$F^S(q_x, q_y) = \frac{2 \sin\left(\frac{1}{2} q_x D\right)}{q_x} \frac{2 \sin\left(\frac{1}{2} q_y D\right)}{q_y}, \quad (1.37)$$

і єдина синтаксична відмінність полягає в заміні a, b на D . Вираз (1.36) прийме зручний для інтерпретації вигляд, якщо врахувати, що $f(x) * \delta(x - a) = f(x - a)$:

$$F(q_x, q_y) = \sum_{m,n} f_{mn}^u F^S\left(q_x - \frac{2\pi m}{a}, q_y - \frac{2\pi n}{b}\right). \quad (1.38)$$

Порівняння виразів (1.38) та (1.33), останній отриманий для нескінченного кристала, показує, що в випадку кристала скін-чених розмірів дельта-функція заміщується образом функції форми кристала, і вузли оберненої ґратки розширюються, зберігаючи, однак, попереднє положення в оберненому просторі. Загальний розподіл амплітуди в оберненому просторі описується функцією розсіяння одиничного елемента f^u , який поданий коефіцієнтами фур'є-розкладу. Зазначимо також, що в функцію F^S входять як параметри лінійні розміри розсіювального об'єкта (1.37), і її інтеграл в околі кожного з вузлів оберненої ґратки буде пропорційний площі об'єкта, чи, якщо згадати про його структуру, $F(q_x, q_y) \approx N_x N_y$, тобто добутку числа елементів в кожному із напрямів осі координат.

Інтенсивність розсіяння пропорційна, як завжди, квадрату модуля амплітуди розсіяння: $I(q_x, q_y) \approx |F(q_x, q_y)|^2$.

Маючи такий запас поданої інформації про дифракційні процеси, зовсім не важко буде, конкретизувавши загальні вирази, отримані для абстрактного об'єкта, перейти до питань, пов'язаних з розсіянням на впорядкованій групі атомів і кристалі.

1.3.3. ДИФРАКЦІЯ НА ВПОРЯДКОВАНІЙ ГРУПІ АТОМІВ

Перше борнівське наближення для розсіяння на тривимірному розподілі електронної густини можна

використовувати для випадку довільної сукупності розсіювальної матерії. Амплітуда пучка, розсіяного в довільно визначеному напрямі, суттєво залежить від впорядкування в розташуванні атомів. Розглянемо ансамбль атомів, розташованих у вузлах досконалої кристалічної ґратки. Вузлові точки ґратки будемо визначати радіусом-век-тором $\mathbf{r} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, де n_i — ціле число або нуль. За аналогією з виразами попереднього параграфу узагальнюючи наші результати на тривимірний випадок прямокутного паралелепіеда із сторонами a , b , c , записуємо

$$\rho(x, y, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \delta(x - na, y - mb, z - pc), \quad (1.39)$$

а фур'є-образ має вигляд

$$F(q_x, q_y, q_z) = \sum_h \sum_k \sum_l \delta\left(u - \frac{h}{a}, v - \frac{k}{b}, w - \frac{l}{c}\right). \quad (1.40)$$

Таким чином, для періодичної ґратки в реальному просторі з періодами a , b , c відповідний розподіл в оберненому просторі є ґраткою з періодами $\frac{1}{a}$, $\frac{1}{b}$, $\frac{1}{c}$. Це обернена ґратка для часткового випадку прямокутної системи координат. Для об'єкта з довільною періодичною функцією проходження можна записати

$$f(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} F_h \exp\left(\frac{2\pi i h x}{a}\right). \quad (1.41)$$

Отже, відповідно до (1.41) маємо, що $\rho(\mathbf{r})$ періодична функція, яку можна виразити через ряд Фур'є:

$$\rho(x, y, z) = \sum_h \sum_k \sum_l F_{hkl} \exp\left\{-2\pi i \left(\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c}\right)\right\}, \quad (1.42)$$

тоді

$$F(q_x, q_y, q_z) = \sum_h \sum_k \sum_l F_{hkl} \delta\left(u - \frac{h}{a}, v - \frac{k}{b}, w - \frac{l}{c}\right), \quad (1.43)$$

що є оберненою ґраткою, в котрій кожна точка має вагу, яка залежить від відповідного фур'є-коефіцієнта. Для періодичної функції в реальному просторі, обмеженої прямокутною функцією форми з розмірами A, B, C , маємо

$$F(q_x, q_y, q_z) = \sum_h \sum_k \sum_l F_{hkl} \delta\left(u - \frac{h}{a}, v - \frac{k}{b}, w - \frac{l}{c}\right) \times \\ \times ABC \frac{\sin(\pi Au)}{\pi Au} \frac{\sin(\pi Bv)}{\pi Bv} \frac{\sin(\pi Cw)}{\pi Cw}. \quad (1.44)$$

Із цього виразу випливає, що кожна точка зваженої оберненої ґратки розмита в неперервному розподілі, який задає функція форми:

$$S(u, v, w) = ABC \frac{\sin(\pi Au)}{\pi Au} \frac{\sin(\pi Bv)}{\pi Bv} \frac{\sin(\pi Cw)}{\pi Cw}. \quad (1.45)$$

Ідеальний кристал будується шляхом повторення елементарної комірки у трьох вимірах, яка містить у собі один чи більше атомів. Для кристала з розмірами A, B, C уздовж напрямів трьох осей функція $S(u)$ буде мати таку ж форму, як і для сукупності атомів.

Таким чином, F_{hkl} є структурним фактором, або структурною амплітудою, для точки (вузла) оберненої ґратки h, k, l і буде задаватись виразом

$$F_{hkl} = \int_0^a \int_0^b \int_0^c \rho(x, y, z) \exp\left\{2\pi i \left(\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c}\right)\right\} dx dy dz,$$

або

$$F_h \equiv F_{hkl} = \int \rho(r) \exp(2\pi i \mathbf{hr}) dr.$$

Розподіл інтенсивності в оберненому просторі має різкий пік поблизу кожної точки оберненої ґратки, так що можемо записати

$$|F(\mathbf{u})|^2 = \sum_h \sum_k \sum_l |F_{hkl}|^2 \delta\{\mathbf{u} - (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)\} * |S(\mathbf{u})|^2, \quad (1.46)$$

де $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ — вектори оберненої ґратки.

1.3.4. КІНЕМАТИЧНЕ РОЗСІЯННЯ ІДЕАЛЬНИМИ КРИСТАЛАМИ

Після того як було розглянуто розсіяння на групі атомів (елементарній комірці), можна перейти до розсіяння сукупністю елементарних комірок або кристалом. Ідеальний кристал будується шляхом трансляції елементарної комірки, тобто мінімальної сукупності атомів, яка дає уявлення про симетрію кристалічної ґратки у цілому в трьох вимірах. Матеріали, наведені в даній монографії значною мірою стосуються розсіяння на напівпровідникових структурах з ґраткою типу «алмаз» (кремній, германій) або, що те ж саме, але з врахуванням бінарності сполуки — цинкової обманки (GaAs і т.п.). У зв'язку з цим, наприклад, доречно навести схему елементарної комірки GaAs (рис. 1.7).

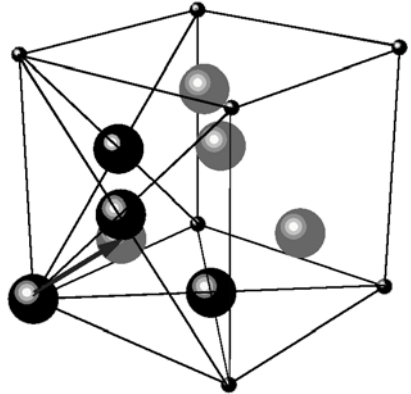


РИС. 1.7. Елементарна комірка GaAs. Малі сфери в кутах куба відповідають атомам Ga, що належать сусіднім елементарним komórкам

Видно, що зазначена елементарна комірка складається з двох підкомірок гранецентрованого кубічного типу (fcc), заповнених атомами або Ga або As, зміщених відносно одна одної на чверть діагоналі куба, так, що кожен атом As перебуває в середині тетраедра, утвореного атомами Ga, і навпаки.

Саме елементарна комірка визначає положення (але не форму) вузлів оберненої ґратки в тривимірному просторі, як це відбулося з гіпотетичним розсіювальним об'єктом (див. п. 1.3.2, рис. 1.5, б). При цьому картина розташування вузлів у оберненому просторі буде набагато різноманітніша, ніж наведена на рис. 1.5. По-перше, вона буде тривимірною, по-друге, вона буде містити в собі вузли, що відповідають не тільки шести базовим площинам, які обмежують елементарну комірку, а й площинам, проведеним через будь-які три атоми, зображені на рис. 1.7. Нагадаємо, що площини (і рентгеновські відбиття, що їм відповідають) позначаються набором індексів h, k, l , причому числа h, k, l визначають напрям нормалі до індексованої площини: $\mathbf{n}_{hkl} =$

$= ha_x + ka_y + la_z$, а величини $\frac{a_x}{h}$, $\frac{a_y}{k}$, $\frac{a_z}{l}$ дорівнюють відрізкам, що відтинаються зазначеними площинами на осях x , y і z відповідно. Тут a_x , a_y , a_z відповідають векторам трансляції елементарної комірки. Індекси звичайно бувають цілими. Дробові значення індексів відповідають площинам (і періодичностям), які містять у собі більше ніж одну елементарну комірку, та деяким спеціальним випадкам впорядкування, наприклад магнітного, що виходить за рамки даної праці.

Вузли оберненого простору, що відповідають кристалографічним площинам $[hkl]$, будуть перебувати в точках $Q_{hkl} = ha_x^* + ka_y^* + la_z^*$, причому елементарні вектори оберненого простору $a_{x,y,z}^*$ у випадку кубічної ґратки паралельні однойменним векторам реального простору, а $|a_{x,y,z}^*| = \frac{2\pi}{a}$, де a — стала ґратки.

Для вузла hkl оберненого простору амплітуда розсіяння елементарною коміркою (так званий структурний фактор) є сумою інтерференційних внесків кожного із атомів, які утворюють комірку, або сумі амплітуд розсіяння від кожної з fcc -підґраток. Для простої гранецентрованої підґратки одержимо

$$F_{hkl}^{fcc} = f(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{r}_j} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) = f(\mathbf{q})(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}), \quad (1.47)$$

де $f(\mathbf{q})$ — амплітуда атомного розсіяння, а круглі дужки містять у собі інтерференційну суму по атомах з координатами (000) і атомах, які перебувають в центрі бічних граней куба (див. на рис. 1.7, позначені більш темним кольором).

Аналіз виразу (1.47) показує, що сума в дужках може приймати лише два значення: 4, якщо всі індекси одночасно або парні, або непарні, і 0 при всіх інших наборах hkl . У цьому суть так званого правила погасання рефлексів.

Для ґратки типу «алмаз» структурний фактор з урахуванням відносного зсуву fcc -підґраток буде мати вигляд

$$F_{hkl} = F_{hkl}^1 + F_{hkl}^2 \exp\left(i2\pi\left[\frac{h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{l}{4}\right]\right). \quad (1.48)$$

Індекси 1, 2 вказують на розходження атомних розсіювальних здатностей для 1-ї та 2-ї підґраток. Правило погасання для такої ґратки дещо ускладниться і у випадку моноатомних кристалів будемо мати

$$F_{hkl} = \begin{cases} 8f_{hkl}, & h, k, l \text{ всі або парні, або непарні і їх сума кратна 4,} \\ 0, & h, k, l \text{ змішані (парні і непарні).} \end{cases} \quad (1.49)$$

Якщо ж підґратки заповнені різними атомами (як у випадку бінарних напівпровідників), то додатково можливими стануть відбиття, для яких сума h, k, l буде кратна 2. Хоча в цьому випадку зазначені підґратки відповідно до виразу (1.48) і будуть розсіювати в протифазі, але через розходження в атомних факторах розсіювання $F_{hkl} = F_{hkl}^1 - F_{hkl}^2 \neq 0$. За такими відбиттями закріпились терміни *слабкі*, або *квазізаборонені*.

Зазначимо, що максимуми амплітуди розсіяння від елементарної комірки через обмежений набір атомів, які входять до неї, не є гострими, тобто інтенсивність розподілена в досить широкій області навколо «дозволених» правилом (1.48) вузлів оберненої ґратки. Сказане узгоджується з випадком, зображеним на рис. 1.5, б.

Амплітуда розсіяння кристалом, що складається з $N_x \times N_y \times N_z$ комірок, в наближенні слабкої взаємодії матеріалу з випромінювання записується у вигляді суми інтерференційних внесків від кожної з елементарних комірок, або потрійної суми за координатними напрямками (для простоти вважаємо, що кристал зорієнтований зручно):

$$F^{cr}(q_x, q_y, q_z) = \sum_{n_x=1}^{N_x} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_z=1}^{N_z} F e^{i(q_x a_x n_x + q_y a_y n_y + q_z a_z n_z)}. \quad (1.50)$$

Цей вираз є нічим іншим, як потрійною геометричною прогресією, формула для суми N перших членів якої відома зі школи.

Якщо виконується умова дифракції для кожного з компонентів вектора дифракції: $q_i = \frac{2\pi n}{a_i}$, тобто дифракційний вектор збігається

з вузлом оберненої ґратки, і для цього вузла умова погасання дає ненульові значення F , то суму (1.50) можна обчислювати так:

$$F^{cr}(q_x, q_y, q_z) = FN_x N_y N_z, \quad (1.51)$$

тобто амплітуда пропорційна об'єму кристала, в той час, як остронь від точного брегівського положення

$$F^{cr}(q_x, q_y, q_z) = F \frac{\sin\left(\frac{1}{2}q_x a_x N_x\right) \sin\left(\frac{1}{2}q_y a_y N_y\right) \sin\left(\frac{1}{2}q_z a_z N_z\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}q_x a_x\right) \sin\left(\frac{1}{2}q_y a_y\right) \sin\left(\frac{1}{2}q_z a_z\right)}. \quad (1.52)$$

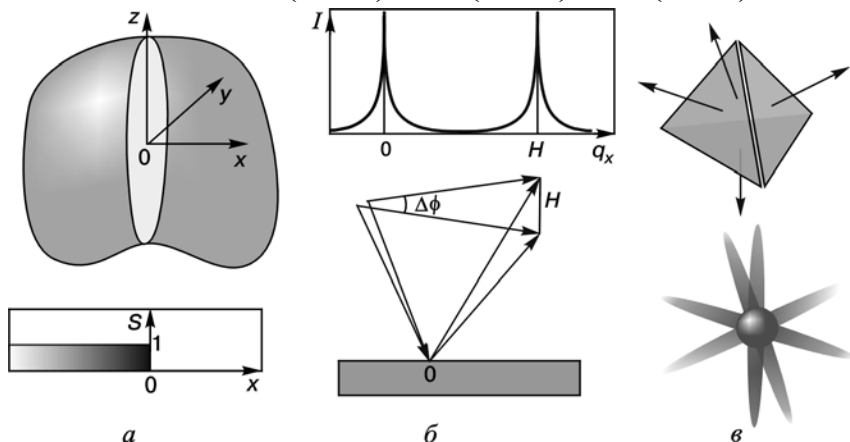


РИС. 1.8. Схематичне зображення механізму формування вузьких стрижнеподібних областей поблизу вузла оберненої ґратки в приповерхневій області

Якщо взяти до уваги реальні розміри кристала в припущенні, що він весь «омивається» хвилею, то розходження в значеннях амплітуди у виразах (1.50) і (1.51) є досить значним, а якщо врахувати, що інтенсивність пропорційна *квадрату* модуля амплітуди, то розходження ще більше зростає.

По суті, автори в монографії зробили граничний перехід від структурного фактора комірки, що дає плавну зміну інтенсивності, до *дельта-функцій*, яка на прикладі двовимірного розподілу розглядалася при переході від рис. 1.5, б до рис. 1.5, в. Тут виникає доречне запитання, чи впливає форма кристала на розподіл інтенсивності в оберненому просторі, і яким чином.

Вирази (1.50)—(1.52) неявно за допомогою введення розмірностей N_x, N_y, N_z , однакових для всього кристала, припускають, що кристал має форму паралелепіпеда. При цьому у випадку дійсного великого кристала, принаймні більшого ніж розмір пучка, бічні грані паралелепіпеда, а також найчастіше його нижня грань не суттєво впливають на процес розсіяння, оскільки об'єм кристала, що бере

участь у цьому процесі, обмежений поглинанням випромінювання матеріалом. Істотним фактором, однак, є наявність у кристала вхідної щодо падаючого випромінювання грані, яка визначає перехід вакуум—матеріал.

Найпростіше плоска вхідна грань може бути врахована за допомогою східчастої функції форми, яка в булівському значенні визначає наявність (відсутність) електронної площини для точки простору з координатою x (рис. 1.8).

У такому випадку розподіл амплітуди розсіяння в оберненому просторі описується або фур'є-образом добутку функції форми і розподілу електронної густини кристала (рис. 1.8, а), або відповідно до властивостей фур'є-перетворення — згортокою образів цих функцій. При цьому образом масивного кристала в оберненому просторі буде набір вузлів оберненої ґратки, а близьким аналогом такого розподілу амплітуди розсіяння навколо кожного вузла є дельта-функція. Для обчислення образу функції $S(x)$ зазначимо, що її похідною є негативна дельта функція $\delta(x - 0)$. Образом дельта-функції в точці $x = 0$ буде константа $F(q) = 1$ (1.20). Тоді, скориставшись залежністю між образом функції і образом її похідної

$$F\left(\frac{df(x)}{dx}\right) = iqF(q), \quad (1.53)$$

легко одержимо

$$F(S(x)) = \frac{-1}{iq} = \frac{i}{q}.$$

А для кристала з плоскою вхідною гранню, розподіл амплітуди розсіяння виразиться так:

$$\delta(q - H) * \frac{i}{q} = \frac{i}{q - H}, \quad (1.54)$$

де дискретні значення H відповідають вузлам оберненої ґратки. Тоді розподіл *інтенсивності* розсіяння в оберненому просторі навколо кожного з вузлів запишеться у такому вигляді:

$$I(q) \cong F(H)^2 \frac{1}{(q - H)^2}. \quad (1.55)$$

Таким чином, наявність у кристала плоскої грані приводить до того, що в оберненому просторі інтенсивність виявляється зосередженою не лише в вузлах оберненої ґратки, а й у вузьких стрижнеподібних областях поблизу вузла оберненої ґратки, які паралельні нормалі до зазначеної грані і де інтенсивність спадає за законом оберненого квадрата. За цими областями в англомовних працях закріпився термін Crystal Truncation Rod (CTR), а у вітчизняних — брегівські стрижні, стрижні резонансного розсіювання і т.п. На рис. 1.8, б схематично показаний розподіл інтенсивності вздовж стрижня і орієнтація CTR в оберненому просторі.

Наявність у кристала CTR приводить як мінімум до двох ефектів, які варто враховувати на практиці. З одного боку, випромінювання, відбите кристалом (яке характеризується набором напрямів відбитого пучка з відповідними інтенсивностями розсіювання), ніколи не має сферичної симетрії (рис. 1.8, б) і завжди характеризується деякою кінцевою кутовою шириною $\Delta\phi$. Тобто використання монохроматора і аналізатора в традиційній високороздільній дифрактометрії приводить до появи апаратурних смуг інтенсивності на карті оберненого простору. (Докладніше див. далі.)

З іншого боку, саме наявність CTR дозволяє часто судити про форму розсіювальних об'єктів. На рис. 1.8, в, на прикладі тетраедрично ограненого кристала, схематично зображені стрижні CTR в оберненому просторі, які паралельні відповідним нормалям до граней тетраедра.

Зазначимо, що наведені вище міркування, які стосуються CTR, носять якісний характер. Більш глибокий аналіз з урахуванням поглинання випромінювання речовиною надано у працях [5, 6].

1.3.5. УСЕРЕДНЕНА ҐРАТКА, КОГЕРЕНТНЕ ТА ДИФУЗНЕ РОЗСІЯННЯ

Оскільки для кристалів з дефектами, які не є періодичними структурами, неможливо використовувати формули для інтенсивностей, які отримані в попередніх параграфах, необхідно розглянуто більш загальний випадок. Відправною точкою для цього буде рівняння (1.55). Однак в це рівняння неможливо підставити всі амплітуди атомного розсіювання, а також положення атомів зразка. Інтенсивності потрібно оцінювати за допомогою статистичних співвідношень між цими величинами. Один з таких підходів — це розгляд усередненого оточення якого-небудь атома або атома певного сорту. Якщо один атом зі статистично еквівалентного набору

позначити індексом n , а всього таких атомів N_n , то кожний з них можна почергово вибрати як початок координат і визначати його усереднене оточення. Тоді запишемо

$$I(s) = \sum_n N_n f_n \left\langle \sum_j f_{j-n} \exp\{2\pi i s(r_j - r_n)\} \right\rangle, \quad (1.56)$$

де дужки $\langle \rangle$ дають усереднення за всіма конфігураціями атомів навколо атома сорту n . Для одноатомного кристала це рівняння зводиться до вигляду

$$I(s) = N f^2 \sum_j \langle \exp(2\pi i s r_j) \rangle, \quad (1.57)$$

де r_j — положення атома щодо початку координат, який вибирається в центрі одного із атомів.

Для більш загального характеру розгляду потрібно також урахувати зміну положень атомів з часом. Тоді у випадку чисто пружного розсіяння дифрагована амплітуда буде усередненням структури за часом:

$$I_{\text{пруж}}(s) = \left| \sum_i f_i \langle \exp\{2\pi i s r_i(t)\} \rangle_t \right|^2. \quad (1.58)$$

При дифракції РП вимірювання інтенсивностей не дає можливості розрізнити чисто пружне чи не пружне розсіяння. Експериментальні інтенсивності є миттєвими інтенсивностями усередненими за часом:

$$\begin{aligned} \langle I(s, t) \rangle_t &= \left\langle \sum_i \sum_j f_i f_j \exp\{2\pi i s(r_i - r_j)\} \right\rangle_t = \\ &= \sum_i \sum_j f_i f_j \langle \exp\{2\pi i s(r_i - r_j)\} \rangle_t. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Таким чином, повну дифракційну інтенсивність від кристала можна розглядати як суму інтенсивностей від дуже великого числа незалежних, але статистично еквівалентних областей.

Для випадку, коли можна визначити усереднену періодичну ґратку, запишемо

$$\rho(r) = \langle \rho(r) \rangle + \Delta\rho(r), \quad (1.60)$$

де $\langle \rho(r) \rangle$ — розподіл електронної густини для усередненої ґратки, який визначається як незалежний від часу і періодичний; $\Delta\rho(r)$ — відхилення від усередненої ґратки, яке істотно неперіодичне. Тоді маємо

$$I(s) = |\bar{F}|^2 + |\Delta F|^2, \quad (1.61)$$

де \bar{F} і ΔF — фур'є-перетворення $\langle \rho(r) \rangle$ і $\Delta\rho$.

Таким чином, повний розподіл розсіювальної здатності є сумою визначених окремо розподілів інтенсивності для усередненої ґратки і відхилень від усередненої ґратки. Оскільки $\langle \rho(r) \rangle$ — періодична функція, $|\bar{F}|^2$ буде складатись із гострих піків у вузлах оберненої ґратки і на дифракційній картині отримуватимемо гострі брегівські відбиття. Оскільки $\Delta\rho$ — неперіодична функція, то $|\Delta F|^2$ буде являти собою неперервний розподіл розсіювальної здатності між вузлами - оберненої ґратки і, таким чином, давати на дифракційній картині дифузне розсіювання.

1.4. МЕТОД КОВЗНОГО ВІДБИТТЯ І РЕНТГЕНІВСЬКИЙ АНАЛІЗ НАНОСТРУКТУР. МОДЕЛЮВАННЯ ЕФЕКТІВ РЕНТГЕНІВСЬКОГО РОЗСІЯННЯ

1.4.1. МАЛОКУТОВЕ РОЗСІЯННЯ ЗА УМОВ КОВЗНОГО ВІДБИТТЯ НА ІДЕАЛЬНИХ КРИСТАЛАХ

Розвиток мікроелектроніки поставив перед рентгенодифракційними методами дослідження структур нові завдання, пов'язані не стільки з аналізом дефектної структури в об'ємі матеріалу (що з погляду виняткової чистоти і структурної досконалості напівпровідникових матеріалів у наш час є зовсім нетривіальним завданням), скільки з аналізом геометричних параметрів — форми, розміру, глибини залягання і періодичності — мікроструктур як багат шарових, так і (за сформованою термінологією) квантово-розмірних, або нанооб'єктів.

Говорячи про нанооб'єкти і багат шарові структури, а також, що логічно з погляду розвитку твердотільної мікроелектроніки, про багат шарові впорядковані структури, які складаються з нанооб'єктів, слід зазначити: по-перше, ці об'єкти дійсно малі (порядку 10 нм), тобто інтенсивність розсіяного випромінювання мізерна, по-друге, вони перебувають в приповерхневих областях кристала. Сказане, з практичної точки зору, означає, що для вивчення розсіяного нанооб'єктами випромінювання треба проводити вимірювання або далеко від головного дифракційного максимуму «основного матеріалу», або підкладки, або яким-небудь чином виключити підкладку із процесу розсіювання. Перший напрям реалізується в традиційній високо-роздільній дифрактометрії і стає досить ефективним щодо багат шарових структур з розвинутою системою сателітів в оберненому

просторі. Другий напрям може бути реалізований двома способами: або методами дифракції за умов аномального поглинання випромінювання матеріалом підкладки з використанням так званих квазізаборонених відбиттів, або з використанням геометрії ковзного відбиття, реалізованої в двох експериментальних підходах: малокутове розсіяння і дифракція в ковзній геометрії.

У рамках цього параграфу будуть наведені дані про розсіяння за умов ковзного відбиття, а також про методи експерименту і чисельного моделювання, що використовуються для цього.

Під геометрією малокутового розсіяння за умов ковзного відбиття (в англійській традиції — Grazing Incidence, GISAX) маються на увазі умови, за яких кут падіння (і відбиття) падаючого променя стосовно поверхні кристала досить малий (звичайно менше одного градуса) для того, щоб частково або повністю виявився ефект повного зовнішнього відбиття випромінювання.

Ефект повного зовнішнього відбиття є прямим рентгенівським аналогом відомого з оптики видимого світла ефекту повного внутрішнього відбиття і наслідком зміни довжини хвилі випромінювання на границі двох середовищ із різними коефіцієнтами заломлення [9]. Розглянемо цей ефект докладніше.

Почати розгляд треба з того, що коефіцієнт заломлення в рентгенівському діапазоні на відміну від оптичного менше ніж одиниця. Тобто довжина хвильового вектора в матеріалі порівняно з вакуумом зменшується: $|\mathbf{K}| = n|\mathbf{k}^v|$. Рентгенівський коефіцієнт заломлення n прийнято записувати у вигляді

$$n = 1 - \delta + i\beta, \quad (1.62)$$

де речовинна складова δ пропорційна електронної щільності:

$$\delta = \frac{2\pi\rho_a f^0(0)r_0}{k^2}, \quad (1.63)$$

а уявний компонент пов'язаний з коефіцієнтом поглинання в матеріалі:

$$\beta = \frac{\mu}{2k}. \quad (1.64)$$

У виразах (1.63, 1.64) k відповідає довжині хвильового вектора в вакуумі; $f^0(0)$ — атомний фактор розсіяння в прямому напрямі; $r_0 = 2,82 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}$ — класичний радіус електрона; ρ_a — атомна щіль-

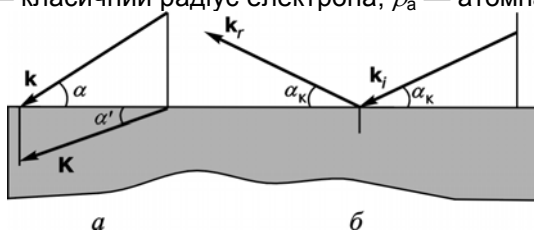


РИС. 1.9. До питання про заломлення РП і критичний кут

ність; μ — лінійний коефіцієнт поглинання. Отже хвильовий вектор у матеріалі зменшується в речовинній частині і отримує уявну частину. Тут варто зробити зауваження щодо вибору знака уявної частини. Уявну частину вектора \mathbf{k} прийнято вважати паралельною нормалі до поверхні зразка, а знак вибирається в кожному випадку з таким розрахунком, щоб при поширенні хвилі в матеріалі на відстань Δr амплітуда хвилі зменшувалася:

$$Ae^{i\mathbf{k}\Delta r} = Ae^{j\operatorname{Re}(\mathbf{k})\Delta r} e^{i(i/\beta k_z \Delta z)} = Ae^{j\operatorname{Re}(\mathbf{k})\Delta r} e^{(-\mu\Delta z)}. \quad (1.65)$$

На границі поділу двох середовищ із різними коефіцієнтами заломлення електродиніміка накладає ряд обмежень як на хвильові вектори (напрямок поширення хвилі), так і на амплітуду хвилі. Тут має бути рівність тангенціальних (уздовж поверхні розділу) компонентів хвильових векторів по обидва боки від границі поділу (рис. 1.9, а).

Оскільки модуль хвильового вектора рентгенівського випромінювання в матеріалі зменшується порівняно з вакуумом (1.62), умова рівності тангенціальних компонентів хвильових векторів означає менші кути поширення РП в матеріалі. Очевидно, що при зменшенні кута падіння α_i до деякого критичного значення складається ситуація, коли $k_i \cos \alpha_k = |nk_i|$, тобто заломлений вектор буде паралельний поверхні. Подальше зменшення кута падіння приведе до того, що для задоволення умови рівності тангенціальних компонентів хвильових векторів

$$k_i \cos \alpha_k = \sqrt{|\mathbf{K}|^2 - |\mathbf{K}_z|^2}, \quad (1.66)$$

1.4. Метод ковзного відбиття і рентгенівський аналіз наноструктур

де \mathbf{K} , \mathbf{K}_z відповідають хвильовому вектору заломленої в матеріалі хвилі і його z -компоненту і $|\mathbf{K}| = |nk_i|$, компонент \mathbf{K}_z виявляється цілком уявним. Цей формальний математичний результат трактується однозначно як поява додаткового коефіцієнта поглинання для променів, що поширюються в матеріалі. Інакше кажучи, рентгенівське випромінювання немов би «витісняється» із кристала і супроводжується утворенням дзеркально відбитого під тим же кутом α променя. Втім у цьому немає нічого незвичайного з погляду рентгенівської дифракції. Подібні ж уявні значення z -компонентів хвильових векторів зустрічаються при описі дифракції в геометрії Бреґґа, в точному дифракційному положенні. Ефект швидкого зникнення (evanescence) заломленого променя в приповерхневих шарах кристала і сприяв широкому використанню ковзної геометрії для їх діагностики.

Зміна довжини хвильового вектора, зображена на рис. 1.9, значно перебільшена. Насправді поправки у виразі (1.62) дуже малі: $\delta \sim 10^{-6}$, $\beta \sim 10^{-8}$. Табульовані значення поправок з урахуванням матеріалу і довжини хвилі випромінювання можна знайти в Міжнародних кристалографічних таблицях, а також онлайн. Таким чином, критичні кути не перевершують одного градуса. Тут цікаво зазначити, що, вводючи кут α' тригонометрично (з врахуванням малості кутів) як $\alpha' = \frac{\mathbf{K}_z}{|nk|}$, тим самим маємо на увазі і наявність уявного компонента в куті заломлення.

Для знаходження амплітуд відбитої і заломленої хвилі використовують обмеження, що накладаються електродинамікою на векторні амплітуди хвильових полів на границі поділу, так звані граничні умови. Згідно із цими умовами на границі поділу потрібна неперервність як самого поля, так і його першої похідної. Друга умова практично означає вимогу рівності z -компонентів амплітуд хвильового поля на границі поділу:

$$\begin{cases} E_i + E_r = E_t \\ \alpha E_i - \alpha E_r = \alpha' E_t \end{cases} \quad (1.67)$$

Тут індексами i , r , t позначені падаюча, відбита і заломлена хвилі, а також використана властивість малих кутів: $\sin \alpha = \alpha$. При цьому передбачається, що значення α' уже знайдено з рівняння (1.66). Сис-

тему лінійних рівнянь (1.67) чисельно найпростіше розв'язувати в матричній формі, не вдаючись до спрощень:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \alpha' & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_t \\ E_r \end{pmatrix},$$

що для невідомих амплітуд дає наступні вирази:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \alpha' & \alpha \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i \\ E_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_t \\ E_r \end{pmatrix}. \quad (1.68)$$

Вважаємо також доречними вирази для коефіцієнтів відбиття і проходження, а також наближений вираз для α' , отримані шляхом нескладних перетворень виразів (1.66), (1.67). Почнемо із закону заломлення:

$$\cos \alpha = n \cos \alpha', \quad (1.69)$$

$$\alpha^2 = \alpha'^2 + 2\delta - 2i\beta = \alpha'^2 + \alpha_k^2 - 2i\beta, \quad (1.70)$$

$$R = \frac{E_r}{E_i} = \frac{\alpha - \alpha'}{\alpha + \alpha'},$$

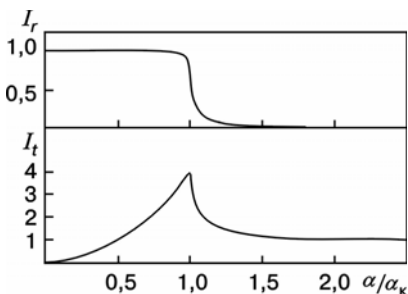
$$T = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2\alpha}{\alpha + \alpha'}. \quad (1.71)$$

Зазначимо, що поширення заломленої хвилі в глиб матеріалу описується виразом

$$E_t e^{i(K_z)z} = E_t e^{i(k\alpha')z} = E_t e^{ik \operatorname{Re}(\alpha')z} e^{ik \operatorname{Im}(\alpha')z} \quad (1.72)$$

і характеризується глибиною проникнення (глибиною, на якій амплітуда поля зменшується в e раз)

$$\Lambda = \frac{1}{2k \operatorname{Im}(\alpha')}. \quad (1.73)$$



На завершення цього пункту наведемо графіки, які ілюструють зміну відбитої і заломленої в кристалі інтенсивності хвильового поля при зміні кута падіння рентгенівської хвилі (рис. 1.10).

РИС. 1.10. Залежність інтенсивності дзеркально відбитого I_r і заломленого променя при одиничній інтенсивності падаючого променя від різних значень кута падіння стосовно критичного

1.4.2. ДИФРАКЦІЯ ЗА УМОВ КОВЗНОГО ВІДБИТТЯ НА ІДЕАЛЬНИХ КРИСТАЛАХ

У попередньому пункті було коротко розглянуто процеси заломлення рентгенівського пучка при малих кутах падіння, що приводять до утворення дзеркально відбитого пучка. При цьому результуючий вектор розсіювання був досить малий: $Q_{GISAX} = 2k\alpha$. Маючи через малі значення вектора розсіювання слабку чутливість зазначеного методу до деформацій періодичної ґратки, він є досить чутливий до форми розсіювального об'єкта, особливо якщо об'єкт перебуває на поверхні кристала.

У той же час ефект заломлення при критичних кутах падіння можна з більшим успіхом використовувати і за умов дифракції, реалізуючи так звану дифракцію за умов ковзного відбиття (Gra-zing Incidence Diffraction, GID) [8, 9].

Розглянемо для початку найпростіший випадок симетричної дифракції в геометрії Лауе (див. рис. 1.11, а), що ввійшов в усі підручники (згадаємо лише [9, 10]). На рисунку зображений кристал у відбивному положенні із площиною P і вузлами оберненої ґратки O , H . При симетричній компланарній дифракції відбивна площина перпендикулярна до поверхні зразка, а падаючий, заломлений і відбитий промені перебувають в одній площині S_1 . Початок хвильового вектора падаючої хвилі відповідає точці 1 . Точне бреггівське положення для падаючих на кристал променів відповідає точці B . Відстань між точками B і 1 є мірою відхилення падаючого променя від точного значення кута Бреґга.

Питання про хвильовий процес всередині кристала вирішується в рамках динамічної теорії дифракції, заснованої на послідовному розв'язанні рівнянь Максвелла для періодичного середовища. Докладне перерахування результатів і ефектів динамічної дифракції не входить в мету даної праці, тому зупинимося лише на деяких висновках, істотних для подальшого викладу.

Насамперед, поблизу точного бреггівського положення довжина хвильового вектора змінюється за складнішими законами. Крім по-

правок, пов'язаних з коефіцієнтом заломлення і які містять у собі дійсну і уявну (поглинання) частини, на довжину хвильового вектора накладаються додаткові дисперсійні поправки. У підсумку, реакцією кристала на падаючу хвилю з початком хвильового вектора в точці 1 є збудження в кристалі чотирьох хвиль у напрямі O і H . При цьому початки хвильових векторів — точки 2 і 3 — лежать із точкою 1 на одній нормалі до поверхні (принцип рівності тангенціальних складових хвильових векторів),

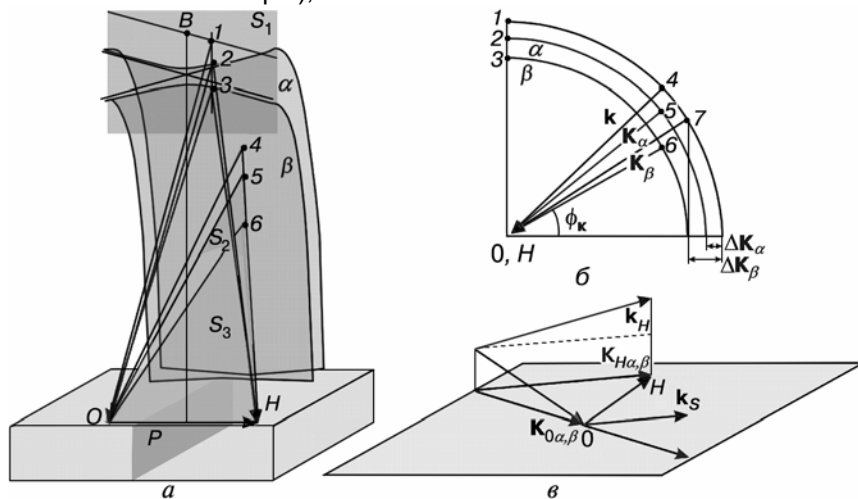


РИС. 1.11. Дифракція за умов ковзного відбиття. Основні геометричні співвідношення

описуючи при цьому деяку гіперболу, параметри якої відомі. Наведемо формули для розрахунку дисперсійних поправок.

У теорії динамічної дифракції як міра інтерференційної взаємодії випромінювання з речовиною використовуються так звані фур'є-компоненти поляризованості середовища χ_h . Вони є табличними, доступні в довідниках і пов'язані зі структурним фактором простим співвідношенням:

$$\chi_h = - \frac{e^2 \lambda^2}{m c^2 \pi} \frac{F_h}{v}, \quad (1.74)$$

де m — маса електрона; v — об'єм елементарної комірки; λ — довжина хвилі РП. При цьому коефіцієнт заломлення так само просто виражається через нульовий компонент χ :

1.4. Метод ковзного відбиття і рентгенівський аналіз наноструктури

$$n = 1 + \frac{\chi_{0r}}{2} + i \frac{\chi_{0i}}{2}. \quad (1.75)$$

У виразі (1.75) уявна і дійсна частини χ виражені явно.

Рентгенівське хвильове поле всередині кристала є суперпозицією заломленої і відбитої хвиль:

$$E(r) = D_0 e^{i\mathbf{k}_0 r} + D_H e^{i\mathbf{K}_H r}, \quad (1.76)$$

що задовольняють так звану фундаментальну систему рівнянь, які, в свою чергу, є наслідком рівнянь Максвелла

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{K}_0^2 - \mathbf{k}_0^2}{\mathbf{K}_0^2} D_0 = \chi_0 D_0 + \chi_H D_H, \\ \frac{\mathbf{K}_H^2 - \mathbf{k}_H^2}{\mathbf{K}_H^2} D_H = \chi_H D_0 + \chi_0 D_H, \end{cases} \quad (1.77)$$

де \mathbf{k} , \mathbf{K} відповідають векторам у просторі та матеріалі. Рівняння (1.77) описують поправки до хвильових векторів у матеріалі. Якщо ввести змінну, пропорційну відхиленню від точного бреггівського положення $\Delta\vartheta$:

$$\eta = \frac{\Delta\vartheta \sin 2\vartheta}{\chi_h}, \quad (1.78)$$

то відповідні поправки для заломлених і дифрагованих променів, точки зародження яких перебувають на гілках α і β дисперсійної поверхні, можна виразити так:

$$\xi_0^{\alpha,\beta} = \frac{\chi_h}{2} \left[\eta \pm \sqrt{\eta^2 + 1} \right], \quad \xi_h^{\alpha,\beta} = \frac{\chi_h}{2[\eta \pm \sqrt{\eta^2 + 1}]}, \quad (1.79)$$

де знак «+» відповідає гілці α ; знак «-» відповідає гілці β . Унаслідок урахування дисперсійних поправок і деяких спрощень хвильові вектори в кристалі отримають наступний вигляд:

$$\mathbf{K}_{0,h}^{\alpha,\beta} = \mathbf{k} \sqrt{1 + \chi_0 + \xi_{0,h}^{\alpha,\beta}}. \quad (1.80)$$

Відношення амплітуд відбитої і заломленої хвиль для кожної із точок збудження також пов'язані з дисперсійними поправками:

$$\frac{D_H^{\alpha,\beta}}{D_0^{\alpha,\beta}} = \omega^{\alpha,\beta} = \frac{-2z_0^{\alpha,\beta}}{k\chi_H}. \quad (1.81)$$

Повернемося до рис. 1.11, а. Уявимо, що кристал повернули стосовно нерухомого джерела уздовж осі OH . Або, що те ж саме, точка 1, описавши деяку дугу радіуса k в площині, паралельній відбивній площині P , перейшла в положення 4. Таке положення падаючої хвилі приведе до зародження хвильового процесу із точками збудження 5, 6, пов'язаними із точкою 4 нормаллю до поверхні, які лежать на відповідних дисперсійних поверхнях, що є гіперболоїдами обертання з віссю OH . На рис. 1.11, б показано положення точок збудження і перетин дисперсійних поверхонь площиною, в якій перебувають точки 1 і 4, що відповідають падаючій на кристал хвилі. Зазначимо, що при обертанні навколо осі OH кут нахилу падаючої хвилі до дифракційної площини не змінюється, а тому і відхилення від точного брегівського положення, і дисперсійні поправки, а також відношення амплітуд (1.81) залишаються постійними. Однак пари хвиль K_0 і K_H перебувають уже в різних площинах (S_2 і S_3), що привносить деяку розмаїтість в картину дифракції, оскільки маятникові биття інтенсивності, пов'язані з інтерференцією хвиль, що зародилися на різних дисперсійних поверхнях, стають тривимірними.

Будемо продовжувати зменшувати кут падіння променя на поверхню кристала (але не змінюючи кута Брега!) і дійшовши до точки 7 (рис. 1.11, б), з'ясуємо, що дійсна складова заломленої і відбитої хвиль вже паралельна поверхні кристала, і при подальшому зменшенні кута падіння, дійсної частини хвильових векторів вже буде недостатньо для виконання умови рівності тангенціальних компонентів хвильових векторів (1.66). Це приведе до того, що z -компонент векторів K_0 , K_H одержить додаткову, до вже існуючої і зумовленої поглинанням, уявну складову. Ситуація абсолютно аналогічна тій, що спостерігається в випадку GISAX, але, крім дзеркально відбитого променя, в розглянутому випадку з об'єму кристала «видавиться» також дифрагований промінь (рис. 1.11, в). Його тангенціальна складова дорівнює сумі тангенціальної складової падаючого пучка і вектора дифракції Q . Вертикальна складова визначається законом збереження енергії при пружному розсіянні: $k_H = k$.

Отже, визначивши значення z -компонентів хвильових векторів і, в такий спосіб, розрахувавши значення комплексних ку-тів

$\Phi_0^{\alpha,\beta} = \frac{K_{0z}^{\alpha,\beta}}{|K_0^{\alpha,\beta}|}$, $\Phi_H^{\alpha,\beta} = \frac{K_{Hz}^{\alpha,\beta}}{|K_H^{\alpha,\beta}|}$, а також ϕ_n для відбитого пучка, що ви-

йшов із кристала, можна знайти амплітуди всіх хвиль використовуючи рівняння для граничних умов. Система рівнянь буде виглядати дещо складніше. Для амплітуд хвиль, окремо для заломленої і відбитих, запишемо

$$\begin{cases} E_0 + E_S = D_0^\alpha + D_0^\beta, \\ E_H = D_H^\alpha + D_H^\beta. \end{cases}$$

Для z-компонентів аналогічно маємо

$$\begin{cases} \phi(E_0 - E_S) = \Phi_0^\alpha D_0^\alpha + \Phi_0^\beta D_0^\beta, \\ -\phi_H E_H = \Phi_0^\alpha D_H^\alpha + \Phi_0^\beta D_H^\beta. \end{cases}$$

Використавши зв'язок між D_0 і D_H (1.81) і перетворивши рівняння до матричного вигляду, одержимо систему рівнянь:

$$\begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ E_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 \\ \omega_\alpha & \omega_\beta & 0 & -1 \\ \frac{\Phi_0^\alpha}{\phi} & \frac{\Phi_0^\beta}{\phi} & 1 & 0 \\ \Phi_H^\alpha \omega_\alpha & \Phi_H^\beta \omega_\alpha & 0 & \phi_H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_0^\alpha \\ D_0^\beta \\ E_S \\ E_H \end{pmatrix}, \quad (1.82)$$

що складається із чотирьох рівнянь з чотирма невідомими, розв'язок якої не становить ніяких труднощів, але чисельний запис виразів для кожної з невідомих амплітуд досить громіздкий.

1.4.3. ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФРАКЦІЙНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ. МЕТОД ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ ЗА БОРНОМ

У даному пункті коротко розглянемо розсіювання випромінювання недосконалими об'єктами і методи чисельного моделювання таких процесів. Розгляд можна віднести скоріше до формулювання проблеми в цілому, деталі ж будуть подані у відповідних розділах.

Отже, все, що було викладено в попередніх параграфах, стосувалося випадків ідеальних об'єктів, тобто об'єктів з ідеальною ґрат-

кою і ідеально гладкою поверхнею. Щодо таких об'єктів можна сказати, що хвиля, яка падає під деяким кутом на кристал, зорієнтований деяким чином, приведе до появи відбитої хвилі з відомим напрямом і амплітудою, дифрагованої хвилі (якщо умови дозволять), а також до певних за напрямом і амплітудою хвильових процесів у матеріалі.

Тобто для ідеального кристала рішення абсолютно однозначне, і розподіл інтенсивності в оберненому просторі буде описуватися дельта-функціями. Але що ж відбудеться, якщо розсіювальний об'єм недосконалий, якщо локально, від точки до точки, змінюється орієнтація ґратки, розсіювальна здатність елементарної комірки і т.д. Очевидно, що картина розсіяння виявиться

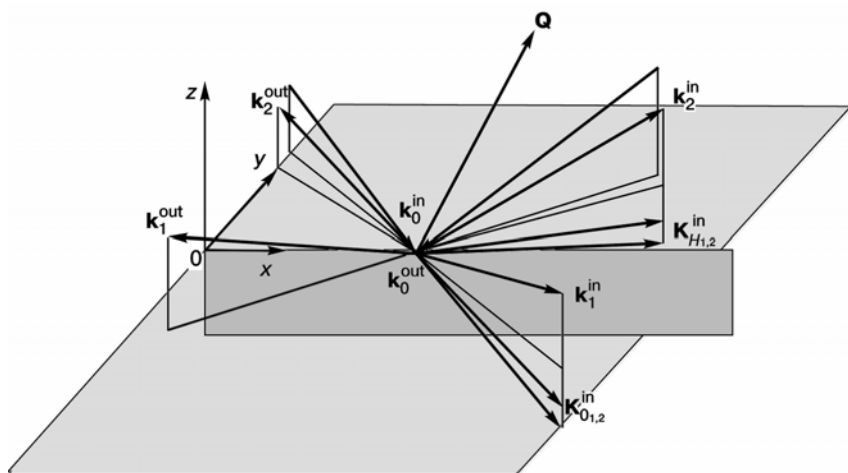


РИС. 1.12. Суперпозиція хвильових процесів у динамічній теорії дифракції під час розсіяння з вектором розсіяння \mathbf{Q}

розмитою, несучи в собі результат статистичного усереднення за розсіювальним об'ємом (якщо спотворення не надто великі і усереднення можливе). Теоретично такий підхід був сформульований М. Кривоглазом і розвинутий В. Молодкіним [11, 12, 13]. Результатом стали деякі формули, що описують у більш-менш складній формі і з більшою або меншою точністю розподіл інтенсивності в оберненому просторі. Не розглядаючи обмеженість аналітичних або чисельних методів, зосередимо увагу на останньому.

З погляду чисельного моделювання необхідно відповісти на наступне запитання: яка буде амплітуда розсіяння хвилі з параметрами \mathbf{E}_0 ,

\mathbf{k}_0 недосконалим об'єктом у напрямі \mathbf{k}_1 , тобто, яка буде амплітуда розсіювання для значення вектора дифракції $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0$.

На практиці для цього можна використовувати результати теорії збурень, але вже в іншій її інтерпретації: вже відомі результати розсіювання ідеальним кристалом, тому недосконалості кристала можна розглядати як збурення, накладаючи на них відоме хвильове поле і визначаючи для складових амплітуди розсіювання, привнесені збуреннями в загальну картину дифракції [2].

При цьому хвильове поле всередині і зовні кристала є суперпозицією хвильових полів, породжених хвилею \mathbf{k}_0 з одиничною амплітудою і «оберненою в часі хвилею \mathbf{k}_1 » (це поле позначене на рис. 1.12 темним кольором). Обернення в часі в цьому випадку є лише зміною напрямку поширення хвилі на протилежний. У підсумку процес розсіювання з вектором \mathbf{q} (для вакууму) поділяється на кілька субпроцесів розсіювання з векторами

$$\mathbf{Q}_{ij} = -(\mathbf{K}_i^0 + \mathbf{K}_j^1),$$

де верхні індекси відповідають хвилям, виникли завдяки падінню на кристал плоских хвиль з одиничною амплітудою. Амплітуда кожної з таких взаємодій пропорційна добутку амплітуд кожної із хвиль.

Отже, для динамічного розсіювання всередині матеріалу сума буде складатися з 16 членів з різними \mathbf{Q}_{ij} . А внесок збурення розраховується підсумовуванням за об'ємом:

$$A = \sum_r \sum_i \sum_j D_0^i D_1^j \chi_{ij} (e^{i\mathbf{Q}_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{r}')} - e^{i\mathbf{Q}_{ij}\mathbf{r}}), \quad (1.83)$$

де χ_{ij} приймає значення залежно від взаємного напрямку пари векторів D_0^i, D_1^j — амплітуди блохівських хвиль.

1.5. МЕТОДИ ЧИСЛОВИХ РОЗРАХУНКІВ СПЕКТРІВ

1.5.1. УЗАГАЛЬНЕНА ТЕОРІЯ ТАКАГІ—ТОПЕНА

Дифракційний профіль мультишарової структури може бути розрахований згідно з динамічною теорією дифракції Такагі—Топена [14, 15]. Припустимо, що шари поперечно однорідні і всі варіації відбуваються вздовж осі z нормально до поверхні зразка. У двоххвильовому випадку, в якому лише заломлений і дифрагований

промені мають значні амплітуди в межах кристала, фундаментальні рівняння приводять до набору диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned}i \frac{\lambda \gamma_H}{\pi} \frac{dD_H}{dz} &= (\chi_0 - \alpha_H) D_H + C \chi_H D_0, \\i \frac{\lambda \gamma_0}{\pi} \frac{dD_0}{dz} &= \chi_0 D_0 + C \chi_H D_H,\end{aligned}\tag{1.84}$$

де λ — довжина хвилі; γ_0 і γ_H — напрямні косинуси відповідно падаючої і заломленої хвиль; z — глибина в кристал від його верхньої поверхні; D_0 і D_H — амплітуди падаючої і заломленої хвиль; χ_0 і χ_H — електричні сприйнятливості; α_H — параметр девіації, який є функцією кута падіння \mathcal{S} ; C — коефіцієнт поляризації, який має значення 1 для нормальної (σ — поляризації)

або $\cos 2\vartheta$ для паралельної (π — поляризації), ϑ — кут падіння на площину відбиття. Електрична сприйнятливість має вигляд

$$\chi_H = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi V} F_H, \quad (1.85)$$

де e — електронний заряд; m — класична маса електрона; c — швидкість світла; V — об'єм елементарної комірки; F_H — структурний множник. Структурний коефіцієнт отримуємо наступним чином:

$$F_H = \sum_k f_k \exp[-i2\pi n(x_k h + y_k k + z_k l)], \quad (1.86)$$

де f_k — атомний коефіцієнт розсіяння k -го атома; n — порядок відбиття; x_k, y_k, z_k — координати k -го атома в елементарній комірці; (hkl) — індекси Міллера відбивних площин. Атомний коефіцієнт розсіяння розраховуємо класичним способом:

$$f_k = f_k^0 + \Delta f_k' + i\Delta f_k'', \quad (1.87)$$

де f_k^0 — атомний коефіцієнт розсіяння, віддалений від резонансного енергетичного рівня; $\Delta f_k', \Delta f_k''$ — реальна і уявна частини аномального коефіцієнта розсіяння.

Диференціальна система (1.84) може бути об'єднана за допомогою амплітудного відношення $X = \frac{D_H}{D_0}$. Тоді маємо

$$\frac{dX}{dz} = iG(AX^2 + 2BX + E). \quad (1.88)$$

Тут змінні визначають так:

$$A = -\frac{C\chi_H}{b}, \quad B = \frac{1}{2} \left[\chi_0 \left(\frac{b-1}{b} \right) - \alpha_H \right], \quad (1.89)$$

$$E = C\chi_H, \quad G = -\frac{\pi}{\lambda \gamma_H},$$

де коефіцієнт асиметрії $b = \frac{\gamma_0}{\gamma_H}$ пов'язаний з геометрією експерименту.

Рівняння (1.88) може бути проінтегроване наступним чином:

$$\int_{z_0}^z dz = \int_{x_0}^x \frac{-i}{G(AX^2 + 2BX + E)} dX, \quad (1.90)$$

де амплітудне відношення $X(z, \vartheta)$ дорівнює X_0 на глибині $z = Z_0$ від поверхні зразка. Після інтегрування (1.88) отримано рекурентний розв'язок:

$$X(z, \vartheta) = \frac{X_0 S + i(E + X_0 B) \operatorname{tg}[GS(z - Z_0)]}{S - i(B + X_0 A) \operatorname{tg}[GS(z - Z_0)]}, \quad (1.91)$$

де $S = (B^2 - AE)^{1/2}$.

Рівняння (1.91) дозволяє розрахувати відношення амплітуд $X(Z, u)$ на глибині $z = Z$, коли амплітудне відношення X_0 на глибині $z = Z_0$ відоме. Ця особливість дозволяє обчислити коефіцієнт відбиття неоднорідної структури у напрямі z , перпендикулярному до поверхні зразка. Структура може бути поділена на паралельні ламелі однорідного матеріалу, і вираз (1.91) рекурентно застосовується від шару до шару до досягнення поверхневого шару зразка. Однак це говорить про те, що амплітудне відношення на глибині має бути відомим. У більшості напівпровідників глибина проникнення випромінювання дещо більша ніж 5 мкм [16]. Це означає що амплітудне відношення на основі поверхні підкладки незначне, і (1.88) може бути об'єднано наступним чином:

$$\int_{\infty}^z dz = \int_0^x \frac{-i}{G(AX^2 + 2BX + E)} dX, \quad (1.92)$$

де підкладка має нескінченну товщину. Інтегрування виразу (1.90) приводить до наступного рівняння, яке дає амплітудне відношення на вершині підкладки:

$$X(\vartheta) = \frac{-E}{B + \{\operatorname{sign}(-2G\xi m[S])\}S}, \quad (1.93)$$

де $\xi m[S]$ — уявна частина S . Цей вираз є класичним результатом для поглинаючого досконалого кристала [9].

Якщо $X(\vartheta)$ відоме, то амплітудне відношення $X(z_1, \vartheta)$ на вершині перших ламелей товщиною $t_1 = z_s - z_1$ отримано із (1.89). Цей розрахунок потім повторюється для всіх ламелей до амплітудного відношення $X(0, \vartheta)$ на поверхні зразка. Коефіцієнт відбиття від всього зразка дає

$$R(\vartheta) = X(0, \vartheta) X^*(0, \vartheta) \frac{1}{|b|}, \quad (1.94)$$

в якому $X^*(0, \vartheta)$ є комплексно-спряженим із $X(0, \vartheta)$. $R(\vartheta)$ повинен бути розрахований в межах кутів $(\vartheta_1, \vartheta_2)$. Коефіцієнт відбиття для випадкової поляризації тоді отримується як середнє арифметичне нормального і паралельного відбиття.

1.5.2. МАТРИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ

Для НГ і зразків з БКЯ розрахунки є ідентичними для обох періодів. У матричній формі повторення однакових розрахунків для різних періодів можна уникнути, тоді як у випадку рекурсивних формул це неможливо. Матричний метод є частково придатним для аналізу НГ кривих гойдання для отримання інформації про структуру інтерфейсів [17]. Період НГ може складатись з окремих шарів, якщо інтерфейси перехідних шарів (чи атомних площин) будуть включені в нього.

Рекурсивна формула може бути записана в наступній формі:

$$X_j = \frac{P_j X_{j-1} + Q_j}{V_j X_{j-1} - W_j}, \quad (1.95)$$

де параметрами шарів є

$$\begin{aligned} P_j &= S_j - iC_j \operatorname{tg}(S_j A_j), \quad Q_j = -iB_j \operatorname{tg}(S_j A_j), \\ V_j &= -iD_j \operatorname{tg}(S_j A_j), \quad W_j = S_j + iC_j \operatorname{tg}(S_j A_j). \end{aligned} \quad (1.96)$$

Крива гойдання для зразка може бути отримана з формули

$$X_0 = \frac{P_s X_0 + Q_s}{V_s X_0 - W_s}, \quad (1.97)$$

де

$$\begin{pmatrix} P_s & Q_s \\ V_s & W_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_N & Q_N \\ V_N & W_N \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} P_2 & Q_2 \\ V_2 & W_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1 & Q_1 \\ V_1 & W_1 \end{pmatrix}. \quad (1.98)$$

Для НГ з N періодів з m шарами в періоді динамічна крива гойдання може бути отримана з виразу (1.97), але при

$$\begin{pmatrix} P_s & Q_s \\ V_s & W_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_p & Q_p \\ V_p & W_p \end{pmatrix}^N, \quad (1.99)$$

де період матриці є

$$\begin{pmatrix} P_p & Q_p \\ V_p & W_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_m & Q_m \\ V_m & W_m \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} P_2 & Q_2 \\ V_2 & W_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1 & Q_1 \\ V_1 & W_1 \end{pmatrix}. \quad (1.100)$$

Використання даного наближення значно спрощує і прискорює розрахунки у випадку, коли число періодів більше ніж два.



ДИФРАКТОМЕТРІЯ ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУР

2.1. ВСТУП

Високороздільна рентгенівська дифрактометрія (ВРРД) часто використовується для дослідження епітаксійних напівпровідникових багат шарових структур, забезпечуючи при цьому точну інформацію про кристалічну якість, деформації, нахили площин і товщини шарів у неруйнівний і відносно простий спосіб [1, 2]. Інтерпретація дифракційних профілів є доволі складною задачею, оскільки напівпровідникові прилади стають більш комплексними. У більшості випадків необхідно використовувати комп'ютерне моделювання, щоб отримати дифракційний профіль і порівняти його з експериментом. Крім того, в даному розділі буде розглянуто різні методики аналізу квантових структур, у тому числі шарів квантових точок на поверхні. Ці методики дозволяють контролювати не лише вказані вище параметри структури, а й геометричні параметри (форму), склад, розподіл напруг за об'ємом точок [3, 4, 5].

2.2. ЧУТЛИВІСТЬ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ ДО СТРУКТУРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Визначимо основні структурні типи, які є критичними до вибору відповідного методу аналізу рентгенівського випромінювання. Структурні властивості можуть бути макроскопічними й мікроскопічними. Макроскопічні властивості пов'язані зі зразками в цілому, наприклад зовнішні розміри й товщина шару, тоді як мікроскопічні властивості визначаються розмірами кристалічних блоків, дефекта-

ми і т.д.

2.2.1. МАКРОСКОПІЧНА ФОРМА

Товщина шару — це фундаментальний параметр для тонких шарів, оскільки ця властивість є фізичним параметром самостійно чи в комбінації з іншими шарами й підкладкою. Перший очевидний ефект на дифракційній картині — зміна інтенсивності з товщиною шару: чим тонший шар, тим менший розсіювальний об'єм. Це єдине загальне формулювання для всіх типів матеріалу. Товщина шару визначає відносні інтенсивності піків шару і підкладки [6].

Цей ефект успішно використовувався на цілому ряді матеріалів, а більшість відповідних методів залежить від матеріалу і виходячи із цього визначає простоту або складність дифракційної моделі, яка застосовується. Прийнятною величиною для вимірювання інтенсивності є не пікова, а інтегральна інтенсивність. Це пояснюється тим, що ця величина менше залежить від структури матеріалу. Якщо в матеріалі присутні дефекти, наприклад дислокації невідповідності, то пік шару буде розширюватись і зменшуватись за розміром, а інтегральна інтенсивність в кінематичному наближенні буде незмінною [7].

Інша особливість розсіяння від тонких шарів — те, що на схилах кривих гойдання спостерігаються інтерференційні смуги, період котрих пов'язаний з товщинами шарів, це так звані товщинні осциляції. Для «ідеальної» епітаксії і розумної якості епітаксійного матеріалу з певною будовою дифракційний профіль може бути розширеним при зменшенні товщин шарів і ці інтерференційні смуги можуть бути непомітні. Отже, лише математичним моделюванням інтенсивності розсіювання, яке враховує розширення і наявність інтерференційних смуг, можна досягнути точного вимірювання товщин.

2.2.2. МЕТОД ВИЗНАЧЕННЯ ТОВЩИНИ ЗА ІНТЕНСИВНІСТЮ РОЗСІЯННЯ

Фундаментальне рівняння, яке застосовується для цього методу, пов'язує лінійний коефіцієнт поглинання μ_i для матеріалу товщиною t_i і відношення інтенсивностей $\left(\frac{I_i}{I_0}\right)$ заломленої хвилі I_i від матеріалу до такої самої від нескінченно товстого зразка з того самого матеріалу I_0 :

$$\frac{I_i}{I_0} = 1 - \exp\left(-\mu_i t_i \left[\frac{1}{\sin \omega} + \frac{1}{\sin (2\vartheta - \omega)}\right]\right), \quad (2.1)$$

2.2. Чутливість рентгенівських променів до структурних властивостей

де 2ϑ — подвійний кут розсіяння; ω — кут падіння пучка на зразок. Це рівняння дійсне для полікристалічної, аморфної і молекулярної структури за умови, що дальній порядок або точні кристалічні області в межах цих матеріалів менші, ніж екстинкційна глибина. Екстинкційна глибина — це динамічний дифракційний параметр, що визначає глибину, в якій потік енергії передається від заломленого до дифрагованого променів і являє собою когерентну глибину дифракції:

$$\xi = \frac{\pi V}{r_e C \lambda |F_H|} [|\sin \omega| \sin(2\vartheta - \omega)]^{1/2}, \quad (2.2)$$

де F_H — структурний фактор (коефіцієнт); C — поляризаційний множник (1 або 2ϑ для двох можливих поляризаційних станів); V — об'єм елементарної комірки; r_e — електронний радіус; λ — довжина хвилі рентгенівського випромінювання. Для шарів, товщих ніж їх екстинкційна довжина, не можна використовувати це просте відношення інтенсивностей, тому що падаючий пучок буде зменшений і дифрагована інтенсивність значно не збільшуватиметься при зростанні товщини. В найпростішому випадку, коли матеріал аморфний, екстинкційна довжина є нескінченною, але розсіяння слабке, так що для отримання достовірних даних експеримент повинен бути досить тривалим. Для полікристалічної речовини важливий параметр — розмір кристалічних блоків, і вони повинні бути менші ніж екстинкційна довжина, якщо кристалічні блоки не містять у собі значної кількості дефектів. Ще один важливий момент при визначенні інтенсивності розсіювання — вторинна екстинкція, яка є результатом екранування кристалічних блоків. Падаючий пучок у такий спосіб вибирає однаково орієнтовані кристалічні блоки в глибині зразка. Товщина може бути визначена декількома методами, заснованими виятково на інтенсивності розсіяння.

2.2.3. ВИМІРЮВАННЯ ТОВЩИНИ, ЩО ҐРУНТУЄТЬСЯ НА ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНИХ СМУГАХ

Цей метод корисний тим, що рівняння не містить у собі ніяких параметрів, які характеризують матеріал, відкидає помилки в вимірюванні розсіяної інтенсивності від одного з вузлів, а використовує інтерференцію дифрагованого променя. Такий метод може використовуватись в будь-якому матеріалі: кристалічному або аморфному, але вимагає плоского зразка в

області дослідження. Є два загальних підходи до цього типу аналізу: рефлектометрія і висококутова дифракція. В основному рефлектометрія визначається дифракцією біля максимумів 000 (тобто в напрямі падаючого пучка), тоді як висококутова дифракція визначається відбиттями від вузлів близьких до всіх доступних hkl -площин. Існування hkl -відбиттів залежить від регулярної ґратчастої періодичності, тоді як максимум 000 завжди присутній, отже дифракційні особливості біля останнього вузла не залежать від кристалічної форми. Сильна інтерференція на границях з різними показниками заломлення викликає биття (рис. 2.1), з яких, використовуючи вираз (2.3), оцінюємо товщину:

$$t = \frac{(i - j)\lambda}{2 \sin(\omega_i - \omega_j)}, \quad (2.3)$$

де i і j — порядки інтерференційних смуг; ω — половина кута розсіяння. Це просте співвідношення, отримане із закону Бреґґа, спочатку використовувалось для визначення товщини за рефлектометриєю [8] і, в більш відповідній формі, для малих кутів розсіяння та для висококутових дифракційних досліджень [9].

2.2.4. ВИМІРЮВАННЯ ТОВЩИНИ ШАРІВ МОДЕЛЮВАННЯМ ПРОФІЛІВ

Із наведеного вище видно, що багато безпосередніх вимірювань розсіяної інтенсивності і періодичності інтерференційних смуг можуть привести до серйозних помилок в аналізі, оскільки поєднання періодичності інтерференційних смуг і інтегральної інтенсивності дають покращані оцінки, але це знову обмежено певними застосуваннями. Гарна теоретична модель дифракційного процесу, однак, може привести до більш надійного значення товщин, але вимагає ітераційного процесу. Існує три головних дифракційні моделі: динамічна, кінематична й оптична теорії. Вони можуть застосовуватися в різних областях. Динамічна теорія — найточніша і є наслідком прямого диференціювання рівнянь Максвелла. Вона має багато варіантів, які розрізняються в деталях, але найбільш пристосована до багат шарових структур і кристалів з дефектами. Це єдина модель, яка дає можливість правильно розрахувати інтенсивності розсіяння від товстих, майже досконалих матеріалів. Кінематична теорія — апроксимація динамічної теорії, і застосовується для слабого розсіяння, тоді як оптична теорія успішно використовується для обчислень профілів рефлектометрії, коли ефекти

періодичності ґратки віддалені від області спостереження. Зв'язок дифракційного процесу зі структурними особливостями є більш очевидним в останніх теоріях, які не містять у собі поняття екстинкції і хвильових полів. Є моделі з напівкінематичної теорії, до яких входять деякі динамічні положення, але в праці [10] показано, що напівкінематична модель [11] є неадекватною для структур будь-якої складності (наприклад, структура із трьома шарами) порівняно з повною динамічною теорією. Однак при використанні цієї моделі можуть бути отримані якісні результати.

Дуже просто можна пристосувати динамічну теорію до дифракції в напівпровідниках, кінематичну теорію для дифракції на полікристалах і оптичну теорію для рефлектометрії. У викладках будемо використовувати вимірювання товщин, розглядаючи високодосконалі матеріали, в яких може застосовуватись динамічна дифракція. Основні рівняння динамічної теорії зв'язують зміни електричного поля як функцію глибини в зразку. Вирази, найбільш прийнятні для наших задач, запропоновані у працях [12, 13] і розглянуті в розд. 1.

2.2.5. НАПРУГИ І НЕВІДПОВІДНІСТЬ ПАРАМЕТРІВ ҐРАТОК

Звичним застосуванням кривих гойдання є визначення складу шарів, напруг і невідповідності параметрів ґраток за кутовою відстанню між піками підкладки та шару. Якість шару визначається з розширення кривих відбиття, і для зразків з одним епітаксійним шаром його товщина розраховується з маятникових осциляцій інтенсивності. Це може бути застосовано до шарів, які мають свої видимі бреггівські піки. Для НГ і БКЯ товщина періоду визначається з відстані між маятниковими полосами (див. далі).

У цьому пункті обговоримо можливості визначення складу, напруг, невідповідності і дезорієнтації шарів. Згідно з рис. 2.1 кутова відстань між бреггівськими піками $\Delta\vartheta$ визначається трьома вкладками: різницею міжплощинних віддалей $\Delta\vartheta_b$, різницею напрямів орієнтації $\Delta\phi$ і дезорієнтації поверхні Ω . Зазначимо, що $\Delta\phi = 0$, коли епішар є повністю релаксований, чи площини ґратки паралельні поверхні зразка $\phi = 0$. Кут Ω відповідає тому факту, що при упорядкуванні атомів на поверхні при зростанні мінімум вільної енергії може привести до дезорієнтації між поверхня-

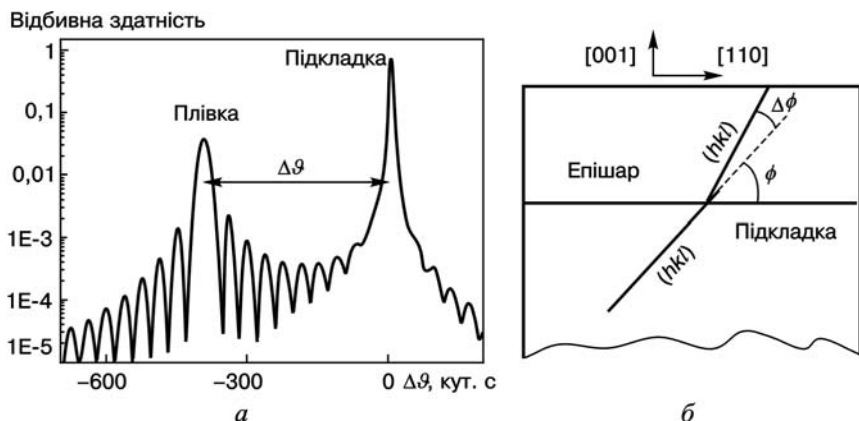


РИС. 2.1. Піки КДВ від підкладки і плівки (а), а також можлива дезорієнтація епішару (б)

ми підкладки і шару. Його знак буде змінюватись, коли напрями падаючого і дифрагованого хвильових векторів будуть комутувати чи при обертанні зразка на 180° навколо нормалі до поверхні. Перпендикулярна невідповідність ε_{\perp} може при цьому бути визначена з $\Delta\vartheta$ усередненого для двох симетричних рефлексів ($\phi = 0$):

$$\varepsilon_{\perp} = -\overline{\Delta\vartheta} \cot \vartheta_B, \quad (2.4)$$

де $\overline{\Delta\vartheta} = 0,5(\Delta\vartheta_0 + \Delta\vartheta_{180})$. Усереднене положення піка для двох асиметричних рефлексів, наприклад, 115 і 224 дає невідповідність ґратки в площині ε_{\parallel} . Два асиметричних рефлексів при азимутальних положеннях 90 і 270° дають значення ε_{\parallel} вздовж інших напрямів у площині. Тому експериментальні значення ε_{\parallel} будуть розділені для площин $\{110\}$ у напрямках типу $\langle 110 \rangle$, а не $\langle 100 \rangle$. При цьому пружні деформації зсуву ε_{xy} будуть дорівнювати $\varepsilon_{\parallel[110]} - \varepsilon_{\parallel[-110]}$, а деформації стиску чи розтягу — $0,5(\varepsilon_{\parallel[110]} + \varepsilon_{\parallel[-110]}) - \varepsilon_f$.

Відповідно до лінійної теорії пружності перпендикулярна невідповідність ε_{\perp} і дві невідповідності в площині ε_{\parallel} будуть пов'язані невідповідністю $\varepsilon_f = \frac{(a - a_s)}{a_s}$ між кубічною коміркою кристала:

$$\varepsilon_f = \frac{[\nu \varepsilon_{\parallel[110]} + \nu \varepsilon_{\parallel[-110]} + (1 - \nu) \varepsilon_{\perp}]}{(1 + \nu)}. \quad (2.5)$$

2.2. Чутливість рентгенівських променів до структурних властивостей

Тут ν — відношення Пуассона, яке для поверхні (001) дорівнює $\frac{c_{12}}{(c_{11} + c_{12})}$, де c_{ij} — пружні константи.

Для узгоджених за параметром ґратки шарів і псевдоморфних напружених шарів, для яких $\varepsilon_{\parallel} = 0$, рівняння (2.5) виконується точно. Проте формула (2.5) має суттєву помилку в випадку частково релаксованих шарів $\varepsilon_{\parallel} \neq 0$, що можна побачити з наступних тестів. Відношення Пуассона було оцінено з виразу (2.5) за допомогою рентгенівського вимірювання ε_{\parallel} і ε_{\perp} та відомої композиції плівок.

Збільшення відхилення від значення $\frac{c_{12}}{(c_{11} + c_{12})} = \frac{1}{3}$ при зростанні ε_{\parallel}

ясно показує, що (2.5) не виконується для релаксованих шарів. Для псевдоморфних шарів $\varepsilon_{\parallel} = 0$:

для {100}

$$\varepsilon_f = \frac{\varepsilon_{\perp} c_{11}}{(c_{11} + 2c_{12})},$$

для {111}

$$\varepsilon_f = \frac{\varepsilon_{\perp} (c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44})}{3(c_{11} + 2c_{12})}, \quad (2.6)$$

для {110}

$$\varepsilon_f = \frac{\varepsilon_{\perp} (c_{11} + c_{12} + 2c_{44})}{2(c_{11} + 2c_{12})}.$$

Використання для запису кривих гойдання двокристалного дифрактометра дозволяє вимірювати відносні деформації шарів з дуже малим значенням невідповідності параметрів ґраток (НПГ) порядку $\beta_0 \cong 10^{-4}$, з точністю не гірше $2 \cdot 10^{-5}$ при використанні стандартного гоніометра. При реалізації методу на більш досконалих гоніометрах, наприклад на трикристалному рентгенівсь-кому спектрометрі, точність визначення компонент тензора деформації досягає 10^{-6} .

Запропоновану в працях [14, 15] методику, що дозволяє підвищити точність вимірювання деформацій, доцільно використовувати для гетероструктур з ультратонкими шарами чи шарами з високим рівнем дефектності, оскільки обидва ці фактори приводять до знач-

ного розширення дифракційних максимумів плівки, внаслідок чого визначення їх точного кутового положення стає неможливим.

На завершення зазначимо, що формули даного пункту справедливі, строго кажучи, лише для гетероструктур із різко розмежованими епітаксійними шарами постійного складу. Для гетероструктур з розмитими гетерограницями між шарами, так, як і для плівок з неоднорідним складом, кутова відстань між шаром і підкладкою може не відповідати середнім значенням деформації, крім того, сама форма рентгенодифракційного (РД) максимуму від шару з неоднорідним складом може бути дуже складною. Тому для таких об'єктів при визначенні деформацій потрібно розв'язати відповідні прямі задачі теорії рентгенівської дифракції з конкретним законом зміни деформації.

2.2.6. ОСОБЛИВОСТІ ДИФРАКЦІЇ В НЕПОГОДЖЕНИХ ЕПІТАКСІЙНИХ СИСТЕМАХ

Навіть у підкладках, ненабагато відхилених від осі високої симетрії, пружна деформація елементарної комірки несиметрична [16]. Асиметричне спотворення ґратки зумовлює зсув бреггівського піка відносно азимутальної орієнтації зразка. Ці зсуви приводять до помилок при інтерпретації кривих, оскільки вони можуть бути інтерпретовані як композиційні коливання або нахили площин в релаксаційних механізмах. Тому коректне вивчення дезорієнтованих псевдоморфних зразків повинно ґрунтуватись на анізотропній теорії пружності і припущенні про асиметричні спотворення деформованих елементарних комірок.

У цьому пункті будемо розглядати теоретичну модель, яка дозволяє розрахувати дифракційний профіль псевдоморфних багат шарових структур, вирощених на довільно орієнтованій підкладці. Спочатку опишемо пружну модель і наведемо рівняння, котрі пов'язують пружний стан системи з динамічною дифракційною теорією. Зосередимо увагу на деяких геометричних аспектах, пов'язаних з вивченням дифракції рентгенівського випромінювання на дезорієнтованих підкладках.

Розглянемо підкладку з довільною орієнтацією, що задається одиничним вектором \mathbf{l} , нормальним до її поверхні. Допустимо, що протягом росту епітаксійного матеріалу на підкладці фронт росту зберігається паралельним поверхні первинної підкладки [17]. Це буде також припущення про те, що невідповідність між епітаксійним шаром і підкладкою мала, а шар пружно деформований. У площині плівки деформація епітаксійного шару визначається так:

2.2. Чутливість рентгенівських променів до структурних властивостей

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a_L}{a_{\parallel}}, \quad (2.7)$$

де a_{\parallel} — параметр кристалічної ґратки деформованих матеріалів у площині росту; a_L — параметр вільної кристалічної ґратки. У випадку складних напівпровідників a_{\parallel} отримуємо з параметрів складових частин кристалічних ґраток при використанні закону Вегарда. У псевдоморфних шарах $a_{\parallel} = a_S$, тобто латеральний параметр ґратки шару дорівнює параметру підкладки. Однак оскільки деформований шар може перевищити критичну товщину [18], накопичена пружна енергія зменшується при формуванні дислокацій невідповідності в інтерфейсі гетероструктури. При подальшому збільшенні товщини розмноження дислокацій приводить до зміни параметра кристалічної ґратки в площині a_{\parallel} , який може бути помічений в ВРРД, і шар стає частково релаксованим. У цьому випадку параметр кристалічної ґратки в площині може бути змодельований таким чином:

$$a_{\parallel} = a_L R + a_S(1-R), \quad (2.8)$$

де R — релаксаційний коефіцієнт такий, що $R = 0$ в псевдоморфних шарах і $R = 1$ в повністю релаксованих шарах. Розглянемо лише псевдоморфний випадок. Якщо вектор \mathbf{l} паралельний осі симетрії ($\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ чи $\langle 111 \rangle$ в напівпровідниках зі структурою сфалериту), то пружні спотворення псевдоморфних шарів будуть симетричними (рис. 2.2, а), тобто атоми спотвореного матеріалу будуть зміщені на вектор \mathbf{u} паралельно \mathbf{l} . Проте, якщо \mathbf{l} не паралельний будь-якій осі симетрії (рис. 2.2, б), то век-

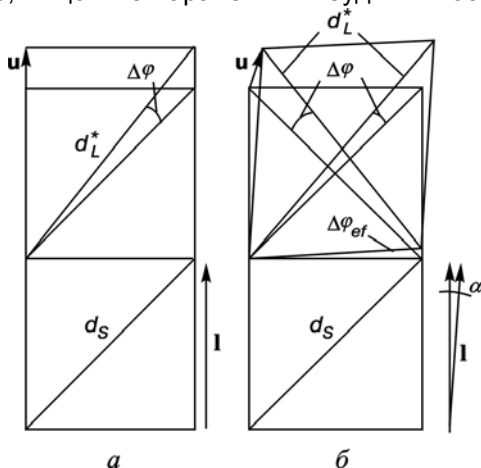


РИС. 2.2. Пружно деформована одинична комірка псевдоморфно напруженого матеріалу. a — нормаль до поверхні підкладки, яка паралельна осі симетрії, і деформація симетрична; b — \mathbf{l} не паралельний осі симетрії внаслідок дезорієнтації тор \mathbf{u} не буде паралельний \mathbf{l} , і елементарна комірка деформованого матеріалу буде асиметрична.

ВРРД-експерименти надзвичайно чутливі до деформацій та нахилу площин епітаксійного матеріалу, і тому ці величини повинні бути детально розраховані для правильної інтерпретації КДВ. Ґрунтуючись на геометричних уявленнях, автори праці [18] вивели вираз для деформації і нахилу в псевдоморфних матеріалах на жорсткій підкладці з довільною орієнтацією. У праці [17] використана модель, заснована на техніці енергетичної мінімізації псевдоморфних структур, для отримання аналогічних результатів. Використаємо геометричний підхід, оскільки це прямо дає можливість обчислити дифракційний профіль деформованих шарів. Згідно з [19, 20], деформація в напрямі \mathbf{m} , нормальному до відбивних площин (вздовж дифракційного вектора), може бути розрахована так:

$$e_m = u_0 \cos(\mathbf{m} \mathbf{n}) \cos(\mathbf{m} \mathbf{l}),$$

де u_0 і \mathbf{n} — відповідно абсолютне значення і одиничний вектор вектора зміщення \mathbf{u} ($\mathbf{u} = u_0 \mathbf{n}$). Нахил відбивних площин деформованого матеріалу відносно відбивних площин підкладки можна записати у вигляді виразу

$$(\Delta\varphi)_m = u_0 \cos(\mathbf{m} \mathbf{n}) \sin(\mathbf{m} \mathbf{l}). \quad (2.9)$$

Вектор зміщення \mathbf{u} може бути розрахований наступним чином: три компоненти \mathbf{u} (u_1, u_2, u_3) повинні відповідати наступному співвідношенню:

$$u_1 : u_2 : u_3 = \frac{l_1}{c_{44} - l_1^2 C} : \frac{l_2}{c_{44} - l_2^2 C} : \frac{l_3}{c_{44} - l_3^2 C}, \quad (2.10)$$

де l_1, l_2, l_3 — компоненти вектора \mathbf{l} ; $C = 2c_{44} - c_{11} + c_{12}$, і c_{11}, c_{12}, c_{33} — константи пружності матеріалу. Із (2.10) видно, що значення u_1, u_2, u_3 можуть бути отримані із виразу

$$u_1[(c_{11} - c_{44})l_1^2 + c_{44}] + u_2 l_1 l_2 (c_{11} + c_{44}) + u_3 l_1 l_3 (c_{12} + c_{44}) + \varepsilon_{\parallel} l_1 (c_{11} + 2c_{12}) = 0, \quad (2.11)$$

який дозволяє зв'язати кожен компонент \mathbf{u} з деформацією в площині e_{\parallel} , визначеною вище. Із (2.10) можна легко бачити, що навіть коли нормаль до поверхні зразка \mathbf{l} близька, але не точно, до осі симетрії, вектор зміщення \mathbf{u} не паралельний \mathbf{l} і деформація не симетрична. Це означає, що будь-який набір (hkl) -площин, що пов'язані симетрією в підкладці перпендикулярно до перерізу осі симетрії, більше не еквівалентні в перерізі підкладки [9]. Крім того,

2.2. Чутливість рентгенівських променів до структурних властивостей

розрахунки за (2.9) і (2.10) приведуть до різних значень деформацій і нахилу для кожного набору із (hkl) відбивних площин, які повинні спостерігатись в ВРРД. Як тільки вектор \mathbf{u} стає відомий, можна вирахувати деформації

$$\varepsilon_m = \left(\frac{\Delta d}{d} \right)_m = \frac{d_L^* - d_{\parallel}}{d_{\parallel}} = \frac{1}{P} \frac{a_L - a_{\parallel}}{a_{\parallel}} = -\frac{1}{P} \varepsilon_{\parallel}. \quad (2.12)$$

Тут d_L^* — міжплощинна відстань деформованого шару вздовж \mathbf{m} ; d_{\parallel} — міжплощинна відстань деформованого шару в площині; P — поправковий коефіцієнт, який заданий так:

$$P = \frac{-1}{\sum_i m_i u_i \cos \varphi}, \quad (2.13)$$

де m_i ($i = 1, 2, 3$) — компоненти \mathbf{m} ; φ — кут між векторами \mathbf{m} і \mathbf{l} . Рівняння (2.12) може бути перетворено в більш відповідний вираз згідно з наступним співвідношенням:

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a_L}{a_{\parallel}} = \frac{d_{\parallel} - d_L}{d_{\parallel}}, \quad (2.14)$$

тобто що в недеформованому матеріалі міжплощинні відстані d є пропорційними параметрам кристалічної ґратки a . Рівняння (2.12) і (2.14) зводяться до виразу

$$d_L^* = d_{\parallel} \left(1 - \frac{1}{P} \right) + \frac{d_L}{P}, \quad (2.15)$$

який приводить до деформованої міжплощинної відстані d_L^* вздовж напрямку \mathbf{m} , нормального до відбивних площин.

Із виразів (2.9) і (2.15) маємо, що нахил $\Delta\varphi$ відбивних площин відносно підкладки і деформованих міжплощинних відстаней d_L^* відбивних площин може бути розрахований. Для розрахунку коефіцієнта відбиття ці величини мають бути отримані для кожної ламелі, на які повинна бути розбита структура, та введені в визначення параметра девіації в динамічній теорії дифракції. Таким чином, поведінка пружності пов'язана з дифракційною моделлю і дозволяє моделювати різні відбиття від багатозарової структури на

довільно орієнтованій підкладці. Параметр девіації α_H зв'язаний з кутовим відхиленням від точного бреггівського положення. Використаємо параметр відхилення, визначений в [21]:

$$\alpha_H = 2\gamma_H (\gamma_0 - \gamma_H - 2\sin \vartheta_B \cos \Phi), \quad (2.16)$$

де γ_0 і γ_H — напрямні косинуси падаючої і заломленої хвилі, відповідно; ϑ_B — бреггівський кут матеріалу; Φ — ефективний кут між відбивними площинами і поверхнею зразка. Параметр девіації дозволяє асимптотично апроксимувати дисперсійну поверхню далеко від точки Лауе, значно краще використовуючи відбиття з низькими кутами виходу, ніж класичний вираз [13].

Напрямні косинуси γ_0 і γ_H задаються виразами

$$\gamma_0 = \sin(\vartheta - \Phi), \quad \gamma_H = \sin(\vartheta_H + \Phi). \quad (2.17)$$

У цих виразах ϑ — кут між відбивною площиною і падаючою хвилею; ϑ_B — кут, сформований відбивними площинами і заломленою хвилею в вакуумі, який відрізняється від кута в кристалі; ϑ_H може бути розрахований з умови, що компоненти хвильових векторів, паралельні поверхні, повинні бути рівними всередині і зовні кристала:

$$\cos(\vartheta_H + \Phi) = \cos(\vartheta - \Phi) - 2\sin \vartheta_B \sin \Phi. \quad (2.18)$$

Унаслідок обчислювальних вимог замість виразу (2.16) використаємо розширення ряду Тейлора для покращення параметра девіації:

$$\alpha_H = 2\gamma_H \left[\Delta\vartheta \frac{\sin 2\vartheta_B}{\sin(\vartheta_B + \Phi)} + \frac{1}{2} (\Delta\vartheta)^2 \left(\frac{\cos 2\vartheta_B}{\sin(\vartheta_B + \Phi)} - \frac{\sin^2(\vartheta_B - \Phi)}{\sin^3(\vartheta_B + \Phi)} \right) \right]. \quad (2.19)$$

Кутове відхилення $\Delta\vartheta$ визначається так:

$$\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_B \pm \Delta\varphi. \quad (2.20)$$

З точки зору ВРРД, є деякі геометричні особливості, пов'язані з дослідженням на дезорієнтованих підкладках. По-перше, вісь симетрії визначає напрям, вздовж якого асиметричні відбиття можуть бути виміряні. По-друге, кут між поверхнею і від-

бивними площинами вздовж дифракційної площини залежить від азимута зразка щодо падаючого рентгенівського випромінювання. По-третє, кут дезорієнтації показує, що епітаксійний матеріал не росте вздовж осі симетрії кристала і спотворення елементарної комірки нетригональне. Вплив цих моментів буде враховуватись в ВРРД.

Елементарні комірки, близькі для кожної поверхні розділу структури, будуть неоднорідно деформованими через атомні кроки, і їх форму неможливо пояснити підходом, наведеним у праці [18]. Ця модель тільки описує спотворення елементарної комірки деяких моношарів далеко від поверхні поділу. Експеримент з використанням ВРРД усереднює значення по всій структурі НГ і положення нульового сателіта відображає середній нахил відбивних площин і середнє число міжплощинних відстаней.

2.3. МЕТОДИ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ

Двокристальна рентгенівська дифрактометрія дозволяє проводити різні записи кривої дифракційного відбиття (КДВ) залежно від спільного чи окремого обертання зразка чи детектора. У зв'язку з цим можна виділити три основних способи запису КДВ.

- Метод кривих гойдання — так зване ω -сканування. Запис КДВ здійснюється обертанням зразка при нерухомому детекторі, який розташований відносно падаючого рентгенівського пучка під кутом 2ϑ .

- Метод ω — 2ϑ -сканування. Запис КДВ здійснюється при одночасному обертанні зразка і детектора. Обертання детектора відбувається з подвоєною щодо зразка швидкістю.

- Метод 2ϑ -сканування. Запис здійснюється при обертанні детектора і нерухомому зразку.

У кожному з цих методів залежно від завдання може бути використана колімація дифрагованого пучка безпосереднім встановленням перед детектором вузької щілини. Порівняння напівширин максимумів, записаних з щілиною і без неї при різних методах запису КДВ, дозволяє судити як про зміну деформації в шарах, так і про ступінь мозаїчності епітаксійних шарів. Це питання детально досліджувалось у [9], де показано, що із порівняння напівширин рентгенівських максимумів КДВ ω — 2ϑ і 2ϑ -сканування отримується інформація про ступінь мозаїчності плівки, а порівняння напівширин кривих гойдання, записаних з щілиною і без неї, дає інформацію про ступінь неоднорідності деформації по глибині кристала.

Введення додаткової дезорієнтації (відносно точного кута Бреґга ϑ_0) між зразком і детектором в методі ω — 2ϑ -сканування при записі КДВ асиметричного відбиття дозволяє провести роз-гортку КДВ вздовж вектора оберненої ґратки [22]. Таким чином, цим прийомом можна визначити пружну деформацію шарів відносно один одного навіть у тому випадку, коли вихідні параметри ґраток шарів невідомі. Це особливо важливо в випадку ба-гатошарових гетероструктур, шари яких складаються із три- або чотирикомпонентних твердих розчинів.

Зупинимось детальніше на вимірюваннях деформації методом кривих гойдання, які зазвичай використовуються для вивчення багатшарових гетероструктур і надґраток (НГ).

2.3.1. РОЗДІЛЬНА ЗДАТНІСТЬ ДИФРАКТОМЕТРИЧНИХ ВИМІРЮВАНЬ

ВРРД-вимірювання з високою роздільною здатністю за кутами i , таким чином, за векторами дифракції задають розподіл дифрагованої інтенсивності в сусідніх точках оберненої ґратки (чи бреггівських піків). Тому точки оберненої ґратки є еталонними положеннями в оберненому просторі при описі розподілу дифрагованої інтенсивності.

Розсіяна інтенсивність описується як функція відхилення хвильового вектора від точки оберненої ґратки. У випадку багатшарової структури пік від підкладки служить точкою відліку. В обох випадках: трикристальної дифрактометрії (ТКД) і двокристальної дифрактометрії (ДКД), вектор відхилення \mathbf{q} лежить в площині дифракції, тому що розсіяна інтенсивність, розподілена у напрямі, нормальному до площин дифракції, буде проінтегрована широким вікном детектора. Монохроматор і кристал-аналізатор розділяють різні хвильові вектори лише в межах площини дифракції. Вертикальний прийомний кут детектора може бути в межах $\pm 5^\circ$ заданий розміром детектора і відстанню від зразка, якщо немає вертикальної щілини. Вертикальна щілина розміром 1 мм на відстані 10 см від зразка дасть вертикальний кут розбіжності $0,57^\circ$. Вертикальне інтегрування розсіяної інтенсивності має важливе значення на \mathbf{q} -залежності дифузного профілю розсіяння в кристалах з дефектами.

У ТКД дифрагована інтенсивність вимірюється як функція двох кутів: кута падіння на поверхню зразка $\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_B$ і кута роз-

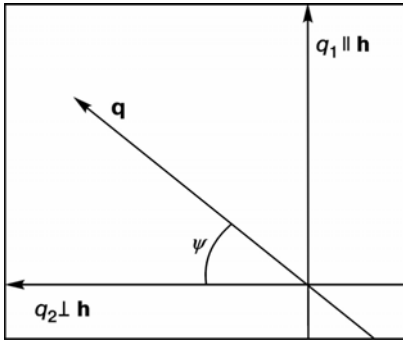


РИС. 2.3. Радіальний розподіл розсіяної інтенсивності вздовж вектора q , який отримується комбінацією поворотів аналізатора та зразка



РИС. 2.4. Сфера Евальда для опису інтенсивності розсіяння

сіяння $\Delta\omega = \omega - 2\vartheta_B$. Перетворення цього кута в змінних q -координатах, які лежать в площині дифракції, запишеться наступним чином:

$$(q_1, q_2) = K(\Delta\omega \cos \vartheta_B, (2\Delta\vartheta - \Delta\omega) \sin \vartheta_B),$$

$$(q_E, q_0) = K(\Delta\omega, \Delta\vartheta \sin 2\vartheta_B), \quad (2.21)$$

$$(q_z, q_x) = (q_1 \cos \phi + q_2 \sin \phi, -q_1 \sin \phi + q_2 \cos \phi),$$

де лише одна вісь з кожної пари чітко визначена: q_1 паралельна вектору оберненої ґратки h , q_E паралельна сфері Евальда і q_z паралельна нормалі до вихідної поверхні зразка. Координати (q_1, q_2) використовуються для побудови контурів рівної інтенсивності на двовимірних картах, про що скажемо нижче.

На рис. 2.3 показано, що радіальний розподіл інтенсивності вздовж напрямку q в площині дифракції, який утворює кут ψ з віссю q_2 , може бути отриманий в ТКД комбінацією сканів аналізатора і зразка:

$$\Delta\omega = \frac{2\Delta\vartheta}{(1 + \cos \vartheta_B \cos \psi)}. \quad (2.21a)$$

На рис. 2.4 показано переріз сфери Евальда дифракційною площиною. Тут кут падіння перевищує бреггівський. При $\vartheta = \vartheta_B$ сфера Евальда проходить через точку оберненого простору H , а при

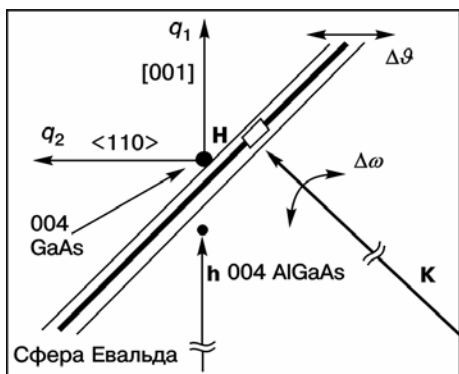


РИС. 2.5. Система координат в q -просторі. Координати (q_1, q_2) відносяться до вектора \mathbf{h} , (q_z, q_x) — до поверхні зразка і (q_E, q_0) — до сфери Евальда

$\omega = 2\vartheta_B$ дифракційний вектор розсіяної хвилі \mathbf{K} закінчується в точці H .

Нарешті на рис. 2.5 проілюстровані всі координатні системи, наведені в виразі (2.21), і на сфері Евальда при

даному куті падіння, і в реальному просторі на поверхні зразка. Тут q_y і y осі перпендикулярні до площини дифракції. Зазначимо, що при даному куті падіння хвильовий вектор розсіяної хвилі \mathbf{K} при куті $\omega = 2\vartheta_B$ закінчується на перетині сфери Евальда і q_2 осі на відстані $2K\sin\vartheta_B \Delta\theta$ від точки оберненої ґратки H . Це видно з рис. 2.4.

Різні сфери Евальда можуть бути реалізовані в q -просторі з роздільною здатністю $10^{-5}1/\text{Å}$, що відповідає кутовому інтервалу 3 кут. с.

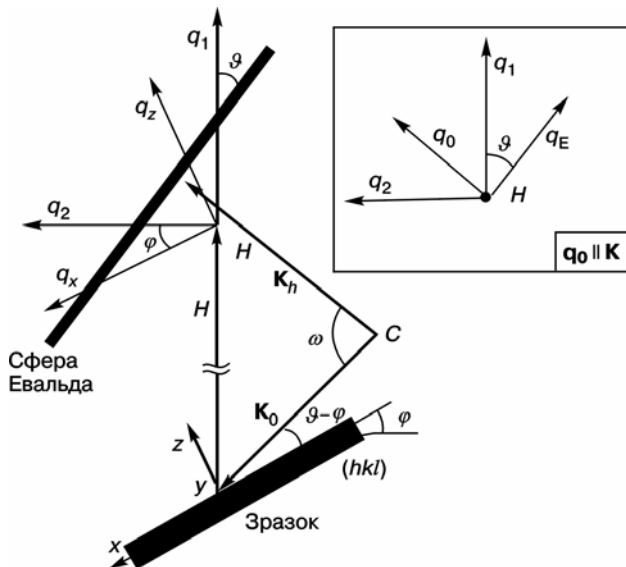


РИС. 2.6. Вектор роздільної здатності \mathbf{q} , показаний для 004-рефлексу в AlGaAs/GaAs(001)

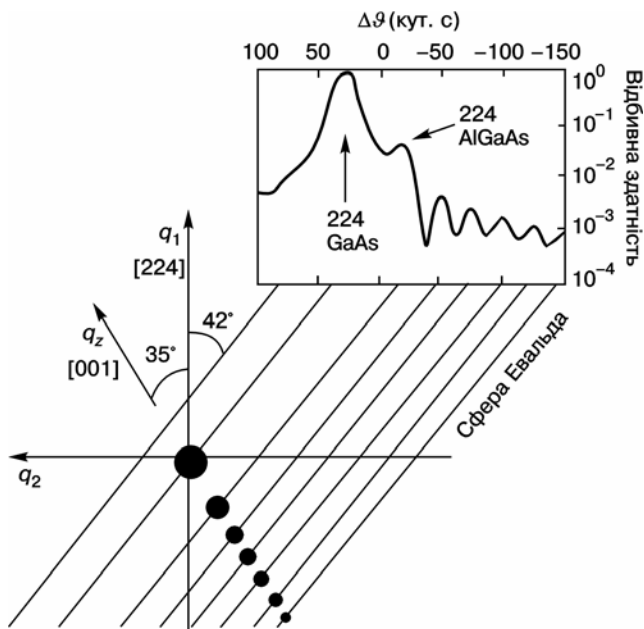


РИС. 2.7. Співвідношення між двокристалною КДВ і трикристалною КОП для 224-відбиття

Для прикладу наведемо дослідження від зразка AlGaAs/GaAs(100) біля вузла 004 для $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання. На рис. 2.6 зображені частини сфери Евальда, що відповідають різним кутам падіння. На рис. 2.7 видно відповідність між ТКД-розподілом інтенсивності в q -просторі біля вузла 224 та кривою гойдання від рефлекса 224 для цього ж зразка. Цей рисунок показує, що маятникові піки від шару вилаштувані вздовж нормалі до поверхні в q -просторі і відображені як вторинні піки на ДКД-кривих.

2.3.2. ДИФРАКЦІЯ ЗА УМОВ КОВЗНОГО ПАДІННЯ

Дифракція за умов ковзного падіння (GIXRD) — унікальна методика для вивчення поверхні, особливо для структурних досліджень ультратонких плівок з декількома моношарами, і характеристик границь бар'єрних структур [3]. Порівняно зі звичайними рентгенівськими умовами, ковзне падіння може забезпечити велику освітлену область падаючого пучка рентгенівського випромінювання на поверхні зразка і, таким чином, збільшує поверх-

неву об'ємну частку, що дає внесок у дифраговану інтенсивність. Успіхи в застосуванні поверхневої рентгенівської дифракції впливають з поверхневої чутливості і специфіки поверхні. Важливим моментом у застосуванні цієї поверхневої чутливості був розвиток синхротронного випромінювання, яке дає можливість одержувати надзвичайно інтенсивні і висококолімо-вані джерела рентгенівських променів, що дозволяє виявляти слабкі розсіяні сигнали. Метод вивчення поверхні ґрунтується на двох різних ідеях.

Перший підхід ґрунтується на умовах ковзного відбиття і є подібним до ситуації з дифракцією електронів (RHEED). Фізична основа цього підходу в рентгенівських променях, однак, зовсім інша. Показник заломлення для рентгенівського проміння в твердих тілах менший ніж одиниця, і якщо наблизитися до поверхні в ковзному куті падіння, то можна досягти умов повного відбиття. У цьому випадку проникнення в кристал мале, так що будь-який сигнал розсіяння належить приповерхневій області, навіть якщо розсіяний сигнал добре вимірюється далеко від геометрії розсіяння, наприклад як в RHEED.

Другий підхід полягає у виборі дифракційних умов, за яких розсіяний поверхнею сигнал є значним, а розсіяння підкладки слабке. Глибина проникнення рентгенівських променів у зразок — домінуючий параметр, яким можна керувати, змінюючи кут падіння α_i . Існує межа для кута падіння, тобто кут повного зовнішнього відбиття α_k , нижче якого заломлений пучок знаходиться на поверхні зразка, а падаючий кут повністю відбивається поверхнею. Кут повного зовнішнього відбиття може бути розрахований з (2.22):

$$\alpha_k = (2,6 \cdot 10^{-6} \rho \lambda^2)^{1/2}, \quad (2.22)$$

де ρ — масова густина зразка, г/см^3 . Якщо $\alpha_i \leq \alpha_k$, то глибина проникнення t визначається так:

$$t = \frac{\lambda}{[2\pi(\alpha_k^2 - \alpha_i^2)^{1/2}]}. \quad (2.23)$$

Якщо $\alpha_i \geq \alpha_k$, то глибина проникнення залежить від лінійного поглинання μ :

$$t = 2\alpha_i \sqrt{\mu_e}. \quad (2.24)$$

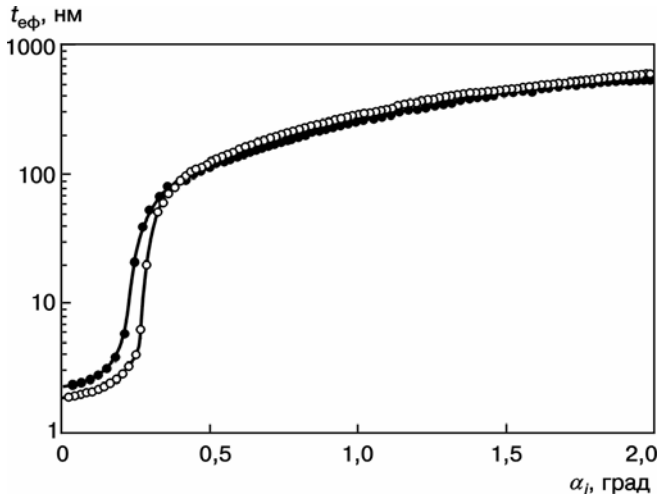


РИС. 2.8. Ефективна глибина проникнення при ковзному падінні рентгенівських променів в кристал при зміні кута падіння α_i для довжини хвилі 0,117 нм: ● — GaAs, $\alpha_k = 0,23^\circ$; ○ — InAs, $\alpha_k = 0,25^\circ$

Наприклад, на рис. 2.8 показана розрахункова глибина проникнення t в кристали GaAs і InAs як функція кута падіння. Ковзна геометрія падіння вимагає висококолімованого пучка, який може дати синхротронне випромінювання. Варто також зазначити, що використання кутів падіння, близьких до критичних, є потенційно важливим, коли дифраговані під малими кутами пучки добре розділяються з дзеркально відбитими пучками. Для пояснення цієї поверхневої специфіки припустимо, що вивчення поверхневої рентгенівської дифракції проводиться при фіксованому куті падіння щодо площин поверхні, а дифраговані пучки отримуються комбінацією азимутального обертання зразка і переміщення детектора. Вимірювання поверхневого рентгенівського випромінювання при постійному відхиленні, перпендикулярному до поверхні, дуже трудомісткий процес і вимагає від апаратури, щоб аномально ковзний кут падіння був дуже строго зафіксований. У цьому випадку необхідність дотримання жорстких вимог регулювання високої точності положення і обертання зразка та детектора в поверхневій дифракції — велика проблема в експерименті.

Коли пучок рентгенівського випромінювання відбивається від поверхні під кутом ковзання, як відомо, в кристалі генерується непостійна хвиля. Поперечна складова (паралельна поверхні)

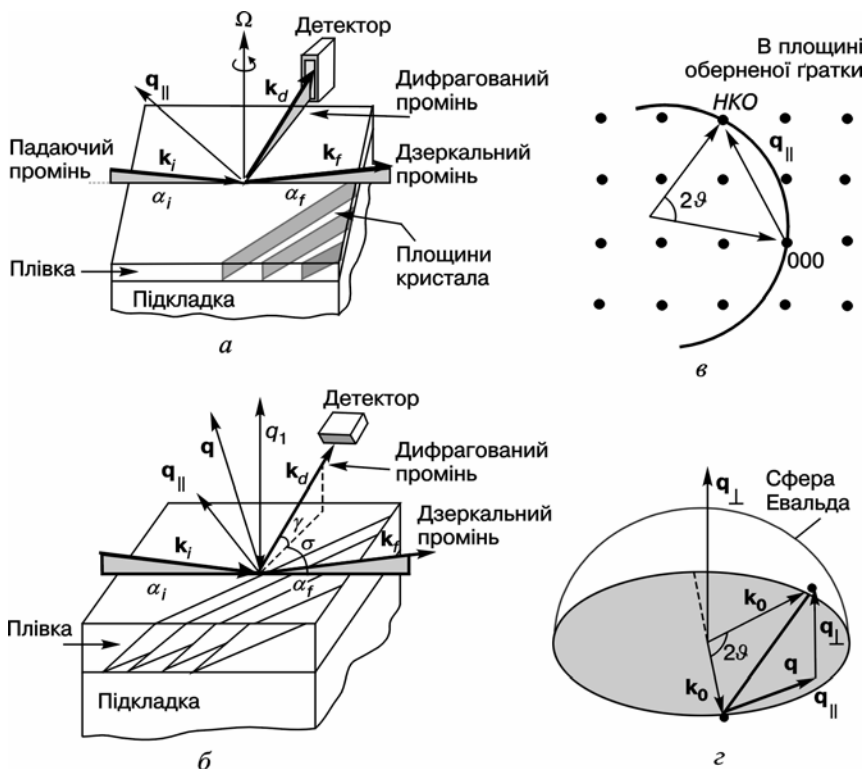


РИС. 2.9. Схема, яка ілюструє GIXRD-експеримент: GIXRD в площині, внесок в дифракцію дають площини ґратки, перпендикулярні до поверхні зразка, $\mathbf{q}_\perp = 0$ (а); GIXRD з площини, похилі площини дають внесок в дифракцію з вектором $\mathbf{q}_\perp \neq 0$ (б); сфера Евальда і обернена ґратка при дифракції в площині (в); геометрія (б) в оберненому просторі (г)

може бути приписана ковзному падінню у випадку, якщо виконується умова Лауе, що є достатнім для площин ґратки, перпендикулярних чи похилих до поверхні зразка. Обидва випадки показані на рис.2.9. Дифракційна геометрія падаючого пучка до площин ґратки, перпендикулярних до поверхні, зображена на рис. 2.9, а. Назвемо цей випадок дифракцією в площині, оскільки вектор розсіяння є паралельним поверхні зразка, тобто $\mathbf{q} = \mathbf{q}_\parallel$, у той час, як $\mathbf{q}_\perp = 0$. Використовуючи умову Вульфа—Брегга, міжплощинну відстань d_{hko} можна розрахувати від кута 2θ у площині дифракції, яка характеризує поверхневу структуру в площині, наприклад сталу ґратки. Крім цьо-

го, випадок ковзного падіння може також дати нам структурну інформацію в геометрії із площини.

На рис. 2.9, б показана ситуація, коли дифракція від площини ґратки є чутливою щодо поверхні зразка. Вектор розсіяння \mathbf{q} на площині поверхні складається з проєкцій \mathbf{q}_{\parallel} і \mathbf{q}_{\perp} . Аналізуючи обидва вектори розсіяння, можна отримати дані про кристалічну структуру ґратки в горизонтальному і вертикальному напрямках. Крім того, поєднуючи GIXRD-методи в площині і з площини, можна досліджувати всі брегівські плями, які знаходяться в оберненому просторі ґратки.

Для пояснення цього твердження зобразимо дифракційні умови Бреґга за допомогою сфери Евальда в оберненому просторі (рис. 2.9, в, г). Перетин сфери Евальда з оберненою ґраткою — брегівська умова для спостереження дифракційної інтенсивності. Вектор розсіяння \mathbf{q} (передача імпульсу) на рис. 2.9, в знаходиться точно в лауе-умовах, тобто $q_{hk0} = q_{\parallel} = \mathbf{G}_{hk0}$, де \mathbf{G} — вектор оберненої ґратки в площині. Аналогічно для випадку дифракції з площини можна визначити вектор розсіяння $q_{hkl} = \mathbf{G}_{hkl}$.

Всі детальні співвідношення між кутковими характеристиками в реальному просторі і в площині дифракції в оберненому просторі для даного методу описані в праці [23]. Подальші доповнення до GIXRD-методики для структурної характеристики поверхні обговорені в [24].

2.3.3. РОЗСІЯННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ ПРИ КОВЗНОМУ МАЛОКУТОВОМУ ПАДІННІ

Розглянемо приклад застосування GISAXS-методики для дослідження латерального впорядкування самоорганізованих InAs квантових точок (КТ). Допустимо, що 3-D точки є латеральними, безладно розподіленими з ближнім порядком. У випадку ковзного падіння звернемо увагу на інтенсивності розсіяння при дзеркальному положенні пучка, де можна одержати дифузну розсіяну інтенсивність, наведену 3-D розподіленими точками. Дифузна інтенсивність симетрично розподілена по обидва боки дзеркального пучка. Ці дифузні максимуми будемо називати сателітними піками. У деяких зразках азимутальна орієнтація сателітної пікової інтенсивності може бути виражена так [25]:

$$I(q_{\parallel}) \propto \sum \frac{w}{w^2 + (q_{\parallel} \pm q_0)^2}, \quad (2.25)$$

де q_{\parallel} — значення латерального вектора розсіяння в оберненому просторі; $q_{\parallel} = q_0$ — пікове положення сателітів; w — напівширина пікової інтенсивності сателітів. Аналізуючи сателітний пік, отримуємо два важливих параметри, які описують латеральний розподіл 3-D точок, тобто середньої відстані d між точками і середньоквадратичного відхилення середнього значення відстані між точками $\left\langle \frac{\sigma}{d} \right\rangle$, в якому σ є середньою дивергенцією відстані між точками щодо середнього значення d [25]:

$$\bar{d} = \frac{2\pi}{q_0},$$

$$\left\langle \sigma / \bar{d} \right\rangle = \sqrt{\frac{w}{2\pi q_0}}. \quad (2.26)$$

Середньоквадратичне відхилення дуже важливе для характеристики дивергенції точкової відстані в напрямі, паралельному до q_{\parallel} , та чіткості розподілу між точками. Цей параметр також пов'язаний з довжиною кореляції між точками і може інтерпретуватись як когерентне розширення. Кількісне визначення довжини кореляції із напівширини (НШ) сателітів залежить від вибору парної функції кореляції. Для ближнього порядку кореляції можна використовувати показникову функцію типу $\exp\left(\frac{r}{l}\right)$ [26]. Довжина кореляції l тоді пов'язана з НШ: $l = \frac{2}{w}$. Тоді, використовуючи формулу Шерера [27], можна одержати з НШ розміри кристалічних доменів. Середній розмір домена L , може інтерпретуватися як довжина кореляції [26]:

$$L = 0,9 \frac{2\pi}{w}. \quad (2.27)$$

Схема GISAXS-експерименту показана на рис. 2.10. Вхідний пучок рівнобіжний у напрямі вздовж осі y ; α_i — кут падіння, більший за кут повного відбиття α_c ; α_f — кут відбиття; Ω — кут азимутальної орієнтації зразка. Позиційно-чутливий детектор (ПЧД) встановлюється паралельно поверхні зразка і перпендикулярно до азимутального напрямку зразка. На рис. 2.10, б видно

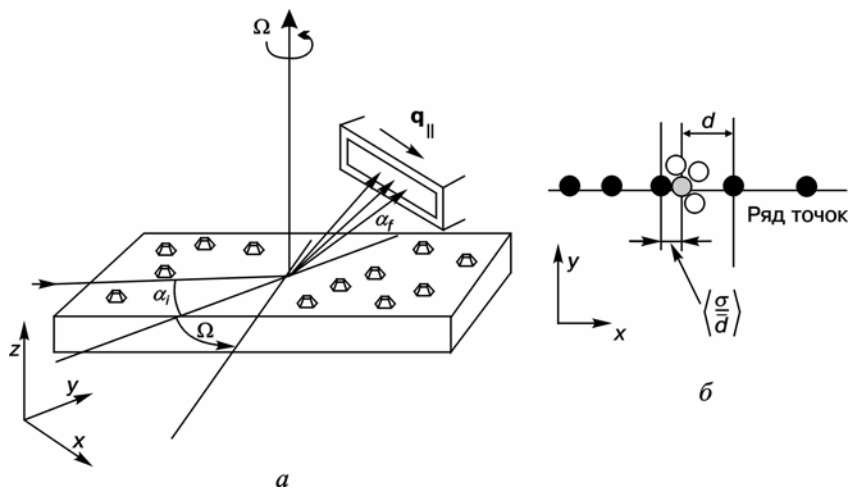
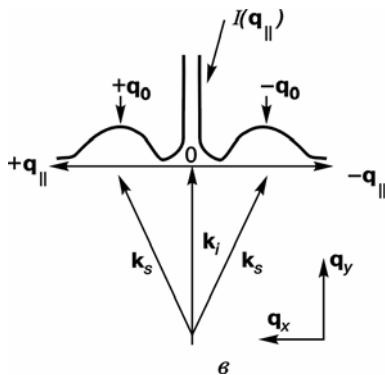


РИС. 2.10. Принцип GISAXS-експерименту. а — схема GISAXS-установки; б — вид ряду точок зверху, d — міжточкова відстань, $\left\langle \frac{\sigma}{d} \right\rangle$ — стандартне відхилення цієї відстані.

Ряд точок паралельний напрямку q_{\parallel} . Світлі кружки показують зміщення точок, сірі — на міжвузлові положення; σ — криві дифузного розсіяння від точок (б). k_i — вектор падаючої хвилі; k_s — вектор дифузного розсіяння; q_{\parallel} — проекція вектора розсіяння в оберненому просторі; q_0 — положення сателітного піка



розподіл точок в деяких рядах, які перпендикулярні до азимута зразка. З рис. 2.10, в стає зрозумілою крива інтенсивності розсіяння від точок.

Важливо зазначити, що чіткість розподілу між точками є пропорційною довжині кореляції і вказує на порядок в латеральному розподілі. Чим більша довжина кореляції, тим вищий порядок. Крім того, інтегральна інтенсивність сателітних піків є ознакою зсуву точок із їх положень у ґратках, визначених зі значень d (див., наприклад, рис. 2.10, б (відкриті кола)). Великий зсув — мала інтегральна інтенсивність. Інтегральна інтенсивність зменшується на коефіцієнт e^{-2M} , де M — пропорційний зсуву то-

чок. Цей параметр аналогічний коефіцієнту Дебая—Валлера, який описує динамічні зсуви атомів в кристалічній елементарній комірці (див. [7]). На поверхневій ґратці з розташованими точками цей коефіцієнт виражає статичні зсуви відносно їх точного місцезнаходження в ґратці.

Крім того, GISAXS-метод дозволяє визначати структуру граней, які оточують точки [28—30]. Аналізуючи профілі інтенсивності перерізів кристалічних стрижнів (CTR), що викликані формою точок, можна одержати усереднену форму грані, яка є важливим параметром, що використовується для обчислення електронних структур.

2.3.4. ВІДБИТТЯ Х-ПРОМЕНІВ ПРИ КОВЗНОМУ ПАДІННІ

GIXR-вимірювання дають багату інформацію щодо товщини і властивостей границь поділу. Зокрема, GIXR-метод дуже чутливий до некристалічних шарів. Тому він добре задовольняє умови вивчення тонких наноструктур і Hf^{I} . GIXR-експеримент для багат шарових систем був описаний Парратом [8] і пояснений за допомогою рекурсивних рівнянь Френеля. Показник заломлення може бути виражений як функція вектора розсіяння $\mathbf{q}_0 = |\mathbf{k}_{0f} - \mathbf{k}_{0i}| = q_0$:

$$n(q_0) = 1 - \frac{2\pi r_0}{k_0^2} \sum_i [f_i(q_0) + \Delta f_i] - \frac{i\mu}{2k_0} = 1 - \delta - i\beta, \quad (2.28)$$

де $|\mathbf{k}_{0i}| = |\mathbf{k}_{0f}| = k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ — хвильові числа в вакуумі для пружного розсіяння; r_0 — класичний електронний радіус ($0,2818 \cdot 10^5$ нм); $f_i(q_0)$ — атомний коефіцієнт форми (у випадку ковзного падіння дорівнює атомному числу Z); Δf — дисперсійна поправка δ до рахунку; μ — масовий коефіцієнт поглинання. Дійсна частина δ додатна і її порядок 10^5 , тому розрахунок проникнення зовнішнього відбитого пучка рентгенівського випромінювання в середовище більш високої електронної густини ρ_e відбувається при критичному значенні вектора

$$q_k^2 = 16\pi\rho_e r_0 = 4k_0^2(1 - n^2), \quad (2.29)$$

де q_k — властивість матеріалу. Зазначимо, що в конфігурації дзеркального відбиття колімований пучок рентгенівських променів

падає з вакууму на поверхню матеріалу, а вектор розсіяння буде нормальний до поверхні цього матеріалу. Тоді кути падіння α_i і виходу α_f пучка ідентичні, а вектор розсіяння запишеться так: $\mathbf{q}_0 = 2\mathbf{k}_0 \sin \alpha$. У матеріалі вектор розсіяння змінюється: $\mathbf{q}_{\parallel}^2 = \mathbf{q}_0^2 - \mathbf{q}_k^2$. Для $q_0 < q_k$ вектор \mathbf{q}_{\parallel} стає уявним і прохідна хвиля згасає в матеріалі по експоненті з характерною глибиною проникнення $\Delta_{\text{еф}}$, що є $\lim \Delta_{\text{еф}}(q_0) = \frac{1}{q_k}$. $\Delta_{\text{еф}}$ становить порядку 2—5 нм залежно від елек-

тронної густини матеріалу. Для $q_0 > q_k$ параметр $\Delta(q_0)$ визначає головним чином фотоелектричне поглинання.

У випадку тонких плівок і НГ маємо справу з декількома чи багатьма поверхнями поділу. Граничні умови повинні бути повними на кожній індивідуальній поверхні поділу, а відбиття і проникність разом описують повне відбиття для середовища шаруватих структур.

2.4. ПЕРЕРІЗИ КРИСТАЛІЧНИХ СТРИЖНІВ

2.4.1. ПОВЕРХНЕВА ДИФРАКЦІЯ

Дифракція має дуже широке і важливе застосування в структурному аналізі конденсованих матеріалів. Як зазначалося раніше, при використанні ковзних кутів падіння (кути між пучком фотонів і поверхнею монокристала) рентгенодифракційні методи стають поверхнево-чутливими. Отже, поверхневі РД-методи стають важливою структурною методикою для характеристики поверхонь і тонкопліткових гетероструктур як доповнення до традиційних дифракційних методів, зокрема RHEED. Інтенсивності дифрагованих променів динамічного діапазону зразка, які пропорційні розсіювальному об'єму, в поверхневій дифракції є виправданими лише при використанні синхротронного випромінювання.

Останнім часом поверхневе рентгенівське розсіяння [31—38] одночасно з розвитком нових синхротронних джерел отримало швидкий розвиток. Рентгенівська дифракція має важливу перевагу завдяки значній чутливості для виявлення одного шару атомів, але в той же час є досить проникною, щоб досягнути поглиблених поверхонь поділу [39]. Тому цей метод може з однаковим успіхом використовуватись як для досліджень поверхні, так і границь поділу. Основні поняття поверхневої дифракції можуть бути отримані виходячи з простих і зрозумілих трактувань, запропонованих у праці [32]. Дифракція рентгенівських променів

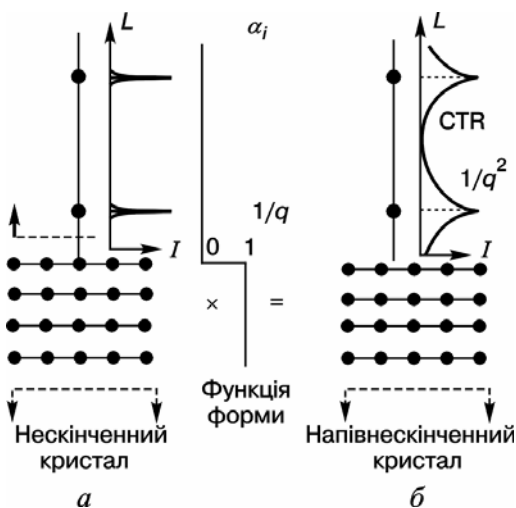


Рис. 2.11. Принципи поверхневої дифракції. а — дифрагована інтенсивність від площин нескінченного кристала в напрямі L , перпендикулярному до площин; б — кристал, утворений на поверхні, візуалізований як результат множення на нескінченну кількість площин функції, яка дорівнює 0 поза кристалом і 1 всередині кристала

кристалами описується законом Вульфа—Брегга, який встановлює умови для таких інтерференцій. На рис. 2.11, а наведено нескінченний набір кристалографічних площин. Якщо розглядати напрям, перпендикулярний до цих площин (L -вісь на рис. 2.11), то для специфічних умов розсіяння, які задовольняють рівняння Вульфа—Брегга, він буде мати дуже інтенсивні дифраговані промені, що нагадують трикутні функції. Інтенсивність цих бреггівських відбиттів є результатом підсиленої інтерференції багатьох (близько кількох тисяч) кристалографічних площин.

Інформація, що отримується в бреггівських відбиттях, усереднює властивості цих дифрагуючих площин, які утворюють кристал. Розглянемо тепер середину осі L між цими двома бреггівськими відбиттями (кола) на рисунку. У цьому точному положенні умови розсіяння такі, що послаблена інтерференція відбувається між рентгенівськими хвилями, розсіяними від двох послідовних кристалографічних площин. Це викликає дуже сильне погасання, яке зменшує заломлювану інтенсивність майже до нуля. Це точне поняття «майже нуль» якраз і є предметом поверхневої дифракції. Можна показати, що залишкова інтенсивність від деструктивних інтерференційних умов є результатом впливу самих верхніх атомних площин кристала. Таким чином, вимірювання за умов послабленої інтерференції не має сенсу для об'ємного кристала, а лише для поверхні.

У більш точному наближенні [32] кристал описують скінченною поверхнею, яка є результатом множення нескінченного набору кристалографічних площин на ступеневу функцію (рис. 2.11). У просторі

Фур'є (тобто в просторі, де описана геометрія розсіяння) простий добуток перетворюється в добуток згортки.

У випадку адсорбованих атомів утворюються моношари з більшою поверхневою ґраткою, ніж підкладка, але формуються не відновлені або спотворені положення атомів підкладки, і структурна інформація отримується від дробових порядків пучків — де важлива тільки відносна локалізація адсорбованих атомів у межах цього шару. Це вимагає вимірювання перерізу кристалічного стрижня (CTR).

Поверхневий CTR, як було сказано вище, існує на напівнескінченній кристалічній поверхні. Інтенсивність стрижня може бути розцінена як розсіяння від одного атомного шару та виражена згідно з виразами (3.8), (3.11) (розд. 1) в припущенні числа нескінченних елементарних комірок N_1 і N_2 , які розташовані паралельно поверхні [40].

Інтенсивність стрижня дуже чутлива до поверхневої кристалічної шорсткості, яка значно загасає вздовж нормалі до поверхні, тобто вздовж q_3 , далеко від бреггівських умов. Це можна зрозуміти із простої моделі. Якщо неповний шар атомів доданий до поверхні таким чином, що вони займають положення, які є продовженням об'ємної ґратки, то буде відбуватись інтерференція між двовимірною картиною дифрагуючого шару і ідеальною картиною CTR іншої ідеальної частини кристала. Зручний спосіб моделювати шорсткість — це розширювати товщину плівки більше ніж на один шар, тобто дробове заповнення β при $0 < \beta < 1$ додається до першого шару, β^2 до другого, і так далі. Розташування атомів у межах кожного шару прийнято таким, щоб зробити терасну структуру, бічна грань якої менша, ніж довжина когерентності рентгенівських променів. Дифрагована інтенсивність може бути записана так:

$$I_{hk} = F_{hk}^2 N_1^2 N_2^2 \frac{(1-\beta)^2}{[1+\beta^2-2\beta\cos(q_3c)]} \frac{1}{4\sin^2\left(\frac{1}{2}q_3c\right)}. \quad (2.30)$$

Зручно виразити шорсткість поверхні як середньоквадратичне значення поверхневого профілю σ_{rms} співвідношенням

$$\sigma_{rms} = \frac{\beta^{1/2}}{(1-\beta)} d_{\perp}, \quad (2.31)$$

де d_{\perp} є параметром, перпендикулярним до поверхні ґратки. Ця формула є специфічною для моделі і дасть неточний критерій поверхневого контуру, якщо істотними є вібрації або безладдя. Вище було відзначено, що для ідеального кристала з гладкою поверхнею інтенсивність

CTR зменшується пропорційно q^{-2} . Для випадку шорсткої поверхні інтенсивність знижується швидше зі збільшенням q .

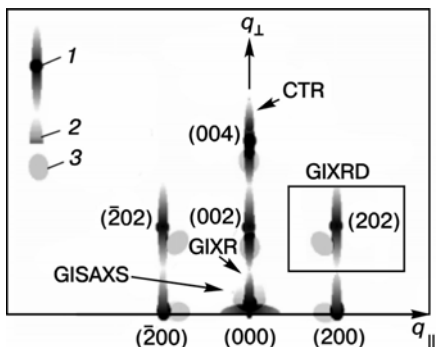
У розглянутому випадку тонкої плівки, вирощеної на вершині підкладки, коливання інтенсивності стають видимими вздовж CTR завдяки різниці між векторами розсіяння від підкладки і тонкого шару [41]. Період коливань пропорційний оберненій товщині шару. У випадку шорсткої поверхні і границь поділу наявність шорсткості приводить до зменшення інтенсивності CTR і зниження амплітуди коливань зі збільшенням q .

Ці неперервні розподіли інтенсивності звичайно позначаються як перерізи кристалічних стрижнів (CTR). Вони є характеристиками, які поєднують брегівські відбиття. У мінімумах CTR, як показано вище, поверхнева чутливість найбільш висока. На практиці, однак, інтенсивності CTR чутливі до поверхневої структури всюди, окрім безпосередньої близькості до брегівських відбиттів. Поверхнева дифракція ґрунтується в основному на вимірюваннях інтенсивностей CTR, які містять у собі інформацію відносно структури самих верхніх атомних площин кристала. Структура поверхні досить гарно визначається підгонкою розрахункових CTR до вимірюваних, отриманих з апіоріорних поверхневих моделей.

2.5. ВИСНОВКИ

Згадані вище рентгенівські експериментальні методи дозволяють нам зібрати структурну інформацію про вирощені методом МПЕ нанорозмірні структури на кристалічних підкладках. Вирощені структури поділяються на непокриту й покриті зразки. Метод дослідження за допомогою рентгенівських променів виявляється дуже потужним для дослідження цих тонких плівок.

На рис. 2.12 схематично подано різні рентгенівські експериментальні методи в оберненому просторі. Брегівські дифракційні плями, показані



на рисунку, обрані для того щоб одержати різноманітну структурну інформацію щодо зразків. Значимо, що фактична картина оберненого простору більш складна, ніж наведена на рисунку.

РИС. 2.12. Схема різних дифракційних експериментів в оберненому просторі: 1 — пік підкладки GaAs; 2 — сателітний пік; 3 — пік шару ZnAs



НАДҐРАТКИ. ОСНОВНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ

3.1. ВСТУП

Фізичні властивості матеріалів можуть бути змінені при створенні додаткової структурної періодичності шляхом осадження додаткових тонких плівок. Довжина хвилі періодичності повинна бути такою, щоб фізичні параметри впливали на цю періодичність, і це відрізняє надґратку від багат шарової структури. На жаль, це твердження не настільки просте, тому що фізичні параметри (наприклад, електронне обмеження) можуть відчувати періодичну структуру як ряд індивідуальних плівок (наприклад, індивідуальні потенційні ями), хоча деякі інші фізичні параметри відчують це як надґратку. Надґратку будемо визначати в термінах «рентгенівської дифракційної надґратки» (залежність природи дифракційної картини від структури) [1]. Тому вона може бути визначена як структура, яка усереднює розсіяння для періодичних елементів і не складається з індивідуальних піків, пов'язаних з індивідуальними елементами, а з'являється як усереднений пік збурення в термінах сателітних відбиттів. Межі терміну «надґратка» також вимагають уточнення: скільки періодів утворюють надґратку і наскільки товстими мають бути окремі шари, щоб прості явища усереднення були недейсними. Аналіз структур надґратки з використанням кінематичної і динамічної дифракційних теорій буде розглянуто, включаючи межі їх обґрунтованості. Будуть розглянуті важливі параметри: період надґратки, індивідуальні товщини шарів і гранична шорсткість.

Використання високороздільних методів відкриває широкі можливості в аналізі дифракційних картин, що буде розглянуто в даному розділі. Рентгенівська дифракція є настільки чутлива, що дійсно може виявляти девіації від досконалого об'єкта, тому для практичного аналізу необхідний компроміс, який залежить від заданої інформації.

Останнім часом значна увага приділяється вивченню властивостей квантово-розмірних надґраток (НГ), що пов'язано з перспективою їх практичного використання, зокрема, в приладах оптоелектроніки. У цьому плані надзвичайно важливою є інформація про структуру цих об'єктів, відносно планарності границь між шарами, однорідності товщин шарів та дифузійних процесів на границях, про домішки й мікродфекти в періодичних структурах. Всі ці недосконалості кристалічної будови значно впливають на електрофізичні й оптичні характеристики НГ.

У цьому розділі висвітлено деякі питання, пов'язані з дослідженнями методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії надґраткових структур із квантовими ямами, отриманими молекулярно-променевою епітаксією. У декількох параграфах обговорюються особливості формування спектрів кривих дифракційного відбиття в короткоперіодних надґратках.

Обговорюються причини виникнення і згасання сателітної картини спектрів залежно від різних причин: структурна досконалість шарів, напруги на границях поділу, нерівності границь і дисперсія товщини шарів. Буде розглянуто причини високої чутливості інтенсивності сателітів НГ до дефектів структури в субшарах, а також показані деякі особливості застосування квазізаборонених рефлексів для дослідження цих структур.

3.2. ДИФРАКЦІЯ ВІД БАГАТОШАРОВИХ КОГЕРЕНТНИХ СТРУКТУР

Багатошарові когерентні структури (БШС) — новий тип матеріалу, котрий складається з тонких шарів напівпровідників або металів, які утворені послідовним осадженням пари двох різних матеріалів. Проста модель, заснована на структурі складових матеріалів, має ті ж самі якісні особливості, що і реальний матеріал. Далі запропоновано модель, в котрій деформація між двома суміжними несумірними атомними площинами може бути різною, будемо досліджувати результати лінійної зміни цього параметра деформації.

Задача моделювання періодичних композиційних модуляцій спочатку була здійснена авторами [2]. Для дослідження більш ранньої історії задачі можна звернутись до праці [3]. Пізніше великий інтерес викликали штучно створені матеріали [4]. Зокрема, шаруваті матеріали знайшли застосування як монохроматори поляризованих нейтронів і РП [5].

3.2. Дифракція від багат шарових когерентних структур

Ідеальні утворення БШС з великою кількістю шарів N формують макроскопічний кристал. Кожний шар складається з M атомних площин, хімічні і структурні композиції яких модулюються в процесі підготовки. Якщо a — середня відстань між атомними площинами, то періодичність БШС $\lambda = M\bar{a}$.

Для дифракційних експериментів, де вектор дифракції нормальний до площин, ідеальні зразки поведуться як одновимірна ґратка, що викликає дифракційні максимуми, отримані в термах розсіювальної функції:

$$F(q) = \sum_{n=0}^N A(q) \exp[iqn(M\bar{a})], \quad (3.1)$$

де $F(q)$ — амплітуда розсіяння, квадрат якої пропорційний дифрагованій інтенсивності. Підсумовування у виразі (3.1) показує, що інтенсивність досягає максимуму для значень дифракційного вектора $q = \frac{2\pi p}{Ma}$, де p — ціле число. Для ідеального зразка, що складається з адекватного числа шарів ($N \sim 10^3$), ширина піків порівнянна з роздільною здатністю приладу.

Квадрат амплітуди розсіяння $|A(q)|^2$ прямо пов'язаний з експериментально вимірюваною інтенсивністю дифракційних максимумів. Виконавши модельні розрахунки, $|A(q)|^2$ можна порівняти з експериментом, звідки може бути визначена мікроструктура матеріалу. Амплітуда задається виразом

$$A(q) = A(2\pi p / M\bar{a}) \equiv A_p = \sum_{m=1}^M f_m \exp(2\pi i p m / M) \exp(2\pi i \Delta\phi_m p / M), \quad (3.2)$$

де f_m — амплітуда розсіяння m -го шару; $a\Delta\phi_m$ — зміщення m -го шару від його середнього положення ma . Формула (3.2) показує, що $2M$ співвідношень повинні бути визначені з експериментальних вимірювань, а саме f_m , $\Delta\phi_m$ і, таким чином, зокрема, $2M$ різних дифракційних максимумів мають бути виміряні для отримання цих фізичних величин.

При виконанні таких умов, однак, необхідно звернути увагу на те, чи можуть вони привести до загального виразу. У деяких простих, але суттєвих випадках, це може привести до більш простого аналітичного виразу і можливості описати експериментальні дані меншим числом параметрів.

Деякі з дифракційних максимумів за даними (3.2) приймають особливі значення, оскільки їх інтенсивність є відмінною від нуля, навіть якщо матеріал, який знаходиться в основному періоді, однорідний, тобто $f_m = f$ і $\Delta\phi_m = 0$ для всіх значень m . Ці піки, сигнал від середньої ґратки, виникають для $p = rM$, де r — ціле число. Інші відбиття могли бути індексовані як $p = rM \pm s$, де s — також ціле число, і названі «сателітами» s -го порядку середньої ґраткової лінії r . Зазначимо, що інтенсивність сателітів слабка порівняно з цією середньою ґратковою лінією тільки в межах слабого збудження. Це означає, що для більшої модуляції з усіма піками необхідно працювати за тією ж самою схемою. Розглянемо особливий випадок, а саме в якому БШС утворена з двох елементів у рівних частинах, так щоб основний період був утворений з $M_1 = \frac{M}{2}$ шарів. Припустимо, що коливання в композиції та деформації ідентичні і симетричні для цих двох напівперіодів:

$$\Delta f_m = -\Delta f_{M_1+m}, \quad \Delta\phi_m = -\Delta\phi_{M_1+m}, \quad (3.3)$$

$$\Delta f_m = -\Delta f_{M_1-m+1}, \quad \Delta\phi_m = -\Delta\phi_{M_1-m+1},$$

де $\Delta f_m = f_m - \bar{f}$. У зв'язку з цим лише модуляції, симетричні до четверті періоду (синусоїдальної чи прямокутної форми), прийнятні, в той час, як інші (типу пилоподібної модуляції) виключені. Амплітуда розсіяння прийме тепер досить просту форму: середня ґратка

$$p = rM, \quad |A_p| = 4\bar{f} \sum_{m=1}^{M/4} \cos[2\pi r \Delta\phi_m],$$

непарні сателіти

$$p = rM \pm (2s + 1),$$

$$|A_p| = 4\bar{f} \sum_{m=1}^{M/4} \cos \left[2\pi \frac{m - \frac{1}{2}}{M} (2s + 1) \right] \sin \left[2\pi \left(r \pm \frac{2s + 1}{M} \right) \Delta\phi_m \right] \pm \pm 4\bar{f} \sum_{m=1}^{M/4} \Delta f_m \sin \left[2\pi \frac{m - \frac{1}{2}}{M} (2s + 1) \right] \cos \left[2\pi \left(r \pm \frac{2s + 1}{M} \right) \Delta\phi_m \right], \quad (3.4)$$

парні сателіти

$$\begin{aligned}
 p &= rM \pm 2s, \\
 |A_p| &= 4\bar{f} \sum_{m=1}^{M/4} \cos \left[2\pi \frac{m - \frac{1}{2}}{M} (2s) \right] \sin \left[2\pi \left(r \pm \frac{2s}{M} \right) \Delta\phi_m \right] \pm \\
 &\pm 4\bar{f} \sum_{m=1}^{M/4} \Delta f_m \sin \left[2\pi \frac{m - \frac{1}{2}}{M} (2s) \right] \cos \left[2\pi \left(r \pm \frac{2s}{M} \right) \Delta\phi_m \right]. \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

З аналізу виразів (3.4), (3.5) можна отримати декілька важливих наслідків. Дослідимо спочатку утворення лінії середньої ґратки «центрального пік» як функцію довжини періоду M . Амплітуда його розсіяння залежить тільки від деформації, котра викликана зміщеннями, які можуть бути розкладені в ряди Фур'є:

$$\Delta\phi_m = \Delta_1 \frac{M}{2\pi} \cos \left(2\pi \frac{m}{M} \right) + \Delta_3 \frac{M}{2\pi} \cos \left(6\pi \frac{m}{M} \right). \quad (3.6)$$

З урахуванням лише першого доданка (котрий відповідає синусоїдальній деформації) амплітуда середньої ґраткової лінії приймає просту форму:

$$A_m = \bar{f} M J_0 \left(2\pi \Delta_1 \frac{M}{2\pi} \right), \quad (3.7)$$

де J_0 — функція Бесселя нульового порядку. Це рівняння дійсне тільки при великих значеннях M , де умовами, які описуються функціями Бесселя, більш високого порядку в рівнянні (3.4) можна знехтувати. З рівняння (3.7) в реальному випадку знайдемо, що в напівпровідникових надґратках існують незначні зміни амплітуди центрального піка як функції довжини хвилі. Це справедливо, оскільки деформація в цих матеріалах мала [4]. З іншого боку, БШС, сформовані декількома речовинами, показують великі зміни в центральній піковій амплітуді при якісному узгодженні з (3.4).

Поведінка сателітів не може бути описана таким прямим способом. Однак сказане вище дає можливість розібратись у деяких із їх особливостей. Наприклад, інтерференція між амплітудним і ґратковим збудженням спричиняє асиметрію в амплітудах сателітів $+s$ і $-s$. Якщо деформації відсутні ($\Delta\phi_m = 0$), то сателіти парного порядку тотожно перетворюються в нуль. Якщо амплітуди розсіяння однакові для всіх атомів ($\Delta f_m = 0$), то сателіти порядку s амплітуди пропор-

ційні функціям Бесселя s -го порядку. Аналіз співвідношень (3.4) і (3.19) показує також, що в цьому випадку симетричні сателіти мають рівну інтенсивність, тому що другий член у кожному рівнянні тожний нуль.

Кількісні особливості, показані аналітично для амплітуд розсіяння, підтверджені чисельними розрахунками.

Введемо явні вирази для структурних множників в деяких досконалох подвійних шарах [6]. У загальному випадку маємо

$$f_m = (1/d) \int_0^d \exp(i K_m z) f(z) dz. \quad (3.8)$$

Зазначимо, що $f_{-m} = f_m^*$ для подвійного непоглинального шару, де $f(z)$ — реальний. Це аналог закону Фріделя [7]. Зазначимо також, що f_0 — середнє від (z) :

$$f_0 = (1/d) \int_0^d f(z) dz. \quad (3.9)$$

Для загального подвійного шару, в якому шари позначені A і B , отримаємо

$$f(z) = \begin{cases} f_A, & 0 \leq z \leq sd, \\ f_B, & sd \leq z \leq d, \end{cases} \quad (3.10)$$

де $f_A = \rho_A b_A$; $f_B = \rho_B b_B$; s — відносне число товщин шарів. Тоді це можна записати

$$f_m = \begin{cases} sf_A + (1-s)f_B, & m = 0, \\ (f_A - f_B) \{ [\exp(2sm\pi i) - 1] / 2m\pi i \}, & m \neq 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Якщо подвійний шар симетричний, тобто шари A і B мають однакову товщину, то $s = \frac{1}{2}$ і

$$f_m = \begin{cases} \frac{1}{2}(f_A + f_B), & m = 0, \\ (i/m\pi)(f_A - f_B), & m = \pm 1, \pm 3, \dots, \\ 0, & m = \pm 2, \pm 4, \dots \end{cases} \quad (3.12)$$

3.3. Дослідження формування рентгенівських спектрів від надґраток

Таким чином, всі відбиття парного порядку є забороненими для симетричних подвійних шарів [8, 9]. Динамічна теорія дифракції не вимагає ідеальної багат шаровості (тобто послідовності однорідних шарів, відділених плоскопаралельними границями). Лише необхідно, щоб густина довжини розсіяння $f(z)$ була періодичною функцією z . Отже, динамічна теорія може легко врахувати той факт, що в дійсності границі між шарами завжди розмиваються в деякій мірі дифузєю і шорсткістю проміжного шару. В екстремальних випадках, де ефективна довжина розсіяння змінюється синусоїдально з глибиною z , маємо

$$f(z) = \frac{1}{2} \left[(f_A + f_B) + (f_A - f_B) \sin(2\pi \frac{z}{d}) \right], \quad (3.13)$$

$$f_m = \begin{cases} \frac{1}{2}(f_A + f_B), & m = 0, \\ \pm(i/4)(f_A - f_B), & m = \pm 1, \\ 0, & m = \pm 2, \pm 3... \end{cases} \quad (3.14)$$

У цьому випадку всі відбиття більш високого порядку заборонені.

3.3. ДОСЛІДЖЕННЯ ФОРМУВАННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ СПЕКТРІВ ВІД НАДҒРАТОК

Розглянемо рис. 3.1, на якому наведено серію симульованих дифракційних профілів з використанням динамічної теорії для шарів AlAs і GaAs, осаджених на підкладці арсеніду галію. На рис. 3.1, а показана крива від одного подвійного шару, де видно чіткі осциляції, викликані усередненою ґраткою. Широкий усереднений пік від подвійного шару віддалений від піка підкладки в бік менших кутів через більшу сталу ґратки усередненого піка за рахунок більшого параметра шару AlAs. Для чотирьох подвійних шарів (рис. 3.1, б) сателіти першого порядку з'являються як плечі усередненого піка. Оскільки число подвійних шарів збільшується, сателіти стають чіткішими, хоча картина стає більш складною з швидкими осциляціями, що зустрічаються всюди на спектрах (рис. 3.1, в, г).

Інтенсивність

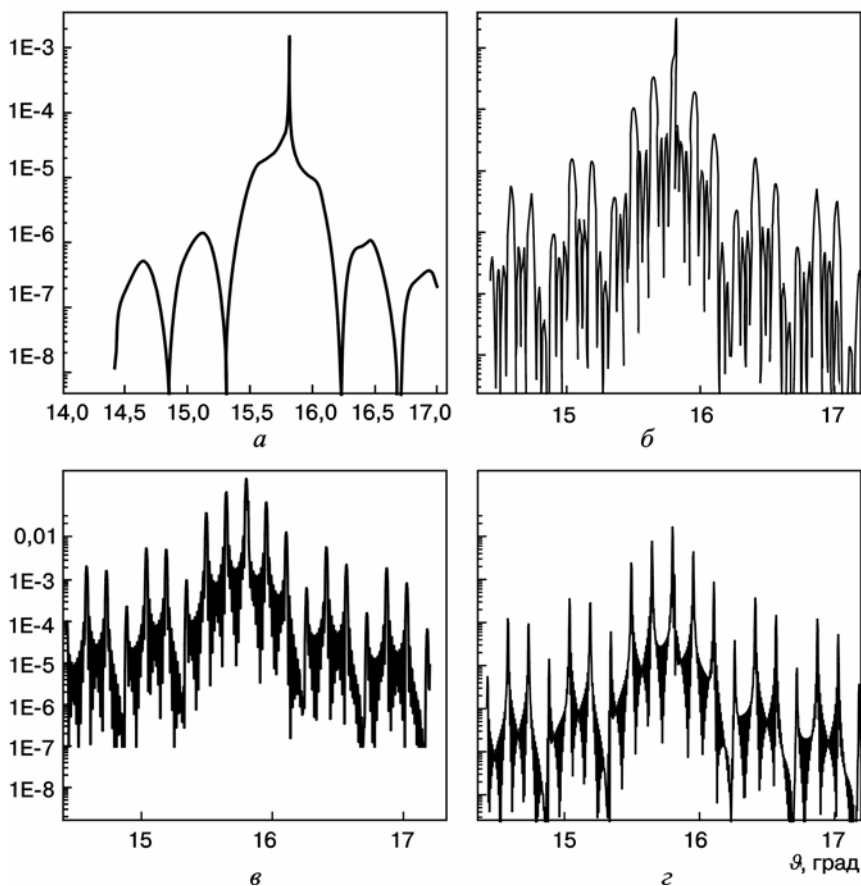


РИС. 3.1. Еволюція спектрів дифракції для двошарової структури AlAs(10нм)—GaAs(20нм) при зростанні числа подвійних шарів, n : а — 1; б — 4; в — 10; з — 20. Відбиття 002, $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання

Розглянемо ситуацію, коли шари, які складають надґратку, стають товщими, (рис. 3.2), тоді сателіти розташовуються близько один від одного. Пік підкладки може використовуватись як маркер у наступних обговореннях — пік S (рис. 3.2).

Пік зліва (менші кути) від гострого піка підкладки на рис. 3.2, а є найбільш сильним і фактично його можна розглядати як усереднений пік $\text{H}\Gamma$, а опуклі піки (сателіти), які є приблизно рівновіддаленими від нього, змінюють своє положення при збільшен-

3.3. Дослідження формування рентгенівських спектрів від надґраток

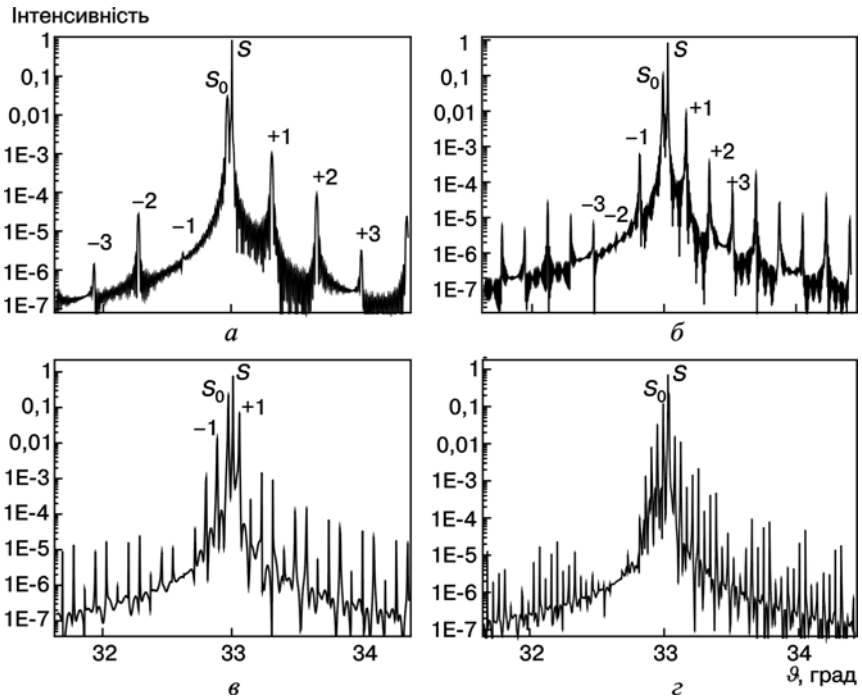


РИС. 3.2. Еволюція спектрів дифракції для двошарової структури AlAs—GaAs (20 подвійних шарів) при зростанні товщин шарів: а — 5—10; б — 10—20; в — 20—40; г — 40—80 нм. Відбиття 004, $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання

ні товщини подвійного шару. При подальшому збільшенні періоду картина змінюється: стає більшим усереднений пік і сателіти стають слабкими. З дифракційних спектрів для структур на рис. 3.2, а, б видно, що від'ємні сателіти непарного порядку є слабкими все-таки не тому, що збільшується товщина. На рис. 3.2, в сателіти на великокутовій стороні усередненого піка стають найбільш сильними, тоді як сателіти на малокутовій стороні значно нижчі за інтенсивністю. Поняття усередненого піка тепер стає досить сумнівним, хоча дифракцію не можна розглядати в простих термінах незалежних розсіянь, але видно, що така взаємодія це все ще надґратка дифракції рентгенівського випромінювання [10].

Кінематична дифракція відчуває таку модуляцію як збурення [11] і не може застосуватися до цих надзвичайних випадків, а тому

необхідне динамічне моделювання профілю розподілу інтенсивності. Отже, є три явні області на цій стадії:

1) дуже мало періодів — один або два, які можуть інтерпретуватися лише в термінах дифракційного профілю;

2) проміжна область, коли профіль виникає як усереднення, і сателітні інтенсивності можуть використовуватись для отримання інформації;

3) область, коли індивідуальні шари настільки товсті, що відбувається істотна зміна дифракційної картини, і моделювання профілю можливе лише за динамічною теорією.

В значній мірі області 1 і 3 не дають ніяких реальних покращань, хоча можливо в останньому випадку кінематична апроксимація теорії була б достатня, але в загальній динамічній дифракційній теорії повинен застосовуватися ітераційний процес змінних параметрів. Тому сконцентруємо свою увагу на проміжній області.

3.3.1. СТРУКТУРНИЙ ФАКТОР НАДґРАТОК. ІНТЕНСИВНОСТІ САТЕЛІТІВ

Як бачимо, криві гойдання від таких одномірних «штучних кристалів», якими є H^{Γ} , мають досить незвичайний вигляд. На цих спектрах спостерігається послідовність розділених рівними проміжками піків-сателітів. Можна зрозуміти зародження сателітів надґратки (H^{Γ}), відзначивши, що періодична структура має відповідну систему вузлів в оберненому просторі. Період в реальному просторі великий і тому відстань між вузлами в оберненому просторі дуже мала. Окрім цього, вузли розташовані лише в одному вимірі і тому існує лише лінія вузлів оберненої ґратки, як показано на рис. 3.3. Зазначимо, що всі вузли оберненої ґратки основного кристала разом з нульовим модульовані надґраткою. Походження сателітів тоді стає зрозумілим, а структура оберненого простору особливо добре спостерігається на двовимірних картах оберненого простору (див. далі).

Дифракція РП на структурах, в яких стала ґратки або інтенсивність розсіяння модульовані вздовж однієї з координат, характеризується наявністю сателітів біля бреггівського піка усередненої ґратки [12, 13]. Інтенсивність розсіяння РП сателітними піками пропорційна фур'є-компонентам координатної залежності модуляції складу системи [14]. Крім цього, зміна ширини сателітних піків в оберненому просторі несе інформацію про досконалість плівки і, зокрема, про когерентність шарів H^{Γ} .

3.3. Дослідження формування рентгенівських спектрів від надграток

У даному параграфі, використовуючи так зване напівкінематичне наближення теорії розсіювання РП [15], коли товщини окремих шарів НГ є малими стосовно екстинкційної довжини, розглядаємо основні властивості дифракційних спектрів від НГ.

При розрахунках картини дифракції РП за допомогою першої ітерації рівняння Топена [15] однорідний епітаксійний шар описується такими параметрами: t — товщина, χ — коефіцієнти Фур'є поляризованості кристала, ε — напруги, μ — коефіцієнт поглинання. Характеристиками дифракції й епітаксійного шару з товщиною t будуть величини A , яка обернено пропорційна екстинкційній довжині, та Y , що визначаються такими формулами [12]:

$$A = \frac{\pi \chi_h t}{\lambda \sqrt{|\gamma_0 \gamma_h|}}, \quad (3.15)$$

$$Y = -\frac{\sqrt{|\gamma_0|} \sin(2\vartheta_B)}{\sqrt{|\gamma_h|} |\chi_h|} \Delta\omega. \quad (3.16)$$

В цих формулах λ — довжина хвилі РП; ϑ_B — брегівський кут для підкладки; γ_0, γ_h — напрямні косинуси первинного і дифрагованого променів щодо внутрішньої нормалі до поверхні; $\Delta\omega$ — відхилення кристала від брегівського положення.

При розгляді відбивної здатності реальної НГ для заданого рентгенівського випромінювання необхідно брати до уваги механічні напруги (деформації) в епітаксійній плівці, оскільки вони можуть бути безпосередньо визначені з аналізу форми КДВ. Позначимо характеристики плівки й підкладки відповідно індексами f і s . Різниця міжплощинних відстаней залежить від конкретної деформації й орієнтації атомних площин $\Delta d = d_f - d_s$. Зазначені напруги (деформації) (як перпендикулярні ε_{\perp} , так і па-

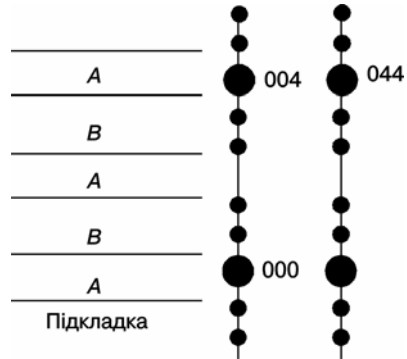


Рис. 3.3. Схема НГ в прямому просторі і розташування її вузлів із сателітами в оберненому просторі

ралельні ε_{\parallel} поверхні кристала) визначаються в теорії пружності відносною зміною міжплощинних відстаней у підкладці й плівці:

$$\frac{\Delta d}{d_s} = \varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{\parallel} \sin^2 \Psi, \quad (3.17)$$

де Ψ — кут між площинами й поверхнею кристала. Диференціальний кут $\Delta \omega$ визначається так:

$$\Delta \omega = \vartheta - \vartheta_B + (\varepsilon_{\perp} \cos^2 \Psi + \varepsilon_{\parallel} \sin^2 \Psi) \operatorname{tg} \vartheta_B \pm (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{\parallel}) \sin \Psi \cos \Psi, \quad (3.18)$$

де ϑ — кут ковзного падіння РП.

Довільний розподіл напруг ε і структурного фактора F епітаксійної плівки по глибині можна подати дискретною структурою, що складається з N субшарів. Нормалізована амплітуда дифракції цієї структури може бути записана за допомогою наступної формули:

$$E_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_j^N a_j \exp[-i(A_j Y_j + \Phi_j)] \frac{\sin(A_j Y_j)}{Y_j}, \quad (3.19)$$

де $a_j = \exp\left[-\mu \left(\frac{\gamma_0 + |\gamma_h|}{2|\gamma_0 \gamma_h|}\right) \sum_{i=j+1}^N t_i\right]$ — абсорбційний множник; $a_N = 1$;

$\Phi_j = 2 \sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i$ — фазовий фактор, причому $\Phi_1 = 0$.

Надґратка являє собою випадок довільної шаруватої епітаксійної структури. У найпростішому випадку її період складається із двох шарів (a і b), кожний з яких характеризується своєю товщиною, напругами, структурним фактором і параметрами A та Y . Амплітуда дифракції для M — періодної двошарової НГ має вигляд [12, 14]

$$E_M = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \exp(-i\beta) F_S \frac{\sin[M(A_a Y_a + A_b Y_b)]}{\sin(A_a Y_a + A_b Y_b)}, \quad (3.20)$$

де $\beta = (M-1)(A_a Y_a + A_b Y_b) + A_a Y_a$; $F_S = \frac{\sin(A_a Y_a)}{Y_a} + \exp[-i(A_a Y_a + A_b Y_b)] \frac{\sin(A_b Y_b)}{Y_b}$ можна розглядати як структурний фактор для

одного періоду НГ. Синус в чисельнику (3.6) перетворюється в нуль із періодом $\Delta \vartheta_M$, який визначається з умови $M(A_a Y_a + A_b Y_b) = \pi$.

3.3. Дослідження формування рентгенівських спектрів від надґраток

Цей множник описує так звані швидкі маятникові осциляції інтенсивності на КДВ. Приймаючи до уваги (3.15) і (3.16), знаходимо

$$\Delta \vartheta_M = \frac{\lambda |\gamma_n|}{M (t_a + t_b) \sin(2\vartheta_B)}, \quad (3.21)$$

звідки можна визначити повну товщину НГ $T = M(t_a + t_b)$.

Синусоїдальний знаменник в (3.20) зумовлює інші (більш повільні) коливання амплітуд розсіювання при реєстрації КДВ. Нульові положення коливань визначаються з умови

$$A_a Y_a + A_b Y_b = n\pi, \quad (3.22)$$

які позначаються, як $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. З кутової відстані між цими піками $\Delta \vartheta_p$ можна визначити період p НГ:

$$p = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_n|}{\Delta \vartheta_p \sin(2\vartheta_B)}. \quad (3.23)$$

Надґратковий пік сателіта нульового порядку розташований від піка підкладки на кутовій відстані $\Delta \vartheta_0$:

$$-\Delta \vartheta_0 = k_1 \langle \varepsilon_{\perp} \rangle + k_2 \langle \varepsilon_{\parallel} \rangle,$$

де

$$k_1 = \cos^2 \Psi \operatorname{tg} \vartheta_B \pm \sin \Psi \cos \Psi, \quad (3.24)$$

$$k_2 = \sin^2 \Psi \operatorname{tg} \vartheta_B \pm \sin \Psi \cos \Psi.$$

Дужки для величини деформації означають усереднення за період НГ.

Амплітуда сателітів n -го порядку пропорційна величині структурного фактора НГ за умови (3.22)

$$F_{Sn} = \frac{\sin(A_a Y_{an})}{A_a Y_{an}} \left(A_a + \frac{A_b}{1 - \frac{n\pi}{A_a Y_{an}}} \right). \quad (3.25)$$

Оскільки кутовий параметр сателіта Y_{an} пов'язаний з Y_{a0} формулами (3.23) і (3.16), то він залежить тільки від A_a , A_b і Y_{a0} . При $n = 0$ вираз (3.25) приймає простий вигляд:

$$F_{S0} = \frac{\sin(A_a Y_{an})}{A_a Y_{an}} (A_a + A_b) \cong A_a + A_b. \quad (3.26)$$

Вимірюючи відношення амплітуд розсіювання сателітів n -го й нульового порядків, можна розрахувати значення товщини одного із шарів НГ^Г, а також середні напруги в ньому. Однак, як показує аналіз формул (3.25)—(3.26), найбільш придатними для цієї мети є так звані квазізаборонені рефлекси (КЗР) типу 200 (див. нижче).

Методика аналізу таких структур полягає в тому, щоб розрахувати структурні фактори всіх спостережених сателітів елемента НГ^Г, використавши звичайну формулу для підсумовування по атомах в елементарній комірці, а потім порівняти їх з інтегральними інтенсивностями, дійсно виміряними і скоректованими на різні інструментальні спотворення. Розрахунок повторюється до тих пір, поки різниця між розрахованими і виміряними інтенсивностями не мінімізується як функція відношення ями до бар'єру. Різниця виразиться як звичайний R -фактор:

$$R = \sum (|F_0| - |F_{\text{експ}}|) / |F_0|, \quad (3.27)$$

де $F_{\text{експ}}$ і F_0 — експериментальні (інтегральні інтенсивності) і розраховані структурні фактори.

3.4. ЗАГАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАДґРАТОК

3.4.1. ДЖЕРЕЛО САТЕЛІТІВ

Є кілька шляхів, щоб пояснити виникнення сателітів, а отже, показати як отримати структурні параметри. Подвійний шар можна розглядати як велику елементарну комірку, і це справедливо в межах кінематичного наближення теорії та за умови, що структури сумірні. Як уже зазначалось, періодичність подвійного шару можна розглядати як модуляцію сталої кристалічної ґратки, або структурного фактора, і це дійсно дає підстави вважати, що збурення на усередненій структурі правильне. Інший шлях полягає в тому, щоб обґрунтовано вставити структурні

параметри в динамічну дифракційну симуляцію і спостерігати, що виходить; на жаль, це останнє наближення не зовсім очевидне в розумінні його причин.

Насамперед розглянемо велику елементарну комірку, яка складається з декількох елементарних комірок кожного елемента. Із неї можна розрахувати структурний фактор (коефіцієнт) для будь-якого відбиття H :

$$F_H = \sum_j^N f_j \exp(-2\pi H r_j), \quad (3.28)$$

де N — число атомів у цій великій елементарній комірці; j — позиції j -го атома у цій комірці; f_j — коефіцієнт розсіяння j -го атома. У кінематичній апроксимації теорії це може відповідати розсіяній інтенсивності, яка є квадратом цього виразу:

$$I_H = |F_H F_H^*|, \quad (3.29)$$

і кут розсіяння в цьому випадку

$$2\vartheta_H = 2 \sin^{-1} \left(\frac{\lambda}{2d_H} \right), \quad (3.30)$$

де d_H — міжплощинна відстань; λ — довжина хвилі. У згаданому вище рівнянні для структурного фактора маємо дві модуляції: одна з них пов'язана з різницею в розсіяннях, а друга — з різницею сталей кристалічної ґратки на підставі різного розміщення атомів у межах двох областей елементарної комірки. Обчислюючи інтенсивність і положення сателітів, можна отримати хороше узгодження з експериментом [16].

Наведений вище аналіз стає зрозумілим, адже контроль за вирощуванням плівок часто недостатній для створення подвійних та індивідуальних шарів в межах періоду H_1^1 , які б мали ціле число атомних площин. Тому отримуємо несумірну структуру [17]. Завжди буде кінцева шорсткість поверхні, якщо число осаджених атомів буде неточним або атоми дифундують вздовж поверхні. Ефективна товщина шару взагалі буде складатись з нецілого числа атомних площин і тому виникають нерівності на атомному рівні. Дифракційний зонд усереднить структуру в межах латеральної довжини когерентності, і тому дифракційну ситуацію можна розглядати як міжшарові включення. На дифрак-

ТАБЛИЦЯ 3.1. Параметри шарів НГ

Номер зразка	Задані технологічно параметри НГ, нм	Експериментальні значення параметрів НГ із рефлексу 004, нм	Помилка визначення параметрів, %
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

ційному профілі несумірної НГ сателітні піки викликають періодичність, що є близькою до цілого числа атомних шарів і інтенсивностей, які не узгоджують з заданим числом шарів (GaAs)—(AlAs), і може описуватись лише їх комбінаціями (табл.3.1).

Однак розсіяння на границях буде мати області кінцевої довжини кореляції (віддаль між областями шорсткості), і якщо вона менша, ніж довжина когерентності, то це викликатиме дифракційне розширення профілю. Ця несумірність може бути врахована в аналізі, особливо в короткоперіодних надґратках, включенням ряду більших елементарних комірок, які містять у собі усереднену несумірну структуру [17].

Інший підхід полягає в тому, щоб розглянути розсіяння і модуляцію сталої кристалічної ґратки як збурення усередненої структури [11]. У цьому випадку коефіцієнт розсіяння змінюється від $f(1 - \eta)$ до $f(1 + \eta)$ і міжплощинна відстань від $d(1 - \varepsilon)$ до $d(1 + \varepsilon)$. Виходячи з цього твердження, отримуємо співвідношення інтенсивностей:

$$\frac{I_{H \pm m}}{I_H} = \left(\frac{a_m}{2} \left[\left(\frac{H}{d} \pm \frac{m}{\Lambda} \right) \Lambda \varepsilon \mp \eta \right] \right)^2, \quad (3.31)$$

де H і m — дифракційні порядки для середньої періодичності кристалічної ґратки і періодичності НГ з довжиною хвилі Λ ; a_m — коефіцієнт Фур'є для сателіта порядку m . Сателіти з'являються на відстанях $\frac{m}{\Lambda}$ від усередненого дифракційного піка, або на $\frac{H}{d}$ в оберненому просторі. Ці рівняння дуже корисні для візуалізації сателітних інтенсивностей, оскільки припускається, що модуляція деформації незначна $\varepsilon \sim 0$ або альтернативно модуляція коефіцієнта розсіяння

незначна $\eta \sim 0$, тоді сателітні інтенсивності з будь-якого боку усередненого піка повинні бути рівні. Будемо розглядати амплітуду сателітних відбиттів як коефіцієнти Фур'є, і тоді це рівняння описує дуже простий технологічний процес для переходу від оберненого до реального простору за умови необхідності оцінки фаз коефіцієнтів Фур'є.

Обидва методи дуже зручні, тому що вони потребують для порівняння лише інтегральних інтенсивностей або фур'є-перетворень. Метод підгонки профілів, наприклад з допомогою динамічної теорії, вимагає дуже гарної якості даних для порівняння, однак цей метод є більш повільний. Також при використанні моделі динамічної теорії важливо пам'ятати, що це є строго точно для дифракції, для якої параметри визначені і підтримуються як кутові змінні. Параметр девіації $\alpha_H(\omega)$ в багатьох моделях також використовується в дуже наближеній формі проте в [18] був використаний в дуже точній формі:

$$\alpha_H(\omega) = \left(1 + 4 \sin \frac{\omega - \omega_0}{2} \left[\sin \frac{\omega - \omega_0}{2} + \sin \left(2\vartheta - \frac{\omega - \omega_0}{2} \right) \right] \right)^{1/2} - 1, \quad (3.32)$$

де ϑ — бреггівський кут для симульованого відбиття; ω — кут падіння; ω_0 — кут падіння в бреггівському положенні. Вираз (3.32) для точного параметра відхилення може бути далі спрощений згідно з припущеннями до більш знайомих форм:

$$\alpha_H(\omega) = -2 \sin \frac{\omega - \omega_0}{2} \sin 2\vartheta = -(\omega - \omega_0) \sin 2\vartheta \quad (3.33)$$

для малих девіацій, оскільки $\omega - \omega_0$ мала величина.

3.4.2. ВИМІРЮВАННЯ ПЕРІОДУ

Цей пункт може здатись досить тривіальним, тому що положення сателітів, які є результатом модуляції, можуть бути прямо проаналізовані використанням закону Бреґга за допомогою виразу

$$\Lambda = \frac{(i - j)\lambda}{2(\sin \vartheta_i - \sin \vartheta_j)}, \quad (3.34)$$

де i і j — порядки сателітів з бреггівськими кутами ϑ_i і ϑ_j . Це справедливо в кінематичному наближенні теорії і дає дуже гарну оцінку періоду в межах приблизно 1%. Період може бути визначений з високою точністю до ангстрема для періодів близьких до 100, тоді як при зменшенні періоду точність поліпшується далі, тому що це приводить до збільшення відстані між сателітами. Однак проста кутова пе-

ріодичність може бути джерелом помилки на кілька відсотків для комплексних дифракційних ефектів [10]. Ускладнення виникає з динамічними дифракційними явищами, які зумовлюють дифракційні процеси в цілому, і це може привести до несподіваних взаємодій. Згаданий вище вираз можна успішно використовувати для швидкого аналізу НГ [18], включаючи всі виміряні сателіти і визначаючи різні комбінації. У цьому випадку динамічні дифракційні явища практично усереднені.

Розглянемо динамічні дифракційні явища з посиланням на рис. 3.1. Наведене вище рівняння базується на кінематичній теорії, тому є можливість порівняти обґрунтованість цього виразу для різних пар сателітів, а також різного числа періодів. Період НГ на рис. 3.1 дорівнює 300 в усіх випадках, і все-таки відстань між піками сателітів на низькокутовій стороні усередненого піка є більшою ніж очікувалось. Наприклад, від -8 до -7 порядків сателітів модуляційна довжина хвилі приблизно дорівнює 298. З іншого боку від $+7$ до $+8$ відстані між піками сателітів дають модуляційну довжину хвилі 300,9. Беручи до уваги, що відстані між -1 та $+1$ сателітами дають періоди 301,89, 300,53 і 299,25 відповідно для структур з 4, 10 і 20 періодів. Це може здаватися досить дивним, але з аналізу відомо, що дифракційний профіль є зовсім несиметричним до усередненого піка, особливо в області сателітів слабких непарних відбиттів, і тому «очевидна» модуляційна асиметрія довжини хвилі періоду не настільки дивна. Перший порядок піка сателіта можливо більш очевидний, і відомо, що для дифракційного максимуму ефект «затягування» може виникнути в тонкошарових структурах, тому що хвильові поля, які мають недостатню періодичність, блокуються і дифрагують незалежно [18]. Тому в цьому особливому випадку період може бути визначений в межах декількох ангстрем зі згаданого вище рівняння з використанням єдиного виміру. Усереднення декількох сателітів вище й нижче усередненого піка поліпшує точність визначення періоду.

3.4.3. ВАРІАЦІЇ ПЕРІОДУ

Варіації періоду можуть інтерпретуватися як гранична шорсткість [19] за умови, що вони, як відомо, є нескорельованими, тобто коливання безладно розподілені по структурі. Найпро-

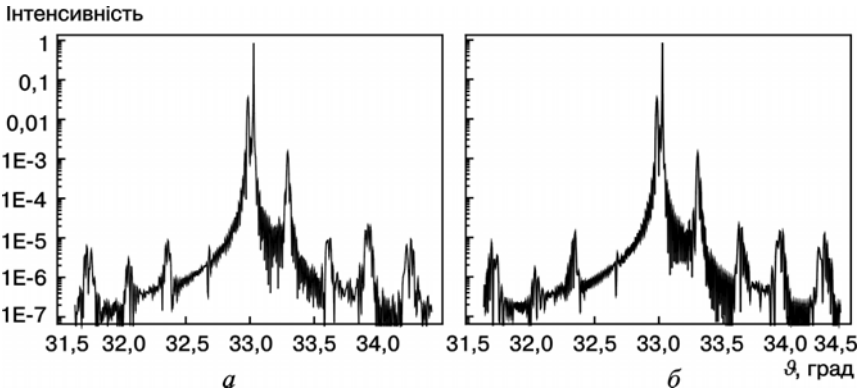


РИС. 3.4. Вплив варіації товщин шарів на спектри дифракції для двохшарової структури AlAs—GaAs: а — випадкові зміни $\pm 5\%$; б — систематичні зміни 7% . Відбиття 004, CuK_α -випромінювання

стіший спосіб візуалізувати вплив цих варіацій на дифракційному профілі полягає в тому, щоб розглянути структуру, яка має сателіти з періодами $\Lambda, \Lambda_2, \Lambda_3 \dots \Lambda$, тоді дифракційна картина буде складатись із сателітів у різних положеннях [20]. Ширина індивідуального сателіта $\Delta\omega$ у цьому випадку може бути пов'язана з варіаціями періоду [20]. Якщо профілі апроксимувати гауссовою формою і використовувати інтегральне розширення, то можна визначити параметр гауссового розподілу періодів:

$$\Delta\omega_\Lambda = \frac{(i - j)\bar{\beta}_s}{\omega_j^2 \cos \vartheta}, \quad (3.35)$$

де $\bar{\beta}_s$ — інтегральна ширина, статистично усереднена для всіх вимірних сателітів; ω_j — кут між двома сателітними піками. Наближення профілю до гауссіана — це досить тривіальний метод для деконволюції ширини профілю для НГ.

На рис. 3.4, а показана модельована структура з 4%-ми випадковими варіаціями в періоді. На цих спектрах можна побачити розширення сателітів, яке прогресує з порядком, хоча ступінь інтеграції пікових форм складний. При цьому хаотичність повинна бути усереднена, щоб досягти практичної ситуації. Однак важливо знати різницю між випадковими флуктуаціями і варіаціями періоду, які виникають, якщо коефіцієнти вирощування змінюються систематичним способом протягом осадження. Профіль таких варіацій зображений

на рис. 3.4, б. Автори праці [15], використавши напівкінематичну теорію, пояснили вплив різних способів варіації товщини періоду на форму профілю.

3.4.4. ВИМІРЮВАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ТОВЩИН ШАРІВ НГ

До вимірювання товщини в мультишарах можна наблизитися в дуже різні способи, починаючи з того, що багат шаровість вносить додаткову періодичність у структуру. Підходи, описані вище, використовують поняття великої елементарної комірки, а підхід щодо збурень і метод імітації профілів використовує динамічну теорію. Самі швидкодіючі методи використовують два попередні підходи, тому що товщини можуть бути отримані з інтегральної інтенсивності, тоді як останній вимагає точної форми профілю, а також дуже спрощує інструментальні вимоги.

У рівнянні (3.31) був отриманий вираз для деформації ε і модуляції розсіяння η в термах відношення інтенсивностей [21]. Звичайно добра оцінка товщин вимагає починати з визначення параметра a_m тому, що ця величина містить у собі фази компонентів, тобто відносні положення синусоїд модуляції. Важливо також знати про небезпеку фур'є-перетворень, яка суттєво залежить від числа спостережуваних сателітів. Якщо наявні вимірювання тільки сателітів першого порядку, то модуляцією буде проста синусоїда, і ці дві товщини будуть еквівалентні. Лише, коли «розумне» число сателітів буде включене в цей розгляд, можна буде отримати достовірний результат. Звичайно форму хвилі періоду можна розглядати як прямокутну хвилю з точною симетрією поверхонь поділу, тоді функція косинус буде включена із простими фазами 0 або π .

Наближення великої елементарної комірки дає менше припущень відносно числа сателітів. У цьому випадку необхідно обчислити структурний фактор для великих елементарних комірок, які коливаються між певними значеннями періоду, і підсумовувати структурні фактори перед перетворенням їх в інтенсивності для порівняння з виміряними інтегральними інтенсивностями. Інтенсивності низьких порядків менш чутливі до інтерфейсних дефектів (низькі порядки коефіцієнтів Фур'є), і тому підгонка до них повинна бути досить хорошою для впевненості щодо результату. Одержані індивідуальні товщини залежать також від того, чи відома композиція плівок у ме-

жах НГ. Якщо усереднена композиція $x_{\text{серед}}$ НГ відома, то маємо два основних рівняння для структури з двома шарами:

$$\Lambda = t_1 + t_2, \quad (3.36)$$

$$t_2 x_2 + t_1 x_1 = x_{\text{серед}} \Lambda.$$

Для простої структури з двома плівками виду $A_x B_{1-x} C$ x_1 і x_2 — це композиції в плівках 1 і 2. Об'єднуючи ці рівняння, отримуємо

$$t_2 = \frac{(x_{\text{серед}} - x_1) \Lambda}{(x_2 - x_1)}. \quad (3.37)$$

Отже, якщо ми будемо знати індивідуальні композиції і «середню» композицію $x_{\text{серед}}$, то можемо дуже легко визначити товщини t_2 і t_1 . Тепер, коли для багат шарової сполуки товщини t_1 і t_2 нижчі ніж 400, можна розглядати дифракцію багат шаровою структурою із середньою композицією $x_{\text{серед}}$ і збуренням, що викликає сателітні піки. Для товщин значно вищих, ніж ці значення, поняття середнього піка більше не існує [20, 22]. Зрозуміло, якщо композиції невідомі, то маємо занадто багато змінних і необхідно підключити додаткову інформацію, отриману з інших джерел. Додаткова інформація знаходиться в інтенсивностях сателітів.

Для обох цих методів існує вимога усередненого розсіяння (метод збурення) і усередненої композиції. Для одержання інформації про структуру в центральному регіоні дифракційного профілю необхідно використовувати динамічну теорію [23], а не покладатись на розділення піків. Також дуже важливо моделювати цілу структуру детально, а не обмежуватись лише усередненою еквівалентною структурою.

Ця методика детально описана в праці [14], котра стверджує, що вона точна до порядку 5 % моношару і що нею можна користуватись для визначення несумірної ширини квантових ям (тобто такої ширини, яка не дорівнює цілому числу атомних площин, а містить у собі частки моношару). Отримані шляхом припасування структурні характеристики шарів і значення параметрів ґраток наведені в табл.3.1. Аналіз даних таблиці вказує на визначену невідповідність між експериментальними й технологічно заданими значеннями товщин шарів НГ.

Спектр НГ можна подати як позитивну інтерференцію між товщинними осциляціями від послідовних елементів НГ, що добре видно при комп'ютерному моделюванні серії НГ зі зростаю-

Відносна інтенсивність

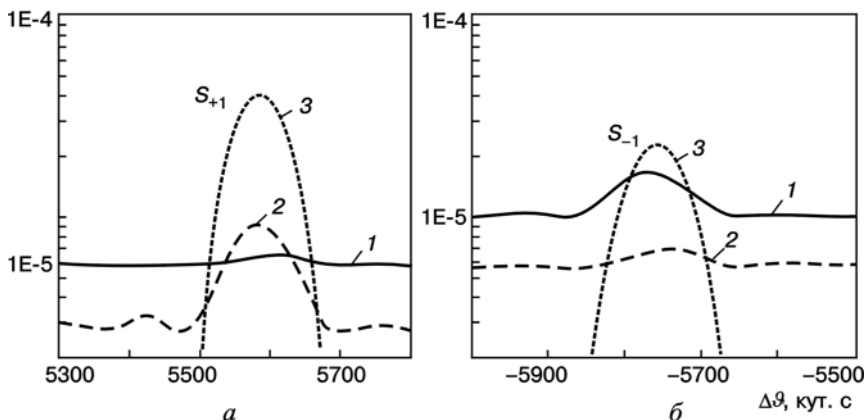


РИС. 3.5. Фрагменти кривих дифракційного відбиття в області додатних (а) і негативних (б) сателітів залежно від статфактора верхнього E_1 і нижнього E_2 субшарів: 1 — $E_2 = 1, E_1 = 0,6$; 2 — $E_2 = 1, E_1 = 0,8$; 3 — $E_2 = E_1 = 1$

чим числом повторюваних елементів. Таке моделювання показує, що ширина окремого відображення майже не змінюється із введенням дисперсії періоду, але відносні інтенсивності різних максимумів у товщинних осциляціях дуже чутливі до нерегулярностей періоду. Часто невелика дисперсія періоду переносить інтенсивність від піка $H\Gamma$ до товщинних осциляцій, розташованих у безпосередній близькості від нього, що робить враження збільшення ширини піка, якщо роздільна здатність недостатньо гарна. Тому саме шляхом вивчення і моделювання інтенсивностей цих осциляцій, розташованих між положеннями сателітів, можна визначити дисперсію періоду.

Нарешті кілька слів можна сказати щодо форми експериментальних сателітів. Як показує аналіз КДВ (рис. 3.5), вони є асиметричними щодо значення пікової інтенсивності. Це, напевно, можна трактувати, як порушення симетрії в розподілі напруг у середині шарів.

Ці результати дають можливість одержати кількісну інформацію про структурні параметри $H\Gamma$ (період, ступінь деформації в шарах). Показано певну відмінність експериментального періоду $H\Gamma$ від технологічно заданих параметрів (табл.3.1).

Шорсткість і градієнт складу поблизу інтерфейсу неможливо розрізнити при аналізі двовісної кривої гойдання. Введення шорсткості на рівні субмоношару дає можливість ввести несумір-

ну ширину ями. Шорсткість вводять шляхом когерентного додавання структурних факторів двох сумірних періодів при значеннях ширини ями по обидві сторони від середнього значення. Потім періоди приводять до одного масштабу з раніше визначеною гауссовою дисперсією періодів і додають, щоб одержати загальний структурний фактор для сателіта. Структурний фактор кожного сателіта розраховують на комп'ютері та порівнюють з експериментальними інтенсивностями (в цьому випадку теж при використанні R -факторів), причому змінною є градієнт складу за межами інтерфейсу, що змінюють на один шар за один раз. Очевидно, що цей градієнт складу може бути як завгодно складним за умови необмеженого комп'ютерного часу, але лінійного градієнта протягом декількох шарів звичайно цілком достатньо. Такий градієнт складу може мати дуже значний вплив на відносні висоти послідовних сателітів. Він може, наприклад, привести до дуже істотної асиметрії в пікових інтенсивностях додатніх і від'ємних сателітів. Ця відмінність виходить за рамки помилки визначення зазначених параметрів.

Як свідчать результати виконаних досліджень, вивчені $H\Gamma$ поряд з більшими значеннями деформацій мають дуже високу структурну досконалість із чіткими границями поділу, про що свідчать малі значення напівширини сателітів, а також наявність тонкої структури спектра (швидкі осциляції). Безсумнівно, що така зміна в профілі параметра ґратки необхідна для того, щоб одержати гарну відповідність між розрахованими і експериментальними даними.

3.5. ПОВЕДІНКА САТЕЛІТНИХ ДИФРАКЦІЙНИХ МАКСИМУМІВ КОРОТКОПЕРІОДНИХ НАДґРАТОК GaAs—AlAs З РІЗНИМ СТУПЕНЕМ КРИСТАЛІЧНОЇ ДОСКОНАЛОСТІ ШАРІВ

Як показано в працях [24—27], присутність дефектів у $H\Gamma$ викликає некогерентне (дифузне) розсіяння і міняє профіль КДВ для когерентно розсіяних хвиль. Задача поведінки спектрів КДВ у довгоперіодних $H\Gamma$ залежно від ступеня дефектності шарів була розв'язана в праці [24].

У даному пункті розглянемо особливості поведінки КДВ в короткоперіодних $H\Gamma$ GaAs—AlAs, які містять у собі різні концентрації точкових дефектів, а також впливу цих дефектів на поведінку сателітних піків за допомогою напівкінематичного наближення теорії розсіювання РП.

Для НГ^{Γ} , яка складається із двох шарів з різною міжплощинною відстанню, розсіювальною здатністю σ і фактором аморфізації f_j , вираз для амплітудного коефіцієнта розсіяння (АКР) R з урахуванням статистичного усереднення можна записати у вигляді [24]

$$R = \langle R \rangle = i \sum_{n=1}^N \left\{ \int_{(n-1)T}^{(n-1)T+t_1} \sigma_1^n E_1^n \exp[i(\eta z - \mathbf{g} \langle \mathbf{u}_1^n(z) \rangle)] dz + \int_{(n-1)T+t_1}^{nT} \sigma_2^n E_2^n \exp[i(\eta z - \mathbf{g} \langle \mathbf{u}_2^n(z) \rangle)] dz \right\}, \quad (3.38)$$

де $E_{1,2}^n$ — статичні фактори Дебая—Валлера для шарів 1 і 2; $\mathbf{u}_{1,2}^n(z)$ — вектори атомних зміщень у шарах НГ^{Γ} ; $t_{1,2}$ — товщини шарів; $T = t_1 + t_2$; $\eta = (\frac{2\pi}{\lambda \sin \vartheta})(\chi_0 + \sin 2\vartheta \Delta \vartheta)$ — кутова змінна, що характеризує положення кристала відносно напрямку падаючої хвилі; $\Delta \vartheta = \vartheta - \vartheta_0$; \mathbf{g} — вектор дифракції; $\sigma_h = \frac{\pi \chi_h C}{(\lambda \sin \vartheta)}$ — параметр розсіяння; C — фактор поляризації; χ_h — коефіцієнт поляризованості; N — число періодів НГ^{Γ} .

Вектори атомних зміщень виражаються через міжплощинні відстані $d_{1,2}$ шарів, які утворюють НГ^{Γ} . Середня міжплощинна відстань періоду НГ^{Γ} визначається як $d = \frac{(d_1 t_1 + d_2 t_2)}{T}$. Непогодження міжплощинних відстаней шарів щодо середнього можна подати так: $\frac{\Delta d_{1,2}}{d}$, де $\Delta d_{1,2} = d_{1,2} - d$.

Для випадку симетричної дифракції, з огляду на однорідний розподіл дефектів у періодично повторюваних шарах, запишемо вираз для АКР когерентно розсіяних хвиль НГ^{Γ} :

$$R^C = i F^C \exp(i\Psi) \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)}, \quad (3.39)$$

де $y = A_1 t_1 + A_2 t_2$, $A_{1,2} = (\eta + 2\pi \Delta d_{1,2} / d^2) / 2$, $\Psi = (N - 1)y + A_1 t_1$.

Структурна амплітуда періоду НГ^{Γ} має вигляд

$$F^C = \sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + \exp(iy) \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2}. \quad (3.40)$$

Кутовий розподіл когерентно розсіяної інтенсивності можна характеризувати за допомогою інтерференційної функції Лауе:

$$I^c(\Delta\vartheta) = |F^c|^2 \exp(-2\text{Im } \Psi) \left| \frac{\sin(Ny)}{\sin(y)} \right|^2. \quad (3.41)$$

У кінематичному наближенні кутовий розподіл дифузно розсіяних хвиль для шарів з параметром ґратки, що змінюється за глибиною, досліджено в праці [27]. Для проведення чисельного аналізу й зіставлення його з експериментом зручно використати модель дефектів кулонівського типу. Тоді вираз для статичного фактора Дебая—Валлера згідно з [28] можна представити так:

$$E_{1,2} = \exp\left(\frac{-4\pi r_{1,2}^3 c_{1,2}}{3}\right), \quad (3.42)$$

де $r_{1,2}$ й $c_{1,2}$ — радіуси й концентрації дефектів у шарах періоду ґратки. Запишемо вираз для дифузно розсіяних хвиль на одному періоді:

$$I_1^d = 2 \left\{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \int_0^{t_1} \tau_1(\eta, z) dz + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \int_0^{t_2} \tau_2(\eta, z) dz \right\}, \quad (3.43)$$

де $\tau_{1,2}$ — довжини параметра кореляції Като, що описують ступінь близького порядку для відповідних шарів періоду НГ. Параметри $\tau_{1,2}$ для шарів короткоперіодної НГ не залежать ні від z , ні від періоду НГ. Кутова залежність кореляційної довжини з урахуванням (3.32) в явному вигляді запишеться так:

$$\tau_i(\eta) = \frac{6r_i}{X_i^4} \left[\frac{X_i^2}{2} + 1 - \cos(X_i) - X_i \sin(X_i) \right], \quad (3.44)$$

де $X_i = 2r_i \gamma_0 A_i$. Тоді (3.43) буде мати такий вигляд:

$$I_1^d = 2 \{ \sigma_1^2 (1 - E_1^2) \tau_1 t_1 + \exp(-\mu_1 t_1) \sigma_2^2 (1 - E_2^2) \tau_2 t_2 \}. \quad (3.45)$$

Введемо середній коефіцієнт поглинання на одному періоді НГ $\mu = \frac{\mu_1 t_1 + \mu_2 t_2}{T}$. Кутовий розподіл дифузного фону в околі

бреггівського рефлексу можна характеризувати за допомогою наступного виразу:

$$I^d(\Delta\vartheta) = \sum_{n=1}^N I_1^d \exp(-\mu T(N-1)/2). \quad (3.46)$$

Якщо інтенсивності дифузно розсіяних хвиль однакові для всіх періодів НГ, то (3.36) запишеться

$$I^d(\Delta\vartheta) = NI_1^d \exp(-\mu T(N-1)/2). \quad (3.47)$$

Інтерференційна функція Лауе НГ, яка присутня у виразі (3.41), приймає максимальне значення при $y = \pi m$, де $m = 0, \pm 1, \dots$. Тоді для m -го кутового положення кристала η одержуємо $\eta_m = \frac{2\pi m}{T}$. Цей

вираз описує кутові положення сателіта нульового порядку при $\eta_m = 0$ і сателітів вищих порядків. Звідси вираз для інтенсивності сателітів приймає вигляд

$$I_m = N^2 |F_m^S|^2,$$

а структурний фактор описується виразом

$$|F_m^S|^2 = (\sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + (-1)^m \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2})^2. \quad (3.48)$$

Для короткоперіодних НГ структурний фактор нульового максимуму можна подати у вигляді $|F_m^0|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2$. У випадку, коли один із шарів в періоді НГ має сильно виражену аморфізовану структуру ($E_i = 0$), інтенсивність основного сателіта буде визначатися лише більш досконалим кристалічним шаром. З аналізу виразу (3.38) слідує ще один цікавий висновок. Він стосується використання квазізаборонених рефлексів (КЗР). Для таких відбиттів унаслідок малості розсіювальної здатності одного із шарів, який складається з атомів із близькими порядковими номерами, інтенсивність сателітів буде визначатися лише розсіювальною здатністю іншого шару з більш відмінними атомними номерами складових його компонентів [29]. Звідси випливає, що використання КЗР дозволяє сепарувати вплив одного із шарів на інтенсивності розсіяння. При вивченні НГ GaAs—AlAs/GaAs(001)

за допомогою рефлексів 200 або 600 такими шарами, які впливають на загальну картину розсіяння, є субшари GaAs. Чисельні розрахунки картини розсіяння Cu_α -випромінювання виконувалися для симетричних рефлексів 400 й 200.

На рис. 3.5 наведені розрахункові спектри КДВ (фрагменти в області сателітів першого порядку) для рефлексу 400 від ґратки з товщиною шарів $t_1 = 2,24$ нм й $t_2 = 1,1$ нм при різних значеннях статичного фактора $E = \exp(-L)$.

Як видно з аналізу цього рисунка, поведінка інтенсивності сателітів залежно від ступеня структурної досконалості верхнього або нижнього шарів Hg відповідає результатам, отриманим у працях [24, 25], в яких відзначається той факт, що недосконалість верхнього шару Hg зменшує інтенсивність додатних сателітів (I_+), а порушення структури нижнього шару приводять до загасання від'ємних сателітів (I_-). Зазначимо, що на відміну від [12] при розрахунках КДВ [31, 30] враховувалася як когерентна, так і дифузна складові відбиття.

Порівнюючи поведінку сателітів на розрахункових і експериментальних КДВ (рис. 3.6), можна зробити висновок, що в досліджуваних Hg більш спотвореним є нижній шар — AlAs. При цьому співвідношення інтенсивностей експериментальних сателітів першого порядку $\frac{I_+}{I_-} = 0,56$ при значенні статфактора 0,68 для шару GaAs за-

довільно корелює з даними результатів підгонки КДВ. Залежність відношення $\frac{I_+}{I_-}$ від статфактора одного із шарів L_j при фіксованому рівні спотворень структури іншого шару $L_j = \text{const}$ на відміну від наведених у [24] має чітко виражений нелінійний характер (рис. 3.7) як при однаковій товщині шарів ($t_1 = t_2$), так й у випадку, коли товщина одного із шарів більша, ніж іншого ($t_1 = 2t_2$).

Причому, як видно з рис. 3.7, зміна досконалості нижнього шару AlAs впливає практично монотонно на співвідношення інтенсивностей сателітів. Недосконалість же верхнього шару GaAs немонотонно змінює відношення інтенсивностей додатних і від'ємних сателітів. Особливо чутливий цей параметр до розміру мікрodefektів. У останньому випадку спостерігаються як максимум, так і мінімум на кривій залежності відношення інтенсивностей сателітів від статфактора. Для рефлексу 400 така поведінка інтенсивності сателітів якісно не залежить від співвідношення товщин шарів Hg .

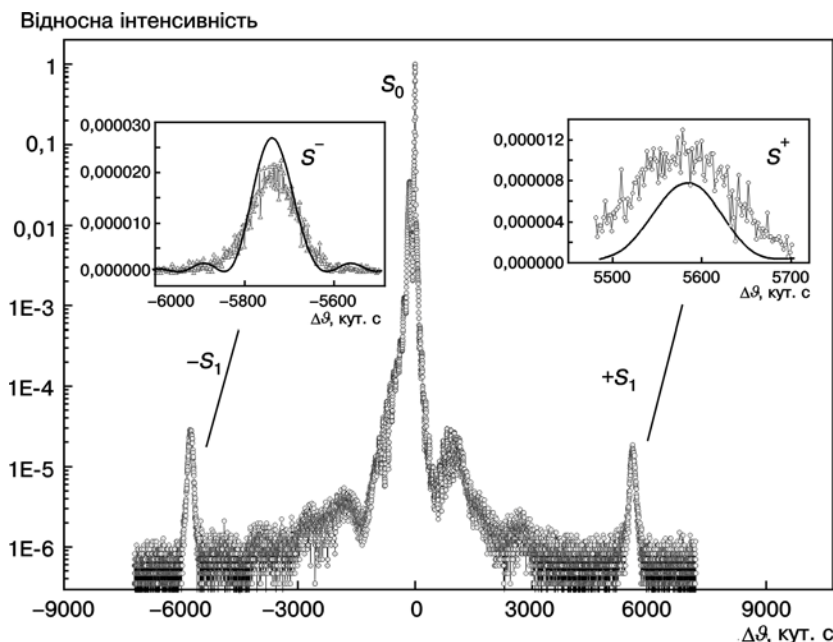


РИС. 3.6. Експериментальна крива дифракційного відбиття для рефлексу 400 в області сателітів першого порядку. На вставках наведені фрагменти КДВ в області сателітів першого порядку: суцільні криві — розрахунок; точки — експеримент

Для квазізабороненого відбиття 200 спостерігається монотонний спад інтенсивності сателітів зі зростанням статфактора для недосконалого верхнього шару й ріст — при збільшенні ступеня

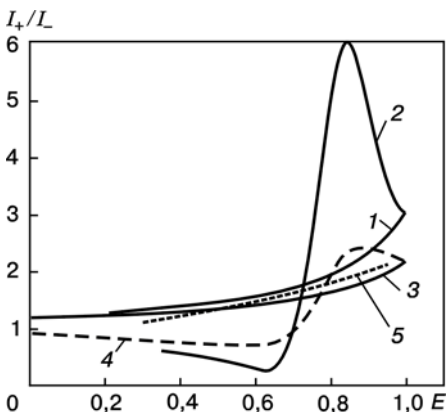


РИС. 3.7. Залежність відношення інтенсивностей сателітів першого порядку для 400-відбиття від статфактора одного із субшарів при фіксованому рівні структурної досконалості іншого шару. Для кривих 1 і 3 досконалим є перший (верхній) шар $E_1 = 1$ при $t_1 = 2t_2$ (1) і $t_1 = t_2$ (3). У кривих 2 і 4 досконалим має нижній шар $E_2 = 1$ при $t_1 = 2t_2$ (2) і $t_1 = t_2$ (4), $E_1 = E_2 \neq 1$ (5)

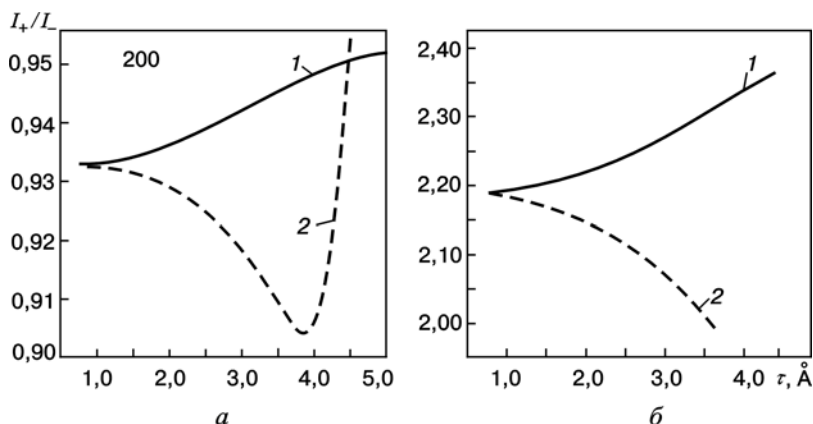


РИС. 3.8. Характер зміни залежності відношення інтенсивностей сателітів першого порядку для відбиттів 200 (а) і 400 (б) від значень кореляційного параметра Като: 1 — верхній шар — GaAs; 2 — нижній шар — AlAs

недосконалості нижнього шару. Однак ефект зміни відношення інтенсивностей сателітів для КЗР значно менше, ніж для структурного відбиття 400, що узгоджується з результатами, отриманими раніше [29]. Слід зазначити, що рівень механічних напруг у шарах Hg значно менше впливає на співвідношення інтенсивностей сателітів, ніж статичний фактор Дебая—Валлєра.

Досить цікавим моментом, на думку авторів, є поведінка такого параметра, як довжина кореляції Като, залежно від дефектності того або іншого субшару. З розрахунків за формулами (3.48), (3.35) видно, що параметр $\tau_{1,2}$ досить чутливий до дефектів кулонівського типу як для структурних, так і КЗР-рефлексів. Залежності відношень інтенсивностей сателітів від параметра кореляції для двох субшарів Hg показані на рис. 3.8. Легко бачити, що збільшення параметра τ , який описує ступінь кореляції випадкових фазових співвідношень для верхнього шару Hg , при використанні структурних відбиттів приведе до зростання і зменшення відношення інтенсивностей сателітів відповідно для верхнього й нижнього шарів (рис. 3.8, б). У випадку використання КЗР чутливість до параметра кореляції зберігається в значній мірі лише для шару AlAs. Залежність відношення інтенсивностей сателітів від τ для нижнього шару має яскраво виражений мінімум (рис. 3.8, а). Дослідження залежностей інтенсивності сателітів від $\tau_{1,2}$ може бути цікавим й у плані можливої чутливості

цієї величини до рівня нестехіометрії шарів, оскільки вона деякою мірою характеризує ближній порядок у ґратці [26].

Наведені тут експериментальні результати й чисельні розрахунки КДВ із застосуванням напівкінематичного наближення теорії розсіяння РП дали можливість зробити висновок про те, що в короткоперіодних Нґ зміна співвідношення інтенсивностей сателітів, розташованих з боку менших і більших кутів від головного (нульового) сателіта, залежить як від ступеня структурної досконалості (фактора Дебая—Валлера, параметра ближнього порядку Като), так і від рівня пружної деформації окремих шарів. Показано, що для верхнього шару, яким є GaAs, це відношення інтенсивностей має немонотонний характер. Зазначений факт може бути викликаний, найімовірніше, нерівнозначними фазовими змінами в структурному множиннику кожного з реальних шарів. Для порівняно високого рівня спотворень

структури ($E \sim 0,8$) співвідношення $\frac{I_+}{I_-}$ може в кілька разів перевищувати значення, характерне для ідеального шару. Варіації характеристики $\frac{I_+}{I_-}$ у випадку КЗР мають значно меншу амплітуду

порівняно зі структурними відбиттями. Ця обставина якісно узгоджується з малою чутливістю КЗР до спотворень структури, виявленою раніше. Виконані в праці [30] розрахунки показують можливість проведення якісних оцінок ступеня структурної досконалості вирощених шарів Нґ навіть за зовнішнім виглядом КДВ (співвідношенням між інтенсивностями сателітів).

3.6. ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ДИФРАКЦІЙНИХ СПЕКТРІВ ДЛЯ КВАЗІЗАБОРОНЕНИХ РЕФЛЕКСІВ В Нґ

Як уже зазначалось вище, досить цікаві ефекти в дифракції РП в структурах Нґ спостерігаються при використанні квазізаборонених рефлексів (КЗР) [30—33].

Метою даного пункту є аналіз результатів дослідження впливу фазових змін у структурному факторі, викликаних товщинами шарів, напругами між ними, структурною досконалістю шарів, на особливості утворення системи сателітів в спектрах КЗР для Нґ, а також інтерпретація експериментальних спектрів КДВ на основі проведених розрахункових досліджень.

Повна амплітуда розсіяння РП складною багат шаровою системою описується за допомогою структурного фактора, що має вигляд [32]

$$F(\mathbf{h}) = F_B(\mathbf{h}) + F_H(\mathbf{h})\exp(-i\mathbf{h}t_B) + F_{\text{буф}}(\mathbf{h})\exp(-i\mathbf{h}(-t_B + t_H)) + F_{\text{підкл}}(\mathbf{h})\exp(-i\mathbf{h}(t_B + t_H + t_{\text{буф}})), \quad (3.49)$$

де t_B , t_H , $t_{\text{буф}}$ — товщини верхнього, над'раткового й буферного шарів відповідно; \mathbf{h} — вектор дифракції. Експоненційні множники в (3.49) враховують зміну фази амплітуди розсіяння при проходженні РП через субшари структури. Ефект впливу товщинних флуктуацій шарів був врахований у розрахунках через зміну фазового множника:

$$\varphi_i = \exp(-h^2(\Delta t_i)^2). \quad (3.50)$$

При однорідному розподілі дефектів у періодично повторюваних шарах двох типів, кожний з яких характеризується своєю міжплощинною відстанню d , розсіювальною здатністю σ і статичним фактором Дебая—Валлера E , вираз для амплітудного коефіцієнта розсіяння (АКР) когерентно розсіяних хвиль НЅ у випадку симетричної дифракції може бути записаний у вигляді (3.38).

Вираз (3.38) буде мати максимуми при таких значеннях синусоїдального знаменника:

$$A_a t_a + A_b t_b = n\pi. \quad (3.51)$$

Ці максимуми позначимо як сателіти n -го порядку ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Період НЅ може бути визначений з кутової відстані $\Delta \vartheta_p$ між цими піками:

$$T = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_n|}{\Delta \vartheta_p \sin(2\vartheta_B)}. \quad (3.52)$$

Кутовий розподіл когерентно розсіяної інтенсивності можна охарактеризувати за допомогою інтерференційної функції Лауе (3.45).

У загальному випадку для проведення чисельного аналізу і зіставлення його з експериментом необхідно враховувати не лише вплив дефектів на когерентну складову інтенсивності, а й внесок дифузного компонента, який виникає на структурних дефектах в одному шарі. Врахування розсіяння в буферних та захисному шарах і

підкладці незначно ускладнює завдання, приводячи до необхідності обліку їх товщин і фазових співвідношень у виразах для АКР. Сателіт нульового порядку Нґ знаходиться від піка підкладки на відстані $\Delta\mathcal{G}_0$:

$$-\Delta\mathcal{G}_0 = \text{tg}\vartheta_B \langle \varepsilon_{\perp} \rangle, \quad (3.53)$$

де $\langle \varepsilon_{\perp} = \Delta a / a \rangle$ — відносна зміна параметра ґратки вздовж напрямку росту; дужками $\langle \dots \rangle$ позначають усереднення за періодом Нґ [34]. Структурний фактор для 200 КЗР (який, як відомо, пропорційний різниці між Ga й As атомними факторами розсіяння) є дуже малим у випадку двошарової системи GaAs.

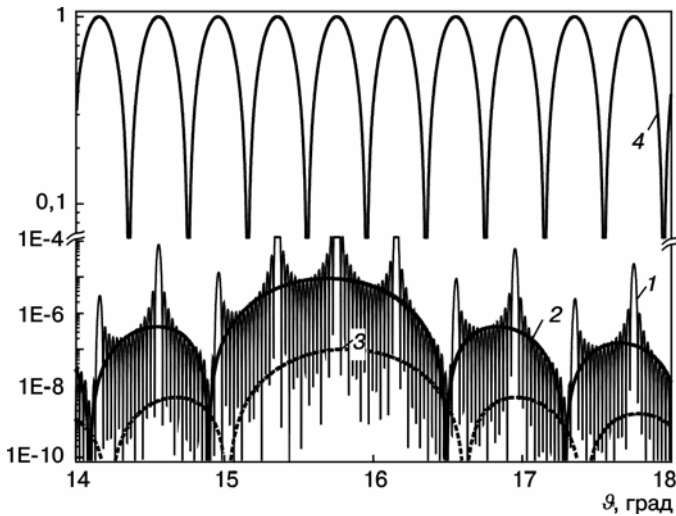
У випадку нехтування поглинанням і внеском від підкладки, а також дифузним розсіянням $I^A(\Delta\mathcal{G})$, вираз для нормалізованої інтенсивності в центрально-симетричному випадку запишеться так [31]:

$$R = |F_{\text{Н}}|^2 = (\sigma_a E_a \frac{\sin(A_a t_a)}{A_a} + \cos(\gamma) \sigma_b E_b \frac{\sin(A_b t_b)}{A_b})^2. \quad (3.54)$$

З огляду на малий внесок у відбивну здатність шару GaAs після деяких перетворень одержимо

$$R \cong |F_{\text{Н}}|^2 = \cos^2(\gamma) \left(\sigma_b E_b t_b \frac{\sin(A_b t_b)}{A_b} \right)^2. \quad (3.55)$$

Розглянемо спочатку (див. рис. 3.9) поведінку розрахованих згідно з (3.54) КДВ (крива 1) для надґраткової структури з однаковими товщинами субшарів. З рисунка видно, що можна виділити області з різними періодами маятникових осциляцій інтенсивності. Косинусоїдальний член у формулах (3.44), (3.45) описує період Нґ (крива 4), а синусоїдальні члени описують товщину шару і внесок у відбивну здатність як AlAs (крива 2), так і GaAs (крива 3). Легко бачити, що внесок в АКВ шару арсеніду галію на два порядки менше ніж від шару AlAs, оскільки його структурний фактор при використанні КЗР 200, як уже зазначалося, є дуже малим. Тому в цьому випадку існує можливість із простого кутового аналізу форми КДВ визначити як товщину всієї структури, так і кожного із шарів зокрема.



Коефіцієнт відбиття

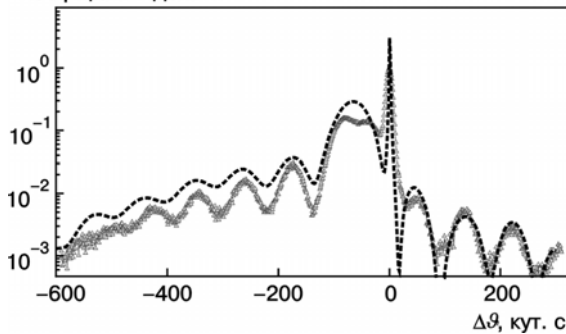


РИС. 3.9. Розрахункові КДВ для рефлексу 200 (крива 1) для $H\#$ GaAs—AlAs, синусоїдальний (2, 3), косинусоїдальний (4) фактори в співвідношенні (3.39)

РИС. 3.10. Експериментальна (точки) і розрахункова (штрихова лінія) КДВ для КЗР 200 (ω -режим сканування)

Експериментальні й розрахункові КДВ для $H\#$ з використанням КЗР 200 наведені на рис. 3.10 (ω -режим сканування) і рис. 3.11 (ω — 2ϑ -режим сканування). Видно, що на КДВ існує не лише сателітна структура, яка відповідає за період $H\#$, а й тонка інтерференційна структура спектра. При цьому спостерігається задовільне узгодження в тонких деталях експериментальних і теоретичних спектрів КДВ. Це стосується як значень інтенсивностей

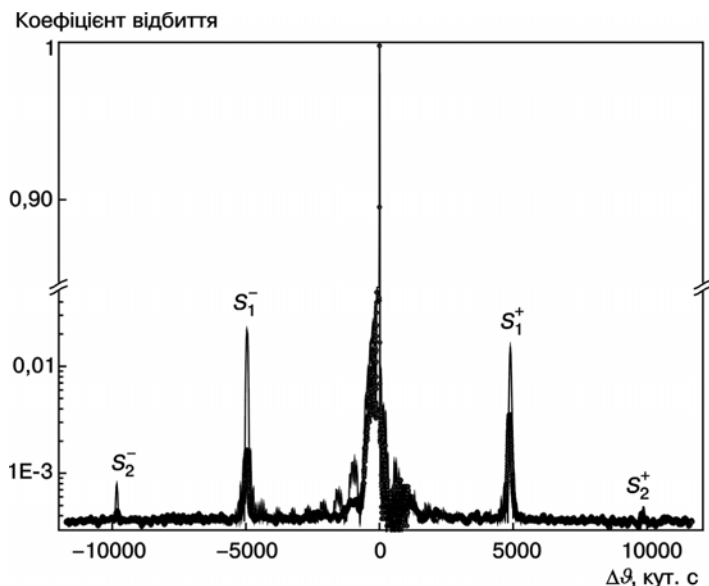


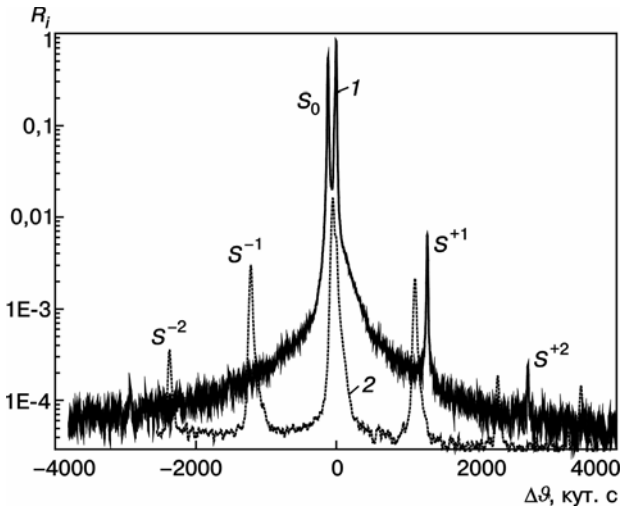
РИС. 3.11. КДВ для КЗР 200 (ω —2 θ -скани) від НЅ: експеримент (точки), симульована (суцільна лінія). S^+ , S^- — сателіти 1-го порядку

біля піка нульового порядку, так і його кутового положення. Цей результат також свідчить про те, що внесок дифузного компонента для КЗР 200 є незначним.

Крім цього, всі результати свідчать про те, що внесок в інтенсивність КЗР від шару (а), що складається з компонентів із близькими атомними номерами (GaAs), є дуже малим. Таким чином, шар (б) з атомними номерами компонентів, які значно розрізняються, визначає картину розсіювання для 200 КЗР.

Проведені розрахунки показують, що на кутове положення сателітів, а також на їх інтенсивність впливає варіація товщини періоду. На рис. 3.12 показане згасання сателітів третього порядку при співвідношенні товщин $t_b/t_a = 2$. Крім того, максимуми сателітів різних порядків можуть як збільшуватися, так і зменшуватись навіть в досконалих структурах. Для з'ясування основних причин цього явища розглянемо поведінку дійсної (Re) і уявної (Im) частин структурного фактора НЅ (3.44). На рис. 3.13 для зіставлення форми КДВ з характером варіацій (Re) і (Im) наведені і розрахункові спектри КДВ НЅ для відбиттів 400 та 200. З'ясувалось, що саме співвідношення між цими двома частинами

3.6. Особливості формування дифракційних спектрів



Інтенсивність, $[\text{Re}F_{\text{нр}}], [\text{Im}F_{\text{нр}}]$

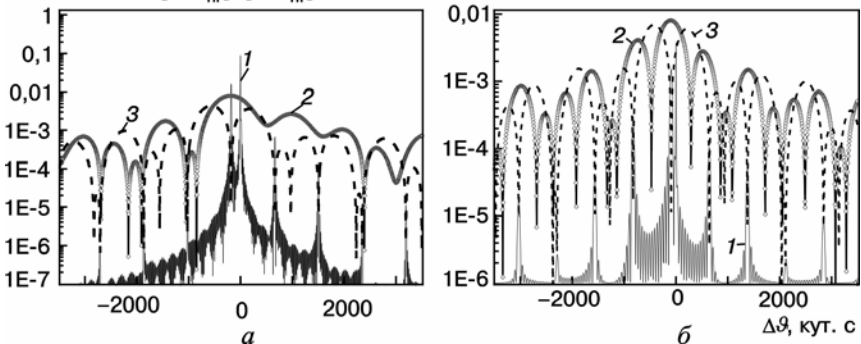


РИС. 3.12. Експериментальні КДВ 400 (1) і КЗР 200 (2) для нґ AlGaAs—GaAs зі співвідношенням товщин шарів 2 : 1

РИС. 3.13. КДВ 400 (а) і КЗР 200 (б) (крива 1), розраховані для AlGaAs/GaAs нґ при співвідношенні товщин шарів 2 : 1, $\text{Re}F_{\text{нр}}$ (2) і $\text{Im}F_{\text{нр}}$ (3)

структурного фактора визначає наявність або загасання сателітів тих чи інших порядків. Дифракційні піки спостерігаються там, де $(\text{Re}F_{\text{нр}})$ досягає максимуму.

На відміну від результатів, показаних на рис. 3.12, для рівнотовщинних шарів відбувається згасання сателітів другого порядку (особливо для КЗР). Ці результати дозволяють сформулювати кількісний критерій згасання сателітів залежно від співвідношен-

ня товщин шарів, які утворюють НЅ. Його можна записати у вигляді емпіричної формули:

$$m = p \left(\frac{t_a}{t_b} + 1 \right), \quad (3.56)$$

де p — ціле число, яке дорівнює 1, 2, ...; m — порядок сателіта, який згасає.

Розглянемо, наприклад, поведінку системи сателітів на експериментальних спектрах (рис. 3.12) для рефлексів 400 (1) і 200 (2) для НЅ другого типу зі співвідношенням товщин шарів 2 : 1. Для 400-відбиття чітко проглядаються не лише сателіти нульового, а також першого, другого й третього порядків (додатні), дозволені структурним фактором для НЅ. Більш багата сателітна структура проявляється у випадку 200-відбиття, де спостерігаються як від'ємні, так і додатні сателіти різних порядків.

Іншою, важливою причиною видності системи сателітів є структурна досконалість окремих шарів НЅ. Як було показано раніше [24, 29], навіть при гарній інструментальній роздільній здатності картина сателітної структури для структурних рефлексів суттєво залежить від наявності дефектів у тому чи іншому шарі НЅ. Ці ефекти проявляються як для структурних, так і для квазізаборонених рефлексів [31, 32]. Результати розрахунків показують, однак, що наявність дефектів у шарі арсеніду галію практично ніяк не впливає на інтенсивності сателітів. Цей висновок узгоджується з отриманими раніше даними про слабкий вплив дефектів на інтенсивності КЗР в масивних монокристалах [35]. Так, вплив досконалого шару ($E = 1$) GaAs у випадку КЗР не відрізняється від впливу такого ж шару з повністю аморфізованою структурою ($E = 0$) за зазначеними вище причинами. Шар GaAs, однак, як фазовий об'єкт певної товщини відіграє важливу роль у формуванні осцилюючої структури спектра НЅ.

Для шару AlAs вплив структурних дефектів на інтенсивність сателітів виявляється помітним, що було показано в розрахунках шляхом варіювання статичного фактора E в межах $0 \leq E \leq 1$. Таким чином, використання КЗР дозволяє окремо вивчати структурну досконалість одного із субшарів (AlAs) НЅ, що є істотною перевагою даного підходу порівняно із застосуванням лише структурних рефлексів 400.

Процедура фітування (припасування розрахункових спектрів до експериментального) показала, що нерівності поверхні шарів на міжфазних границях значною мірою впливають на замазуван-

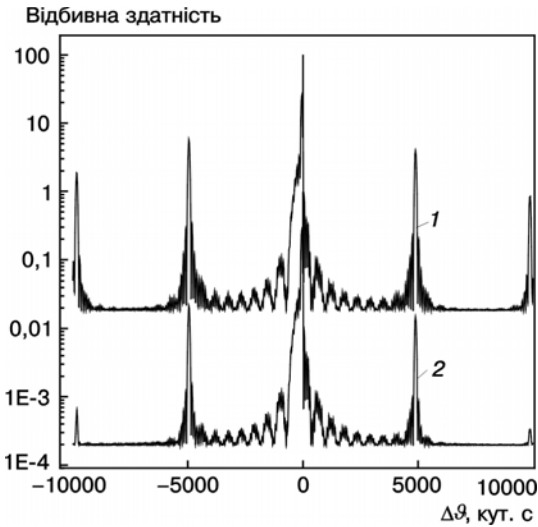


РИС. 3.14. Розрахункові КДВ для КЗР 200 у випадку ідеальних шарів (1) і шарів з нерівностями 0,3 (0,4) нм (2)

ня дифракційної картини, особливо в області сателітів високих порядків (рис. 3.14). Цей результат розрахунків добре узгоджується з експериментальними КДВ (рис. 3.12), на яких спостерігається зменшення інтенсивності сателітів другого порядку. Сателіти першого порядку і нульовий сателіт показують більш слабку чутливість до цього параметра структурної недосконалості. Значення статистично розподілених неоднорідностей поверхні поділу між шарами $H\%$ становить близько 0,3—0,4 нм. Зазначимо, що асиметрія в інтенсивностях максимумів сателітів (ліворуч і праворуч від нульового максимуму) спостерігається тільки при наявності обох типів порушень (зміна міжплощинної відстані і розсіювальної здатності).

Підсумовуючи отримані результати, відзначаємо відносно непогане узгодження між експериментальними і розрахунковими дифракційними спектрами для КЗР. Застосування цих рефлексів для контролю структурних параметрів $H\%$ має ряд переваг перед звичайними (структурними) рефlekсами. По-перше, можуть бути використані більш прості математичні вирази, що зв'язують такі важливі параметри, як товщини шарів і напруги в них. По-друге, незначний внесок шарів з малим значенням структурної амплітуди (GaAs) в розсіяння дає можливість сепарувати вплив кожного із шарів на процес розсіяння. І нарешті, по-третє, незалежність внеску GaAs в загальну кар-

тину розсіяння дає можливість одержати інформацію про структуру окремих шарів $\text{In}\delta$, наприклад шару AlAs .

3.7. ЗАСТОСУВАННЯ КВАЗІЗАБОРОНЕНИХ РЕНТГЕНІВСЬКИХ РЕФЛЕКСІВ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ БАГАТОШАРОВИХ ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУР

Широке застосування напружених шарів InGaAs/GaAs , AlGaAs/GaAs вимагає широкомасштабних досліджень властивостей цих структур з метою оптимізації технологічних режимів формування шарів і границь поділу. Зокрема, при відпрацюванні технології одержання квантових шарів InGaAs/GaAs необхідно знати основні параметри шарів, такі, як молярна частка індію і товщина шару, а також рівень механічних напруг. Крім того, можливо, що морфологія гетерограниці відіграє активну роль у формуванні фізичних властивостей такої багатошарової структури.

У низці праць [30—33] була показана перспективність застосування КЗР для дослідження спектрів кривих дифракційного відбиття. Оскільки ці рефлекси є дуже чутливими до хімічного складу сполуки, то становить інтерес вивчення впливу складу квантової ями на спектри дифракції РП для КЗР.

Ці дослідження були виконані для шарів з товщинами декілька десятків ангстрем. Проблема стає більше складною, якщо КЯ має товщини порядку декількох моношарів. У $\text{In}\delta$ із одним підшаром, більш тонким порівняно з іншими, такі тонкі шари не дають безпосереднього внеску в розсіювальну здатність, і дифракційні криві формуються параметром, що визначається добутком напруги і товщини тонких шарів [21].

У цьому пункті буде показано вплив змін складу і товщини квантових ям, а також структурних і фазових змін, викликаних вказаними параметрами, на еволюцію спектрів відбиття $\text{In}\delta$ для КЗР та інтерпретація експериментальних спектрів КДВ на основі проведених розрахунків. Буде показана також можливість контролю переходу від двовимірного до тривимірного механізму росту квантових точок.

Інтерференційна функція Лауе $\text{In}\delta$, яка присутня в (3.45), приймає максимальне значення при $y = \pi m$, де $m = 0, \pm 1, \dots$. Тоді для m -го кутового положення кристала η одержимо $\eta_m = 2\pi m/T$.

Цей вираз описує кутові положення сателіта нульового порядку при $\eta_m = 0$ і сателітів вищих порядків. Звідси вираз для інтенсивності сателітів набуває вигляду

$$I_m = N^2 |F_m^S|^2,$$

а структурний фактор описується виразом

$$|F_m^S|^2 = \left(\sigma_1 E_1 \frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1} + (-1)^m \sigma_2 E_2 \frac{\sin(A_2 t_2)}{A_2} \right)^2. \quad (3.57)$$

Для короткоперіодних НЅ структурний фактор нульового максимуму можна подати у вигляді $|F_m^0|^2 = (\sigma_1 E_1 t_1 + \sigma_2 E_2 t_2)^2$. У цьому випадку повинні виконуватися умови $\varepsilon_i t_i \leq 1$ і $\frac{\sin(A_1 t_1)}{A_1 t_1}$, тобто невеликі модуляції напруги в шарах. Відношення інтенсивностей сателітів високих порядків до інтенсивності нульового можна записати у вигляді простого виразу, який показує чутливість до різних параметрів НЅ [30]:

$$I_m / I_0 = \left(\frac{\sin(n\pi t_2 / T)}{n\pi t_2 / T} \right)^2 \left(\frac{t_2 \left(1 - k \frac{(\varepsilon_2 + m/T)}{(\varepsilon_1 + m/T)} \right)}{t_1 + t_2 k} \right)^2, \quad (3.58)$$

тут $k = F_2/F_1$, $\varepsilon_i = \Delta d_i/d_2$. Звідси випливає, що для шарів із близькими значеннями структурних факторів поява сателітів високих порядків неможлива. Про це вже було сказано в попередніх параграфах. Ще один висновок, який випливає з цього виразу — залежність відношення інтенсивностей від знака сателіта (додатний або від'ємний), а також від деформаційного параметра $\varepsilon_i t_i$. З аналізу виразу (3.58) слідує, що інтенсивність сателітів на КДВ стає чутливою до наявності тонкого шару, якщо відношення товщин між тонкими і товстими підшарами становить не менше 0,1. У цьому випадку сигнал від тонких шарів може бути виявлений у припущенні, що їх середній склад залишається постійним. Якщо один із шарів у періоді НЅ має сильно виражену аморфізовану структуру ($E_i = 0$), то інтенсивність основного сателіта визначається тільки другим субшаром [32, 30].

ТАБЛИЦЯ 3.2. Експериментальні й технологічні параметри і склад досліджуваних структур

Номер зразка й формула	Атомна частка сполуки, x	Товщина яма/бар'єр, нм	Відношення $I(+)/I(0)/I(-)/I(0)$
1 InGaAs	$\frac{0,2}{0,23}$	4,5/15,9	0,09
2 InGaAs	$\frac{0,28}{0,63}$	5,0/17,31	2
3 InGaAs	$\frac{0,3}{0,59}$	0,7 4,0/16,94	1,57
4 InGaAs	$\frac{0,35}{0,673}$	0,7 4,4/17,88	2,2
5 AlGaAs	$\frac{0,28}{0,3}$	7,6/15	0,93 0,97

Примітка. Над рискою наведено значення для сполуки, заданої технологічно, а під рискою — з РДВР.

Всі зразки були вирощені на напівізолювальному арсеніді галію (100) на установці МПЕ. Для вирощування шарів $8 \times (14\text{ML} (\text{In,Ga})\text{As}/40\text{ML} \text{ арсенід галію})$ температура підкладки зменшувалася до 500°C . Зразки були вирощені з атомною часткою індію відповідно 0,28, 0,3 й 0,35.

Експериментальні КДВ для симетричного відбиття 200 від зразків 1—4 (табл. 3.2) з різною атомною часткою індію в твердому розчині (ТР) наведені на рис. 3.15. Особливості, які спостерігаються на цих кривих, можна якісно просто пояснити. Нульовий максимум, утворений довгоперіодними осциляціями, свідчить про формування в приповерхній області зразків періодичної структури монокристалічних шарів, що відрізняються від підкладки на середній параметр ґратки.

Видно, що крім піка підкладки й основного максимуму, викликаного середньою ґраткою структури (нульового сателіта «0»), на «хвостах» КДВ спостерігається інтерференційна структура, що являє собою взаємодію хвиль із однаковими періодами коливань. Це виражається у проявленні ще одного сателіта (позитивний, першого порядку «+1»). Причому інтенсивність його перевищує пік основного (нульового) сателіта. Це, чесно кажучи, є несподіваним результатом, оскільки всі розрахунки для товщин і

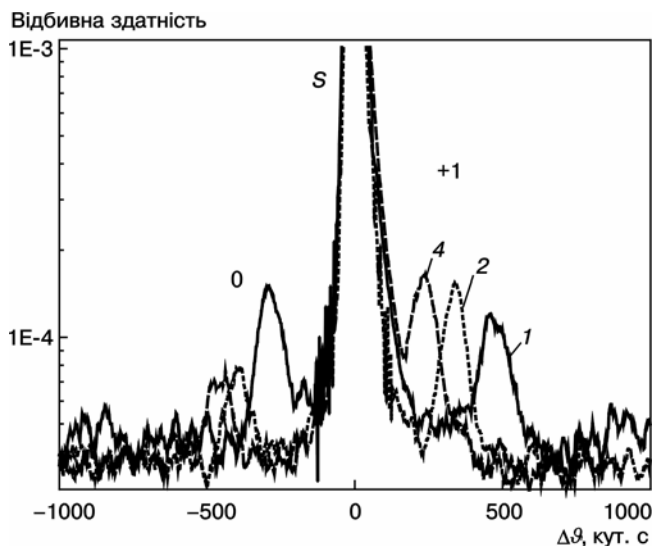


РИС. 3.15. Експериментальні КДВ для 200-рефлексу для структури InGaAs з різною атомною часткою індію. «0» і «+1» — сателіти нульового і першого порядків відповідно. Цифри біля кривих відповідають номерам зразків (табл. 3.2)

сполук твердих розчинів (ТР), заданих технологічно або близьких до них, дають набагато інші співвідношення між інтенсивностями сателітів (див. рис. 3.16). Крім цього, облік структурної досконалості шарів також не може значно вплинути на асиметрію розподілу інтенсивностей сателітів. Відсутність від'ємних сателітів на експериментальних спектрах вказує на те, що їх інтенсивність на кілька порядків нижча, ніж додатних, і при даному співвідношенні сигнал—шум вони не проявляються.

Для з'ясування причин такої поведінки сателітів ви-

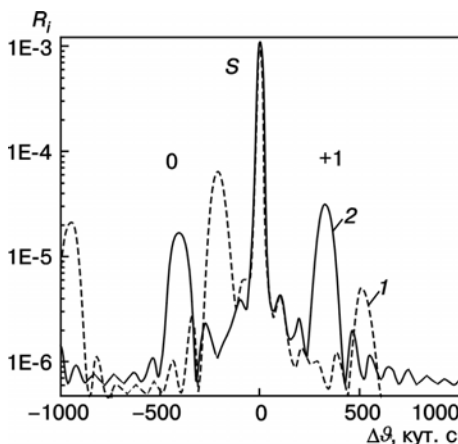


РИС. 3.16. Розрахункові КДВ для 200-рефлексу для структури InGaAs: 1 — для сполуки, заданої технологічно; 2 — визначені зі співвідношення (3.48)

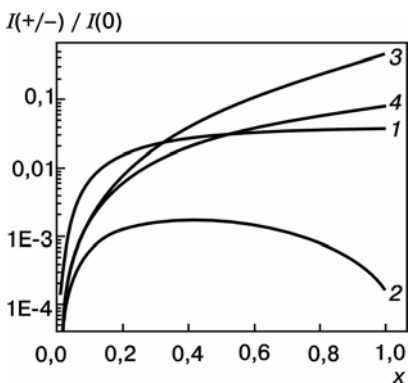


РИС. 3.17. Залежності відношень інтенсивностей сателітів першого порядку до нульового від атомної частки індію (випадок $a_2 > a_1$ і $F_2 < F_1$): 1, 2 — рефлекс 200; 3, 4 — рефлекс 400 (2, 3 — $I(+)/I(0)$; 1, 4 — $I(-)/I(0)$)

Однак асиметрія у відношенні інтенсивностей сателітів проявляється тільки за умови врахування напруг як у першому, так і в другому підшарах. Тобто тільки за тієї умови, що обидва шари є напруженими, тому що неврахування цієї обставини приводить до однакових значень інтенсивностей додатних і від'ємних сателітів. Для рефлексу 400 цей ефект виражений не так сильно (криві 3, 4). Тому КЗР дозволяють дуже ефективно контролювати склад ТР субшарів Нґ.

Наведені на рис. 3.18 результати відповідають випадку, коли при зміні складу ТР зміна параметрів ґраток і структурних факторів шарів відбувається в одному напрямі ($a_2 > a_1$ й $F_2 > F_1$). У випадку, коли зміна цих параметрів відбувається в протифазі ($a_2 > a_1$ і $F_2 < F_1$), залежність відношення інтенсивностей сателітів для 200-відбиттів буде протилежною (див. рис. 3.17). Однак для Нґ $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ при певному співвідношенні товщин шарів буде така ж ситуація з відношенням сателітів, хоча виконується перша умова (синфазність параметра ґратки й структурного фактора). Для цих Нґ товщина КЯ (GaAs) менша, ніж бар'єра (AlGaAs), і тому співвідношення знаків між параметрами невідповідності ґраток змінює співвідношення між сателітами. Це підкреслює важливість ще одного параметра — середнього рівня напруг у шарах.

соких порядків на спектрах КДВ для 200-відбиттів були проведені чисельні розрахунки відповідно до формули (3.58).

На рис. 3.17 наведені залежності відношення інтенсивностей сателітів перших порядків до нульового від складу твердого розчину в шарах InGaAs для рефлексів 200 й 400. З аналізу результатів слідує, що відношення інтенсивностей сателітів першого порядку до інтенсивності нульового для рефлексу 200 дуже чутливе до складу ТР. При певних значеннях складу це відношення для додатних сателітів може значно перевищувати 1 (залежність 1).

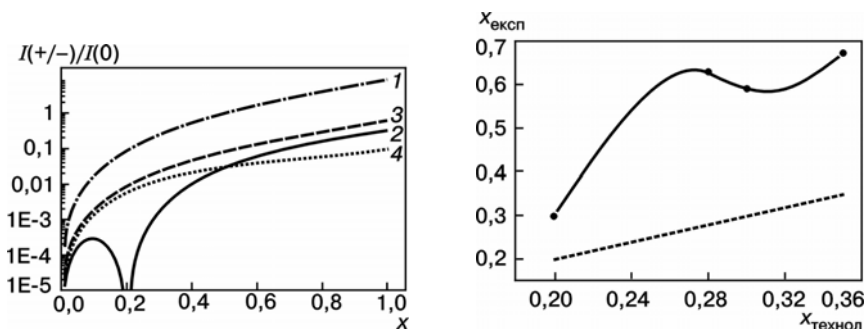


РИС. 3.18. Залежності відношень інтенсивностей сателітів першого порядку до нульового від атомної частки індію (випадає $a_2 > a_1$ і $F_2 > F_1$): 1, 2 — рефлекс 200; 3, 4 — рефлекс 400 (1, 3 — $I(+)/I(0)$; 2, 4 — $I(-)/I(0)$)

РИС. 3.19. Експериментальні значення атомної частки індію в структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ залежно від технологічно заданого: точки — експериментальні дані; суцільна лінія — склад квантової ями без точок

Таким чином, аналіз експериментальних спектрів Нґ для КЗР дозволяє проводити контроль такого важливого параметра, як хімічний склад сполук ТР. Крім того, він дозволяє визначити й кристалграфічну структуру цього твердого розчину на атомному рівні, оскільки вона зав'язана на двох параметрах: стала ґратки й структурний фактор (положення та тип атомів).

Отримана з експериментальних спектрів для 200-рефлексу атомна частка індію для всіх зразків значно перевищує задану технологічно (табл. 3.2). Структура квантових ям така, що верхні й нижні її шари виявляються розмитими і з меншою атомною часткою індію, ніж більш глибокі стосовно інтерфейсу частини квантової ями. Якщо врахувати підвищену рухливість індію, то можна припустити наявність деякого розмиття КЯ. Зміна складу відбувається при внутрішній дифузії деякої кількості індію із двох граничних шарів в об'єм КЯ. Це приводить до формування областей з підвищеною атомною часткою індію — квантових точок. Таким чином, можна допустити, що формування точок пов'язане зі зменшенням ефективної атомної частки індію в змочувальному шарі. Перенаплення In повинне бути виключене при температурах росту порядку 500°C , а отже індію міг бути накопичений у цих областях тільки за рахунок перерозподілу. Перехід до формування точок активно відбувається при заданих значеннях складу квантових ям $x = 0,28$. Про це свідчить пове-дінка кривих на рис. 3.19, де наведено результати залежності ви-

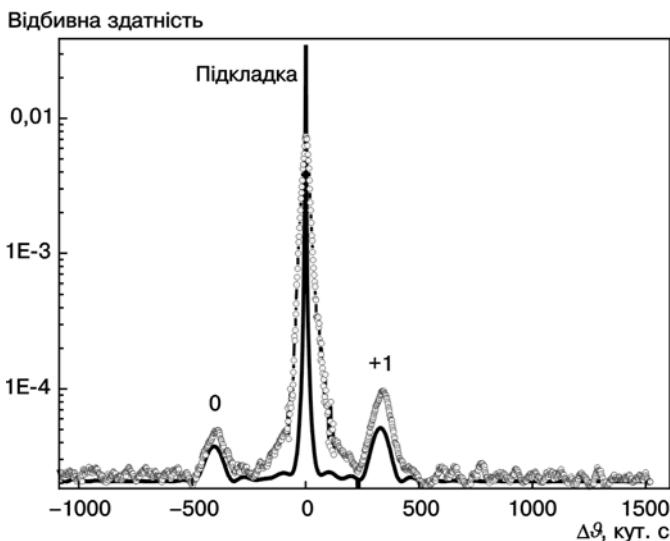


РИС. 3.20. Експериментальна (точки) і розрахункова (суцільна лінія) КДВ для 200-рефлексу в структурі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для складу 0,25

мірних значень складу ТР в структурах, як функції технологічно заданого x . Різде відхилення залежності від заданих технологічних значень свідчить про наявність цих процесів.

Модуляція таких структур підтримується ґраткою змочувальних шарів, а висота острівців може флюктуувати. Острівці можуть бути неупорядкованими в площині, що, однак, не позначиться на профілі симетричного відбиття [36, 37]. В ідеальній ґратці є модульовані дифракційні піки як від острівців, так і від усередненої ґратки шарів. Розкид висоти острівців не гасить модуляцію, оскільки надперіод підтримується ґраткою змочувальних шарів. Невеликі відхилення надперіоду придушують модуляцію піка острівця, але не ґратки шарів, тому що шари в цій моделі утворюють кристалічну ґратку, а для острівців прошарок ближче до аморфного.

Як стартові умови для припасування теоретичних КДВ до експериментальних значень, використовувались параметри структур, отримані з аналізу спектрів для 400-відбиття. Унаслідок цієї процедури були одержані спектри, які дуже добре описують поведінку експериментальних КДВ Нґ із квантовими точками (рис. 3.20).

Як показують результати розрахунків, наявність дефектів у шарі арсеніду галію практично ніяк не впливає на інтенсивності

сателітів. Хоча навіть досконалий шар GaAs у випадку КЗР поводить ся як аморфна структура. Над'ратки AlGaAs/GaAs, таким чином, можна розглядати як складені тільки з AlGaAs-плівок (вставок), які відділені недифрагуючим матеріалом (в даному випадку — GaAs). Цей шар, однак, як фазовий об'єкт, що має певну товщину, впливає на формування осцилюючої структури спектра Нґ [31].

Таким чином, застосування КЗР для дослідження квантово-розмірних Нґ показало, що ці відбиття є дуже чутливими до складу ТР КЯ. Причому залежно від співвідношення параметрів a_2/a_1 й F_2/F_1 змінюється поведінка сателітної структури. Аналіз відношення інтенсивностей сателітів вищих порядків до інтенсивності нульового дозволяє визначити як склад ТР, так і наявність напруг у субшарах (асиметрія інтенсивностей сателітів вищих порядків). Задовільне узгодження між експериментальними й теоретично розрахованими КДВ для 200-рефлексу свідчить про те, що теоретичні передумови, використані в працях [30, 31], є правочинними.

Проведені дослідження ясно свідчать про те, що дифракційні характеристики 002-відбиттів є дуже чутливими для виявлення неоднорідностей границь поділу багатошарових структур.

Нарешті, дифракція РП із високою роздільною здатністю є прийнятною для аналізу прихованих квантових точкових структур. При порівнянні рентгенівських спектрів InGaAs-шарів з точками і без них зменшення ефективної атомної частки індію в змочувальних шарах знайдено в зразках із точками.

3.8. РЕНТГЕНОДИФРАКЦІЙНІ ДОСЛІДЖЕННЯ 2D—3D СТРУКТУРНИХ ПЕРЕХОДІВ У БАГАТОШАРОВИХ ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУРАХ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Багатошарові структури з напруженими шарами InGaAs/GaAs дозволяють підвищити ефективність розмірного квантування. Ансамблі наноострівців, сформовані в матриці широкозонного матеріалу, викликають великий практичний інтерес [38, 39]. Тому їх застосування вимагає проведення широкомасштабних досліджень властивостей цих структур для оптимізації технологічних режимів формування шарів і границь поділу. Зокрема, при відпрацьовуванні технології одержання квантових шарів InGaAs/GaAs необхідно знати основні параметри шарів, такі, як атомна частка індію й товщина шару, а також рівень механічних напруг. Слід також зазначити, що спонтанна поперечна модуляція

сполуки в плівках напівпровідникових сплавів III—V приводить до суттєвих змін оптоелектричних властивостей напівпровідникових матеріалів, які становлять технічний інтерес для виробництва квантово-розмірних лазерів і фотодетекторів [40, 41].

Мета даного пункту — показати можливості визначення основних параметрів багат шарових напружених квантових ям InGaAs/GaAs з різним складом ТР, а також вплив складу квантових ям (КЯ) на перехід від двовимірного до тривимірного росту квантових шарів з острівцями (квантовими точками).

Багат шарову систему, якою є структура з декількома квантовими ямами, можна подати як систему однорідних субшарів [14]. Розрахунок кривої дифракційного відбиття (КДВ) будемо проводити за формулами динамічної теорії розсіяння РП, що зводиться до рекурентних співвідношень, які зв'язують амплітуду відбиття $R_{h,N}$ від N шарів з амплітудами відбиття $R_{h,1}$ й прохідження $R_{0,1}$ від верхнього шару з амплітудами $(N-1)$ шарів:

$$R_{h,N} = [R_{h,1} + R_{h,N-1}(R_{0,1}R_{0,1} - R_{h,1}R_{h,1})](1 - R_{h,N-1}R_{h,1})^{-1}. \quad (3.59)$$

Кожний із шарів характеризується товщиною t_j , параметром кристалічної ґратки a_j і ступенями аморфізації f_j , що зв'язана зі зсувами атомів з регулярної позиції.

Для проведення чисельного аналізу й зіставлення його з експериментом зручно використати модель дефектів кулонівського типу з виразом для статичного фактора Дебая—Валлера згідно з [25].

Всі досліджені зразки вирощувалися на напівізолювальному арсеніді галію (100) на установці МВЕ. П'ять серій зразків були вирощені з атомною часткою індію відповідно 0,2, 0,25, 0,28, 0,3 й 0,35. Вимірювання КДВ для симетричних 400-, 200- і асиметричних 311-рефлексів проводилися на двокристалльному спектрометрі (кристал—монокроматор GaAs(100), Cu_α -випромінювання, 400-відбиття).

З використанням наведених вище співвідношень були проведені розрахунки спектрів КДВ для даних структур. Як стартові умови для припасування теоретичних спектрів КДВ до експериментальних використовувались технологічні параметри структур.

Експериментальні КДВ, а також результати припасування теоретичних кривих для симетричного відбиття 004 від деяких зразків з різною атомною часткою індію в твердому розчині на-

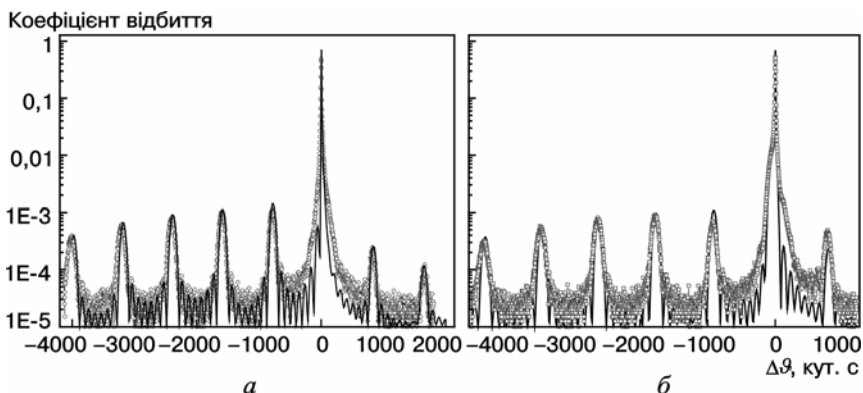


РИС. 3.21. Розрахункові (суцільна лінія) і експериментальні (маркери) КДВ для рефлексу 004 у структурах з атомною часткою індію: а — $x = 0,25$; б — $x = 0,28$

ведені на рис. 3.21. Видно, що крім піка підкладки й основного максимуму, викликаного середньою ґраткою структури (нульового сателіта), на «хвостах» КДВ спостерігається складна інтерференційна структура, що являє собою взаємодію хвиль із однаковими періодами коливань [14]. Осциляції з малим періодом $\Delta\vartheta$ відповідають за товщину всієї структури, а більш довгоперіодні осциляції мають яскраво виражений максимум, що свідчить про формування в приповерхневій області зразків періодичної структури монокристалічних шарів. Аналіз КДВ (як симетричних 400, так й асиметричних 311) показав, що всі структури в тій чи іншій мірі є псевдоморфними. З урахуванням цієї обставини була проведена оцінка атомної частки індію у квантових ямах. Ці оцінки наведені в табл. 3.3.

ТАБЛИЦЯ 3.3. Склад і параметри квантових ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ за даними рентгенівсь-кої дифрактометрії

Номер структури	Склад	Товщина КЯ, нм	Товщина шару GaAs, нм	Період НЇР, 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
5	0,3	4,0	17,88	22,98
	1	0,7		
	0,17	4,4		

ТАБЛИЦЯ 3.4. Деформаційні параметри квантових ям $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ за даними рентгенівської дифрактометрії (симетричний рефлекс 400)

Номер зразка	$\frac{\varepsilon_1^*}{\varepsilon_2}$	$\Delta a/a^{**}$	$\langle \varepsilon \rangle^{***}$
1	$\frac{0,023}{0,000185}$	0,0032	$\frac{0,00529}{0,00501}$
2	$\frac{0,025}{0,000185}$	0,00419	$\frac{0,00599}{0,00586}$
3	$\frac{0,0285}{0,000851}$	0,0045	$\frac{0,00705}{0,00696}$
4	$\frac{0,03}{0,00185}$	0,00444	$\frac{0,00779}{0,00754}$
5	$\frac{0,029}{—}$	0,00453	$\frac{0,00834}{0,00799}$
	$\frac{0,045}{0,00075}$		
	$\frac{0,0322}{—}$		

* Над рискою наведено деформацію в шарі InGaAs , а під рискою — GaAs .

** В релаксованому періоді НЅ.

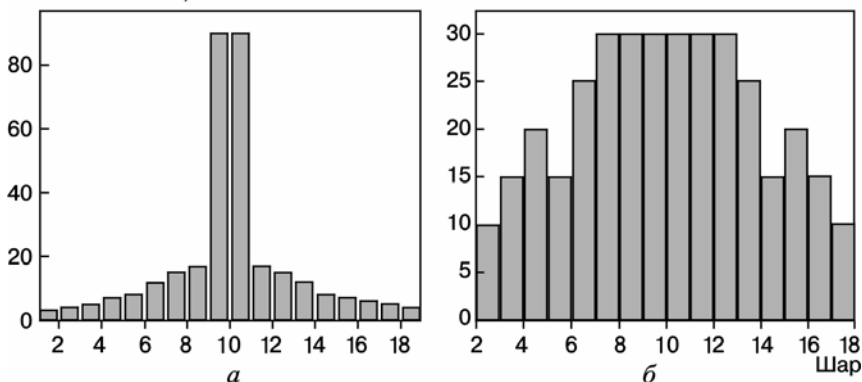
*** Над рискою наведено усереднену деформацію в періоді НЅ за формулою (3.60), а під рискою — визначену з положення «0» сателіта.

Унаслідок процедури підгонки для рефлексу 400 були отримані товщини шарів у періоді надґратки (НЅ), розподіл домішки в межах КЯ, а також зміна параметра ґратки в напрямі росту структури. Ці результати узагальнені в табл. 3.3 і 3.4. Значення усередненого параметра деформації за періодом НЅ уздовж напрямку росту для всіх структур розраховуються за формулою:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon_1 t_1 + \varepsilon_2 t_2}{t_1 + t_2}. \quad (3.60)$$

А усереднені значення деформацій у періоді НЅ отримані з кутового положення нульового сателіта 004-відбиття. Як видно із цього порівняння, результати, отримані різними підходами, добре корелюють між собою. Однак порівняння таких значень із даними для релаксацийної структури, яка має аналогічну сполуку, показує, що всі зразки перебувають у деформованому стані.

Атомна частка Іп, %



Коефіцієнт відбиття

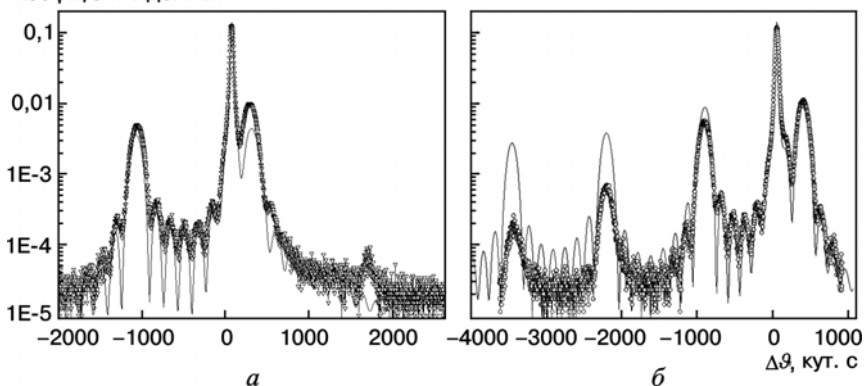


РИС. 3.22. Профілі розподілу індію в моношарах КЯ для зразків 5 (а) і 4 (б)

РИС. 3.23. Розрахункові (суцільна лінія) і експериментальні (точки) КДВ для рефлекса 113 в структурах з атомною часткою індію: а — $x = 0,28$; б — $x = 0,25$

Це приводить до формування областей з підвищеною атомною часткою індію — квантових точок. Таким чином, можна допустити, що формування точок пов'язане зі зменшенням ефективною атомною часткою індію в змочувальному шарі. Структура квантових ям така, що верхні й нижні її шари виявляються розмитими й має тим меншу атомну частку індію, чим глибшими стосовно інтерфейсу є частини квантової ями. Можливі профілі розмиття КЯ для зразків 4 і 5 наведені на рис. 3.22.

На рис. 3.23 наведені залежності КДВ (розрахункові й експериментальні) від складу ТР для рефлекса 311 в геометрії падаю-

ТАБЛИЦЯ 3.5. Значення параметрів деформації шарів у площині інтерфейсу, отримані в різко асиметричній геометрії зйомки КДВ (рефлекс 311)

Номер зразка	ε	Положення нульового сателіта, кут. с
1	0,00035	-806
	0,00047	
2	0,00023	-952
	0,00026	
3	0,00031	-1092
	0,00091	
4	0,00501	-1206
	0,00067	
5	0,00083	-1285
	0,00060	

Примітка. Над рискою наведено деформацію в захисному шарі GaAs, під рискою — паралельну інтерфейсу.

чого ковзного пучка. Їх аналіз також свідчить про можливість релаксаційних і дифузних (індій) процесів у зразках 3—5. Дані про структури, отримані в процесі припасування, для рефлексів 311 наведені в табл. 3.5. Розширення піків сателітів для 400- і 311-рефлексів може бути викликано перерозподілом індію усередині шару.

Отримані значення деформації для напряму, паралельного гетерограниці, у зразках 3, 4 і 5 свідчать про значну релаксацію ґратки, тобто про частковий зрив псевдоморфного росту. Це дозволяє зробити висновки про те, що тут з'являється тривимірний ріст острівцевих структур [37].

Експериментальні КДВ 004 для зразків 4 й 5 свідчать про те, що основний об'єм квантового шару складається із двох областей, що відрізняються за складом від заданого. Основний шар з композицією ($x = 0,17$) і додатковий шар з більшим складом ($x = 0,9$), який імовірно містить у собі острівцеві структури. Про утворення тривимірних острівцевих структур свідчить як розширення піків сателітів низьких порядків, так і зсув обвідної лінії в бік менших кутів. Яскравим прикладом, що свідчить на користь тривимірної структури для зразка з ($x = 0,35$), є спектр КДВ від багатозарової системи для рефлексу 400, який зображений на рис. 3.24.

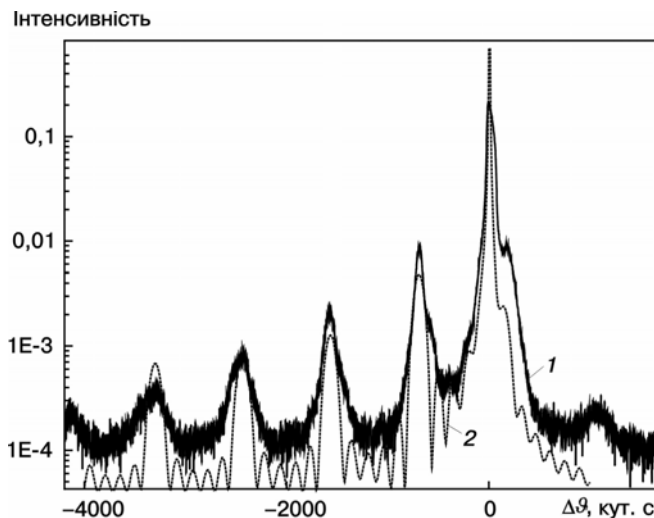


РИС. 3.24. Розрахункова (2) і експериментальна (1) КДВ для рефлексу 004 в структурі з атомною часткою індію $x = 0,35$

На рис. 3.24 показано подавлення періодичної сателітної структури, викликаній острівцями, в області великих негативних кутів (зразок 5). Розрахункові КДВ забезпечують найкращу узгодженість з експериментальними результатами для атомної частки In в КЯ, показаного на рис. 3.22. Нарешті зазначимо, що на користь утворення тривимірної острівцевої структури свідчить і спектр КДВ, знятий при скануванні кристала на деякій відстані від точного положення Бреґа [42]. У цьому випадку на фоні подавлених когерентних піків добре видно пік, утворений дифузною компонентою інтенсивності від квантових точок. За його напівшириною було проведено оцінку розмірів КТ уздовж напрямку інтерфейсу, яка становить у нашому випадку 73,5 нм. Це значення близьке до отриманих у праці [43] середніх розмірів квантових острівців.

Узгодження між експериментальними і теоретично розрахованими КДВ свідчить про те, що багат шарова структура, утворена на підкладці GaAs, має хорошу кристалічну якість, а границя поділу між бар'єрними шарами GaAs і КЯ $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ для зразків із атомною часткою 0,2—0,25 чітка і когерентна. Подальше підвищення атомної частки індію в твердому розчині приводить до порушення псевдоморфного росту і утворення тривимірних острівців. При цьому довільний розподіл In в системах такого роду може приводити до збіль-

шення ступеня локального безпорядку і деформації, що відповідно впливає на рухливість і довжину дифузії носіїв заряду.

При припасуванні теоретичних КДВ до експериментальних аналізувалися найбільш можливі і ймовірні ситуації. Для знаходження більш повної відповідності між теоретичними й експериментальними КДВ дослідження проводилися з використанням не лише кінематичної, а й динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів. Максимально повного узгодження розрахункових і експериментальних КДВ можна досягти лише з урахуванням інструментальних факторів, що в принципі неважко, та з включенням в теоретичну модель ефектів дифузного розсіяння від мікрodefектів в шарах і від шорсткості міжшарових границь [44].

3.9. МОДЕЛЮВАННЯ ДИФРАКЦІЇ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ ВІД БАГАТОШАРОВОЇ СТРУКТУРИ З РІЗНИМ ГРАДІЄНТОМ СКЛАДУ НА ГРАНИЦЯХ ШАРІВ

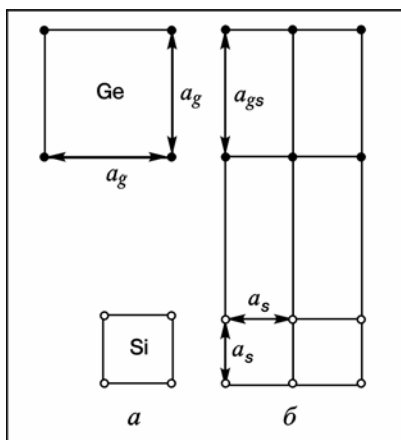
Багатошарові напівпровідникові структури знаходять усе більше застосувань у сучасній промисловості, і завдання підвищення якості їх виготовлення стає все актуальнішим у зв'язку зі зменшенням товщин вирощуваних шарів і поліпшенням їх якості. Одним із найкращих неруйнуючих методів контролю вирощених структур залишається рентгеноструктурний аналіз. Однак дотепер методи моделювання дифракції недостатньо розроблені й тому висновки про аналізовану структуру, які можна зробити, підігнавши змодельовану дифракційну картину під експериментальну, не завжди виявляються справедливими.

Завдання визначення структури вирощеної НЅ далекі від однозначної реалізації. Тому методи, що застосовуються на сьогоднішній день для аналізу багатошарових структур за допомогою моделей з різкими границями між шарами, можуть давати недостовірні результати про товщини шарів. Очевидно, що при вирощуванні багатошарової структури окремі шари не можуть бути ідеальними і особливо це стосується їх складу. Відповідно необхідно підібрати склад модельної структури. З фізичних міркувань, мабуть, при рості кристала на границях шарів буде перехідна область із деяким градієнтом атомної частки складу. Тому необхідно введення перехідної області. Оскільки функціональна залежність цього градієнта не відома, доведеться спробувати кілька різних варіантів.

Рис. 3.25. Модель росту Ge-плівки на Si-підкладці: а — релаксована комірка; б — напружена GeSi

Даний підхід не новий, і багато авторів [45—47] вводили подібні градієнти для поліпшення збігу експериментальних і модельованих кривих. Однак це були або моделі із симетричним профілем [45, 46], або автори змінювали тільки глибину проникнення градієнта [45, 47], залишаючи незмінною його форму. Крім того, в цих працях не була помічена зміна ефективних товщин шарів залежно від градієнта складу.

Будемо розглядати псевдоморфний ріст кристалів з кубічною симетрією. Параметр ґратки, який паралельний відбивним площинам, у цьому випадку залишається сталим і дорівнює відповідному параметру ненапруженої підкладки (це з великою точністю відповідає дійсності, оскільки деформація розтягання в більш товстому шарі періоду $N\lambda$ на порядки менша, ніж більш тонкого шару — ями), а перпендикулярний параметр ґратки буде змінюватись залежно від складу [48]. При цьому будемо вважати, що вирощена структура повністю напружена (рис. 3.25) і



$$a_{gs} = a_g + 2(a_g - a_s) \frac{\nu}{1 - \nu},$$

де ν — коефіцієнт Пуассона розтягнутого шару [49]. Зміна локального параметра ґратки, нормального до шарів, що відбивають a_{gs} , приводить до зміни вектора дифракції \mathbf{h} , оскільки

$$h = \frac{\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}}{a_{gs}}, \quad (3.61)$$

де m_1, m_2, m_3 — індекси Міллера відбивних площин. Таким чином, склад (деформація) впливає на просторове положення дифрагівного променя.

Криві гойдання моделювалися для відбиття 004 для випадку двох плоских хвиль методом, наведеним у праці [50], що цілком правомірно для планарної структури. Розглянута структура склада-

лася з товстої GaAs-підкладки (порядку 300 мкм) з нанесеними 17 періодами $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$ -шарів. Технологічно задані товщини окремих шарів періоду становили 11,5 МШ (3,3 нм) і 67 МШ (18,9 нм) для InGaAs і GaAs . Ці шари розбивалися на значно більш тонкі (близько $0,1 \text{ \AA}$) підшари, параметри яких змінювалися відповідно до обраної моделі градієнта складу. На перший погляд параметр $0,1 \text{ \AA}$, що у десятки разів менший, ніж параметр ґратки, здається нефізично, однак рентгенівський метод є інтегральним у латеральному напрямі (площа поверхні зразка, що приймає участь у формуванні дифракційної картини, може становити порядку мм^2), тому можна вважати параметри структури неперервно змінними за глибиною. Для збільшення швидкості розрахунку та частина зразка, склад якої залишився постійним, не розбивалася на підшари. Для збільшення точності розрахунку хвильові вектори в кожному шарі розраховувались чисельним методом [51].

Основним параметром матеріалу, що впливає на дифракцію, є кристалічна будова речовини. Оскільки розглядається кубічна ґратка і деякий фіксований рефлекс, єдиним параметром кристалічної будови матеріалу, який можна змінювати при моделюванні, є відстань між атомами. При розгляді псевдоморфного росту латеральні параметри ґратки (ті, що лежать в площині росту) не змінюються при варіюванні складу вирощуваної плівки. Крім того, при використанні симетричного рефлексу вони не впливають на дифракцію. Отже залишається тільки один параметр ґратки, який відображає зміну складу — перпендикулярний до відбивних площин. Саме його і будемо варіювати для подальшого моделювання структур зі складним градієнтом складу. Крім такого параметра потрібно ще врахувати поляризованість, яка також залежить від матеріалу, на якому відбувається дифракція. Однак зазначимо, що її вплив для фундаментальних (незаборонених) рефлексів малий. Надалі під зміною складу будемо розуміти зміну параметра ґратки, хоча при розрахунках описані нижче підходи рівною мірою застосовувалися і до поляризованості.

Розглянемо чотири види градієнтів на границі поділу шарів:

- 1) різкий (ідеальні шари);
- 2) лінійний;
- 3) квадратичний;
- 4) квадратично-гіперболічний.

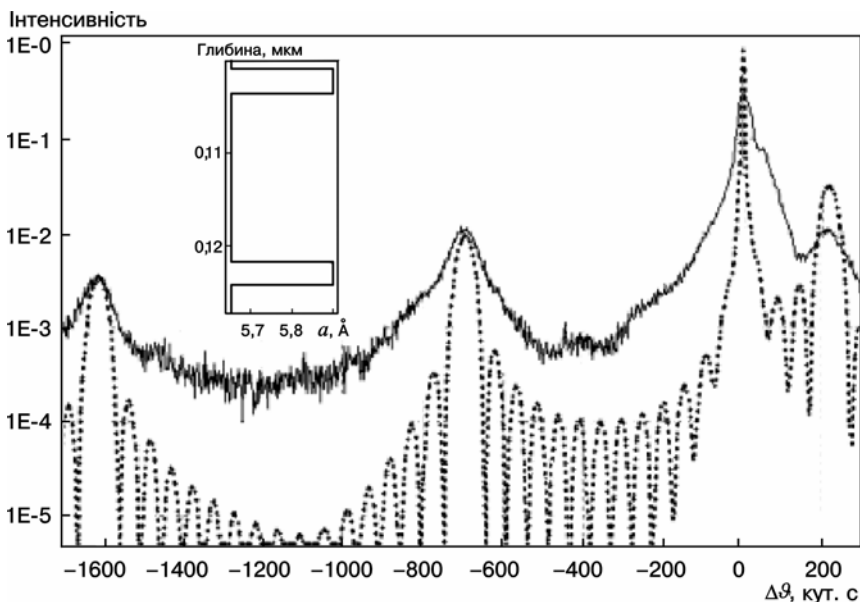


РИС. 3.26. Експериментальна (суцільна) і теоретична (пунктирна) дифракційні криві для багатошарової структури з ідеальними границями шарів (на вставці)

Нижче буде показано, яким чином моделювався закон зміни параметрів матеріалу для кожного із цих випадків. Моделювані криві гойдання порівнюються з експериментальними, отриманими від описаної вище 17-шарової структури.

Різкий градієнт — це найпростіший випадок (вставка на рис. 3.26), що звичайно й розглядають при моделюванні багатошарової структури. Використовуючи таку модель, можна визначити період структури (сумарну товщину $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As} + \text{GaAs}$ -шарів) і (далеко не завжди точно) співвідношення товщин цих шарів. Однак при використанні цієї моделі практично неможливо підігнати інтенсивності сателітних піків на кривій гойдання для згоди з експериментом (рис. 3.26).

Досить просто задати градієнт, що змінюється за лінійним законом (**лінійний градієнт**) (вставка на рис. 3.27).

У цьому випадку задаємо глибину проникнення градієнта в обидва шари і функціональну залежність градієнта складу відповідно зверху і знизу від границі поділу шарів, які виражаються формулами

$$a = \frac{1}{2}(a_0 + a_{-1}) + \frac{a_0 - a_{-1}}{2} \frac{x}{et}, \quad a = \frac{1}{2}(a_0 + a_1) + \frac{a_0 - a_1}{2} \frac{t - x}{et}, \quad (3.62)$$

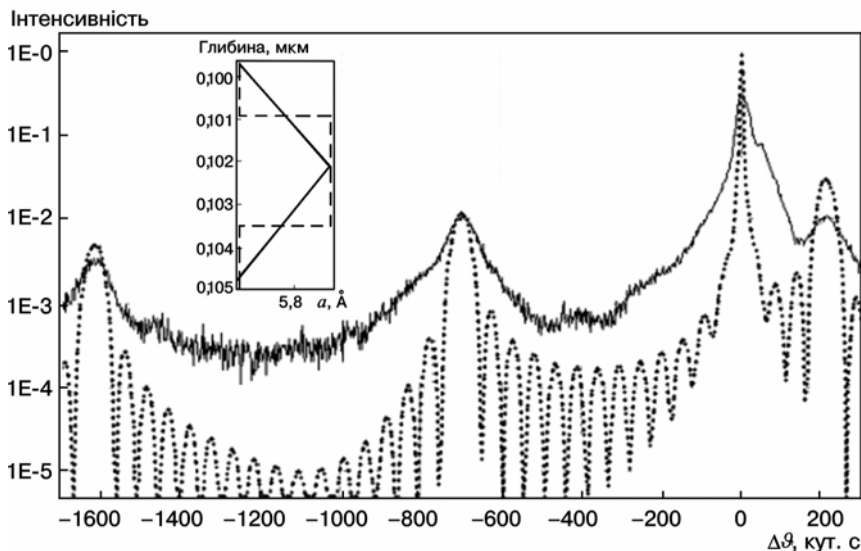


РИС. 3.27. Експериментальна (суцільна) і теоретична (пунктирна) дифракційні криві для багат шарової структури з лінійним градієнтом на границях шарів (на вставці)

де x — відстань від границі поділу; a — поточний параметр; a_0, a_{-1}, a_1 — параметри відповідно поточного, попереднього й наступного шарів; t — товщина шару; et — глибина проникнення градієнта в шар. Для досліджених структур подібний вид градієнта не дозволив одержати задовільний збіг інтенсивностей сателітних піків (рис. 3.27).

Більш фізичною (з міркувань відсутності різких змін складу) здається **квадратична модель** градієнта складу на границях шарів (рис. 3.28). Його функціональна залежність для заданої глибини проникнення (et) за умови рівності нулю похідних в точках A і B та наявності перегину в точці C буде така:

$$a = a_0 - \frac{a_0 - a_{-1}}{2} \frac{(x - et)^2}{et^2}, \quad a = a_0 - \frac{a_0 - a_1}{2} \frac{(x + et - t)^2}{et^2}, \quad (3.63)$$

відповідно зверху і знизу від границі поділу.

Крива гойдання для даного виду градієнта практично збігається з попереднім випадком (рис. 3.27). В обох випадках інтенсивність нульового сателіта дещо знижена, а збільшити її мож-

на хіба що ввівши деяку кількість In в GaAs-шар. Тому була запропонована наступна модель.

Гіперболічний градієнт. В процесі росту методом МПЕ малоймовірний процес однакової взаємодифузії між різними шарами. Особливо це буде помітно при відсутності пауз при вирощуванні різних шарів і різній адсорбційній здатності матеріалів, з яких складаються такі шари. У цьому випадку ($\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$ з більш товстим GaAs-шаром) можливий градієнт складу показаний на рис. 3.29. В області з більшим параметром ґратки (InGaAs — за рахунок присутності In) частка In збільшується майже лінійно (для згладжування кутів і була обрана описана вище квадратична інтерполяція), а в області з меншим параметром ґратки (GaAs) концентрація In зменшується по гіперболі, яка описується формулою

$$a = a_0 + ch - \frac{(c+1)h}{\frac{x}{cet} + 1}, \quad (3.64)$$

де h — максимальна різниця параметрів суміжних шарів (звичайно $h = a_0 - a_1$ (рис. 3.29)); c — параметр кривизни гіперболи, що змінюється від 0 (більша кривизна) до 1 (майже пряма).

Природно, що площа S_1 , яка задана як параметр моделі (а точніше її співвідношення з повною площею InGaAs -шару:

$$S_k = \frac{S_1 100\%}{t(a_1 - a_0)},$$

повинна дорівнювати площі S_2 (рис. 3.29):

$$S_2 = \int_0^{et} \left(a_0 + ch - \frac{(c+1)h}{\frac{x}{cet} + 1} \right) dx = (a_0 + ch - c^*(c+1)h \ln \left| \frac{c+1}{c} \right|) et. \quad (3.65)$$

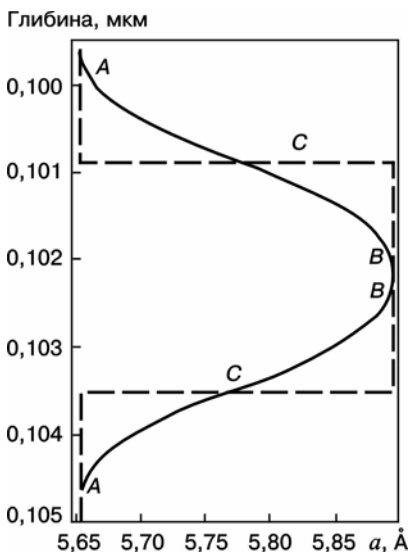


РИС. 3.28. Квадратичний градієнт (суцільна крива)

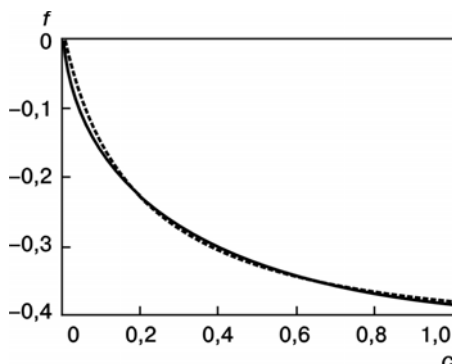
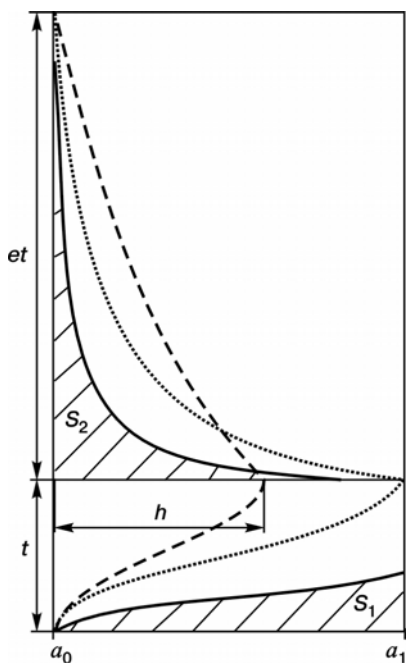


РИС. 3.29. Гіперболічний градієнт. Суцільна крива $S_k = 80\%$, пунктирна $S_k = 50\%$, штрихова $S_k = 30\%$

РИС. 3.30. Апроксимація функції $f(c)$

Із цієї умови підбирається параметр c . Однак таке рівняння є істотно нелінійним відносно c . Звичайно, його можна вирішувати чисельно, проте висока точність у даній ситуації не є критичною, оскільки зроблені припущення більш істотні, але слабо обґрунтовані (наприклад, форма кривої, що обмежує площу S_1). Виходячи із цього можна апроксимувати функцію

$f(c) = \alpha(1 - (c + 1) \ln \left| \frac{c + 1}{c} \right|)$ на відрізку c значень від 0 до 1 так:

$f(c) = \frac{0,092}{c + 0,2} - 0,46$ (рис. 3.30). Підставивши в цю апроксимацію вираз для S_2 , легко одержати значення параметра c :

$$c = \frac{0,092}{0,46 - \frac{(1 - S_k)t(a_1 - a_0)}{eth}} - 0,2. \quad (3.66)$$

Як видно з рис. 3.31, подібна модель градієнта складу на границях шарів дозволяє досягти непоганої відповідності інтенсивностей піків на експериментальній і змодельованій кривих.

Якщо в перших трьох формах градієнта, що очевидно вибирається як товщина шарів, то у випадку гіперболічного градієнта

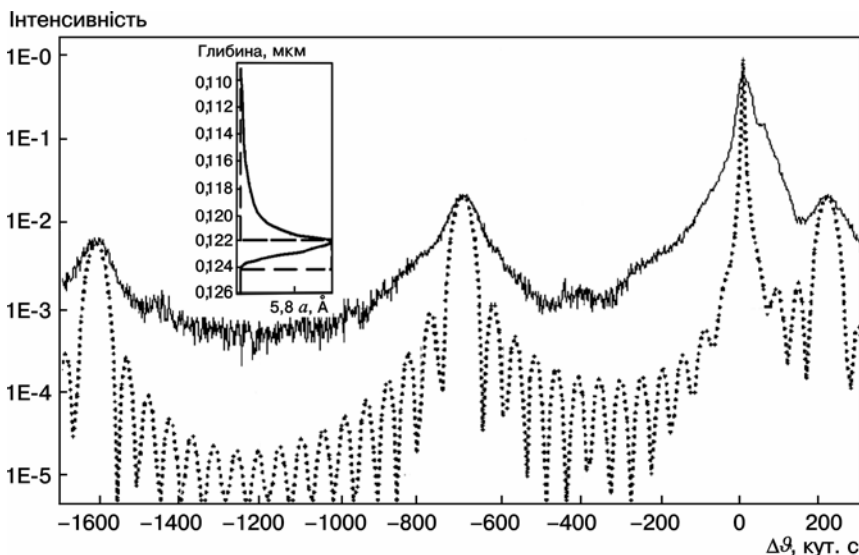


РИС. 3.31. Експериментальна (суцільна) і теоретична (пунктирна) дифракційні криві для багат шарової структури з гіперболічним градієнтом на границях шарів (на вставці)

цей параметр вимагає окремого обґрунтування. Дійсно, зважаючи на рис. 3.28, досить важко сказати, де саме вимірюється товщина InGaAs-шару. На думку авторів, найбільш фізично правильно вибрати цей параметр виходячи з кількості речовини, вирощеної при створенні структури. Тобто будемо вважати, що при вирощуванні в структуру вводиться така кількість InGaAs, яка займає на рис. 3.29 площу, що дорівнює $(a_0 - a_1)t$, де t — товщина шару, яка фігурує в усіх наших моделях. Далі формуємо градієнт складу так, щоб ця площа залишалася постійною (як це робиться описано вище).

Зазначимо, що, якщо для перших трьох моделей товщини шарів $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$ при моделюванні кривої гойдання бралися рівними $26/181 \text{ \AA}$, то для останнього випадку ці товщини були $22,4/184,6 \text{ \AA}$. Тобто розподілені за деяким об'ємом атоми In дають більший внесок в дифракцію, ніж локалізовані в тонкому шарі.

Таким чином, якщо будемо визначати склад вирощених структур методом рентгеноструктурного аналізу, підганяючи промодельовану криву гойдання до отриманої експериментально, і використовувати при цьому припущення про різкість перехідної гра-

ниці між шарами, то можемо зробити неправильні висновки про кількість вирощеного одного або другого матеріалу. Тим самим, склад багат шарової структури визначимо невірно.

Невідповідність експериментальних і підігнаних інтенсивностей в кутовому інтервалі між когерентними сателітами можна пояснити, на думку авторів, впливом дисперсії товщин шарів [52] як в латеральному напрямі (у межах одного шару), так і в нормальному (різні шари можуть мати дещо різну товщину). Крім того, при концентрації індію близькій до 30 % в таких структурах починають виникати квантові точки або квантові нитки (ланцюжки квантових точок, вибудувані в певних кристалографічних напрямках) [37], що також приведе до підвищення фону дифузного розсіяння.

3.10. ОБМЕЖЕННЯ ТА ПРОБЛЕМИ ДОСЛІДЖЕННЯ БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР

Кінцева мета проведення експерименту з розсіяння рентгенівських променів полягає в тому, щоб отримати інформацію про мікроскопічні деформації із дифрагованої інтенсивності. Однак, за винятком деяких спеціальних випадків, фазова інформація втрачається через те, що виміряти можемо лише інтенсивність, а не амплітуду розсіяної хвилі. Тому пряме визначення структури з використанням перетворення Фур'є неможливе. Замість цього ми повинні застосовувати метод, в якому розподіл інтенсивності рентгенівського розсіяння розраховується, виходячи із моделі структури, і розрахований розподіл порівнюється з експериментальним. Послідовно змінюючи структурні параметри, добиваємось найкращого збігу з експериментальними даними і робимо висновок про те, що структура дослідженого матеріалу є структурою даної моделі.

Щоб отримати відповідність між експериментом і результатом моделювання, спочатку знаходиться глобальний мінімум в різниці між двома масивами даних. Коли змінюється багато параметрів, наприклад в надґратках, то в цій різниці з'являється велике число локальних мінімумів. Багато з них можуть бути досить мілкими, і їх важко уникнути. Глобальний мінімум, навпаки, часто дуже глибокий, але він має дуже обмежену область в параметричному просторі. У такому випадку в процесі роботи необхідно сильно наблизитись до правильного розв'язку перед тим, як результат моделювання почне збігатися з результатом експерименту.

Ще однією проблемою, яка виникає при моделюванні даних,

3.10. Обмеження та проблеми дослідження багат шарових структур

отриманих дифракційними методами високороздільної дифрактометрії, є відсутність специфічної інструментальної функції. В аналізі дифракційних даних від полікристалів інструментальну функцію можна визначити, надаючи характерну форму всім дифракційним пікам. Тому є можливість розділити піки, а методи підгонки, такі як методика Рітвелда, можна використовувати, щоб підігнати дифракційні піки, які перекриваються. Такий підхід неможливий у високороздільній дифракції, оскільки форма профілю кривої гойдання суттєво залежить від товщини зразка і його структурної досконалості. Якщо невідомі відповіді на ці питання, то неможливо визначити форму піка.

На завершення відзначимо ще одну важливу обставину. Дифракційна рентгенівська оптика одновимірно-модульованих періодичних структур [50], період яких значно перевищує міжатомні відстані — це фундаментальна проблема когерентного розсіяння хвиль рентгенівського діапазону частот.



ТРИКРИСТАЛЬНА РЕНТГЕНІВСЬКА ДИФРАКТОМЕТРІЯ

4.1. ВСТУП

Двокристальна рентгенівська дифрактометрія дозволяє вимірювати інтенсивність дифракції залежно від одного кутового параметра — кута падіння випромінювання на кристал-зразок. Вона має інтегральний характер, оскільки в стандартній схемі лічильник із широко відкритим вікном фіксує всю інтенсивність, що виходить від кристала незалежно від напрямку відбитого пучка рентгенівських променів.

На відміну від двокристалного, трикристальний дифрактометр дає можливість вимірювати дифраговану інтенсивність залежно від двох кутових параметрів: кутів падіння і відбиття. Це досягається за допомогою використання третього кристала — аналізатора, який може налаштовуватись на різні напрями відбиття.

Зазначимо, що аналіз за напрямками у відбитому пучку може бути здійснений і в одно- і в двокристалних схемах за допомогою вузької щілини на лічильнику. Такий підхід широко використовується в класичному структурному і дифракційному аналізі для сильно порушених кристалів, а також при вимірюванні дифузного розсіяння. Однак двокристальна (а тим більше однокристальна) диференціальна дифрактометрія має низьку роздільну здатність, зумовлену як обмеженою (приблизно 30 кут. с і вище) роздільною здатністю самої щілини, так і залежністю від геометричних розмірів пучка, оскільки в чистому вигляді щілинний аналізатор сканує просторовий, а не кутовий розподіл інтенсивності. Трикристальна рентгенівська дифрактометрія (ТРД) позбавлена цих недоліків.

Трикристальна дифрактометрія є високороздільним методом, що дозволяє детально досліджувати розподіл інтенсивності рентгенівських променів поблизу

бреггівського максимуму [1—3]. Використання кристала-аналізатора після дослідженого зразка забезпечує повне визначення напрямку дифрагованих променів. Це стає можливим тому, що кристал-аналізатор відбиває рентгенівські промені в дуже вузькому кутовому інтервалі. Оскільки дифузна складова дуже розтягнута в кутовому просторі, а когерентна — сконцентрована в певному напрямі, то обидві ці частини дифрагованого випромінювання легко розділяються в прямому чи оберненому просторі. Основна перевага трикристального дифрактометра полягає в можливості сепарування вкладу розорієнтацій і зміни параметра γ (дилатацій) у кристалі. Сканування зразка при фіксованому положенні аналізатора дозволяє вивчати розподіл розорієнтованих областей в кристалі, а сканування зразка з аналізатором (ϑ — 2ϑ -сканування) при співвідношенні швидкостей обертання 1 : 2 дозволяє вимірювати розподіл напруг у зразку (див. параграф 4.4).

Крім того, ϑ — 2ϑ -сканування дозволяє побудувати карти розподілу інтенсивності навколо вузла оберненої γ -ратки. Ці карти є потужним візуальним методом ідентифікації розорієнтацій (мозаїчного кутового розподілу), напруг і дифузного розсіяння в кристалах [4—6].

Питання вимірювання й аналізу дифузного розсіяння не розглядаються у даній монографії (див. праці М.А. Кривоглаза [7, 8], П. Дедерикса [9] і Х. Тринкауса [10]).

4.2. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ ТРИКРИСТАЛЬНОЇ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ

Широке застосування трикристальних схем почалося з праці А. Іїди і К. Коори [2], де було розглянуто особливості одержаної дифракційної картини, можливість поділу дифузного і когерентного розсіяння, введено поняття псевдопиків, показано вплив деяких поверхневих порушень на трикристальні криві відбиття.

На рис. 4.1 показана схема експериментальної установки, яка використовувалась для вимірювань. Для простоти будемо розглядати бездисперсійний варіант (n , $-n$, n), що забезпечує найкращу роздільну здатність. Вплив спектральної розбіжності при використанні дисперсійних схем залишено за рамками даного викладу.

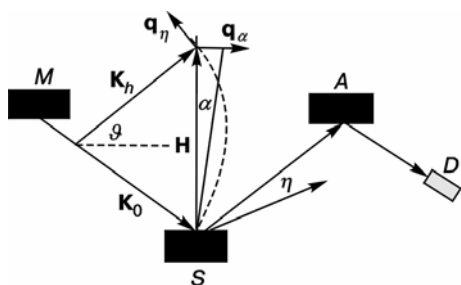


РИС. 4.1. Схема трикристального дифрактометра в бездисперсійній геометрії: *M* — монохроматор, *S* — зразок, *A* — аналізатор, *D* — детектор

Двовимірні карти розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки будуються як функції α (кут відхилення зразка від точного положення Брегга) і η (кут відхилення аналізатора) або $\Delta 2\theta$ (кут відхилення зразка від точного положення при зв'язаному обертанні аналізатор-детектор). Розташування перерізів інтенсивності в оберненому просторі для α і $\Delta 2\theta$, а також варіації компонент розсіювання подані на рис. 4.2. У випадку динамічного розсіювання рентгенівських променів досконалим кристалом когерентний пік витягнутий паралельно нормалі до його поверхні, а для симетричної Брегг-дифракції буде паралельним вектору дифракції H . Мозаїчна складова дифрагованої інтенсивності зразка (дифузна компонента) витягнута вздовж нормалі до вектора дифракції в площині розсіювання [11].

У трикристальній диференціальній схемі рентгенівський промінь, що йде від фокуса рентгенівської трубки, здійснює послі-

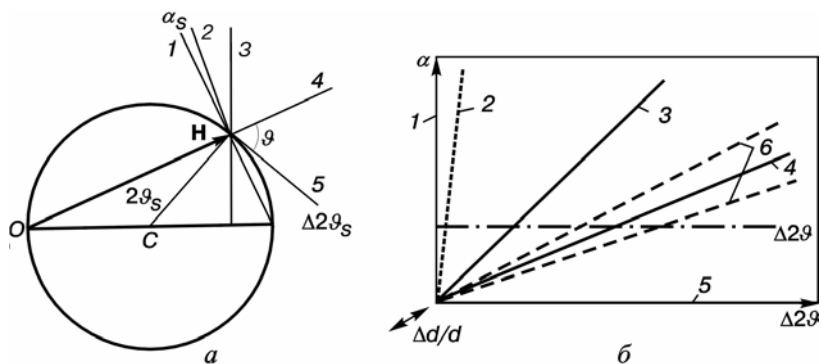


РИС. 4.2. Розміщення осей і варіації компонент розсіювання в оберненому (а) і прямому (кутовому) (б) просторі: 1 — мозаїчна компонента розсіювання; 2 — дифузний пік для 2θ -сканування; 3 — відбиття монохроматора, 4 — когерентна частина розсіювання; 5 — відбиття аналізатора; 6 — нерівності поверхні

4.2. Основні принципи трикристальної диференціальної дифрактометрії

довно дифракційне відбиття від: M — кристала-монохроматора, S — кристала-зразка і A — аналізатора і фіксується лічильником із широким вікном. Нульовим положенням усіх трьох кристалів будемо вважати таке, при якому вони знаходяться в центрі інтерференційної області обраного відбиття (у бреггівському положенні). На практиці у використовуваних схемах монохроматор зафіксований в максимумі відбиття для падаючого на нього променя. Зразок і аналізатор можуть обернутися біля бреггівського положення з відповідними кутами відхилення α і η . Диференціальна відбивна здатність кристала ϵ , взагалі кажучи, функцією двох кутових параметрів: кута падіння ϑ_0 і відбиття ϑ_H .

Для пояснення принципу одержання з використанням ТКС-розподілу інтенсивності дифракції в оберненому просторі, розглянемо симетричний випадок Брега (рис. 4.1) [11]. При повороті зразка на малий кут α вектор \mathbf{H} повертається навколо нульового вузла, виводячи його із сфери Евальда, і переміщує кінець вектора \mathbf{K}'_H вздовж осі q_ω , яка перпендикулярна до \mathbf{H} ($q_\omega \perp \mathbf{H}$), на відстань $q = H\alpha = 2\alpha K \sin \vartheta$ за умови, що $|\alpha| \ll \vartheta_B$. Повертаючи аналізатор на малий кут η , послідовно вводимо в точне положення відбиття промені, що йдуть від зразка в різних напрямках поблизу \mathbf{K}'_H . Іншими словами, робоча точка зміщується вздовж осі q_η , перпендикулярно до \mathbf{K}_H ($q_\eta \perp \mathbf{K}_H$), на відстань $K\eta$ за умови, що $|\eta| \ll \vartheta_B$. Таким чином, маємо косокутну систему координат, де кут між осями, які пов'язані з відбивними площинами кристалів, дорівнює $\pi/2 + \vartheta_B$. Визначивши координати аналізатора η для заданого рівня інтенсивності дифузного піка в профілі ТКС і знаючи кут повороту зразка α , можна встановити положення точки в означеній системі координат (η, α) . Відзначивши такі координати дифузних піків паралельно з реєстрацією еквівалентної інтенсивності для інших точок, можна побудувати контури рівної інтенсивності (ізодифузні лінії), що дають змогу визначити симетрію деформаційних полів дефектів [12, 13].

Диференційна інтенсивність розсіяння плоскої монохроматичної хвилі недосконалим кристалом, що містить у собі однорідно розподілені обмежені дефекти, є сумою когерентної $R_B(\mathbf{q})$ і дифузної $R_D(\mathbf{q})$ компонент для кожного положення зразка, що характеризується вектором \mathbf{q} :

$$R_s(\mathbf{q}) = R_B(\mathbf{q}) + R_D(\mathbf{q}), \quad (4.1)$$

де $\mathbf{q} = \mathbf{K}' - \mathbf{K} - \mathbf{H}$.

Використовуючи вирази для $R_B(\mathbf{q})$ і $R_D(\mathbf{q})$ [14, 15] та інтегруючи їх по кутах виходу про-

меня з кристала, отримуємо інтенсивність, що реєструється детектором ТКС і залежить від кутових змінних (η , α):

$$I_s(\alpha, \eta) = I_B(\alpha, \eta) + I_D(\alpha, \eta). \quad (4.2)$$

У випадку використання бездисперсійної схеми ТКС (n , $-n$, n) когерентну I_B і дифузну I_D складові для кожної точки карти ізодинних ліній ДР можна подати у вигляді

$$I_B(\alpha, \eta) = I_0 \int dx R_M \left\{ b_M^{-1} \left[b_S^{-1}(x - \alpha) - \alpha \right] \right\} R_{\text{ког}} \left[b_S^{-1}(x - \alpha) \right] R_A(x - \eta), \quad (4.3)$$

$$I_D(\alpha, \eta) = I_0 \int dx R_M(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{\text{диф}}(k_x, k_z) R_A(x' - \eta). \quad (4.4)$$

Тут x — кутова координата відхилення заломленого променя від точного положення Бреґґа в площині дифракції; $R_M(\mathbf{q})$ і $R_A(\mathbf{q})$ — коефіцієнти відбиття від монохроматора і аналізатора; b_M і b_S — відомі геометричні параметри асиметрії монохроматора і зразка. Функція $r_{\text{диф}}(q_x, q_z)$ являє собою проінтегрований по вертикальній розбіжності $\varphi = k_y/K$, де $K = 2\pi/\lambda$, диференційний компонент коефіцієнта відбиття:

$$r_{\text{диф}}(q_x, q_z) = \frac{1}{K} \int dq_y R_D(\mathbf{q}). \quad (4.5)$$

Компоненти q_x , q_z лежать в площині когерентного розсіяння (\mathbf{K} , \mathbf{H}), причому q_z направлений перпендикулярно до поверхні кристала, а q_x лежить в площині кристала:

$$q_x = K(2\alpha - \eta) \sin \vartheta_B, \quad q_z = -K \cos \vartheta_B \eta. \quad (4.6)$$

З допомогою ТКС можуть бути побудовані і профілі інтенсивності ДР при фіксованому положенні зразка α як функції кута повороту η кристала-аналізатора ($\vartheta - 2\vartheta$ -сканування). У такому випадку ТКС дозволяє отримати відому криву гойдання, що записується звичайно на ДКС.

Дифузний компонент коефіцієнта відбиття $R_{DS}(\alpha)$ кристала з однорідно розподіленими дефектами, проінтегрований по кутах виходу, може бути поданий у такому вигляді [16]:

$$R_D(\alpha) = F_{\text{дин}}(\alpha) \frac{\mu_{ds}(k_0) \gamma_0}{2\mu_i(\alpha)}, \quad (4.7)$$

$$\mu_{ds}(k_0) = nC^2 E^2 m_0 J_0(k_0), \quad m_0 = \pi a^3 (H |\Psi_h| / \lambda)^2 / 4,$$

4.2. Основні принципи трикристальної диференціальної дифрактометрії

$$J_0(k_0) = b_2 \ln \frac{e(k_m^2 + \mu_i^2)}{k_0^2 + \mu_i^2} + b_3 \left(\frac{k_0^2}{2k_m^2} - 1 \right), \text{ для } |k_0| \leq k_m,$$

$$J_0(k_0) = \left(b_2 - \frac{1}{2} b_3 \right) \frac{k_m^2}{k_0^2}, \text{ для } |k_0| \geq k_m. \quad (4.8)$$

Тут $|\mathbf{H}|$, r , n — відповідно вектор оберненої ґратки, радіус і концентрація дефектів; e — основа натурального логарифма; $k_0 = K \Delta \vartheta \sin(2\vartheta)$; $k_m = 2\pi r_0$; $b_2 = B_1 + B_2 \cos^2(\vartheta/2)$; $b_3 = B_2 \cos^2 \vartheta (1 - 2 \operatorname{tg}^2 \vartheta)/2$. Для моделі сферичних кластерів [17] справедливі вирази: $B_1 = 0$, $B_2 = (4\pi A_{\text{кп}}/a^3)^2$, $A_{\text{кп}} = \Gamma \varepsilon_0^3$, $\Gamma = (1 + \nu)/[3(1 - \nu)]$, де ε — параметр деформації і ν — коефіцієнт Пуассона.

Результати вимірювань на трикристальному дифрактометрі зручно розглядати, використовуючи конструкцію Евальда в оберненому просторі (рис. 4.3) [18]. Нехай поверхня рисунка є перетином оберненого простору площиною розсіяння, в якій лежать напрями падаючого на зразок пучка \mathbf{k}_0 , відбитого \mathbf{k} і нормаль до відбивних площин. Тут і надалі йде мова про компланарну геометрію дифракції, при якій нормаль до поверхні кристала також лежить у площині розсіяння. Позитивною стороною площини будемо вважати ту, в яку спрямований вектор $[\mathbf{k} \times \mathbf{k}_0]$.

Відповідно до кінематичної теорії дифракції бреггівське відбиття спостерігається, коли вектор дифракції

$$\mathbf{S} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \quad (4.9)$$

збігається з вектором оберненої ґратки обраного відбиття \mathbf{H} ($|\mathbf{H}| = 1/d$, де d — міжплощинна відстань) та коли кінець вектора \mathbf{H} (вузол H) знаходиться на сфері Евальда (рис. 4.3, а). Будемо вважати це положення нульовим положенням зразка ($\alpha = 0$). Центральний напрям падаючого на зразок пучка \mathbf{k}_0 закріплений, оскільки монохроматор нерухомий. Що стосується аналізатора, то його нульове положення ($\eta = 0$) визначається тим, що промінь

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{H}$$

падає на нього під бреггівським кутом. Введемо нову систему координат з центром у вузлі H і з двома осями: паралельною ($q_H \parallel \mathbf{H}$) і перпендикулярною ($q_\alpha \perp \mathbf{H}$) вектору оберненої ґратки (рис. 4.3, б).

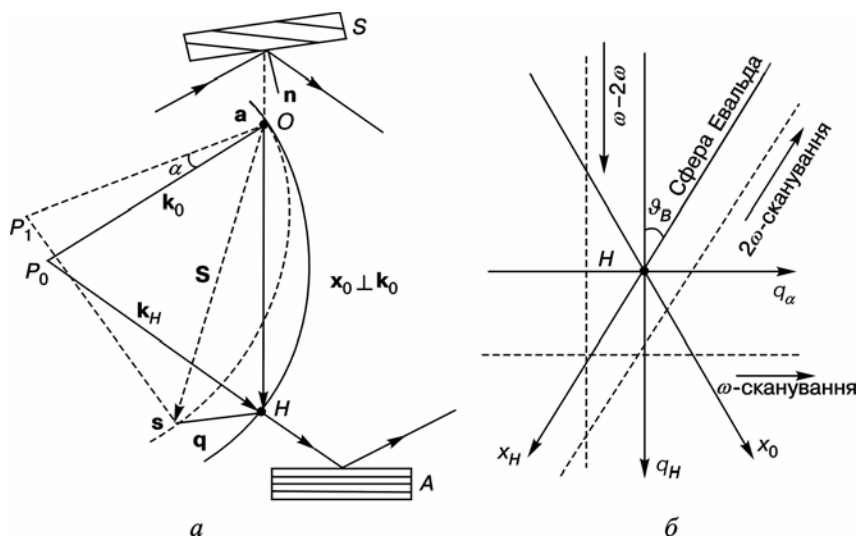


РИС. 4.3. Сфера Евальда і схема напрямку променів в оберненому просторі для трикристальної дифрактометрії (а) і система осей з центром у вузлі оберненої ґратки (б). P_0O і P_0H — хвильові вектори падаючої і відбитої хвиль у брегівському положенні зразка, P_1O і P_1S — після повороту зразка на кут α

Кінець вектора дифракції \mathbf{S} визначає точку спостереження в оберненому просторі, що при використанні монохроматичного випромінювання завжди знаходиться на сфері Евальда. При нульовому положенні всіх трьох кристалів ця точка знаходиться у вузлі оберненої ґратки H . При довільних напрямках \mathbf{k}_0 і \mathbf{k} (поблизу брегівських напрямів) її положення в площині розсіяння можна задавати вектором \mathbf{q} з координатами q і q_α :

$$\mathbf{q} = \mathbf{S} - \mathbf{H}. \quad (4.10)$$

Для монокристала довільної форми і досконалості інтенсивність дифракції не локалізована у вузлі H , а деяким чином розподілена біля нього, тобто є функцією радіуса-вектора \mathbf{q} . Зсув точки спостереження шляхом зміни кутів відхилення зразка й аналізатора дозволяє вимірювати залежність $i(\mathbf{q})$ і вивчати цей розподіл.

При повороті аналізатора вводимо у відбиття хвилі з різними напрямками \mathbf{k} , і точка спостереження зміщується по сфері Евальда, яку у випадку малих кутів можна замінити дотичною, що утворює кут ϑ_B з віссю q_h . При повороті на кут η точка S зміститься на

$$q_\eta = k\eta.$$

4.2. Основні принципи трикристальної диференціальної дифрактометрії

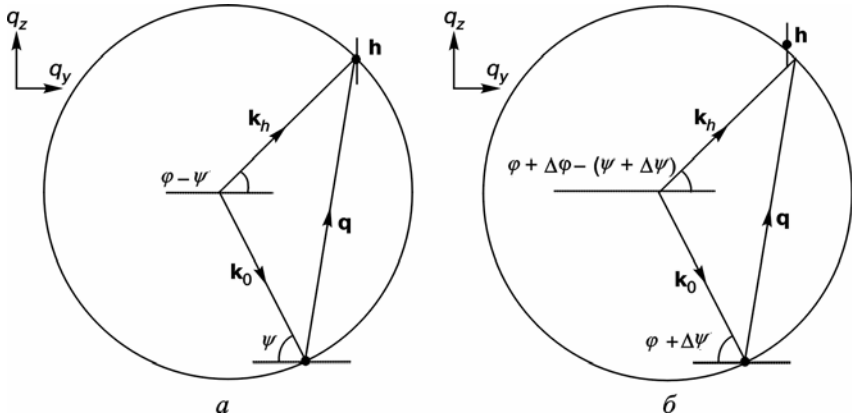


РИС. 4.4. Побудова Евальда: а — в брегівському положенні; б — біля брегівського положення

При повороті зразка виводимо вузол оберненої ґратки зі сфери Евальда чи, оскільки система координат закріплюється в цьому вузлі, повертаємо сферу навколо вузла O (рис. 4.3, а, штрихова лінія). У цьому випадку точка спостереження зміщується по нормалі до вектора \mathbf{H} , тобто по осі q_α . При цьому відрізок, на який вона зміщується, розраховується так:

$$q_\alpha = \mathbf{H}\alpha = 2k\alpha \sin \vartheta_B. \tag{4.11}$$

Вісь q_α є геометричне місце точок, для яких напрям відбитої хвилі фіксований, тобто залишається постійним кут розсіяння 2ϑ .

Загальний випадок асиметричного відбиття дещо складніший і звичайно не приводиться; виклад, наведений нижче, зроблений Вермінгтоном [19]. Відхилення вектора розсіяння \mathbf{q} від вузла оберненої ґратки \mathbf{h} можна вирахувати, виходячи з розгляду побудови Евальда (рис. 4.4). На рис. 4.4, а зображений випадок, коли кут зразка α і кут аналізатора η встановлені так, щоб задовольнити умову Бреґга $2d \sin \vartheta_B = \lambda$. На рис. 4.4, б показано побудову Евальда після того, як кути зразка і аналізатора були змінені відповідно на $\Delta\alpha$ і $\Delta\eta$.

Із геометрії побудови Евальда, показаної на рис. 4.4, б, Δq можна виразити через його декартові складові (q_y, q_z):

$$q_y = 1/\lambda \{ \cos[\eta + \Delta\eta - (\alpha + \Delta\alpha)] - \cos(\alpha + \Delta\alpha) \} -$$

$$- 1/\lambda[\cos(\eta - \alpha) - \cos(\alpha)], \quad (4.12)$$

$$q_z = 1/\lambda\{\sin(\alpha + \Delta\alpha) + \sin[\eta + \Delta\eta - (\alpha + \Delta\alpha)]\} -$$

$$- 1/\lambda[\sin\alpha + \sin(\eta - \alpha)]. \quad (4.13)$$

Розкриваючи тригонометричні члени, рівняння (4.12) і (4.13) перепишемо у вигляді

$$q_y = 1/\lambda\{\cos(\eta - \alpha)\cos(\Delta\eta - \Delta\alpha) - \sin(\eta - \alpha)\sin(\Delta\eta - \Delta\alpha) -$$

$$- (\cos\alpha\cos\Delta\alpha - \sin\alpha\sin\Delta\alpha)\} - 1/\lambda[\cos(\eta - \alpha) - \cos(\alpha)], \quad (4.14)$$

$$q_z = 1/\lambda\{\sin(\eta - \alpha)\cos(\Delta\eta - \Delta\alpha) + \cos(\eta - \alpha)\sin(\Delta\eta - \Delta\alpha) +$$

$$+ (\sin\alpha\cos\Delta\alpha + \cos\alpha\sin\Delta\alpha)\} - 1/\lambda[\cos(\eta - \alpha) - \cos(\alpha)]. \quad (4.15)$$

Якщо $\Delta\alpha$ і $\Delta\eta$ малі, то рівняння (4.14) і (4.15) можна спростити, використовуючи наближення малих кутів: $\sin(\Delta\alpha) = \alpha$ і $\cos(\Delta\alpha) = 1$. Наразі, маємо

$$q_y = 1/\lambda[\sin\alpha\Delta\alpha - \sin(\eta - \alpha)(\Delta\eta - \Delta\alpha)], \quad (4.16)$$

$$q_z = 1/\lambda[\cos\alpha\Delta\alpha + \cos(\eta - \alpha)(\Delta\eta - \Delta\alpha)], \quad (4.17)$$

де для симетричного відбиття

$$\alpha = \vartheta_B, \quad \eta - \alpha = \vartheta_B;$$

для асиметричного відбиття при ковзному падінні

$$\alpha = \vartheta_B - \phi, \quad \eta - \alpha = \vartheta_B + \phi;$$

для асиметричного відбиття при ковзному відбитті

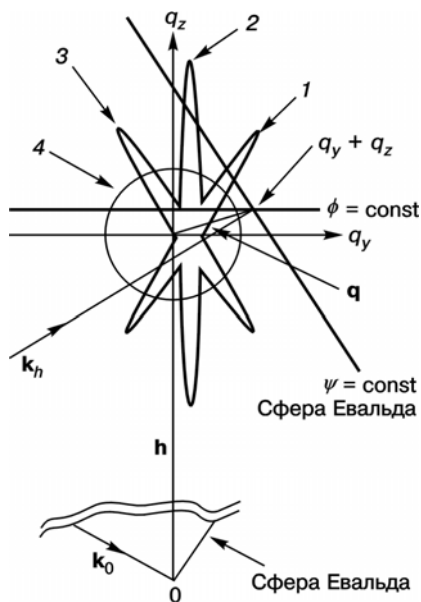
$$\alpha = \vartheta_B + \phi, \quad \eta - \alpha = \vartheta_B + \phi.$$

Тут ϕ — кут між відбивними площинами і нормаллю до поверхні.

Із рис. 4.5 випливає декілька міркувань. Основне динамічне розсіяння від зразка витягнуте вздовж вертикального напрямку q_z , і в кристалі хорошої якості воно має дуже малу ширину в напрямі q_y . Це розсіяння зміщене від вузла оберненої ґратки на поправку на коефіцієнт заломлення. Однак дифузне розсіяння не зміщене, і воно з'являється як слабка, але широка область розсіяння приблизно сферичної форми з центром у вузлі оберненої ґратки.

4.2. Основні принципи трикристальної диференціальної дифрактометрії

РИС. 4.5. Схематична карта розсіяння в оберненому просторі: 1 — полоса від коліматора; 2 — динамічна дифракція від зразка; 3 — полоса від аналізатора; 4 — дифузне розсіяння від зразка. Показані контури рівної інтенсивності. Динамічна дифракція від зразка злегка зміщена від ТОГ і центра дифузного розсіяння за рахунок впливу заломлення



При кутах $\pm \vartheta_B$ на вертикальній осі з'являються витягнуті області, зумовлені обмеженою кутковою роздільною здатністю кристалів коліматора і аналізатора. Ці області були б відсутні, якби на кривих гойдання від цих кристалів не було «хвостів». Вони виникають тому, що при цих положеннях аналізатора і зразка

поряд з істинним сигналом від робочої області оберненого простору проходить невелика кількість інтенсивних сигналів від головного піка крізь «хвости» функції аналізатора. Тому напрями витягнутості цих областей вказують на головний пік і ці напрями знаходять шляхом слабкої зміни положення векторів \mathbf{k}_0 навколо початку координат і \mathbf{k}_h навколо центра сфери Евальда. У системі з високою роздільною здатністю і дуже широким динамічним діапазоном схожі області при дуже низьких рівнях інтенсивності можна інколи спостерігати через розсіяння на повітрі в цій системі, що також викликає погіршення кутової точності [20].

Нарешті зазначимо, що стандартна двокристална чи високороздільна крива гойдання, де немає контролю над $\Delta\varphi$, є по суті горизонтальним скануванням крізь обернений простір, що інтегрує всі інтенсивності вздовж сфери Евальда. Тому легко бачити, яким чином тривісна схема може дати набагато більше інформації [21].

Як було зазначено вище, інтенсивність, яка фіксується в точці q в площині розсіяння, являє собою інтеграл по деякій області оберненого простору і зумовлена кінцевою роздільною здатністю монохроматора і аналізатора, тобто шириною їх інтерференційних областей (у кутах відбиття для першого і кутах падіння для другого).

Крім того, при роботі зі стандартними джерелами рентгенівського випромінювання в точці спостереження вимірюється інтенсивність, проінтегрована по нормалі до площини розсіювання, оскільки вертикальна розбіжність як падаючого, так і відбитого пучків набагато більша ніж кутова роздільна здатність в екваторіальній площині.

Результати вимірювань на трикристальному дифрактометрі можуть бути подані у вигляді розподілу інтенсивності в площині розсіювання шляхом побудови ліній рівної інтенсивності $i(\mathbf{q}) = \text{const}$ чи у вигляді трикристальних кривих дифракції. Однак на відміну від двокристальних кривих, криві на ТРД можуть вимірюватися декількома способами, названими модами сканування. Найчастіше використовуються три із них: ω -сканування, 2ω і $\omega-2\omega$ -сканування. У першому випадку здійснюється обертання зразка при фіксованому кутовому положенні аналізатора. Точка спостереження при цьому зміщується разом зі сферою Евальда уздовж прямих

$$q = -k\eta_0 \cos \vartheta_B = \text{const.} \quad (4.18)$$

При 2ω -скануванні аналізатор обертається при нерухомому зразку ($\alpha = \alpha_0$). Перетин площини розсіювання при цьому відбувається по прямих, паралельних осі q_η :

$$q = -q_\alpha \text{ctg} \vartheta_B + q_0, \quad (4.19)$$

де $q_0 = H\alpha_0 \text{ctg} \vartheta_B$.

При $\omega-2\omega$ -скануванні зразок і аналізатор обертаються зі співвідношенням швидкостей 1 : 2, тобто

$$\eta = -2(\alpha - \alpha_0), \quad (4.20)$$

де α_0 — початковий розворот зразка відносно брегівського положення. Звідси випливає, що точка спостереження зміщується уздовж прямих, паралельних вектору оберненої ґратки

$$q_\alpha = q_{\alpha 0} = \text{const.} \quad (4.21)$$

Трикристальні криві мають досить складну структуру, причому це залежить не тільки від характеру розподілу інтенсивності дифракції зразка навколо вузла оберненої ґратки. Із загального виразу для інтенсивності (4.3), яка вимірюється на ТРД, видно, що максимумами функції $i(\alpha, \eta)$ можуть мати місце, якщо з трьох функцій R_M , R_S і R_A дві одночасно дають максимум, тобто

- 1) $R_M = \max, R_A = \max;$
- 2) $R_M = \max, R_S = \max;$ (4.22)
- 3) $R_A = \max, R_S = \max.$

В умові 1 $\Delta g_0 = 0$, $\eta = -\Delta g_H^s$, і в припущенні плавної зміни R_S в околі вузла H одержуємо шукану інтенсивність розсіяння зразка в точці спостереження q :

$$i(\alpha, \eta) = I_0 R_A R_S(\mathbf{q}). \quad (4.23)$$

Форма і положення відповідного максимуму визначаються характером розподілу $R_S(\mathbf{q})$. Другий і третій випадки зв'язані з максимумами розсіювальної здатності зразка. Якщо $R_S(\mathbf{q})$ приймає максимальне значення тільки у вузлі оберненої ґратки, то з умови 2 випливає, що будемо мати максимум при

$$\alpha = 0. \quad (4.24)$$

Умова з (4.22) дає максимум при

$$\alpha = -\eta. \quad (4.25)$$

Поява першого з цих піків зумовлена тим, що промінь, відбитий в центрі інтерференційної області зразка, попадає на «хвости» роздільної здатності аналізатора. Цей пік не може спостерігатися на кривих 2ω -сканування. Максимум у положенні (4.25) визначається тим, що аналізатор налаштований на промінь, який падає під брегівським кутом від зразка, і відповідними крилами відбиття монохроматора.

Максимуми інтенсивності на ТРД-кривих, викликані «хвостами» відбивної здатності монохроматора й аналізатора, називають звичайно «псевдопіками», враховуючи їх інструментальне походження (рис. 4.5). У площині розсіяння їх інтенсивність локалізована вздовж прямих, що проходять через вузол H під кутами g_B до вектора оберненої ґратки. Максимуми, що відповідають «хвостам» аналізатора, розташовані вздовж $\mathbf{x} \perp \mathbf{k}$, а псевдопіки, які виникають від «хвостів» відбиття монохроматора, — вздовж $\mathbf{x}_0 \perp \mathbf{k}_0$. Якщо в розподілі інтенсивності розсіяння зразка є декілька максимумів (наприклад, для великоблочних чи кристалів епітаксійних систем), то відповідно збіль-

шується і число псевдопіків. Їх інтенсивність буде локалізована уздовж ліній, паралельних \mathbf{x}_0 та \mathbf{x} , і проходити через додаткові вузли оберненої ґратки зразка. Криві дифракції можуть стати дуже складними і розшифрувати їх важко, тому на практиці псевдопіки намагаються пригасити. Кращий спосіб для цього — використання монохроматора й аналізатора з багатократним відбиттям.

Відповідно до динамічної теорії дифракції рентгенівських променів максимум дифракційного відбиття від товстої кристалічної пластини займає деяку область кутів падіння біля брегівського кута (названу інтерференційною), ширина якої пропорційна глибині екстинкції.

Іншими словами, для динамічної дифракції кожному напрямку падаючої хвилі \mathbf{k}_0 буде відповідати такий напрям відбитої \mathbf{k} , що кінець вектора дифракції \mathbf{S} завжди буде знаходитися на нормалі \mathbf{n} , яка проходить через вузол оберненої ґратки.

Отже на ТРД-кривих динамічний чи когерентний максимум фіксується тоді, коли точка спостереження знаходиться на цій нормалі. Записуючи умову

$$\mathbf{q} = q_H \mathbf{n} \quad (4.26)$$

в координатах q_H і q_{α} , з (4.10) одержуємо наступний зв'язок між кутами відхилення аналізатора і зразка:

$$\eta = -\alpha(1 - \gamma_0/\gamma_H), \quad (4.27)$$

де γ_0 і γ_H — напрямні косинуси кутів падіння і відбиття.

При вимірюванні кривих 2ω -сканування когерентний максимум з'являється при куті аналізатора

$$\eta_{\text{ког}} = -\alpha_0(1 - \gamma_0/\gamma_H). \quad (4.28a)$$

В симетричній брегівській геометрії $\gamma_H = -\gamma_0$, і при зміні кута відхилення зразка його положення на 2ω -кривих змінюється за законом

$$\eta_{\text{ког}} = -2\alpha_0, \quad (4.28b)$$

а його форма повторює згортку кривих відбиття монохроматора й аналізатора.

У реальності лінії рівної інтенсивності когерентного розсіяння є смугою, витягнутою уздовж \mathbf{n} , ширина якої зумовлена вихідною

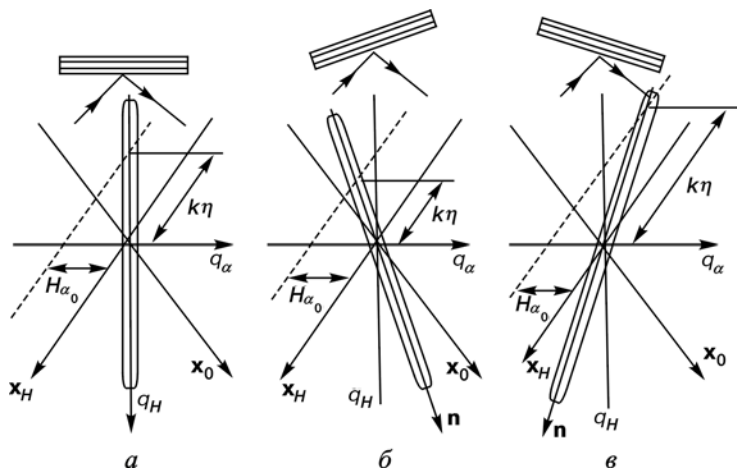


РИС. 4.6. Розподіл когерентної інтенсивності в оберненому просторі для симетричної геометрії Бреґа (а) та асиметричної при $\gamma_0 < |\gamma_H|$ (б) і $\gamma_0 > |\gamma_H|$ (в)

розбіжністю відбиття монохроматора і вхідною — аналізатора. Залежно від геометрії вимірювань траєкторія зсуву точки спостереження при скануванні аналізатора перетинає ці смуги під різними кутами: ближчим до прямого при $|\gamma_H| > \gamma_0$ і більш ковзним при $|\gamma_H| < \gamma_0$ (рис. 4.6), що приводить до різної кутової напівширини динамічного піка (звуженню в першому і розширенню в другому випадку порівняно із симетричною геометрією).

Побудова в оберненому просторі дозволяє одержати форму кривих кристала для будь-якої геометрії дифракції. При кутовому скануванні кінець вектора дифракції (чи точка спостереження) переміщується вздовж визначеної траєкторії. При перетині останньої з нормаллю до поверхні \mathbf{n} на кривих з'являється динамічний максимум, а при перетині з напрямками \mathbf{x}_0 і \mathbf{x} виникають псевдопіки.

4.3. ВИКОРИСТАННЯ ТРИКРИСТАЛЬНОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР. ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ

Основи трикристального диференціального підходу до дослідження епітакійних структур були закладені в роботах [22—25].

Перевага використання ТРД і двовимірному аналізу інтенсивності для дослідження гетероепітакійних систем полягає в тому, що єдиний вузол оберненої ґратки обраного відбиття розщеплю-

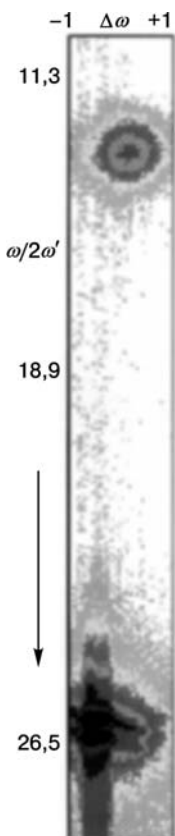


РИС. 4.7. Карта розподілу інтенсивності навколо 004-вузлів оберненої ґратки підкладки і епітаксійного шару

ється на декілька вузлів (центрів відбиття), що належать окремим шарам і підкладці (рис. 4.7). Таке розщеплення викликане розбіжністю складу шарів у гетероструктурах і пов'язаних зі складом деформацій. Іншою особливістю гетероструктур є спрямованість регулярної зміни складу і деформацій (для плоских гетеросистем це нормаль до поверхні). Вплив цих двох обставин на геометричну картину дифракції можна легко побачити, звернувшись до виду інтерференційної функції Лауе (розд. 1), яка описує загальний розподіл інтенсивності дифракції в оберненому просторі (у функції вектора дифракції \mathbf{S}) за кінематичною теорією:

$$I(\mathbf{S}) = \sum_n \exp(i2\pi\mathbf{S}\mathbf{R}_n) = \frac{\sin^2 \pi N_x S_x d_x}{\sin^2 \pi S_x d_x} \frac{\sin^2 \pi N_y S_y d_y}{\sin^2 \pi S_y d_y} \frac{\sin^2 \pi N_z S_z d_z}{\sin^2 \pi S_z d_z}, \quad (4.29)$$

де d — період трансляції прямої ґратки у відповідному напрямі (міжплощинна відстань); N — число періодів.

Три основних властивості інтерференційної функції мають безпосереднє відношення до гетероструктур:

1) головний максимум відбиття існує, коли вектор дифракції збігається з вектором оберненої ґратки $\mathbf{S} = \mathbf{H}$ (знаменники в (4.29) дорівнюють нулю);

2) розмір області оберненого простору, у якій локалізована інтенсивність (розмір вузла), у визначеному напрямі обернено пропорційний розміру кристала в цьому напрямі l , що впливає з вигляду чисельників у (4.29), оскільки мала частка інтенсивності знаходиться в межах головного максимуму, для якого

$$-\pi < S_i N_i d_i < \pi, \quad (4.30)$$

то $S_i = 2/(N_i d_i) = 2/l_i$;

3) крім головного є побічні максимуми (осциляції), період яких також зумовлений розміром кристала у відповідному напрямі.

Для простоти розглянемо спочатку одношарову гетеросистему з однорідною за складом плівкою на товстій підкладці. Очевидно, головному максимуму плівки відповідає інше положення вектора дифракції порівняно з підкладкою. Це положення легко одержати, використавши вираз (4.29). В однорідно деформованій плівці атоми піддані регулярному зсуву щодо положень, які вони займали у ґратці підкладки, і їх координати такі:

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_{n0} + \mathbf{u}_n, \quad (4.31)$$

де компоненти вектора зсувів \mathbf{u} виражаються через компоненти тензора дисторсії \mathbf{U} :

$$u_i = U_{ij}R_j. \quad (4.32)$$

Підставляючи нові координати атомів в (4.32) і підсумовуючи по всіх атомах плівки, одержуємо інтерференційну функцію плівки, де замість аргументів синусів типу $(\pi S_i d_i)$ у знаменнику будуть вирази $(S_i + U_{ij}S_j)d_i$.

Заміняючи вектор дифракції \mathbf{S} на $\mathbf{S}_0 + \Delta\mathbf{S}$ і враховуючи, що в центрі відбиття підкладки $S_0 = h_i/d_i$, де h_i — цілі числа (індекси Міллера відповідного відбиття), при нехтуванні членами другого порядку малості маємо, що центр відбиття (чи вузол оберненої ґратки) плівки віддалений від вузла підкладки на

$$\Delta\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0 = \mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_0, \quad (4.33a)$$

з компонентами

$$\Delta S_i = -\sum U_{ji}S_j. \quad (4.33b)$$

Для нерелаксованої епітаксійної системи деформація створюється тангенціальними напругами невідповідності. Якщо нормаль до поверхні збігається з одним з напрямів високої симетрії в кубічному кристалі $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, то в тензорі дисторсії тільки компонент U_{zz} не дорівнює нулю (це не буде мати місця для довільної орієнтації поверхні, коли тангенціальні напруги можуть привести до наявності зсувних компонентів, наприклад для орієнтації $\langle 311 \rangle$ [26]). У цьому випадку вузол оберненої ґратки плівки може бути зміщений щодо вузла підкладки тільки в напрямі нормалі \mathbf{n} до поверхні:

$$\Delta\mathbf{H} = \Delta H_{zz} = U_{zz}H_{zz} \quad (4.34)$$

і може бути зафіксований тільки для рефлексів, що мають нормальний компонент вектора дифракції.

У симетричній бреггівській геометрії, де $\mathbf{H} \parallel \mathbf{n}$ — вектори оберненої ґратки, плівки і підкладки розрізняються тільки за довжиною, а відповідні відбиття — тільки за міжплощинною відстанню та бреггівським кутом. Для асиметричних бреггівських відображень вектор \mathbf{H} при переході від підкладки до плівки змінюється не тільки за довжиною, а і за напрямом, що викликано розворотом відбивних косих площин плівки щодо площин підкладки (явище тетрагональної дисорсії).

Якщо відбивні площини утворюють кут φ з поверхнею, то у системі координат (q_H, q_α) прив'язане до вектора оберненої ґратки зміщення центра відбиття плівки щодо підкладки буде визначатися так:

$$q_H = -HU_{zz} \cos^2 \varphi, \quad q_\alpha = HU_{zz} \sin \varphi \cos \varphi. \quad (4.35)$$

По суті кажучи, через заломлення центр відбиття за динамічною теорією не знаходиться точно у вузлі оберненої ґратки, а зміщений по нормалі до поверхні на величину δH , яка залежить від властивостей розсіювального кристала і геометрії відбиття. Тому положення вузла оберненої ґратки оцінене з максимуму відбиття відрізняється від істинного на δH . Однак цю величину можна вважати однаковою для підкладки і епітаксійної плівки, оскільки через близькість параметрів ґратки напрямні косинуси γ_0 і γ_H практично ті ж самі, а розходження в розсіювальній здатності для стандартних відбиттів відіграє малу роль порівняно з кутовими зсувами, викликаними деформацією. Проте значення різниці в заломленні може стати істотним фактором при використанні різко асиметричних відображень [19].

Оскільки в плоских гетероструктурах епітаксійні шари мають розміри, обмежені тільки по нормалі до поверхні, то з другої властивості інтерференційної функції видно, що розподіл інтенсивності плівки буде витягнутий в тому ж напрямі ($l_z = t \ll l_x, l_y$), а за третьою властивістю на цій же лінії розташуються центри побічних максимумів. Якщо, крім того, врахувати, що і динамічна інтенсивність відбиття підкладки також локалізована уздовж \mathbf{n} , то для нерелаксованої системи з когерентною гетерограницею існує єдиний вузьконаправлений розподіл дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі.

Таким чином, складна форма кривих відбиття, що спостерігається для кристалів з неоднорідною зміною деформації по глибині, сприймається в оберненому просторі у вигляді розподілу інтенсивності вздовж напрямку нормалі до поверхні кристала.

Локалізація інтенсивності вздовж одного напрямку приводить до того, що на ТРД-кривих, вимірених способом як ω , так і 2ω -сканування, буде спостерігатися один когерентний пік при будь-

якому куті непогодження. Його кутове положення визначається співвідношенням (4.27). Для одержання повної картини дифракції необхідно виміряти цілу серію кривих яким-небудь способом сканування. Безпосередньо крива дифракційного відбиття для когерентної системи, що аналогічна двокристалній кривій відбиття, може бути отримана тільки в одному випадку — у симетричній бреггівській геометрії шляхом $\omega-2\omega$ -сканування, коли під час вимірювання точка спостереження зміщується вздовж вектора \mathbf{H} , тобто по області локалізації інтенсивності дифракції, оскільки $\mathbf{H} \parallel \mathbf{n}$.

Тому для епітаксійної системи за відсутності структурних дефектів ТРД не дає якої-небудь нової інформації порівняно з двокристалною дифрактометрією. Однак ситуація різко змінюється при переході до вивчення релаксованих гетероструктур. Аналіз двовимірного розподілу інтенсивності в площині розсіяння дозволяє не тільки виявити взаємне розташування центрів відбиття підкладки й окремих шарів і тим самим визначити компоненти середнього тензора дисторсії, а й одержати більш повну інформацію про структурні порушення, що виникають у результаті релаксації.

Процедура аналізу частково релаксованих структур дає можливість отримати значну кількість інформації. Типовий розподіл інтенсивності в оберненому просторі для частково релаксованих структур поданий на рис. 4.8, з якого макроскопічний нахил може бути отриманий з 004-відбиттів, тому що поверхнева нормаль спрямована вздовж [001].

Ці карти також дають параметр ϵ ратки вздовж напрямку [001] порівняно з підкладкою. Відбиття 115 містять у собі компоненти параметра ϵ ратки в площині, оскільки нахил площин і перпендикулярна деформація є відомі, останні можуть бути отримані з [28]. Так, у цій стадії макроскопічний нахил (враховуючи два ортогональних внески), очевидні параметри ϵ ратки, нормальні і в поверхневій площині, можна отримати прямим способом, тоді як мікроскопічний нахил і бічні довжини кореляції розрізняються менше. Цей останній пункт будемо розглядати більш ретельно. Ідеально карта оберненого простору повинна моделюватися, але це поза межами даного викладу, і тому розглянемо більш прагматичний підхід.

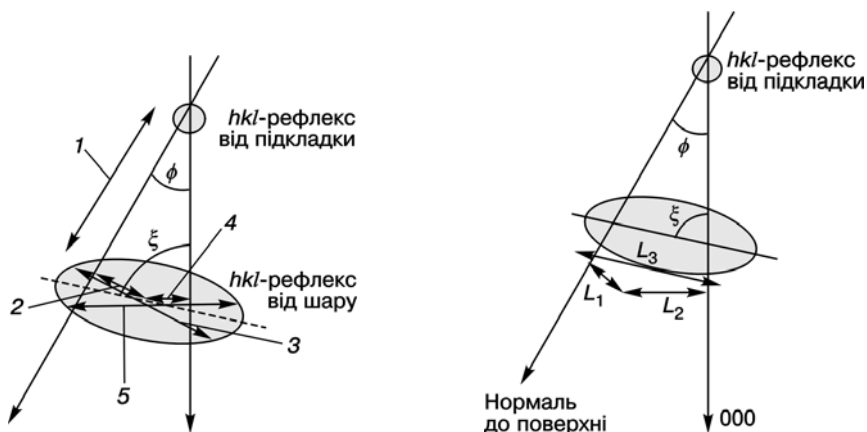


РИС. 4.8. Схема розподілу інтенсивності в дифракційному просторі для гетероструктури з частковою релаксацією: 1 — різниця параметрів ґратки, перпендикулярних до поверхні; 2 — різниця параметрів ґратки в площині; 3 — латеральна довжина кореляції; 4 — макронахили; 5 — мікронахили

РИС. 4.9. Схема, яка показує можливість визначення параметрів структури з характеристик розподілу інтенсивності в оберненому просторі

Мікроскопічний нахил для областей зразка, які мають однакові параметри ґратки, буде перпендикулярним до радіального напрямку, тоді як кожна довжина кореляції в площині буде перпендикулярна до нормалі до поверхні (рис. 4.8). Тому при вимірюванні КОП інтенсивності розсіяння від кристалічних площин, які розташовані вздовж нормалі до поверхні, ці різні компоненти можуть бути відділені. Потрібно пам'ятати, однак, що мозаїчні блоки, які впливають на довжину кореляції, через їх кінцевий бічний розмір також впливають на дифракцію за рахунок розширення їх відносних орієнтацій. Повна форма кривих тоді стає досить складним спотворенням у двох вимірах. Розглянувши розширення через мікроскопічний нахил і кінцеві розміри, можна розділити ці два ефекти.

З діаграми на рис. 4.8 видно, що є два внески в ширину профілю, а саме мікроскопічний нахил і бічні довжини кореляції. Унаслідок ефекту змазування і скручування описана вище форма вузла буде приблизно еліптичною відносно осі, що є проміжною між цими двома крайніми випадками. Згідно з тригонометричними співвідношеннями (рис. 4.9) з відношення цих двох внесків маємо

$$\frac{\text{Латеральна довжина кореляції}}{\text{Мікроскопічні нахили}} = \frac{L_1}{L_2} = \frac{\cos \xi}{\cos(\phi + \xi)} \quad (4.36)$$

та вимірне розширення L_3 в термінах L_1 задається так:

$$\frac{L_3}{L_1} = \frac{\sin \phi}{\cos \xi}, \quad (4.37)$$

і, отже, із цих співвідношень індивідуальні внески L_1 і L_2 можуть бути отримані в ω -шкалі. Кут ξ є кутом між лінією через вісь еліпса профілю шару і радіальним напрямом до джерела (рис. 4.9).

Походження латеральної довжини кореляції є простим (ΔS_g), де

$$\Delta \omega_{L_1} = L_1(\cos \phi + \sin \phi \operatorname{tg} \vartheta),$$

$$\Delta(2\omega')_{L_1} = \frac{L_1 \sin \phi}{\cos \vartheta}. \quad (4.38)$$

Тут мікроскопічні нахили записуються у вигляді

$$\Delta \omega_{L_2} = L_2.$$

Більш цікаві інформативні картини двовимірних карт розсіяння отримуються при переході до асиметричних відбиттів. На рис. 4.10 наведено розподіл інтенсивності в оберненому просторі навколо вузла 224 для епітаксійної системи. Як бачимо, основна частка інтенсивності локалізована навколо двох вузлів H_0 і H_1 , що відповідають бреггівським положенням підкладки і плівки. Ці вузли знаходяться на лінії, яка паралельна нормалі до поверхні, що свідчить про відсутність релаксації в даній системі (тангенціальна невідповідність міжплощинних відстаней дорівнює нулю). Контури, які витягнуті вздовж цієї лінії, — це лінії когерентної інтенсивності. Поряд з цими ділянками розподілу інтенсивності спостерігаються контури, що витягнуті вздовж лінії, паралельної поверхні зразка. Це контури дифузного розсіяння. А їх асиметрія в розподілі пов'язана з анізотропією

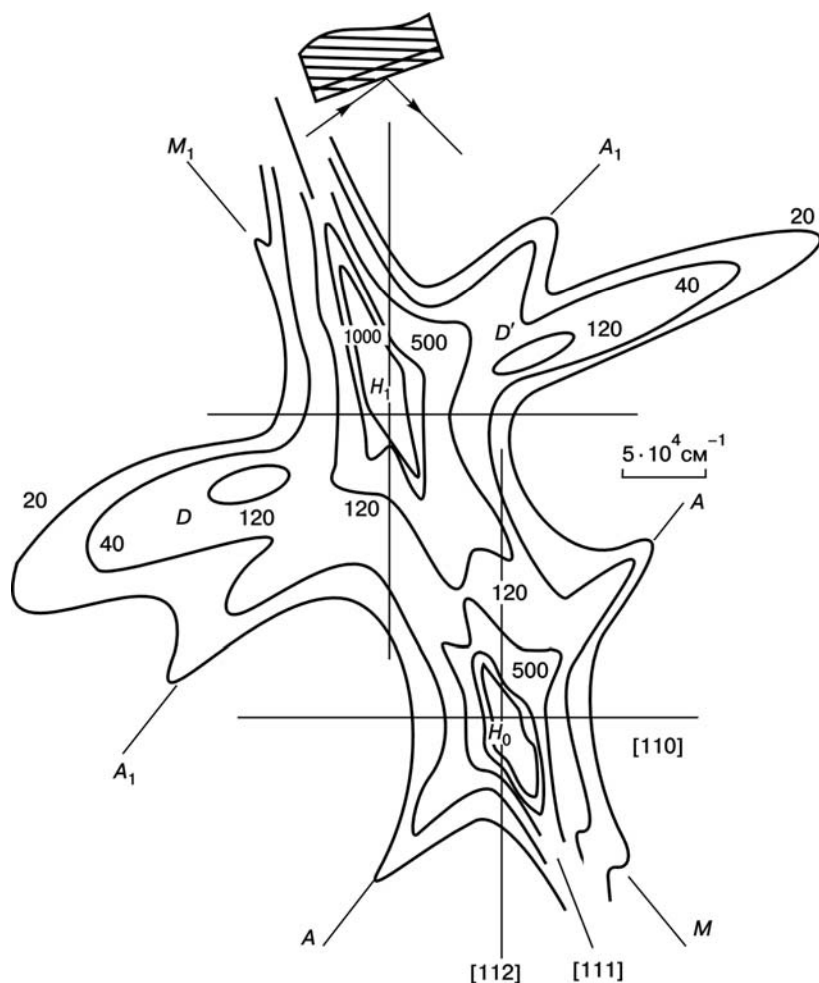


РИС. 4.10. Розподіл інтенсивності в площині дифракції для асиметричного відбиття 224 із ковзним кутом падіння

полів зміщень навколо дефектів [29]. У даному випадку форма витягнутих ізодинфузних контурів уздовж поверхні повинна відповідати тетрагональному характеру деформації.

4.4. РОЗПОДІЛ ДЕЗОРІЄНТАЦІЙ І ДЕФОРМАЦІЙ ҐРАТКИ

Тривісне розсіяння дає можливість визначити різницю між дезорієнтаціями і дилатаціями. У цьому можна впевнитись, розглянувши зразок, поданий на рис. 4.11, який містить у собі області, дезорієнтовані відносно одна одної, тобто субзерна і області, деформовані або непогоджені, наприклад потрійні шари. Згідно із законом Бреґґа кут розсіяння визначає міжплощинні відстані d , які будемо досліджувати. При обертанні зразка області з різною дезорієнтацією будуть послідовно задовольняти дифракційні умови і розсіяна інтенсивність дасть нам критерій розподілу дезорієнтацій. Области кристала, для яких міжплощинні відстані розрізняються, ніколи не викличуть появи сильного розсіяння у випадку, якщо повертається тільки один зразок.

Уявимо, що здійснюється дифракційний експеримент, в якому зразок і аналізатор скануються синхронно. Зокрема, аналізатор сканується зі швидкістю вдвоє більшою, ніж зразок (ϑ — 2ϑ -сканування), і обидва починають рухатися від нульового положення. Припустимо, що область зразка з параметром ґратки d встановлена у відбивне положення. Тоді, оскільки аналізатор виставлений під подвійним значенням кута відбиття, детектор зафіксує інтенсивність відбиття. Тепер, якщо здійснити зв'язане ϑ — 2ϑ -сканування, то жодна з областей зразка, що також має параметр ґратки d , але дезорієнтована відносно початкової області, ніколи не дасть відбиття, яке попадає в детектор; положення аналізатора ніколи не буде точним (на відміну від попереднього

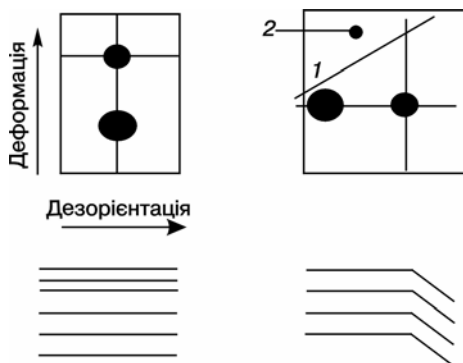


РИС. 4.11. Тривісні вимірювання, наведені в реальному і оберненому просторі: 1 — апертура двовісного сканування; 2 — апертура тривісного

прикладу). Однак інша область зразка з параметром 'ратки d' може попасти в положення, де задовольняються умови Бреґґа. Тепер аналізатор знаходиться під подвійним значенням цього кута і інтенсивність попадає в детектор. У цьому випадку реєструється інтенсивність лише від певних частин кристала, але для сильно порушених матеріалів, таких як арсенід галію на кремнії або вузькозонні сполуки A^2B^6 , це дає можливість отримати потрібний критерій для оцінки області параметрів 'ратки, які існують у зразку. У випадку потрібних сполук, таких як кадмій—ртуть—телур, це дозволяє отримати критерій для оцінки області змін складу незалежно від області дезорієнтацій.

Зазначимо також функції роздільної здатності в оберненому просторі для дво- і тривісних вимірювань. На двовісних кривих гоїдання (як було показано) неможливо визначити різницю між дезорієнтаціями і дилатаціями, хоча вони являють собою дуже різні типи дефектів. Тривісна функція роздільної здатності в площині дисперсії є перетином двох векторів (падаючого і дифрагованого пучків), розтягнутих на кутову ширину монохроматора і аналізатора відповідно. Подальше погіршення роздільної здатності виникає в площині, нормальній до рисунка, і зумовлене вертикальною розбіжністю, а остання складова функції роздільної здатності — це розподіл за довжинами хвиль. Таке погіршення змінює довжини векторів падаючого і дифрагованого пучків.



ДИФРАКЦІЯ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ

З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

5.1. ВСТУП

Самоорганізований ріст наноострівців віднедавна став досить великим полем для досліджень, головним чином, через їх використання як можливих пристроїв для оптоелектроніки [1]. Ці островці отримуються гетероепітаксійним вирощуванням з малою різницею сталих кристалічної ґратки підкладки і осажденного матеріалу. Результуюча деформація на границі поділу підкладка/плівка в підсумку приводить до утворення самоорганізованих островців, при відомому режимі вирощування Странські—Крастанова [2]. Характеристика морфології цих островців проводиться звичайно з використанням сканувальних методів мікроскопії чи розсіяння рентгенівського випромінювання. Останній має переваги, оскільки може використовуватись навіть для прикритих островців, і вся поверхня зразків може бути проаналізована зі значно кращою статистикою для усереднених значень. Рентгенівське розсіяння використовується для визначення обох параметрів: розмір і форма островців при використанні ковзної геометрії рентгенівських променів при малих кутах падіння GISAXS [3, 4]. Крім цього, рентгенівські промені можуть проаналізувати внутрішню кристалічну структуру островців, їх орієнтацію і стан деформацій при використанні в дифракції ковзаючого падіння [5] чи кристалічних стержнів перерізу рентгенівського випромінювання CTR [6,7]. Аморфне оксид-не покриття плівок островців, наприклад, може також бути відділене від кристалічної структури їх центральної частини. При аналізі CTR кути між гранями островців можуть бути визначені з більш високою точністю, ніж в сканувальній зондовій мікроскопії. Однак інтерпретація даних розсіяння є менш прозорою,

ніж в реальних просторових зображеннях і потребує відповідної теорії.

Раніше GISAXS-дані були проаналізовані в борнівському наближенні (BA) для визначення структури острівців малих розмірів [8]. При застосуванні DWBA-теорії в методі GISAXS до трикутних острівців германію на Si(111) поверхні було показано, що вона може використовуватись і в області кутів, близьких до повного зовнішнього відбиття на дуже гладких поверхнях, тобто, коли відбивна здатність підкладки висока.

Система самоорганізованих КТ із впорядкованою структурою у вертикальному й латеральному напрямках мало вивчена, оскільки її одержання є дуже складним технологічним завданням. Тому вивчення таких систем важливо з погляду як визначення параметрів таких об'єктів, так і впливу впорядкування системи квантових точок на характер розсіяння РП.

5.2. АНАЛІТИЧНА МОДЕЛЬ ВЕРТИКАЛЬНОГО ВПОРЯДКУВАННЯ КВАНТОВИХ ТОЧОК У БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ

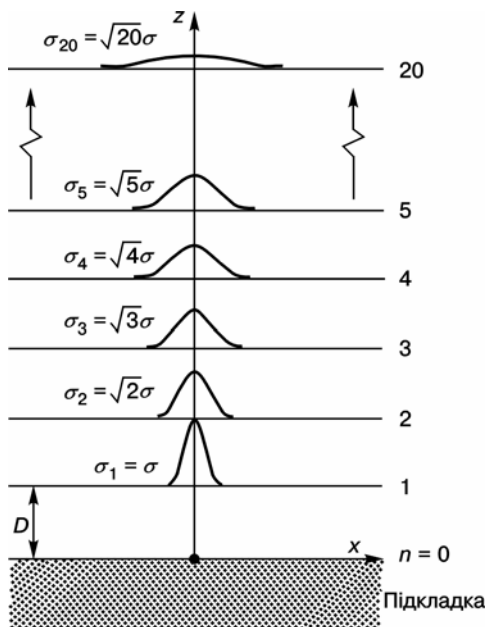
Горизонтальні варіації у вертикальній упаковці квантових точок є частково відомими з детерміністичних умов, які ґрунтуються на різних взаємодіях між КТ. З аналітичної точки зору повне трактування «мікроскопічної» еволюції точкових колонок часто є недостатнім. Прогрес у техніці вирощування дозволяє характеризувати серії зразків і порівнювати великий масив параметрів.

Використовуючи відносні випадковості в розташуванні першого шару точок на підкладці, усереднення проводять по деякому ансамблю точок, яке описує еволюцію середніх значень в колонках, де латеральні зміщення будуть випадковими за природою. Для опису розповсюдження від одного бішару до іншого припускається розподіл Гаусса в горизонтальних відхиленнях від основної реперної точки. Якщо взаємодія між двома сусідніми шарами є незначною, то ширина латерального розподілу точок щодо нижніх точок збільшується для випадкового розподілу так:

$$\sigma_n = \sqrt{n}\sigma, \quad (5.1)$$

де n є число бішарів, починаючи з $n = 0$; σ — параметр розподілу горизонтальних зсувів від шару до шару. Ідея середнього відхилення від досконалого пакування σ в дійсності охоплює усереднену

РИС. 5.1. Модель латеральних відхилень положень квантових точок від середнього значення в багатшаровій структурі



якість вертикального вирівнювання точок. На рис. 5.1 подано цей процес для зразка з 20 шарами періодом D . З кінематичної точки зору повна відбивна здатність від БШС з квантовими точками є добутком чотирьох факторів:

- 1) пара функцій, яка описує падаючу і вихідну хвилі через поверхню;
- 2) формфактор точки, який модулює повну інтенсивність;
- 3) латеральних кореляцій;
- 4) функції, яка описує вплив стовпця точок.

Подальший аналіз зосередимо на функціональній залежності інтенсивності від вертикальної зміни вектора \mathbf{q}_z рентгенівських променів. Явища кореляції в площині враховуються постійним множником для фіксованої латеральної зміни $q_{||}$ і тому не розглядаються. Коефіцієнти форми і момент імпульсу показують повільну варіацію вздовж \mathbf{q}_z порівняно з явищами надструктури. Хоча вони були б необхідні при повному фітуванні інтенсивності розсіяння. Однак можна отримати параметр σ із значення напівширини брегівських піків вздовж \mathbf{q}_z , де інші параметри приводять лише до монотонного фону і тому можуть бути виключені. Дифузне розсіяння від мікрошорсткостей, як показують оцінки, є ефектом меншого порядку порівняно з розсіянням від точок, особливо на епітакційно вирощених поверхнях поділу. Кінцева задача — це визначення структурного множника усередненого стовпця точок. Підсумовування фази по комплекту укладок з N точок дає усереднену амплітуду розсіяння в $q_{||}$ і \mathbf{q}_z , яка буде нормалізована на формфактор одної точки:

$$F_N(q_z, q_{||}) = \sum_{\text{пачка}} e^{iq_r} e^{-\mu(N-1-n)} = \sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_z D n} \left\langle e^{iq_{||} x} \right\rangle_{\text{шар}} e^{-\mu(N-1-n)}, \quad (5.1a)$$

де вертикальне положення підсумоване для ідеальної кореляції; x — латеральне відхилення контрольної точки для кожного стовпця. Безрозмірний коефіцієнт затухання μ повинен урахуватись, щоб описати втрати інтенсивності в пучку рентгенівського випромінювання від одного подвійного шару до іншого. Усереднення виконується по всіх точках одного шару внаслідок інтегрування за розподілами латеральних зміщень $P(x, n)$:

$$F_N(q_z, q_{||}) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_z D n - \mu n} \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{iq_{||} x} P(x, n) dx =$$

$$= \sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_z D n - \mu n} \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{iq_{||} x} \left(\frac{e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{n\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi n\sigma}} \right) dx. \quad (5.2)$$

Оцінка інтегралу проводиться для скінченних сум комплексних фаз, які легко перетворюються так:

$$F_N(q_z, q_{||}) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-n(\sigma^2 q_{||}^2 - iq_z D - \mu)} = \frac{1 - e^{N(iq_z D - \sigma^2 q_{||}^2 - \mu)}}{1 - e^{(iq_z D - \sigma^2 q_{||}^2 - \mu)}}. \quad (5.3)$$

Структурний фактор може бути перетворений до такого вигляду:

$$S_N(q_z, q_{||}) = |F_N(q_z, q_{||})|^2 = e^{-\sigma^2 q_{||}^2 (N-1)} \frac{\sin^2 \frac{q_z N D}{2} + \sinh^2 \frac{\sigma^2 q^2 N + \mu}{2}}{\sin^2 \frac{q_z D}{2} + \sinh^2 \frac{\sigma^2 q^2 + \mu}{2}}. \quad (5.4)$$

Для обґрунтування пояснення цих результатів виберемо $\mu = 0$. Для $\sigma = 0$ вираз (5.4) зводиться до звичайної формули Лауе для обмеженої ґратки. Коли $\sigma \neq 0$, інтенсивність розсіяння вздовж дзеркальної частини при $q_{||} = 0$ не відрізняється від ідеального гладкого пучка. Лише дифузне розсіяння при $q_{||} \neq 0$ впливає на латеральне відхилення від досконалого впакування. Функціональна залежність структурного фактора від $q_{||}$ показана на рис. 5.2 при різних σ $q_{||}$ для випадку 20 мультишарів. Можна відзначити три важливих випадки розподілу, який описується формулою (5.4):

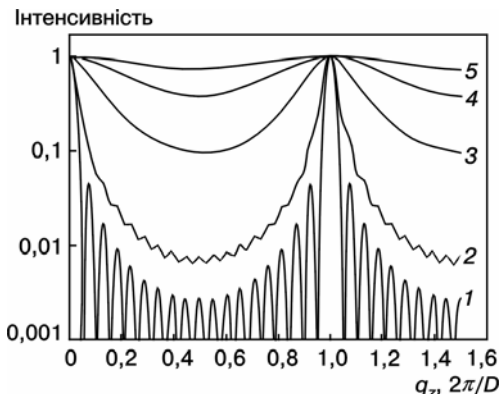


РИС. 5.2. Модифікована функція Лауе, яка описує розсіяння точковими стовпцями при різних значеннях $\sigma q_{||}$: 1 — 1,6; 2 — 1,2; 3 — 0,8; 4 — 0,4; 5 — 0

1. Осциляції повної товщини зникають з ростом $q_{||}$. У той час як їх амплітуда $\Delta S_{N, \text{товщ}}$ дорівнює 1 за умов дзеркального відбиття, воно перетворюється на нуль:

$$\Delta S_{N, \text{товщ}} \approx 2e^{-\sigma^2 q_{||}^2 N} \text{ для } \sigma q_{||} \gg 1. \quad (5.5)$$

Тому для великих N товщинні осциляції будуть обмежені значеннями $\sigma q_{||}$ меншими ніж $N^{-1/2}$.

2. Відносна інтенсивність між двома головними максимумами зростає з $q_{||}$. Усереднюючи швидкі осциляції в першому доданку чисельника рівняння (5.4), отримуємо контрастність

$$\frac{S_N^{\max} - S_N^{\min}}{S_N^{\min}} = \frac{\text{tgh}^2(1/2N\sigma^2 q_{yy}^2)}{\text{tgh}^2(1/2\sigma^2 q_{yy}^2)}. \quad (5.6)$$

Для малих аргументів, коли пікова інтенсивність апроксимується як N^2 , контраст повільно зменшується як біквдрат $\sigma q_{||}$, тоді як для великих значень $\sigma q_{||}$ зменшення експоненційне, але не залежить від числа бішарів:

$$\frac{S_N^{\max} - S_N^{\min}}{S_N^{\min}} = \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{4}\sigma^4 q^4\right) N^2, & \sigma q \leq 1/\sqrt{N}, \\ 2e^{-\sigma^2 q^2}, & \sigma q \geq 1. \end{cases} \quad (5.7)$$

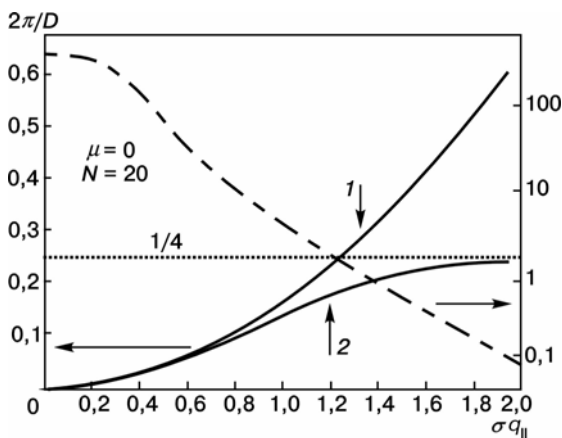


Рис. 5.3. Напівширина максимумів, розрахована з рівнянь (5.9) і (5.8), відповідно (1) та (2), а також контрастність, розрахована з (5.6)

Контраст від такої багатошарової структури, показаний на рис. 5.3. НШ для q_z є обвідною товщинних осциляцій і збільшується з $q_{||}$ до насичення, яке відповідає максимально можливому значенню $1/4$ оберненого періоду надструктури. У цій точці функціональна залежність огинає відповідно осциляції, викликані одним бішаром над рівнем фону. НШ, яку можна оцінити з відповідних мінімумів інтенсивності між бреггівськими максимумами, може бути розрахована аналітично:

$$\Delta q_z^{HWHM} = \frac{1}{D} \operatorname{arccos} \operatorname{sech}(\sigma^2 q^2 + \mu) \quad (5.8)$$

з урахуванням фактора поглинання. При апроксимації для малих значень $q_{||}$ в напрямі q_z напівширина зростає квадратично латеральному вектору:

$$\Delta q_z^{HWHM} = \frac{\sigma^2}{D} q_{yy}^2 + \frac{\mu}{D}. \quad (5.9)$$

На рис. 5.3 наведено розрахунки за рівнянням (5.8) разом з апроксимацією (5.9), для якого відхилення від точного виразу менше ніж 1 % для $\sigma q_{||} \leq 0,5$. Підтвердженням (5.9) є більш зручний шлях для визначення параметра σ з експериментальних даних.

5.3. ВПЛИВ ТРИВИМІРНОГО ВПОРЯДКУВАННЯ ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУР НА РОЗПОДІЛ ДИФРАГОВАНОЇ ІНТЕНСИВНОСТІ В ОБЕРНЕНОМУ ПРОСТОРИ

Просвітлювальна електронна мікроскопія (ПЕМ) і рентгєнівська дифракція (РД) чутливі до форми та до напруг, й розділення цих двох ефектів — головна проблема в аналізі експериментальних даних. Такі методи дослідження, як атомний силовий мікроскоп (АСМ) або сканувальний тунельний мікроскоп (СТМ), нечутливі до напруг в ґратці, і крім того, вони можуть досліджувати лише вільну поверхню зразка. На відміну від СТМ, РД — нелокальний метод, тому що досліджуються параметри структури, усереднені за областю опромінення. З розподілу розсіяної інтенсивності в оберненому просторі може бути отримана інформація щодо форми та розподілу напруг в наноструктурах (рис. 5.4, а).

Дифрагована інтенсивність у даному випадку може бути виражена як функція вектора розсіяння: $\mathbf{Q} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$, де $\mathbf{K}_{f,i}$ — векто-

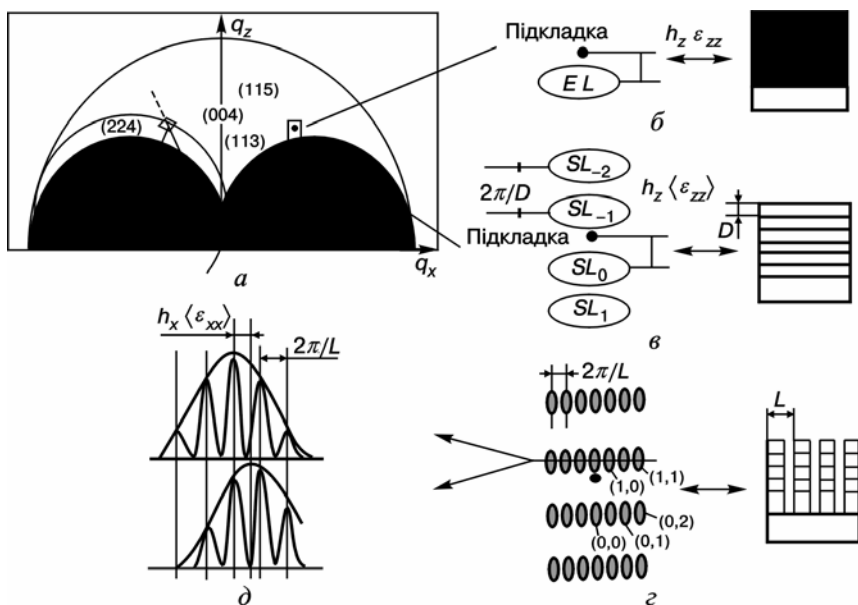


РИС. 5.4. Схематичне зображення розподілу інтенсивності в оберненому просторі для компланарної дифракції (а), а також для різних структур: б — епішар; в — надґратка; з — надґратка з дротами

ри первинної і дифрагованої хвиль відповідно. Латеральні структури в $H\Gamma$ — дуже маленькі, тому динамічні дифракційні ефекти відіграють тут незначну роль і ними можна знехтувати [9]. Тоді розподіл дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі $I(\mathbf{Q})$ пропорційний квадрату абсолютного значення фур'є-перетворення електронної густини в зразку. На електронну густину впливають як латеральна форма зразків, так і поле зміщення атомів з положення рівноваги $u(\mathbf{r})$ в зразку, тобто поля деформацій в шарах. Останній фактор визначається його добутком $\mathbf{h}u(\mathbf{r})$ на дифракційний вектор \mathbf{h} . Це дозволяє відділити вплив форми і напруг на розподіл дифрагованої інтенсивності $I(\mathbf{Q})$ на картах оберненого простору (КОП).

Розподіл інтенсивності навколо точок оберненої ґратки (ТОЇ) епішарів, які виростають псевдоморфно на підкладці, наведений на рис. 5.4, б. Відстань між піками відбиття шару та підкладки визначається вертикальною напругою $\Delta q_z = -h\epsilon_{zz}$. Якщо замість епітаксійного шару вирощена періодична НЇ з періодом D , то пік, що відповідає шару, «розщеплюється» на ряд послідовних піків вздовж Q_z , позначених на рис. 5.4, в як $SL_1, SL_0, SL_{-1}, \dots, SL_{-n}$. Відстань між піками вздовж Q_z обернено пропорційна періоду НЇ: $\Delta Q_z = 2\pi / D$, ширина піків обернено пропорційна повній товщині НЇ. Відстань між піком підкладки і SL_0 тепер визначається середньою напругою в НЇ: $\Delta Q_z = -h_z \langle \epsilon_{zz} \rangle$. Розглянемо одновимірну періодичну множину квантових дротів, утворену літографією і наступним реактивним іонним травленням цієї $H\Gamma$ [10].

Трансляційна група симетрії цієї структури містить у собі трансляційну симетрію звичайної кристалічної ґратки, вертикальну періодичність $H\Gamma$ і горизонтальну періодичність дротової структури L . Всі ці елементи симетрії з'являються на КОП. Кристалічна періодичність ґратки подана тривимірною оберненою ґраткою, і одним з її трансляційних векторів є дифракційний вектор \mathbf{h} . Розглянемо карту оберненого простору біля точки оберненої ґратки H ($OH = h$). Вертикальна періодичність $H\Gamma$ викликає появу точок сателітів $H\Gamma SL_m$, де $HSL_m = n2\pi m / D$, \mathbf{n} — нормальний поверхневий одиничний вектор, m — ціле число, D — період НЇ (тобто на КОП точка H НЇ пов'язана з SL_0). Горизонтальна періодичність множини дротів викликає горизонтальні сателіти в точках $M_{m,p}$, де $M_{m,p}SL_m = \tau 2\pi p / L$, τ — одиничний вектор, який лежить на поверхні і нормальний до дротів, p — ціле число, L — період множини дротів. Розподіл інтенсивності складається при цьому з ряду максимумів в оберненому просторі і пере-

буває близько до точки оберненої ґратки H . Положення цих піків можуть бути охарактеризовані двома індексами (m, p) (рис. 5.4, *г*). Вертикальна ширина знову обернено пропорційна повній товщині НГ. Горизонтальна ширина максимумів буде визначатися освітленою областю зразка (в межах кінематичної теорії).

Ситуація в оберненому просторі є схожою на розглядуваний двовимірний масив точок в надґратці. Тоді латеральні сателіти розташуються в двовимірну обернену множину, сателіти якої будуть позначені (m, p_1, p_2) . Якщо латеральна картина не зовсім періодична, то ширина латеральних максимумів збільшується з p пропорційно середньоквадратичному відхиленню позицій точок/дротів.

Дотепер ми розглядали лише псевдоморфні структури з $a_x = a_{Sub}$, а отже, $\varepsilon_{xx} = 0$. Це спостерігається для надґраткової структури за відсутності пластичної деформації. Для дротової і точкової структури відповідно до латеральної картини внутрішні напруження релаксують пружно [10]. Однак, тому що латеральна структура вимагає ідеальної періодичності, результуючі поля напруг є також періодичними з тим же самим періодом і латеральними позиціями, а ширина латеральних максимумів інтенсивності не залежить від напруг [11]. Напруги змінюють тільки форму обвідної функції цих максимумів. У латеральному напрямі максимум обвідної функції зміщений від максимуму підкладки на величину $-h_x \langle \varepsilon_{xx} \rangle$, де $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ — латеральна усереднена напруга за об'ємом зразка (рис. 5.4, *д*).

Якщо напруга в дротах однорідна, то розподіл інтенсивності вздовж Q_z зміститься лише на $-h_z \varepsilon_{zz}$ від максимуму підкладки. У випадку неоднорідної напруги цей розподіл інтенсивності деформований і можна визначити тільки усереднену напругу $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$. У симетричній дифракції $h_x = 0$ і латеральна обвідна функції розподілу інтенсивності повинна бути симетричною щодо максимуму підкладки. Це справедливо, якщо немає нахилів між площинами шару і підкладки. Практично, через пластичну релаксацію, яка виникає унаслідок формування дислокацій в шарі, має відбутися нахил оберненої ґратки надґраткової структури, що в свою чергу приводить до асиметричного профілю відносно Q_z -осі навіть у симетричних відбиттях.

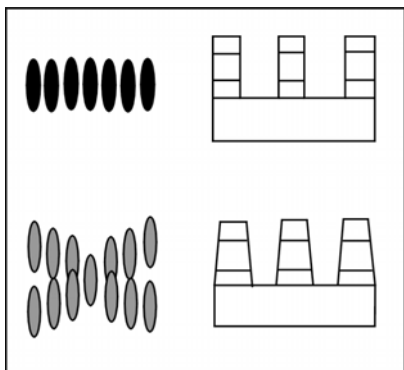


РИС. 5.5. Вплив латеральної форми структури на розподіл інтенсивності в оберненому просторі

Нарешті форма перерізу гравірованих структур має вплив на розподіл інтенсивності в оберненому просторі. Це показано схематично на рис. 5.5. Зазначимо, що для ідеально прямокутних дротів пряма послідовність піків дотримана, в той час як трапецієподібна

форма утворює характерну перехресну картину піків. Унаслідок неоднорідної напруги в напрямі росту ε_{zz} , яка порушує симетрію вздовж Q_z , обвідна цих піків може бути зміщена вздовж Q_z так, що можна спостерігати лише верхні вітки перерізів.

5.3.1. ДИФРАКЦІЯ НА ОДНОВИМІРНОМУ МАСИВІ КВАНТОВИХ ДРОТІВ

Наприклад, покажемо експериментальні результати для SiGe/Si HГ, де одновимірний масив квантових дротів був приготовлений голографічною літографією й реактивним іонним травленням. HГ складається з 10 подвійних шарів, з товщиною кремнію 19,6 нм і товщиною SiGe 5,3 нм з масовою часткою германію 18 %. Номінальний дротовий період становить 458 нм, ширина дротів — приблизно 230 нм, а глибина гравюри — 253 нм (див. рис. 5.5). Лінійні скани, наведені на рис. 5.6, вимірювались за допомогою звичайного джерела випромінювання (CuK α -радіація). КОП (рис. 5.7) були виміряні на синхротроні, тому що розсіяна інтенсивність від гравірованих структур досить слабка, і є необхідною висока інтенсивність випромінювання.

На рис. 5.6 показані скани вздовж осі Q_z , які виміряні до і після травлення для 004-дифракції. Крім піка підкладки S , спостерігаються HГ сателітні піки $m = 0$ (SL_0), а їх відстань від S пропорційна середній вертикальній напрузі $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$ в HГ-структурі. На латеральній картині пік SL_0 зсунутий, що вказує на пружну релаксацію внутрішніх напруг. З положення SL_0 максимуму можна визначити на-

5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур

пруги (деформації) до і після травлення, які становлять відповідно $\langle \varepsilon_{zz} \rangle = 3,4 \cdot 10^{-3}$ і $\langle \varepsilon_{zz} \rangle = 2,4 \cdot 10^{-3}$.

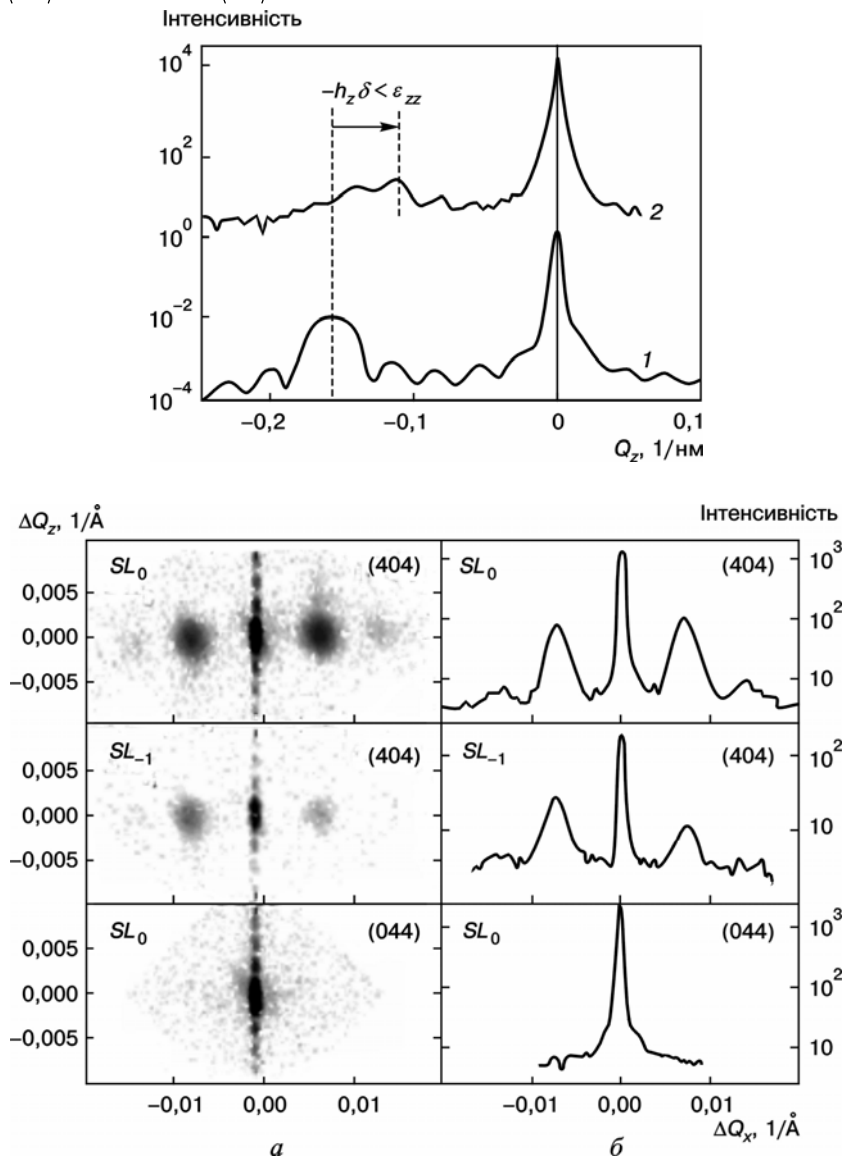


РИС. 5.6. Скани вздовж Q_z навколо брегівського відбиття 004 перед (1) і після (2) витравлювання лінійних дротин

РИС. 5.7. Карти розподілу інтенсивності в оберненому просторі (а) та лінійні скани біля сателітів (б)

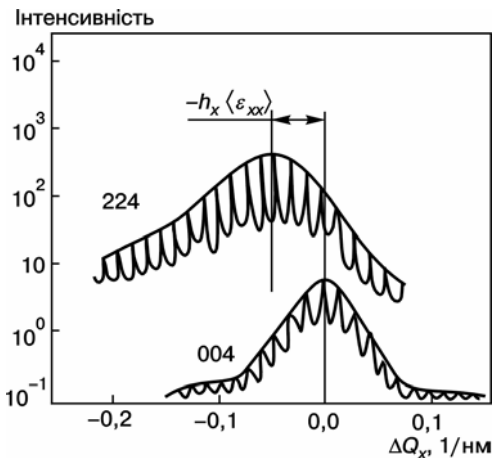


РИС. 5.8. Скани вздовж Q_x для 004 і 224 брегівських відбиттів

мама дуже добре узгоджується з номінальним періодом дротів. Ширина цих максимумів повністю визначається роздільною здатністю пристрою.

Для вивчення розподілу напруг $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ в дротах КОП повинні бути виміряні близько до точок оберненої ґратки (ТОЅ). Приклади КОП біля 404 і 044 вузлів оберненої ґратки наведені на рис. 5.7. Розподіл інтенсивності складається з латеральних максимумів, а їх ширина зумовлена роздільною здатністю пристрою. На практиці вибирається висококутова геометрія падіння РП для того, щоб виміряти 224 КОП, оскільки вона дає більш високу роздільну здатність, ніж в низькокутовій геометрії [12]. Велика кількість спостережуваних латеральних максимумів і той факт, що максимуми вищого порядку розширені не значно, забезпечують доказ гарної періодичності еталонного зразка.

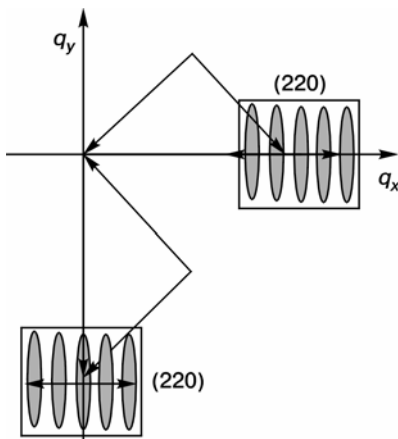
На 004 КОП розподіл інтенсивності є симетричним відносно Q_z і, таким чином, структура шару не нахилена щодо підкладки. Ця симетрія є також на 224 КОП (рис. 5.8). Максимум кривої зсунутий до менших значень Q_x , що вказує на позитивну латеральну напругу в дротах, тобто латеральна стала ґратки в дротах є більшою, ніж в підкладці кремнію. Позиції латеральних сателітів, однак, не впливають на релаксацію пружної деформації. Розподіл інтенсивності на КОП

На рис. 5.8 наведено Q_x -скани, виміряні в симетричних 004 і асиметричних 224 відбиттях. З латерального зсуву обвідної максимуму в 224-дифракції визначена середня латеральна напруга $\langle \varepsilon_{xx} \rangle = 1,5 \cdot 10^{-3}$ в провідній структурі. Ця напруга — результат пружної релаксації в гравюрі (перед гравіюванням структура псевдоморфна $\langle \varepsilon_{xx} \rangle = 0$ відповідно до напруги в підкладці). Відстань між латеральними максима-

5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур

можна пояснити тільки на основі числового моделювання полів напруг в дротових об'ємах. Попередні результати цих обчислень показують невідповідності між

РИС. 5.9. Схема GIXRD-експерименту для різних азимутальних положень вектора розсіяння паралельно чи перпендикулярно до дротин та вплив напруг і форми на розподіл інтенсивності



вимірними і розрахунковими позиціями максимуму інтенсивності; найбільш імовірно, що це розходження викликане неоднорідним шаром на бічних стінах дротів [13]. Таким шаром може бути «рідний» оксид або ушкоджений в процесі гравюри шар. Цей шар може бути додатковим джерелом

деформації в об'ємі. Пошкоджений шар може також бути джерелом дифузного розсіяння [11], яке збільшує фонову інтенсивність у проміжку між латеральними сателітами.

Дотепер вивчалася лише компланарна геометрія розсіяння, де хвильові вектори $\mathbf{K}_{i,j}$ і поверхнева нормаль \mathbf{n} лежать у тій же самій площині (нормаль до поверхні і на гравірованих дротах). В дифракції ковзного падіння (GIXRD) (див. рис. 5.9) площина розсіяння містить у собі вектори \mathbf{K}_i , \mathbf{K}_f і \mathbf{h} , які майже паралельні поверхні зразка. Перевага цього розташування полягає в тому, що якщо кути падіння і виходу α_{if} первинної і розсіяної хвиль дорівнюють критичному куту повного зовнішнього відбиття α_c , то глибина проникнення променя дуже відчутно залежить від α_i і змінюється від 5 нм для $\alpha_i \leq \alpha_c$ до декількох мікрометрів для $\alpha_i \geq \alpha_c$. Таким чином, GIXRD метод є чутливим до глибини. Крім того, в геометрії GIXRD можливо вибрати вектор дифракції \mathbf{h} , який буде паралельним або перпендикулярним до дротів (рис. 5.9). У першому випадку $\mathbf{h}\mathbf{u} = 0$ і дифрагована інтенсивність залежить тільки від провідної форми, в другому випадку $\mathbf{h}\mathbf{u} \neq 0$ і розподіл інтенсивності залежить від форми і напруги. Порівнявши розподіли інтенсивності, виміряні в двох геометріях дифракції, паралельній і перпендикулярній до дротів, можна однозначно відрізнити внески форми дротів від напруг [14]. На рис. 5.10, а, б показана КОП навколо Si 220- і -220-брегг-відбиттів ($\mathbf{h}\perp\mathbf{u}$ і $\mathbf{h}\parallel\mathbf{u}$ відповідно) дротового зразка [15]. На рис. 5.10, в зображені лінійні скани вздовж

–220 напрямку ($\mathbf{h} \perp \mathbf{u}$) для різних кутів падіння α_i . Можна бачити, що обвідна максимуму дротового сателіта зміще-

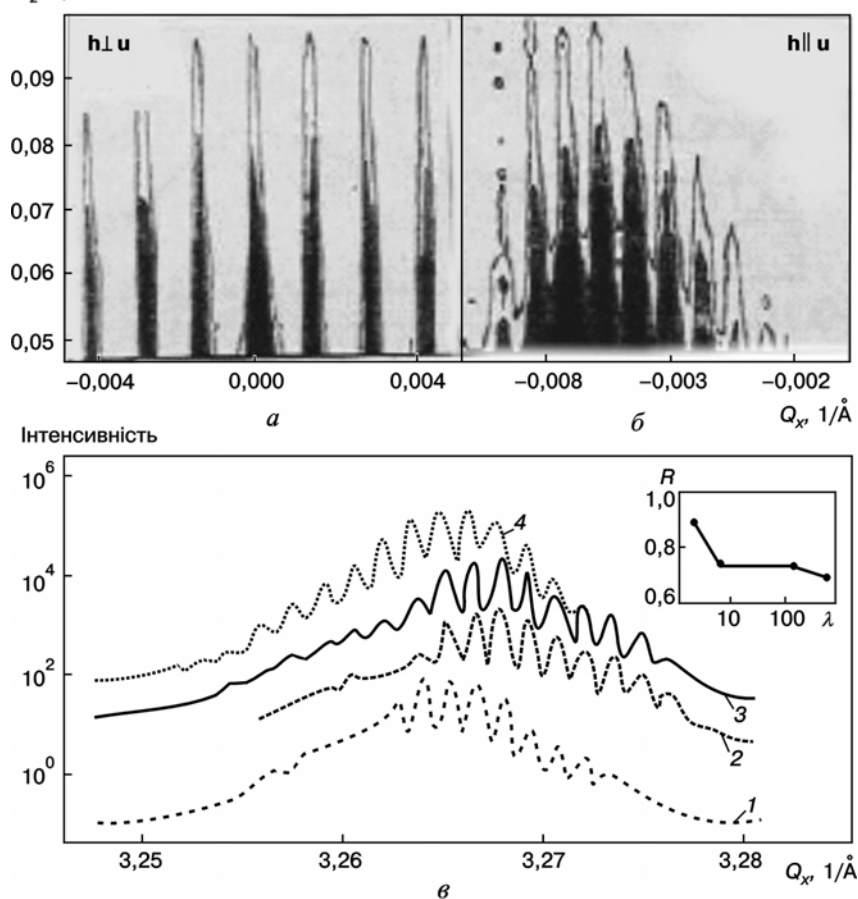


РИС. 5.10. Карти оберненого простору для структури з КД навколо вузла: а — 220 ($\mathbf{h} \perp \mathbf{u}$); б — 220 ($\mathbf{h} \parallel \mathbf{u}$); в — Q_x -скани для різних кутів падіння α_i : 1 — 0,15; 2 — 0,21; 3 — 0,30; 4 — 0,44°

на до більш високих значень Q_y при збільшенні α_i , тобто при збільшенні глибини проникнення рентгенівських променів. Тому релаксація є більш сильною для самих верхніх частин провідних структур (параметр релаксації подано на вставці).

У випадку гравірованого точкового масиву розділення форми і деформаційних ефектів стає неможливим. На рис. 5.11 показана КОП від гравірованого Si/SiGe точкового масиву (структура зразка описана в [15]) зареєстрована навколо Si 220-відбиття, при використанні кута падіння α_i , близького до критичного α_c . Латеральна періодичність точкового масиву за двома ортогональними x , y -напрямами становить $L_x = 457 \pm 3$ і $L_y = 455 \pm 3$ нм. Точковий масив дещо зміщений у відповідних напрямках відносно $\langle -110 \rangle_1$ і $\langle 110 \rangle_2$ на $2,1$ і $6,4^\circ$. Пружна релаксація існує в обох напрямках. У площині поверхні релаксація точкової структури $R = 47 \pm 5\%$ визначається так:

$$R = \frac{\Delta Q_{yy}}{Q_{hkl, Si}} \frac{a_{Si}}{a_{SiGe} - a_{Si}}, \quad (5.10)$$

де a_{Si} і a_{SiGe} — кубічні параметри ґратки Si- і SiGe-сплаву відповідно; $Q_{hkl, Si}$ — момент вектора з частковим відбиттям від Si (hkl); $Q_{||}$ — відхилення максимуму обвідної точкових піків відносно Q .

Методика GID також використовувалась [16] для вивчення релаксації напруг, викликаних формуванням дислокацій в SiGe-шарі на (001)Si. Показано, що дифузно розсіяна інтенсивність у цій геометрії також особливо чутлива до будь-якої зміни параметра ґратки в площині і, таким чином, до ступеня досконалості епішару.

5.3.2. ДИФРАКЦІЯ НА МАСИВІ КВАНТОВИХ ТОЧОК

При способі росту Странські—Крастанова з напруженої епітаксійної Hg самоорганізована структура може бути утворена при рості на поверхні напруженого шару. Структура складається із великої кількості двовимірних маленьких острівців (квантові точки). Зі збільшенням числа шарів у Hg розподіл точкових розмірів стає гомогенним і впорядкування точок поліпшується [4, 17]. Точки утворюють двовимірну, майже періодичну множину, осі якої збігаються з напрямками найменшого значення пружного модуля кристала, тобто в алмазній структурі вздовж $[100]$ напрямку. У вертикальному напрямі по-

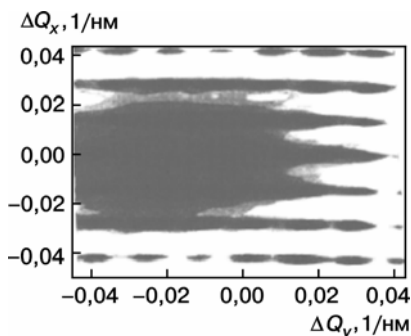


РИС. 5.11. GIXRD карта оберненого простору навколо вузла 220 для SiGe КТ. Дифракційний вектор паралельний (110)

ложення точок на сусідніх інтерфейсах корельовані і викликані полями напруг, що розповсюджуються від прихованої точки до поверхні [15]. Таким чином, точки мають тенденцію бути вбудованими в безладній тривимірній ґратці, вертикальний параметр якої дорівнює періоду H_1^1 .

5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур

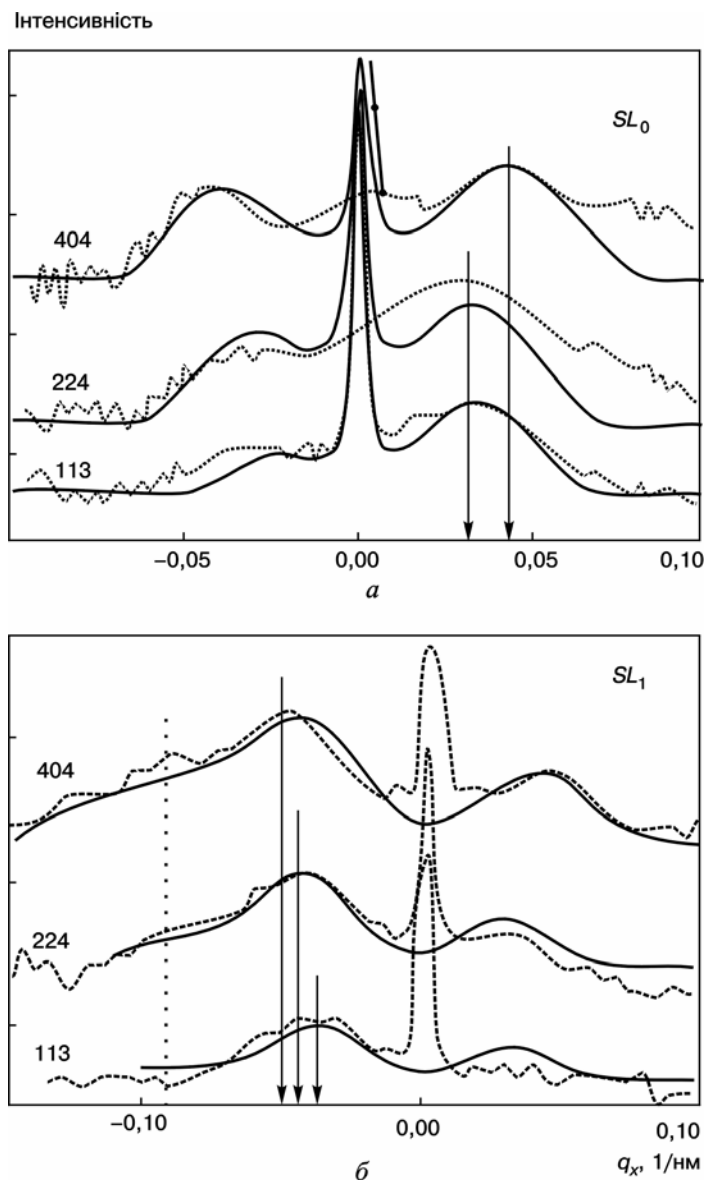


РИС. 5.12. Проекція розподілів інтенсивності дифузного піка навколо SL_0 (а) і SL_1 (б) на вісь q_x для різних відбиттів. Вертикальними лініями показані положення латеральних сателітів

На рис. 5.12 показані скани вздовж напрямку Q_x разом з модельованими профілями інтенсивності [18]. Для дифракційних 004-відбиттів дифузні максимуми симетричні відносно осі q_x . Тому детальнішу інформацію про розподіл деформаційних полів у структурах із квантовими точками можна одержати з аналізу асиметричних двовимірних карт розсіювання РП в оберненому просторі. В асиметричній схемі дифракції розподіл інтенсивності близько до SL_1 зміщений до менших значень Q_x . Цей зсув пропорційний горизонтальному компоненту дифракційного вектора. Таким чином, це викликано напругою, і дифрагована інтенсивність формується областями з більшим параметром ґратки a в площині. Із цього зсуву можна визначити середню латеральну напругу $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ в точках [7].

Як показано вище, з числових розрахунків розподілу напруги навколо ізольованої точки впливає, що між точкою і кремнієвою ґраткою існує область стискування, в той час як нижче й вище точок ґратка розширена (див. рис. 5.13). Тому інтенсивність близько до SL_1 формується головним чином об'ємом точки.

У області близько до піка SL_0 інтенсивність проявляє протилежну асиметрію — це зміщення до більших Q_x . Однак таке зміщення не пропорційне h , і положення максимуму інтенсивності Q_x залежить лише від азимуту площини розсіювання, тобто значення Q_x те саме для 113- і 224-відбиттів і збільшується на фактор $\sqrt{2}$ в 404. Таким чином, цей максимум є перший латеральний сателіт від точкової множини, ґратка множини квадратна і її осі паралельні (100) [18].

Проаналізуємо перетини двовимірних карт розподілу інтенсивності паралельно площині росту структур. Поблизу сателіта нульового порядку SL_0 (для малих значень q) дифузне розсіювання визначається головним чином областю деформації і розсіянням ґраткою Si вдалині від острівців (квантових точок). Максимум дифузної інтенсивності навколо SL_0 , як впливає з рис. 5.12, зміщений в додатному напрямі q_x , тобто в напрямі більшого h_x , що відповідає стискаючій деформації кристалічної ґратки кремнію в областях між точками, і дорівнює $5,062 \cdot 10^{-4}$.

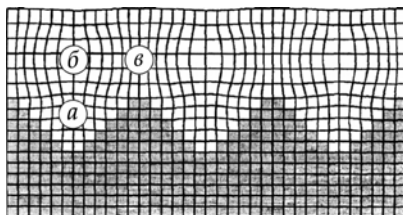


РИС. 5.13. Схема можливих розподілів деформацій навколо квантових точок: а, в — стискування; б — розтяг

5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур

Поблизу сателіта першого порядку SL_1 дифузне розсіяння визначене областю деформації і розсіянням кристалічною ґраткою острівців. Максимум дифузної інтенсивності навколо SL_1 зміщений в бік менших значень q_x , що відповідає деформації розтягу кристалічної ґратки точки. Середнє значення цієї деформації становить $1,119 \cdot 10^{-3}$.

Основним методом дослідження багат шарових квантових структур є рентгенодифрактометрія високої роздільної здатності [19]. Цим методом досліджені як технологічні параметри (товщина шарів, склад квантової ями (точки)), так і структурні — рівень деформації в шарах, ступінь їх структурного впорядкування і досконалості. Деякі особливості впливу утворення КТ на розмиття сателітної структури спектрів відзначене в [20], крім того, висунуте припущення про зменшення параметра дальнього порядку.

У працях [5,21] розвинута теорія розсіювання РП такими об'єктами, яка включає розгляд як когерентної, так і дифузної (викликаную наявністю дефектів у шарах) складових інтенсивності.

Розрахунок КДВ будемо проводити по формулах динамічної теорії розсіяння РП, що зводиться до рекурентних співвідношень, які зв'язують амплітуду відбиття від N шарів $R_{h,N}$ з амплітудами відбиття $R_{h,1}$ і проходження $R_{0,1}$ від верхнього шару з амплітудами $(N-1)$ наступних шарів (розд. 1).

Для розрахунку дифузної частини розсіяння використаємо модель, запропоновану в [18]. Відправною точкою в розрахунках дифузної компоненти розсіяння РП є функція форми, що дорівнює одиниці всередині КТ і нулю зовні:

$$\chi_h(\mathbf{r}) = \sum_j \left[\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \chi_{hD} + (1 - \Omega(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)) \chi_{hL} \right], \quad (5.11)$$

де χ_{hD} і χ_{hL} — коефіцієнти фур'є-поляризованості відповідно КТ і навколишньої матриці; \mathbf{R}_j — положення центра КТ. Нехтуючи анізотропією й різницею між пружними сталими, виражаємо деформаційне поле $\mathbf{t}(\mathbf{r}; Z)$, що оточує одну точку (центровану в $\mathbf{r} = 0$), як суперпозицію деформаційних полів $\mathbf{t}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; Z) d^3 \mathbf{r}'$ елементарних точкових дефектів від внутрішніх точок \mathbf{r}' :

$$\mathbf{t}(\mathbf{r}; Z) = \int d^3 \mathbf{r}' \mathbf{t}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; Z) \Omega(\mathbf{r}'). \quad (5.12)$$

Деформаційне поле $\mathbf{t}(\mathbf{r}; Z)$ залежить не тільки від взаємного положення \mathbf{r} точки спостереження щодо точкового центра, а й від гли-

бини Z центра точки нижче вільної поверхні (стосовно пружної релаксації в поверхні). Всі позначення відповідають наведеним в [18].

Деформаційне поле ізотропного елементарного точкового дефекту в пружному ізотропному континуумі можна розрахувати згідно з працею [22]. Для розрахунків використаємо функцію $\varphi(\mathbf{r}; Z) = \mathbf{ht}(\mathbf{r}, Z)$ і її фур'є-перетворення:

$$\varphi(\mathbf{q}, Z) = \int d^3\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}, Z) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (5.13)$$

Використовуючи дані [18], одержуємо вираз для розподілу дифузійної складової інтенсивності з урахуванням кореляцій в розташуванні квантових точок:

$$I(\mathbf{q}) = \text{const } w_{\parallel}(q_{\parallel}) \left[|F_1|^2 H(iq_z, -iq_z; \xi_{\text{кор}}) + |F_2|^2 H(iq_{\parallel}, -iq_{\parallel}; \xi_{\text{кор}}) + 2 \text{Re}|F_1 F_2| H(iq_z, -iq_{\parallel}; \xi_{\text{кор}}) \right], \quad (5.14)$$

$$\text{де } H(a, b, \xi_{\text{кор}}) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \exp(aZ_n + bZ_m) \exp(-|Z_n - Z_m| / \xi_{\text{кор}}).$$

З урахуванням приведених вище формул запишемо вираз для симуляції вимірної інтенсивності

$$J(q_x, q_z) = \text{const} \int_{-K\psi}^{K\psi} dq_y I(\mathbf{q}). \quad (5.15)$$

Основні експериментальні спектри КДВ для симетричного 400-відбиття в режимі ω (1) і 2θ — ω -сканування з аналізатором (2) наведені на рис. 5.14 [23]. Досліджувалися надґраткові структури із квантовими точками $8 \times (11\text{ML} (\text{In,Ga})\text{As}/67\text{ML GaAs})$, вирощені на напівізолювальному арсеніді галію (100) на установці МПЕ.

На спектрах спостерігається сателітна структура піків основної $\text{H}\Gamma$, а також викликана наявністю КТ. Спостережувані на них особливості можна якісно просто пояснити. Видно, що крім піка підкладки й основного максимуму, викликаного середньою ґраткою структури (нульового сателіта), на «хвостах» КДВ спостерігається складна інтерференційна структура, що являє собою взаємодію хвиль із однаковими періодами коливань [24]. В ідеальній ґратці модульовані і дифракційні піки від острівців (КТ) і від усередненої ґратки шарів. Крім сателітів, відповідальних за період

5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур

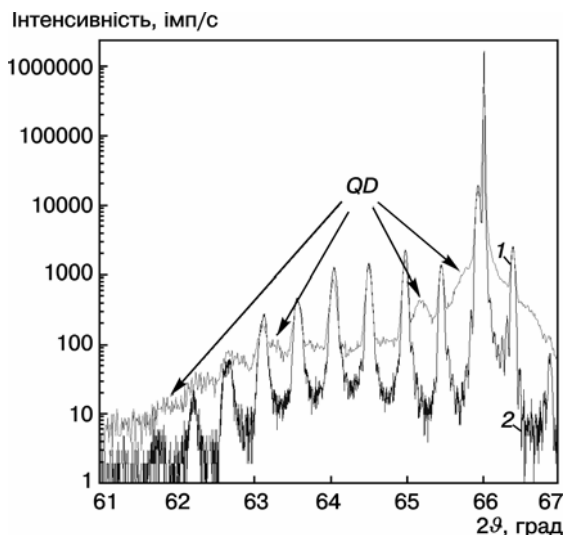


РИС. 5.14. Експериментальні дифракційні спектри для 400-відбиття: 1 — ω -сканування (двокристальний варіант); 2 — 2θ - ω -сканування (трикристальний варіант); *QD* — піки від квантових точок

$H\Gamma$, на КДВ спостерігається також система широких сателітів, зміщених за кутом відносно надґраткових. При цьому їх період аналогічний періоду основної надґратки. Ці сателіти вірогідно повинні відповідати розсіянню від квантових точок. Особливо чітко вони проявляються при ω - 2θ -скануванні без аналізатора (1).

Порівняння дво- і трикристальних (з аналізатором) кривих гойдання показує, що піки, які позначені на графіку як (КТ), дійсно викликані розсіянням від квантових точок з тією ж періодичністю. Проаналізувавши зсув цієї системи сателітів щодо нульового для основної $H\Gamma$, можна визначити середню напругу в ґратці КТ. Звідси, використовуючи рівняння Пуассона, одержуємо середній склад КТ (див. табл. 5.1).

ТАБЛИЦЯ 5.1. Склад і параметри $H\Gamma$ з квантовими ямами $In_xGa_{1-x}As$ за даними рентгенівської дифрактометрії

Номер структури	Склад	Середня деформація в періоді $H\Gamma$, %	Товщина шару GaAs, нм	Період $H\Gamma$, нм
1	0,2	4,5	18,91	$22,9 \pm 0,2$
2	0,25	5,5	15,87	$17,8 \pm 0,3$

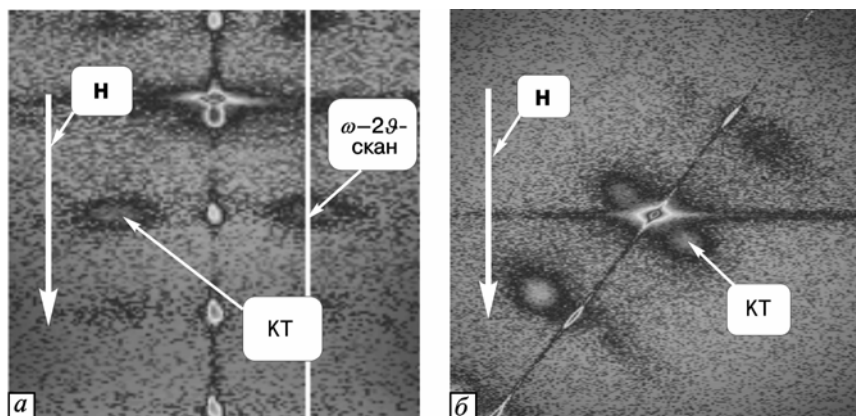


РИС. 5.15. Карті розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі поблизу вузлів 400 (а) і 224 (б) для структури InGaAs/GaAs. Випромінювання — $\text{CuK}\alpha 1$. Н — дифракційний вектор, КТ — розсіяння від квантових точок

Підтвердженням наведеному вище є двовимірні карти оберненого простору навколо вузлів 400 та 224. На рис. 5.15 наведені карти, зняті в симетричному 400- (а) і асиметричному 224-відбиттях (б) [23]. З рисунка видно, що додаткові сателіти на КДВ 400 дійсно відповідають системі впорядкованих максимумів інтенсивності. При цьому таке впорядкування спостерігається як у напрямі росту q_z (уздовж вектора дифракції), так і в площині інтерфейсу (у напрямках $q_x(q_y)$). Період цих впорядкованих максимумів розрізняється у двох взаємоперпендикулярних напрямках. Уздовж вектора дифракції він збігається з періодом НГ і дещо збільшується в латеральному напрямі. Сама присутність впорядкованої системи максимумів уже свідчить про високу якість НГ із квантовими точками, наявність яких і підтверджується картиною розсіяння [24]. Ще більш детальну інформацію про структуру деформаційних полів у цих НГ можна одержати з аналізу асиметричних двовірних карт розсіяння РП у оберненому просторі. На цих картах чітко спостерігається розсіяння від підкладки, сателітна структура від НГ, а також піки, викликані впорядкованою структурою квантових точок. Порівняємо переріз, показаний прямою на карті вузла оберненої ґратки 400 зі спектром ω -сканування (рис. 5.16). Як бачимо, максимумами перетину двовірної карти розподілу інтенсивності, які відповідають розсіянню від КТ і КДВ, збігаються, що дає підставу вважати двокристалъну ω -криву гойдання дуже інформативним інструментом для дослідження стру-

5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур

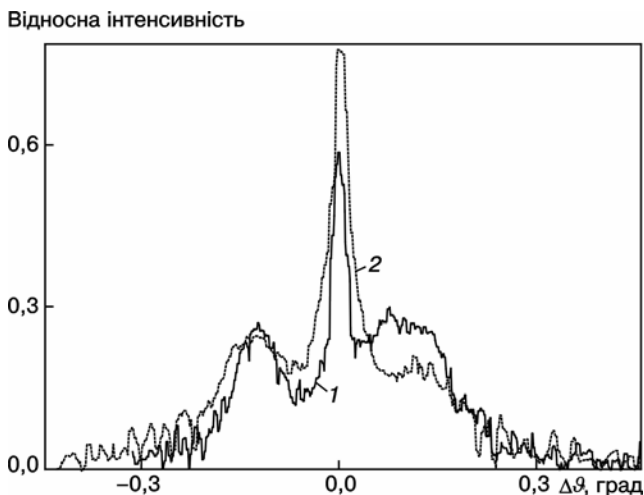
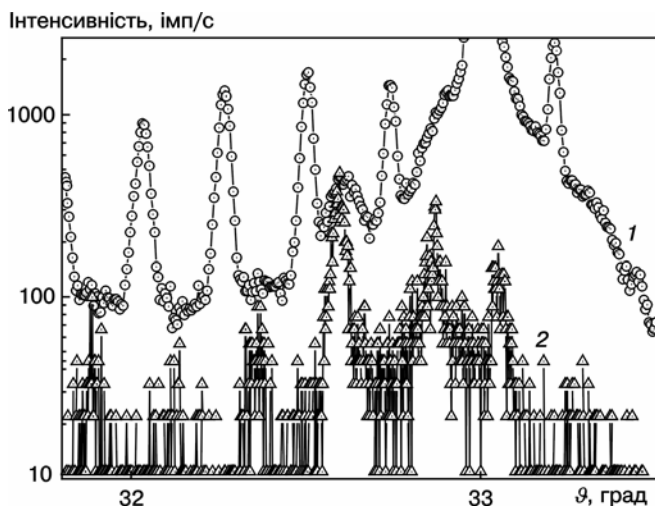


РИС. 5.16. Фрагменти експериментальних дифракційних спектрів: 1 — ω -сканування (двокристальний варіант); 2 — ω - 2θ -переріз (з аналізатором) двовимірної карти розсіяння вздовж напрямку, вказаного стрілкою ω - 2θ -сканування (рис. 5.15, а)

РИС. 5.17. Проекція перерізу піків дифузного розсіяння біля сателіта SL_1 на вісь q_x , отримана з КОП навколо вузла 400 (1) і 224 (2) для 17-періодної структури InGaAs/GaAs

ТАБЛИЦЯ 5.2. Параметри квантових точок $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ за даними рентгенівської дифрактометрії

Номер структури	Середній склад КТ, %	Латеральна напруга в КТ, %	Середній латеральний розмір КТ, нм	Висота КТ, нм
1	58	0,0004	98	7,0
2	63	0,0003	86	7,8

Проаналізуємо тепер переріз уздовж осі q_x поблизу сателіта першого порядку (рис. 5.17). На відміну від аналогічних перерізів, наведених у праці [24], в даному випадку спостерігаються дифузні піки по обидва боки від когерентного сателіта основної надґратки. Положення максимумів дифузних піків вздовж q_x згідно з формулою (7.40) буде відповідати внеску деформаційних полів навколо квантових точок в латеральній площині. Тому їх положення можна пов'язати з напругами в латеральній площині ($q_x^{\max} \sim \varepsilon_{xx}$). Отримані значення латеральних напруг у КТ наведені в **табл. 5.2**.

Аналіз КДВ (для симетричних 400-відбиттів) показав, що структури в тій чи іншій мірі є псевдоморфними. З урахуванням цієї обставини проводилася оцінка середнього вмісту індію в квантових ямах. Унаслідок процедури припасування для рефлексу 400 були отримані товщини шарів у періоді Hg , а також зміна параметра ґратки в напрямі росту структури.

Іншою важливою причиною розділення тонкої структури сателітів є досконалість шарів і їх однорідність по площі. Як було показано раніше [25], навіть при хорошій інструментальній роздільній здатності картина сателітної структури для структурних рефлексів суттєво залежить від наявності дефектів у тому чи іншому шарі Hg .

Наявність дальнього порядку в розташуванні максимумів на двовимірних картах в оберненому просторі свідчить про латеральне й нормальне впорядкування квантових точок з різними періодами. Про це також свідчить і форма ω -кривих поблизу надструктурних максимумів. Однак варто зазначити, що фазові кореляції в напрямі вектора дифракції (оберненої ґратки) сильніші, ніж в паралельному напрямі.

Зазначимо також, що наявність деформованих областей в структурах, викликаних квантовими точками, на відміну від інших типів порушень істотно не впливає на когерентність дифрагованого випромінювання й, отже, на просторову роздільну здатність методу ВРРД.

5.4. ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУР З ЛАТЕРАЛЬНИМИ МОДУЛЯЦІЯМИ СКЛАДУ ЗА ДОПОМОГОЮ ДВОВИМІРНИХ КАРТ РОЗСІЯННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ У ОБЕРНЕНОМУ ПРОСТОРИ

Вирощування короткоперіодних Hg^{I} (КПНГ^I) часто приводить до гетероструктур з ненавмисними латеральними змінами в складі сполуки. Особливо значна й упорядкована композиційна модуляція виникає при рості номінально погодженої КПНГ^I при наявності в періодах близько чотирьох моношарів (МШ). Ця стимульована ростом модуляція вперше спостерігалася авторами праці [26]. Залежно від системи сплаву горизонтальна модуляція може бути за характером або одновимірною [27, 28], або двовимірною [29]. Одновимірною ($1-D$) модуляція в КПНГ^I, що формує горизонтальну довжину хвилі, утворює подібні до дротів області, в той час як двовимірною ($2-D$) модуляція утворює ґратку або подібні до точки області. У більш товстих КПНГ^I модульовані області можуть безупинно самовирівнюватися вертикально: при $1-D$ області подібні до дротів подовжуються в напрямі росту, щоб сформувати подібні до аркуша області або горизонтальні квантові ями, при $2-D$ області подібні до точки так само подовжуються, формуючи стержні. Ця горизонтальна надструктура створює відповідні горизонтальні сателіти в оберненому просторі, які можуть бути проаналізовані неруйнівним методом ВРРД.

Розглянемо спочатку латерально утворений кристал, який містить у собі індивідуальні латерально однорідні ламелі, де всі структурні зміни відбуваються нормально до ламелей, наприклад ідеально когерентна Hg^{I} , що вирощена на сингулярній підкладці. Структура реального простору вздовж нормального напрямку до поверхні проявляється в оберненому просторі як відповідне розширення точок оберненої ґратки в модульовані стрижні, орієнтовані нормально до ламелей, які формують кристал. Звичайні, одновимірні КДВ, які виникають уздовж цих стрижнів, формують карту розподілу дифрагрованої інтенсивності. Якщо ламелі латерально досконалі, то повна локальна структура оберненого простору відома із кривої гойдання.

Тепер розглянемо, що відбувається, коли порушується досконалість у площині шаруватих кристалів, при внесенні дефектів (наприклад, дислокацій, порожнин або преципітатів), мікроструктури (наприклад, квантова точка або дротові множини, поверхнева морфологія або шорсткість інтерфейсу) або горизонтальні варіації складу

(наприклад, відділені фази або домени). Вставка цих латеральних дефектів приводить до ламелей, які є тепер неоднорідними за напрямом у площині. Латеральна структура в площині в реальному просторі відповідає латеральній структурі в оберненому просторі. Цю горизонтальну структуру можна бачити в рентгенівських дифракційних експериментах як тривимірний розподіл дифузного розсіяння РП в області оберненого простору з боку суміжного з положення перерізів кристалічних стрижнів (СТР). Основна мета картографії оберненого простору полягає в тому, щоб визначити детальну тривимірну структуру, що виникає при наявності горизонтальних неоднорідностей у кристалі. Належна інтерпретація карт оберненого простору (а також кривих гойдання) часто вимагає розуміння їх тривимірного характеру.

Латеральна композиційна модуляція в короткоперіодній НГ — це всього лише один певний тип латеральної неоднорідності, яка може бути вивчена картографуванням її відповідної структури в оберненому просторі. Латеральна надструктура в реальному просторі утворює відповідні латеральні сателіти в кожній точці оберненої ґратки. Латеральний [110] розподіл сателітів викликаних композиційною модуляцією $2\pi / p_{\text{к.м}}$, де $p_{\text{к.м}}$ — період латеральної модуляції. Нормальна до поверхні КПНГ модуляція частково перетинається з латеральною композиційною модуляцією. Таким чином, плями КПНГ очікуються вздовж нормалі [001] до поверхні. Вплив 2-D композиційної модуляції в реальному просторі (1-D безпосередня модуляція по [110] і КПНГ-модуляція по [001]) створюють 2-D мережу - сателітів у кожній точці оберненої ґратки.

На відміну від схематичного розв'язання фактична інтенсивність горизонтальних сателітів змінюється для кожної точки оберненої ґратки і задається фур'є-перетворенням модуляції сполуки в ґратці реального простору. Для випадку синусоїдально модульованого вздовж поверхні підкладки параметра ґратки епітаксійного шару в праці [30] були обчислені пружні деформації його ґратки. Для шарів, товщина яких перевищує довжину хвилі модуляції, більша частина горизонтальної надґратки — тетрагонально напружена подібно нормальній НГ, але модуляції напружень тепер поперечні до поверхневої нормалі. Ця симетрія змінює поле площини (001), яка не має ніякої модуляції d -інтервалу: модуляції зсуву відбуваються тільки паралельно площинам (001).

Отже, скалярний добуток $\mathbf{K}\mathbf{r}$, де \mathbf{K} — вектор розсіяння; \mathbf{r} — положення пружно спотвореної області ґратки, не дає ніяких, пов'язаних з напругою, внесків у латеральну сателітну інтенсивність для (002)- і

(004)-відбиттів. Сателітна інтенсивність залежить тільки від хімічних модуляцій, які виражені через структурний фактор комірки. Сателітні амплітуди пропорційні амплітуді локальних фракцій подвійного сплаву, помножених на різницю атомних факторів розсіяння. Слабкі (002)-сателіти помітні тому, що порівняно слабкий квазізаборонений (002)-рефлекс дає слабкий фон, що дозволяє їх виявлення. Слабкі (004)-сателіти також існують, але вони не спостерігаються, тому що їх затінює високий дифузний фон сильного (004)-рефлексу. На відміну від симетричних відбиттів асиметричні рефлекси представлені пов'язаним з напругою ненульовим фазовим зсувом Kr . Цей добуток залежить від внеску в інтенсивність латеральних сателітів і пропорційний фундаментальному структурному фактору. Сателіт біля вузла (224), що не є квазізабороненим відбиттям, буде, таким чином, більш сильним.

Виникнення латеральної впорядкованості в системі сателітів може бути викликано наявністю модуляцій складу по площині росту. Хвилястості товщини в подвійних шарах надґратки є основною причиною латеральних модуляцій складу (ЛМС), стандартна модель яких зображена на рис. 5.18, а [31]. Інша модель полягає в тому, що найбільш товсті частини шарів хвилястості зміщені один від одного на певну частину довжини хвилі хвилястості, яка закінчується вертикальним періодом, зміненням щодо вихідної H_1^1 . Паралелограм — це ділянка одиниці надструктури, що відповідає і вертикальним, і горизонтальним структурам. Нахил основи комірки відносно площини (001) приводить до рівного нахилу вертикальних сателітних піків відносно напрямку [001]. На рис. 5.18, б схематично зображено відповідні дифракційні піки в оберненому просторі для обох моделей.

Хоча хвилястості товщини спостерігаються і в СЕМ, проте це не обов'язково свідчить, що існує латеральна модуляція хімічного складу. Для періодичної горизонтальної структури, тобто хвилястості товщини і модуляції складу, бреггівські дифракційні піки оточені набором латеральних сателітів. Хвилястості товщини приводять до появи латеральних сателітів, які присутні в високих порядках вертикальних сателітів, однак тільки ЛМС будуть оточені латеральними сателітами нульового порядку.

На рис. 5.19 наведена одна з таких карт, знята в симетричному 400-відбитті, для одного із зразків InGaAs/GaAs. З рисунка

5.4. Дослідження структур з латеральними модуляціями складу

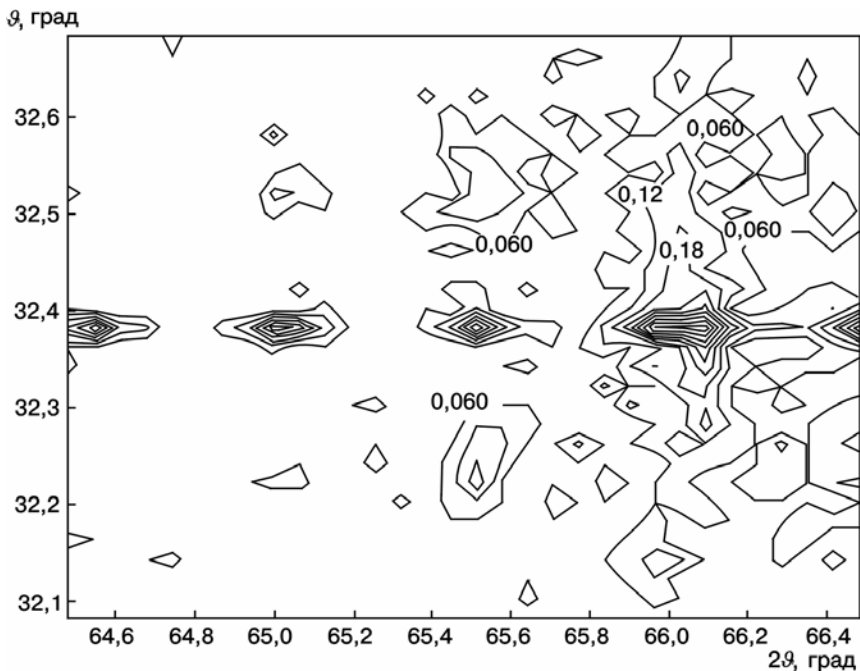
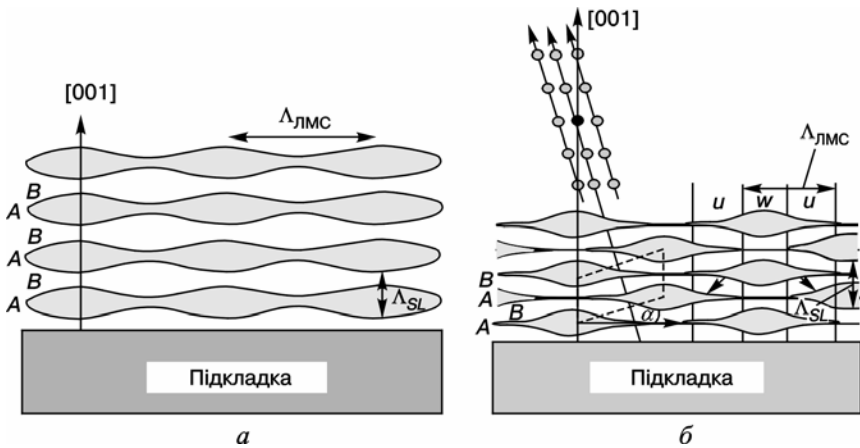


РИС. 5.18. Схематичне зображення структур з латеральними модуляціями складу: а — стандартна модель; б — модель із зміщеними шарами. Точками позначено положення вертикальних і горизонтальних сателітів в оберненому просторі. Буквами u , w — позначені відповідно області з надлишком Ga і In

РИС. 5.19. Карта розподілу дифузної інтенсивності навколо вузла 400 для зразка InGaAs/GaAs (8-періодна структура)

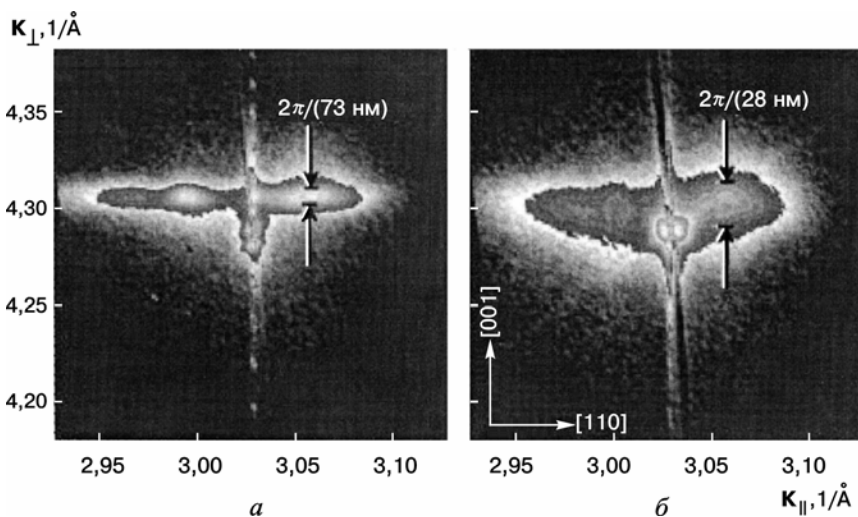


РИС. 5.20. Карті оберненого простору навколо вузла 224 для КПНГ з латеральними модуляціями складу

видно, що додаткові сателіти на КДВ 400 дійсно відповідають системі впорядкованих максимумів інтенсивності. При цьому таке впорядкування спостерігається як у напрямі росту q_z (вздовж вектора дифракції), так і в площині інтерфейсу (латеральні сателіти в напрямках $q_x(q_y)$). Період цих впорядкованих максимумів розрізняється в двох взаємоперпендикулярних напрямках. Вздовж вектора дифракції він збігається з періодом НГ і небагато збільшується в латеральному напрямі. Ще більш детальну інформацію про структуру деформаційних полів у цих НГ можна одержати з аналізу асиметричних двовимірних карт розсіяння РП у оберненому просторі. На рис. 5.20 наведені перерізи в площині розсіяння двовимірних карт для асиметричного 224-відбиття. Як видно з рис. 5.20, а, є окремі сателіти, які характеризують сильну латеральну модуляцію складу в структурі з періодом чотири моношари (МШ). Для структури з трьома МШ у періоді спостерігається схожа ситуація. І нарешті в НГ з періодом один МШ на КОП вже не спостерігається латеральних сателітів (рис. 5.20, б).

Наявність дальнього порядку в розташуванні цих максимумів на двовимірних картах в оберненому просторі свідчить про латеральне

5.4. Дослідження структур з латеральними модуляціями складу

й нормальне впорядкування областей з різними модуляціями складу. Однак варто зазначити, що фазові кореляції в на-

прямі вектора дифракції (оберненої ґратки) більш сильні, ніж у паралельному напрямі.

При переході від (004)- до (224)-рефлексу спостерігаються прості, але важливі деталі, які далі підтверджують, що горизонтальні сателіти є результатом ефектів кореляції в площині. Оскільки обидві обернені ґратки вказують на те, що сателіти залишаються розташованими вздовж напрямку [110], відстань між сателітами на обох картах майже однакова.

5.5. ДИФРАКЦІЯ НА КВАНТОВИХ ОСТРІВЦЯХ З ВИРАЖЕНОЮ СТРУКТУРОЮ ГРАНЕЙ

5.5.1. КОМПЛАНАРНА ДИФРАКЦІЯ В КВАНТОВИХ ОСТРІВЦЯХ. ПОРІВНЯННЯ ТЕОРІЇ З ЕКСПЕРИМЕНТОМ

Процес розсіяння для закритих острівців описаний в рамках (DWBA) [5, 32]. У цьому наближенні ділимо потенціал розсіяння в хвильовому рівнянні на дві частини: перша з них описує незбурену систему, а друга — збурення. Надалі будемо мати справу тільки з дифузним розсіянням і не будемо розглядати розподіл інтенсивності вздовж перерізу кристалічного стрижня. Тоді напівнескінченна «аморфна» підкладка з поляризованістю χ_0 може бути обрана як незбурена система, а кристалічна структура навколишньої матриці і острівці включені в збурення. Використовуючи це наближення, первинний і дифузно розсіяний пучки біля поверхні зразка обробляють точно; хвилі розсіяні кінематично від кристалічної матриці і острівців поширюються в підкладці. Більш точне наближення можна було б отримати в прийнятті напівнескінченної кристалічної підкладки як незбуреної системи. Тоді б заломлені і дифраговані хвилі в цій системі розраховувалися в динамічному наближенні.

Надалі ці хвилі піддаються процесу розсіяння в острівцях і лише цей процес необхідно було б описувати кінематичним наближенням. Однак чисельне порівняння обох підходів показало, що істотна різниця в дифузно розсіяній інтенсивності з'являється тільки в точках оберненого простору, де динамічна дифракційна умова в підкладці виконана для падаючих і/або розсіяних пучків, тобто в експериментальних смугах монохроматора і аналізатора і вздовж стрижня СТР. Оскільки сигнал розсіяння від закритих острівців і оточення деформованої матриці кремнію не залежить від впливу динамічних

явищ, можна використати більш просту процедуру з «аморфною» незбуреною системою. Відповідні вирази для хвильових рівнянь запишемо так:

$$\begin{aligned}
 |i\rangle &= \begin{cases} \exp(-i\mathbf{K}_{i0}\mathbf{r}) + r_i \exp(-i\mathbf{K}_{iR}\mathbf{r}), & z \geq 0, \\ t_i \exp(-i\mathbf{k}_{iT}\mathbf{r}), & z \leq 0, \end{cases} \\
 |f\rangle &= \begin{cases} \exp(-i\mathbf{K}_{f0}\mathbf{r}) + r_f^* \exp(-i\mathbf{K}_{fR}\mathbf{r}), & z \geq 0, \\ t_f^* \exp(-i\mathbf{k}_{fT}\mathbf{r}), & z \leq 0. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Тут \mathbf{K}_{i0} позначений хвильовий вектор падаючої хвилі (рис. 5.21). Вектор падаючої хвилі \mathbf{K}_{f0} в часово обернених рівняннях $|f\rangle$ — вектор розсіяної хвилі. Вектори $\mathbf{K}_{i,fR}$ і $\mathbf{k}_{i,fT}$ означають відбиту і заломлену хвилі відповідно, $r_{i,f}$ і $t_{i,f}$ — коефіцієнти відбиття і заломлення Френеля в обох рівняннях. Вісь z паралельна поверхневій нормалі. Для прикритих острівців потрібно розглянути лише область для $z < 0$. У досліджених зразках положення острівців є повністю некорельованими. Концентрація острівців низька (приблизно $6,3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$), отже, зменшується ймовірність виявлення острівця в околі іншого острівця, що стає важливим для дуже високої питомої ваги острівця і не має ніякого значення для розподілу інтенсивності в оберненому просторі. Таким чином, у даному випадку розсіяна інтенсивність пропорційна інтенсивності, що виникає з єдиної точки

$$I = \text{const} \left\langle f \left| \sqrt{\mathbf{V}} \right| i \right\rangle^2, \tag{5.17}$$

де збурення розсіяного потенціалу задається так:

$$\sqrt{\mathbf{V}} = -K^2 \Theta(-z) \{ \chi_h(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{h}\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})} - \chi_{hs} e^{i\mathbf{h}\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})} \}. \tag{5.18}$$

Тут $\chi_h(\mathbf{r})$ — локальний h -й член ряду Фур'є поляризованості зразка залежить від профілю острівця і його хімічного складу; χ_{hs} — елемент поляризованості підкладки; $\Theta(-z)$ — ступенева функція (одиниця для $z < 0$ і нуль для $z > 0$); $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — поле зміщення, яке описує девіації атома з позиції ідеальної кристалічної ґратки. Вводимо систему координат так, щоб вектор дифракції мав координати

5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней

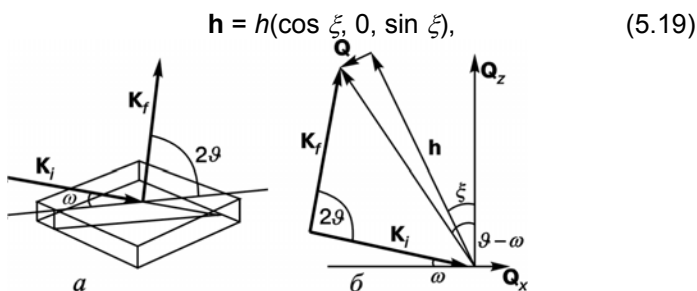


РИС. 5.21. Схема компланарної геометрії дифракції в прямому (а) і оберненому просторі (б)

де ξ — кут асиметрії дифракції, і вектор розсіювання визначаємо так:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K}_{f0} - \mathbf{K}_{i0} - \mathbf{h} = (Q_x, 0, Q_z), \quad (5.20)$$

тобто обчислюємо розподіл інтенсивності в Q_x — Q_z -площині. Дифракційний вектор \mathbf{h} перебуває в тій самій площині. Далі припустимо, що це зменшене зображення вектора розсіювання мале порівняно з \mathbf{h} . Тоді матричні елементи можна записати таким чином:

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -K^2 t_i t_f \int_{z \leq 0} d^3 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \{ \chi_h(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})} - \chi_{hs} \}, \quad (5.21)$$

де \mathbf{q} позначили виправлений вектор розсіювання на рефракцію і поглинання. Для обчислення розсіяної інтенсивності прийемо модель форми острівця і профіль хімічного складу по всьому острівцю. Звідси, використовуючи тривимірну модель (за допомогою обчислень методом скінченних елементів (МСЕ)) і приймаючи до уваги повну пружну анізотропію, отримаємо поля зміщень $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Тоді використаємо $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ з радіусом-вектором \mathbf{r} в вертикальній площині, яка містить у собі вісь обертання і паралельна площині оберненого простору, і прийемо поле зміщення циліндрично симетричним $\mathbf{u}(r, z)$ для обчислення дифракційного відбиття.

Необхідно провести серію чисельних розрахунків, якщо хочемо отримати поле зміщень $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ з тривимірного 3D-розподілу зсувів у різних вертикальних площинах, або використати повну тривимірну імітацію, яка включає анізотропію. Однак потрібно зазначити, що досліджені зразки вирощені при високих температурах, тому немож-

ливо отримати явно виражену структуру граней в закритих острівцях. Для зразків, вирощених при низьких температурах, може стати можливим виконання всіх обчислень у трьох вимірах. Тут можна обмежити симуляцію осьовою симетрією, що дозволяє для прискорення обчислень явно інтегрувати кутову координату. Тоді отримуємо вираз для симуляції розсіяної інтенсивності від закритих острівців:

$$\langle f | \mathbf{V} | i \rangle = -2\pi K^2 t_i t_f \int_0^\infty d\rho \rho \int_{-\infty}^0 dz e^{-iq_z z} \{ \chi_h(\rho, z) J_0(q_x \rho + h_x u_x(\rho, z)) e^{-ih_z u_z(\rho, z)} - \chi_{hs} \}, \quad (5.22)$$

де J_0 — функція Бесселя.

5.5.1.1. Рентгенодифракційні вимірювання

Рентгенівські дифракційні експерименти були виконані на синхротронному випромінюванні. Карти оберненого простору (КОП) були зареєстровані за умов компланарної дифракції (рис. 5.21). Падаючий пучок, розсіяний пучок і нормаль до поверхні зразка знаходяться в одній площині. Для отримання інформації відносно деформації в площині, як і деформації в напрямі росту, знімалися КОП навколо асиметричних 224 бреггівських відбиттів кремнію при двох азимутальних положеннях зразка [110] і [1-10]. Компланарна схема дифракції була вибрана, тому що дослідження прихованих острівців вимагає відносно великого проникнення рентгенівських променів у зразок. Тому використання ковзного падіння для вивчення відкритих острівців [33] не дає ніяких переваг. В XRD падаючий кут і кут виходу α_i , α_f набагато більші, ніж критичний кут повного зовнішнього відбиття α_c , і варіації α_i , α_f в межах КОП не відіграють ніякої ролі. Вимірювання в компланарній схемі дає переваги, в тому що ПЧД може використовуватись для значного зменшення часу вимірювань.

На рис. 5.22, а показані виміряні КОП навколо вузла 224 разом з імітаціями. Навколо піка підкладки було помічено видимий пік підкладки кремнію, що супроводжується вертикальним стрижнем СТР, і дифузне розсіяння, можливо, від точкових дефектів у кремнієвому буфері і захисному покритті. Дифузне розсіяння від острівців і їх деформаційного поля викликає широкий

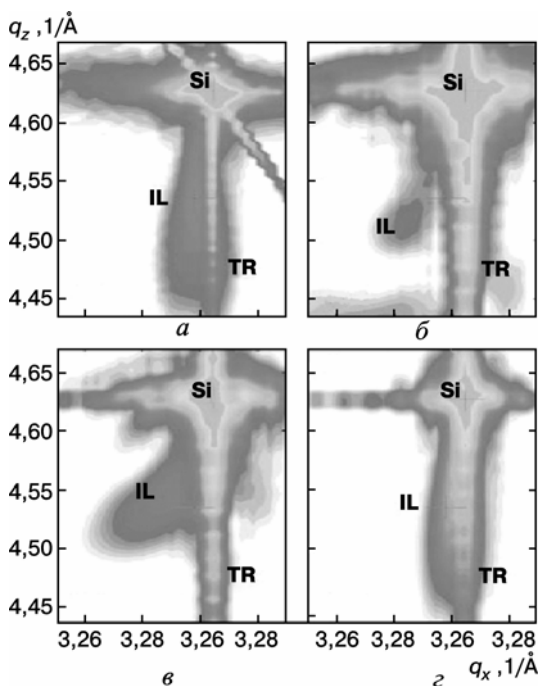


РИС. 5.22. КОП для прихованих острівців: а — експеримент; б — симульовані з використанням форми і профілів неприкритих острівців, отриманих з АСМ; в — симульовані з формою аналогічною випадку «б», але з оптимізованим профілем; г — симульовані з оптимізованими параметрами форми і профілю. Si — позначений пік 224 від підкладки, IL — інтенсивність піка частково релаксованого острівця SiGe [6]

максимум, позначений як *IL*. Цей максимум — центрований в оберненому просторі при менших значеннях q_z і q_x відносно піка кремнію і, таким чином, відповідає більшим в площині та вертикальним сталим кристалічної ґратки, які відповідають частково релаксованому SiGe-острівцю. Тут будемо використовувати термін релаксації відносно сталої кристалічної ґратки об'єму і сплаву SiGe, тобто $R = (a_{||} - a_{Si}) / (a_{SiGe} - a_{Si})$, де $a_{||}$ — в площині параметр кристалічної ґратки частково релаксованого SiGe-сплаву; a_{SiGe} — стала кристалічної ґратки об'єму SiGe; a_{Si} — стала кристалічної ґратки об'єму Si. З імітації, описаної нижче, видно, що стала ґратки кремнію в оточенні острівця залежить від її просторового положення. Наприклад, вище і нижче острівця параметр в площині є більшим, ніж a_{Si} , а верти-

кальний параметр менший. На гранях острівців параметр в площині є меншим, ніж a_{Si} . Із цього випливає, що цей факт неможливо приписати максимуму IL (рис. 5.22) безпосереднього розсіяння від об'єму острівців. КОП при азимутальних поворотах на 90° мали розміри, які ніяк не розрізнялись. Це вказує на те, що острівці і спотворені ділянки поверхні кристала, які їх оточують, повинні були б мати ротаційну симетрію відповідно до АСМ-зображень острівців на поверхні зразка. Таке явище притаманне для частини зразків, які вирощені при високій температурі. Для зразків, вирощених при нижчих температурах (приблизно 500°C), структура граней спостерігалась навіть для покритих острівців [34]. Для закритих острівців при температурі 700°C , де форма змінюється відповідно до зміни атомної частки германію, очікується розмазування структури граней. Очевидно, при високих температурах мала пружна анізотропія кремнію і SiGe буде менш важливою.

5.5.1.2. Аналіз рентгенодифракційних даних

Для аналізу структурних властивостей закритих острівців використаємо підгінну процедуру, описану вище. Будемо моделювати острівець і змочувальну плівку як послідовні шари. На рис. 5.23, а показано сітку МКР, яка використовується для обчислення. Сітка спочатку побудована в площині (110) і витягнута під кутом 45° , для того щоб використати переваги симетрії. Ширини і атомна частка Ge в цих плівках обрані такими, щоб відобразити форму і профіль Ge в острівці — сіра ділянка. В середині і поблизу острівця виберемо розмір комірки: приблизно 1 нм вертикально і 3 нм горизонтально. Сітка МКР простягається далеко в підкладку, і концентрація комірок сітки поступово зменшується з віддаленням від острівця, де пружні спотворення дуже малі. Вузлові точки і заокруглення клина фіксовані. Було перевірено, що збільшення розміру елемента симуляції не має ніякого впливу на розрахунок полів зміщення, тобто комірка (елемент) квазінескінченна. Вузлові точки на бічних гранях клина можуть рухатися тільки в межах грані, але не можуть рухатися перпендикулярно згідно з симетрією. Поверхня сітки повністю вільна і може релаксувати пружно. Використаємо в загальній кількості приблизно 40 000 точок розгалуження, щоб обчислити ділянку поверхні кристала без компонентів зсуву навколо острівців, так само, як і відповідний розподіл деформації, наведений на рис. 5.22, б, в. Використовуючи переріз тривимірного розподілу деформації вздовж азимуту КОП і приймаючи,

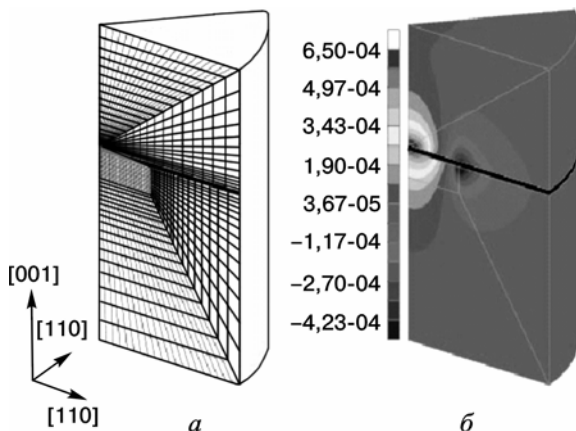


РИС. 5.23. Сітка для розрахунку методом скінченних елементів (МСЕ), яка використовується для симуляції. Область острівця позначена темним кольором. Сітка побудована в (110) площині і під кутом 45° , відповідно до симетрії задачі

що компоненти в площині є радіально ізотропними, розраховуємо сигнал розсіяння чисельно з використанням (5.22) і порівнюємо з вимірним розподілом інтенсивності. Тоді форма, розмір і профіль Ge досягали «розумного» узгодження між експериментом і симуляцією. Протягом цієї процедури було отримано гарне узгодження між імітованою і вимірною КОП щодо сигналу від острівців позначених IL на рис. 5.22. Дифузне розсіяння навколо кремнієвої підкладки і переріз стрижня кристала не відображають правильно імітації, оскільки не містять у собі розсіяння від дефектів. Крім того, ширина модельної кристалічної ґратки при обчисленнях МКР є меншою, ніж когерентно освітлена ділянка.

Щоб отримати «розумне» число підгінних параметрів, форма острівців апроксимується зрізаним параболоїдом обертання, де висота і максимальний радіус основи — вільні параметри. У ряді симуляцій було показано, що важливі деталі форми, наприклад присутність різних граней, несуттєво впливає на картину розсіяння, але дуже важливим є параметр $\eta = h / r_{\text{база}}$. Особливо важливим він буде для закритих острівців, які є порівняно плоскими і де грані для острівців без кришки «розмазуються» як взаємною дифузією, так і сегрегацією Ge протягом вирощування при досить високих температурах. Профіль Ge змінюється лише в напрямі вирощування, залишаючись постійним в поперечному. Це звичайно не строго істина. Однак оскільки профіль, отриманий з аналізу, — скоріше плоский

(див. нижче), ця модель розумно описує розсіяння від острівців. Як відправна точка для симуляцій розсіяної інтенсивності використовується висота і горизонтальні розміри острівців без кришки, які виміряні методом АСМ для максимального острівця півки, та прийняті різні профілі Ge, починаючи від Ge з атомною часткою $x_{\text{Ge}1}$ в базі острівця і її збільшення до $x_{\text{Ge}2}$ у вершині острівця. Для варіації x_{Ge} у напрямі вирощування розглянемо лінійну, квадратичну і кореневу залежності [33]. На рис. 5.22, б показана розрахункова дифракційна картина для кореневого профілю з $x_{\text{Ge}1} = 0,5$ і $x_{\text{Ge}2} = 1,0$, які були знайдені для вирощених острівців без кришки за тих же умов [33—35]. Очевидно ні положення, ні форма піка IL в експериментальних даних не відтворена правильно. Змінюючи $x_{\text{Ge}1}$ і $x_{\text{Ge}2}$, жоден з профілів не вдається підігнати відповідно до експерименту доки не змінена форма острівця. Найкраще підганяються карти з профілями, отриманими з АСМ, як показано на рис. 5.22, в. Всі імітації дають положення максимальної інтенсивності від острівців IL при малих q_x . Це вказує на те, що фактично поглиблені острівці є менше деформовані пружно, ніж симульовані. Крім того, розширення розрахункового розподілу інтенсивності по q_x і q_z не дає узгодження з вимірами, вказуючи на той факт, що форма острівця неправильна. Для того щоб отримати меншу пружну релаксацію острівця, існують дві можливості: 1) зменшення аспекту співвідношення висота—основа, плоский острівець буде релаксований менше, ніж більш високий; 2) оптимізація атомної частки Ge, тому що острівець містить у собі менше Ge, ніж об'ємний кристал і знаходиться по параметру ґратки ближче до кремнію, а отже, менше релаксований, ніж збагачений Ge острівець. Звичайно атомна частка Ge в межах острівця не постійна, тому терміни «релаксація острівця» і «атомна частка Ge в острівці» означають усереднені поняття і використовуються, щоб вказати тенденції.

Була проведена симуляція для острівців різної форми і, зокрема, для різного відношення η . Експериментальний пік IL витягнутий вздовж q_z , але вузький вздовж q_x . Це свідчить про те, що острівці є скоріше плоскими, ніж високими. Використання діаметра острівців 180 нм і висоти лише 6 нм нарешті дає дуже гарну узгодженість з експериментальними даними (див. рис. 5.22, в). Змінюючи висоту в розрахунку лише на 1 нм, отримуємо значне відхилення від форми експериментального піка. Зміна ширини острівця менше впливає на результат симуляції. Оскільки острівці дуже широкі, з експериментальної ширини піка можна отри-

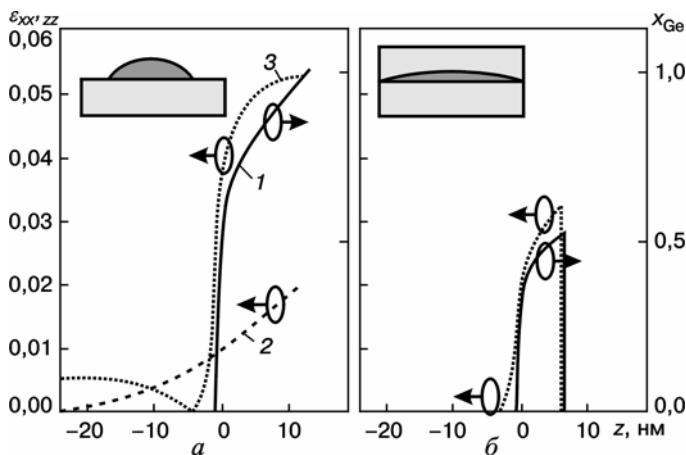
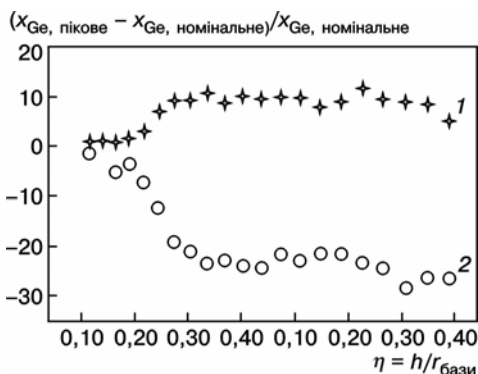


РИС. 5.24. Залежність деформації в площині та вертикальної деформації, а також профілю германію від висоти відносно основи точки: а — дані для острівців без кришки із праці [33]; б — для закритих острівців [38]. 1 — x_{Ge} ; 2 — ϵ_{xx} ; 3 — ϵ_{zz}

мати значення нижньої межі діаметра основи лише 150 нм. Однак варіації атомної частки Ge в острівці, так само, як і варіації відношення їх параметрів (ширина/висота) лише збільшують ширину піка, і усереднений діаметр острівця може бути дещо недооцінений при симуляції.

Що стосується атомної частки Ge, різниця між окремими типами профілів лінійним, кореневим або квадратичним дуже мала і вибір того або іншого типу можна компенсувати використанням різних параметрів x_{Ge} [35, 36]. Залежність профілю була використана в розрахунках, де початкова атомна частка германію становила $x_{Ge} = 0,32 \pm 0,04$ в основі острівця і $x_{Ge} = 0,52 \pm 0,04$ на його вершині. Розподіл деформації відповідно до цього параметра показаний на рис. 5.23, б, в. Порівняно з острівцями без кришки, вирощеними за тих же умов, для яких одержали $x_{Ge} = 0,5$ і $x_{Ge} = 1,0$ [33], значне розбавлення острівців відбувається протягом нарощування із Si. Відношення $\eta = 0,07$ для закритих острівців набагато менше, ніж значення для острівців без кришки $\eta = 0,24$. Коливання розмірів острівця приводять до зміни в формі розподілу дифузної інтенсивності, тоді як положення максимуму залишається незмінним. Стан деформації закритих острівців ненабагато відрізняється від двовимірних плівок. На рис. 5.24 показано порівняння отриманих значень для форми, атомної ча-



РІС. 5.25. Девіація вмісту германію SiGe-острівців, визначена з простого положення піка, від їх фактичного вмісту для різних форм острівця у випадку неприкритого (1) і закритого острівців (2)

стки Ge та деформації для острівців без кришки і закритих острівців.

Ці результати перебувають також в гарному узгодженні з формою і профілями Ge, отриманими з використанням методів ПЕМ. Фактично, використовуючи профіль, показаний в праці [37], і плоску форму, одержуємо узгодження результатів експерименту набагато краще, ніж описане вище. Зазначимо, що DALI-метод дає унікальні результати тільки у випадку дуже плоских острівців, де переріз зразка більш тонкий ніж протяжність закритих острівців. Навпаки, ПЕМ усереднює значення параметрів за матеріалом острівця і оточуючого Si по області «перед» і «поза» острівцем.

Також при аналізі закритих острівців з допомогою рентгенівського випромінювання розсіяна інтенсивність формується не лише від острівців безпосередньо, а й від деформованого оточення кремнію. Ця ситуація відрізняється від випадку острівців без кришки, де головний внесок в розсіану інтенсивність дають острівці. Однак при використанні відповідної моделі розсіяна інтенсивність описується правильно незалежно від відношення η для острівця, коли деформовані області, які оточують острівці, використовуються при обчисленні.

Для неприкритих острівців приблизна чисельна оцінка атомної частки германію і деформації може бути отримана без складних симуляцій положення максимуму інтенсивності в оберненому просторі. Щоб показати проблеми, які зустрічаються в закритих острівцях, був виконаний ряд симуляцій для острівців з різними відношеннями і атомною часткою Ge 37 %, що відповідало усередненій композиції закритих острівців в цих дослідженнях (рис. 5.25).

Поля зміщень і дифракційні рентгенівські картини були розраховані для острівців без кришки і для закритих з тією самою формою. З положення симульованого максимуму інтенсивності були отримані значення деформації в площині і вмісту Ge при використанні простого закону Брегга та за умови тетрагональних спотворень кристалічної ґратки в острівцях.

Досліджувалась форма і склад вздовж SiGe-острівців, прихованих під шаром кремнію. Порівняно з попередніми дослідженнями для непокритих острівців це супроводжується змінами форми острівців. Атомна частка германію змінюється від 32 % в основі острівця і в змочувальній плівці до максимуму 52 % на вершині. Середня атомна частка германію 37 % значно нижча, ніж для вільних острівців 78 %, і переріз більш гладкий для закритих острівців. Протягом росту при температурі 700 °C острівці значно згладжуються. Їх висота зменшується приблизно від 13 нм до 6 нм, в той час як радіус їх основи збільшується від 55 до 90 нм.

5.5.2. ОСОБЛИВОСТІ ДИФРАКЦІЇ ЗА УМОВ КОВЗНОГО ПАДІННЯ НА САМООРГАНІЗОВАНИХ НАНОРОЗМІРНИХ ОСТРІВЦЯХ

У останньому десятилітті інтенсивно досліджувалися напівпровідникові нанорозмірні острівці через їх нові електронні й оптичні властивості, пов'язані із квантовими обмеженнями [39]. Самоорганізовані механізми вирощування типу режиму Странські—Крастанова [2] викликають значний інтерес. Так, гетероепітаксійна плівка може звільнитися від пружної енергії, утворюючи малодислокаційні вільні тривимірні острівці. Структурні властивості, такі, як деформація, форма, розмір, композиція і позиційна кореляція, є істотні для властивостей приладів і вимагають точного аналізу. Крім того, знання структурних деталей дозволяє детально проникнути в технологію формування острівця, яка до кінця ще не зрозуміла.

Рентгенівські методи розсіяння широко використовуються для неруйнівного контролю структурних характеристик систем матеріалів і віднедавна почали застосовуватися до напівпровідникових нанорозмірних систем [40]. Серед найбільш використовуваних методик для дослідження самоорганізованих острівців вирізняється малокутова ковзна геометрія розсіяння рентгенівського випромінювання (GISAXS) [41, 42] і дифракція ковзного падіння (GID) [18, 43, 44]. У GISAXS-методах виявляються флуктуації концентрації електронів, усереднені за атомістичною структурою, тому цей метод чутливий

головним чином до морфологічних властивостей зразка, наприклад розмірів острівця, форми, композиційної і позиційної кореляції острівців. Всі ці топологічні елементи можуть бути також виявлені GID-методом, який, крім того, є чутливим до деформацій ґратки в зразку.

GID- і GISAXS-методи успішно застосовувались для аналізу нанорозмірних структур [45—47]. Однак подальше використання цих методів «страждає» через відсутність зручних підходів, які могли б пояснити механізми формування і розподіл розсіяної інтенсивності в оберненому просторі. Це особливо характерно для острівців з розвинутою структурою грані, де ділянка поверхні кристала без компонентів перекручування не може бути розрахована аналітично в межах наближення лінійної теорії пружності. Хоча чутливість до поверхні і границі поділу, досягнута при ковзному падінні і/або виході в розсіювальному експерименті, збільшується, головна проблема полягає в тому, що кінематична теорія розсіяння в її найпростішому вигляді не може використовуватись. З одного боку, ефекти заломлення приводять до істотної зміни напрямку хвильового вектора всередині і зовні зразка. З іншого боку, внаслідок малих ковзних кутів падіння, а також більшого потоку пучків, які відбиваються від поверхні, нижче критичного кута відбувається повне зовнішнє відбиття. Отже, відбита хвиля бере участь в розсіянні і можна очікувати значного впливу кута падіння на розподіл дифузної інтенсивності в оберненому просторі. Унаслідок теореми взаємності це властиво також для залежності інтенсивності від кута виходу і впливає переважно на вимірювання «з площини» в GISAXS- або GID-конфігураціях. Такі явища ускладнюють інтерпретацію даних з розсіяного рентгенівського випромінювання і роблять використання спотвореної хвилі борнівської апроксимації (DWBA) неминучим.

Дзеркальний пучок застосовувався для визначення шорсткості поверхні поділу [48]. Пізніше була розроблена теорія для GISAXS [10] і GID [44, 46, 49], щоб інтерпретувати розсіяння від автономного нанорозмірного острівця. Однак, хоча відбивна здатність рентгенівського випромінювання критично залежить від кута падіння, систематичне вивчення його впливу на дифузне розсіяння рентгенівського випромінювання не було виконано детально.

У цьому пункті явно показано вплив відбитої хвилі на розподіл розсіяної дифузної інтенсивності. Щоб візуалізувати цей вплив, була вирошена модельна система SiGe острівців методом рідиннофазної епітаксії. Ці острівці внаслідок їх високої досконалості відповідають

відносно однорідному профілю і розміру. Крім того, вони є досить великими, щоб дати досить високий сигнал розсіяння.

Оскільки і форма острівця, і поле внутрішніх напружень були тривимірними (3D) за природою, необхідно вказати, що недостатньо зондувати дифузну інтенсивність простим одновимірним сканом; це повинен бути принаймні двовимірний перетин (2D) в оберненому просторі, хоча тривимірний збір інформації був би найкращий. Карта оберненого простору повинна бути виконана з досить високою кутовою роздільною здатністю. Така точність може досягатись за допомогою трикристального спектрометра. Однак великий час збору даних є серйозною перешкодою і робить цю технологію малопридатною для отримання двовимірних або тривимірних розподілів інтенсивності дифузного розсіяння від острівців, навіть при наявності дуже інтенсивного потоку рентгенівського випромінювання. Труднощі великих часів збору даних можуть бути переборені за допомогою сучасних методів, наприклад, при використанні плоских детекторів рентгенівського випромінювання або лінійного позиційно-чутливого детектора (ПЧД).

Рентгенівські карти інтенсивності дифузного розсіяння вимірювались в GISAXS- і GID-геометриях розсіяння при різних кутах падіння. Порівняння з відповідним теоретичним моделюванням дозволяє якісно і кількісно довести обґрунтованість DWBA-наближення.

У наступному пункті розглянемо наближення DWBA, яке далі буде використовуватись для аналізу GISAXS- і GID-результатів.

5.5.2.1. Теорія GISAXS і GID методів

У структурі спотвореної хвилі борнівської апроксимації амплітуду розсіяної хвилі можна записати так:

$$A(\mathbf{q}) = \frac{k^2}{4\pi} \int E^{out}(\mathbf{r}) \delta\chi(\mathbf{r}) E^{in}(\mathbf{r}) dV, \quad (5.23)$$

де $E^{in}(\mathbf{r})$ і $E^{out}(\mathbf{r})$ — хвильові поля в розсіювальному об'єкті, утворені вхідною плоскою хвилею рентгенівського випромінювання в ковзному напрямі і тою, що виходить із точки спостереження. Вони відповідають точним «неспотвореним» динамічним задачам дифракції, де $\delta\chi(\mathbf{r})$ — збурення діелектричної поляризованості і k — модуль хвильового вектора у вакуумі. Зазначимо, що амплітуди

всіх часткових хвильових полів нормалізовані щодо вхідної хвилі, тобто амплітуда вхідної з вакууму хвилі встановлена як одиниця.

DWBA може бути описана у такий спосіб: падаюча плоска вакуумна хвиля викликає хвильове поле в середині і зовні зразка. Це хвильове поле описується точними співвідношеннями в зразку з непорушеною структурою. Таким чином утворюється динамічне розсіяння від неспотвореного потенціалу. На наступному етапі це хвильове поле (дифузне) розсіюється спотвореним зразком. Після процесу розсіяння розсіяні хвилі залишають кристал.

DWBA являє собою теорію збурень першого порядку. Точні розв'язки неспотвореної системи розраховані динамічно, тоді як дифузне розсіяння від збуреної системи розраховувалось кінематично. Детальний опис теорії DWBA було подано в праці [5].

У більш загальному випадку динамічна задача зображена трьома плоскими хвилями у вакуумі: вхідна хвиля, дзеркально відбита хвиля і - для GID дифрагована хвиля, з амплітудами E_m^{in} й хвильовими векторами \mathbf{k}_m^{in} . Для цих вхідних хвильових полів інвертовані ви-хідні хвильові поля можуть бути побудовані з амплітудами E_m^{out} й хвильовими векторами \mathbf{k}_m^{out} . Індокси m й n показують відповідно падаючу хвилю ($m, n = 0$), дзеркально відбиту хвилю ($m, n = 1$) і дифраговану хвилю ($m, n = 2$). Зазначимо, що ці хвилі — вирази для точного неспотвореного кристала. Взаємні комбінації \mathbf{k}_m^{in} і \mathbf{k}_n^{out} задають вектори розсіяння \mathbf{q}_{mn} так:

$$\mathbf{q}_{mn} = -(\mathbf{k}_m^{in} + \mathbf{k}_n^{out}). \quad (5.24)$$

Згідно з динамічною теорією кожна падаюча плоска хвиля із хвильовими векторами \mathbf{k}_m^{in} і \mathbf{k}_m^{out} створює відповідні хвильові поля в кристалі, які утворюють пари зв'язаних плоских хвиль із хвильовими векторами $\mathbf{K}_{0(1,2)}^{in,out}$ та $\mathbf{K}_{h0(1,2)}^{in,out}$ (рис. 5.26), і відповідні амплітуди. Компоненти векторів $\mathbf{K}_{0(1,2)}^{in,out}$ й $\mathbf{K}_{h0(1,2)}^{in,out}$ знайдені з дис-персійних рівнянь [49]. Відповідні амплітуди $D_{0(1,2)}^{in,out}$ й $D_{h0(1,2)}^{in,out}$ для співвідношень усередині середовища розраховані при розв'язуванні системи на границі поділу [50, 51]. Таким чином, обчислення розсіяння від напівнескінченної підкладки вимагає розгля-

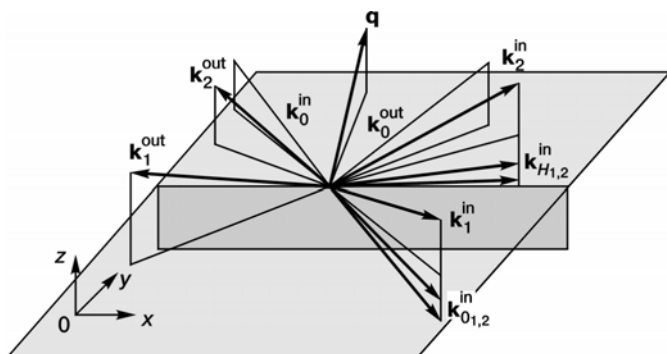


РИС. 5.26. Співвідношення між хвильовими векторами вхідних і вихідних хвиль для дифракції в геометрії ковзного падіння. Індекси 0, 1 і 2 відповідають вхідній, відбитій і дифрагованій хвилям відповідно

ду чотирьох хвиль у кристалі, і DWBA-схема зв'язків дає нам 16 каналів, в яких може відбутися розсіяння [52]. Однак, коли дифузне розсіяння розраховується від автономного острівця, тільки три вакуумні хвилі мають бути прийняті до уваги: падаюча, дзеркальна й дифрагована хвиля. У цьому випадку повна амплітуда може бути виражена так:

$$A(\mathbf{q}) = \frac{k^2}{4\pi} \sum_m^2 \sum_n^2 E_m^{\text{in}} E_n^{\text{out}} \delta\chi_{mn}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dV, \quad (5.25)$$

де $\delta\chi_{mn}(\mathbf{r})$ — збурення, що задається такими виразами:

$$\delta\chi_{mn}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \chi_0(\mathbf{r}), & \frac{|\mathbf{k}_m^{\text{in}} \mathbf{k}_n^{\text{out}}|}{|\mathbf{k}_m^{\text{in}}| |\mathbf{k}_n^{\text{out}}|} \approx 1, \\ \chi_h(\mathbf{r}), & \frac{|\mathbf{k}_m^{\text{in}} \mathbf{k}_n^{\text{out}}|}{|\mathbf{k}_m^{\text{in}}| |\mathbf{k}_n^{\text{out}}|} \approx \cos(2\vartheta), \end{cases} \quad (5.26)$$

ϑ_B — брегівський кут обраного відбиття. Тут збурення $\delta\chi(\mathbf{r})$ приймається за поляризованість острівця, а $\chi_0(\mathbf{r})$ і $\chi_h(\mathbf{r})$ — його нульовий і h - та фур'є-компоненти. Вони слабо залежать від \mathbf{r} , якщо брати до уваги можливий композиційний градієнт в острівці. Зазначимо,

що вирази в рівняннях (5.25) і (5.26) строго виконуються лише для центросиметричних структур.

5.5.2.2. GISAXS в автономних острівцях

Рівняння (5.25) — загальний вираз, який застосовний для обох геометрій GID і GISAXS. Однак у випадку GISAXS амплітуди дифрагованої хвилі $E_2^{in,out}$ можуть дорівнювати нулю, і тільки падаючу й дзеркально відбиту хвилі потрібно враховувати при розгляді розсіяння від острівців. Отже можливі наступні чотири канали розсіяння (процес 1—4) (рис. 5.27): 1) дифузне розсіяння від острівця; 2) дифузне розсіяння від острівця, супроводжуване дзеркальним відбиттям від поверхні; 3) дзеркальне відбиття від поверхні, супроводжуване дифузним розсіянням від острівця; 4) дзеркальне відбиття від поверхні з наступним дифузним розсіянням від острівця та подальшим дзеркальним відбиттям від поверхні. Крім цих чотирьох внесків можна також розглянути розсіяння від підкладки, що приводить до додаткового п'ятого каналу розсіяння: 5) проникнення в підкладку, супроводжується дифузним розсіянням в підкладці, з наступним виходом у вакуум (рис. 5.27, процес 5). Дифузне розсіяння від підкладки починається із проникаючих в кристал полів деформацій, утворених острівцем. Як з'ясувалось, ці поля деформації впливають на GISAXS-інтенсивності.

У випадку GISAXS амплітуди $E_n^{in,out}$ часткових хвильових полів можуть бути легко розраховані за допомогою рівняння Френеля. Для малих кутів падіння порівняно з кутом Брюстера відбиття Френеля і коефіцієнти проходження r і t відповідно є незалежними від поляризаційного стану рентгенівських пучків і можуть бути виражені як функція куту падіння та комплексного показника заломлення n_0 :

$$r(\alpha) = \frac{E_1 \sin \alpha - \sqrt{n_0^2 - \cos^2 \alpha}}{E_0 \sin \alpha + \sqrt{n_0^2 - \cos^2 \alpha}},$$
$$t(\alpha) = \frac{E_1}{E_0} \frac{2 \sin \alpha}{\sin \alpha + \sqrt{n_0^2 - \cos^2 \alpha}}, \quad (5.27)$$

де E_i — амплітуда заломленої хвилі в кристалі. Використовуючи ці вирази, для диференційного поперечного перерізу дифузного розсіяння записуємо:

5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{q}_{\text{вх}}, \alpha_i, \alpha_f) = r_0^2 |A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5|^2, \quad (5.28)$$

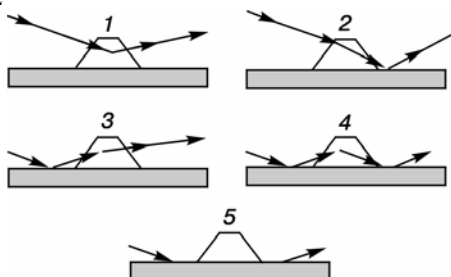


РИС. 5.27. Схема п'ятиканального процесу розсіяння на ізольованих острівцях і підкладці

де чотири амплітуди розсіяння від острівця

$$A_1(\mathbf{q}) = \frac{k^2}{4\pi} \int_{\text{острів}} \chi_0(\mathbf{r}) e^{i(q_{\parallel} + q_1^{\perp})r} dV,$$

$$A_2(\mathbf{q}_{\text{вх}}, \alpha_f) = r(\alpha_f) \frac{k^2}{4\pi} \int_{\text{острів}} \chi_0(\mathbf{r}) e^{i(q_{\parallel} + q_2^{\perp})r} dV, \quad (5.29)$$

$$A_3(\mathbf{q}_{\text{вх}}, \alpha_i) = r(\alpha_i) \frac{k^2}{4\pi} \int_{\text{острів}} \chi_0(\mathbf{r}) e^{i(q_{\parallel} + q_3^{\perp})r} dV,$$

$$A_4(\mathbf{q}_{\text{вх}}, \alpha_f, \alpha_i) = r(\alpha_f)r(\alpha_i) \frac{k^2}{4\pi} \int_{\text{острів}} \chi_0(\mathbf{r}) e^{i(q_{\parallel} + q_4^{\perp})r} dV$$

та амплітуда розсіяння від підкладки

$$A_5(\mathbf{q}_{\text{вх}}, \alpha_f, \alpha_i) = r(\alpha_f)r(\alpha_i) \frac{k^2}{4\pi} \int_{\text{підкл}} \chi_0(\mathbf{r}) e^{i(q_{\parallel} + q_5^{\perp})r} dV, \quad (5.30)$$

де $\delta\chi_0$ — збурення в підкладці.

Згадаємо дві важливі властивості:

1. Дифузна інтенсивність, яка задана рівняннями (5.29) і (5.30), залежить від відбиття Френеля і коефіцієнтів про-пускання $r(\alpha_{i,f})$ і $t(\alpha_{i,f})$, де нижні індекси i і f відповідають вхідним і вихідним хви-

лям. Ці коефіцієнти значно залежать від кута падіння i або виходу $\alpha_{i,f}$ щодо поверхні зразка. Однак, коли коефіцієнт відбиття близький до одиниці нижче критичного

ТАБЛИЦЯ 5.3. Значення імпульсу для п'яти різних амплітуд розсіяння

Номер індекса j	q_j^{\perp}
1	$-\mathbf{k}_{0,z}^{out} - \mathbf{k}_{0,z}^{in}$
2	$+\mathbf{k}_{0,z}^{out} - \mathbf{k}_{0,z}^{in}$
3	$-\mathbf{k}_{0,z}^{out} + \mathbf{k}_{0,z}^{in}$
4	$+\mathbf{k}_{0,z}^{out} + \mathbf{k}_{0,z}^{in}$
5	$-\mathbf{K}_{0,z}^{out} - \mathbf{K}_{0,z}^{in}$

кута повного зовнішнього відбиття α_c , то коефіцієнт пропускання має явний максимум. Це приводить до так званих Yoneda-крил в дифузній інтенсивності.

2. Відповідно до рівняння (5.24) вертикальна зміна імпульсу q' розрізняється для цих чотирьох амплітуд (див. табл. 5.3).

Дифузна інтенсивність, таким чином, є функцією \mathbf{q} , кутів

падіння та виходу. Відбивні здатності $r(\alpha_{i,f})$ мають більший вплив на дифузну інтенсивність, коли $(\alpha_{i,f})$ вибрані близько до критичного кута повного зовнішнього відбиття α_c . Для більш високих кутів відбивні здатності малі і ними можна знехтувати. У цьому випадку потрібно розглянути тільки перший член у правій частині рівняння (5.28) і отримати той же самий результат, який передбачений кінематичною теорією.

5.5.2.3. Дифракція при ковзному падінні в автономних острівцях

Як уже зазначалось, в найбільш загальному випадку в кристалі потрібно розглянути всі чотири хвилі. Проте, коли дифузне розсіяння від автономних острівців розраховано, лише три вакуумних хвилі повинні бути прийняті до уваги, і співвідношення (5.25) може використовуватись. Ці подвійні суми містять у собі дев'ять термів (тобто дев'ять каналів розсіяння), які відповідають всім можливим типам зв'язку між \mathbf{k}_m^{in} і \mathbf{k}_n^{out} . Необхідний точний рахунок дифрагової хвилі, однак лише для обмеженої області оберненого простору, коли падаюча «в» або «з» хвилі задовольняють динамічну бреггівську умову для підкладки і E_2^{in} та E_2^{out} стають істотними. Але у випадку, коли розсіяний сигнал розглядається далеко від відбиття підкладки (тобто дифузне розсіяння від острівця), тільки чотири з дев'яти членів, як очікується, будуть істотними: падаюча і дзеркально

відбиті хвилі для кожного \mathbf{k}_m^{in} та \mathbf{k}_n^{out} . На рис. 5.27 (процеси 1—4) наведені чотири канали розсіяння з відповідним вертикальним імпульсом q'_j (див. табл. 5.3).

У випадку GID-дифракції, особливо для кутів падіння більших, ніж критичний кут повного зовнішнього відбиття, амплітуди дзеркальних пучків залежать від азимутального (в площині) напрямку. При цьому необхідно встановити граничні умови на поверхні, використовуючи динамічне розповсюдження хвилі в підкладці, тобто вводячи дисперсійні поправки. Це означає, що рівняння Френеля (5.27) в загальному вигляді для GISAXS-GID не можуть більше використовуватись.

5.5.2.4. Розрахунок поля деформацій методом скінченних елементів

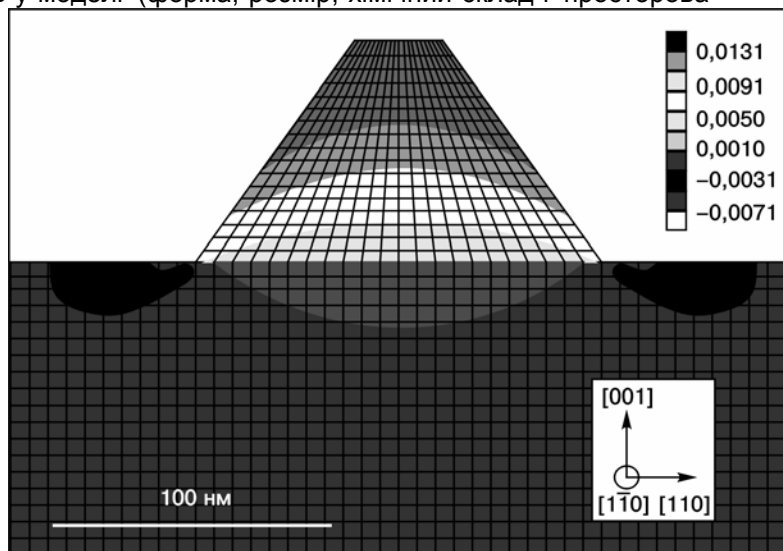
У останні роки став успішно застосовуватись метод скінченних елементів (МСЕ) для розрахунку деформаційних полів у мезоскопічних структурах [53—56]. МСЕ ґрунтується на лінійній теорії пружного континуума, включаючи повну пружну анізотропію. Цей метод довів свою застосовність для структурних розмірів у кілька десятків нанометрів. Для систем, які будемо розглядати тут, має силу лінійна теорія пружності (рис. 5.28).

Результати, отримані МСЕ, можуть використовуватись для симуляції дифузного розсіяння. У праці [54] розроблено наступне ітераційне наближення для визначення даних про нанорозмірні острівці: 1) створення структурної моделі в реальному просторі, що містить у собі розмір острівця, форму і хімічний склад; 2) МСЕ обчислення тривимірного поля деформації всередині острівця, навколишній підкладці і змочувальних шарів; 3) чисельні обчислення дифузного розсіяння з використанням формули, описаної в попередніх розділах; 4) порівняння з експериментальними даними; 5) подальше уточнення моделі 1 і обчислення дифузної інтенсивності від нової моделі до досягнення задовільної згоди.

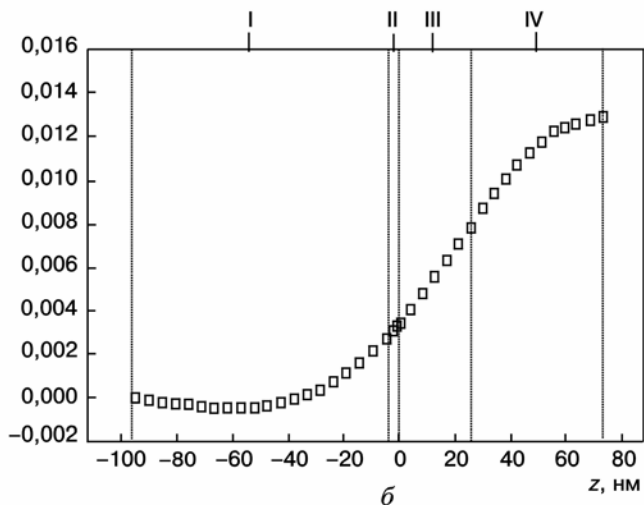
Компоненти поля зсувів $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_1, u_2, u_3)$, які використовуються в імітаціях рентгенівського випромінювання, пов'язані з асиметричними складовими тензора пружної деформації ε_{ij} за допомогою виразу

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (5.31)$$

Взагалі, це наближення не може використовуватись як істинна процедура «фітування», тому що є занадто багато вільних параметрів у моделі (форма, розмір, хімічний склад і просторова



а



б

РИС. 5.28. Розрахунок методом скінченних елементів SiGe-піраміди (а), вирощеної когерентно на (001) Si (б)

5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней

кореляція). Отже, необхідно включити дані, отримані іншими методами, наприклад інформацію щодо форми й розмірів, отриманих АСМ. Обчислення зроблені для єдиного острівця і його нав-

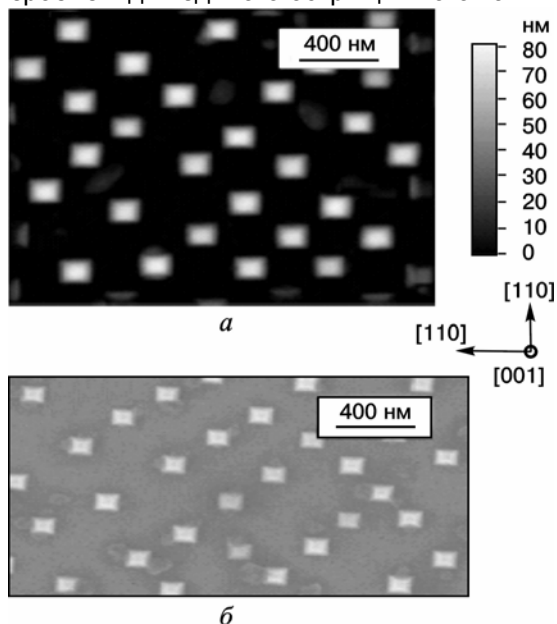


РИС. 5.29. АСМ (а) і СЕМ (б) зображення SiGe-наноострівців, вирощених на Si(001) методом РФЕ

колишнього середовища. Послідовна імітація дифузної інтенсивності виконана чисельно, тобто на регулярній сітці, що складається з базової комірки. Таким чином, інтеграли в рівнянні (5.25) повинні замінюватись дискретною сумою всіх елементів регулярної сітки підкладки. Чисельний процес повинен бути виконаний для базових комірок приблизно від 10^5 до 10^6 і більше ніж 10^4 значень \mathbf{q} .

Різні типи острівців були створені або з однорідною атомною часткою германія, або з різкою її зміною приблизно в одній третій частині висоти острівця. Зокрема, на рис. 5.28 зображено розрахункове поле деформації для острівця SiGe (базова ширина 140 нм, висота 70 нм, {111} грані) у випадку $x = 24\%$ в більш низькій третій частині острівця і $x = 29\%$ у верхній частині. Ця модель відповідає останнім

дослідженням, отриманим за допомогою високороздільної дифракції при використанні компланарних 004- і 224-рефлексів [11]. Зазначимо, що розглядається повна деформація, тобто стала кристалічної ґратки підкладки використовується як еталон. Це вигідно, тому що дифузне розсіяння чутливе до атомних зсувів щодо ідеальної ґратки підкладки.

Тут використовувався МСЕ для обчислення поля деформації всередині мезоскопічної структури. Варто нагадати, що різні наближення, які викликані розсіянням лініями рівної деформації, були розроблені в працях [44, 46, 58]. Однак це наближення працює тільки для циліндричних симетричних острівців і не може, таким чином, застосовуватися до зрізаних пірамід із квадратною основою.

5.5.2.5. Експериментальні результати

Для кількісного доказу обґрунтованості теоретичних наближень, описаних у розд. 2, моношар з дуже регулярними автономними $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -острівцями з номіналом германію $x = 30\%$ були вирощені когерентно на $\text{Si}(001)$. Острівці $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ були вирощені рідкофазною епітаксією (LPE) [59] з використанням розчину вісмуту. Поверхнева морфологія була досліджена атомно-силовою мікроскопією (АСМ) і сканувальною електронною мікроскопією (СЕМ) так, що точна форма й розмір острівців могли бути визначені з високою точністю. Як зображено на рис. 5.29, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(001)$ острівці сформовані подібно зрізаним пірамідам з бічними гранями $\{111\}$ й верхньою гранню (001).

Розподіл за розмірами острівця є скоріше вузьким з головним значенням $w = 140$ нм для базової ширини острівця. Це значення відповідає спостережуваній залежності $w \propto f^{-2,03}$ між базисною шириною острівців w і ґратчастою неузгодженістю f між $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ і кремнієм [60, 61]. Острівці утворюють планарну систему розширених рядів, вибудованих вздовж напрямів $\langle 100 \rangle$. Походження цих рядів обговорюється в працях [62, 63].

Рентгенівські дослідження проводились на європейському синхротроні ESRF у Греноблі. Експеримент GISAXS був виконаний на пучку ID11 за допомогою дуже колімованого і вузького падаючого пучка. Використовувались монохроматичні рентгенівські промені з довжиною хвилі $\lambda = 1,28 \text{ \AA}$. Пучок рентгенівського випромінювання був приведений до розмірів приблизно $50 \text{ мкм} \times 50 \text{ мкм}$. Прилад із зарядовим зв'язком (CCD) — детектор з розміром елемента зображення $60 \text{ мкм} \times 60 \text{ мкм}$ — був поміщений на відстані більше ніж 4 м від зразка.

Повна траєкторія пучка між зразком і детектором проходила в вакуумі. Після зразка сильний первинний і дзеркально відбитий пучки зменшувались за допомогою екранів у вигляді вузьких металевих дротів, щоб уникнути режиму насичення твердотільного детектора

(ТТД). Ці експериментальні умови гарантували дуже гарну роздільну здатність і статистику набору даних. Типові часи збору інформації для єдиного ТТД мали порядок 300 с. При гарній апроксимації інтенсивність ТТД відповідає планарному двовимірному перетину оберненого простору.

Використання цієї установки дозволяло зареєструвати повний тривимірний розподіл інтенсивності навколо точки оберненої ґратки типу $(hk0)$ в площині з високою роздільною здатністю.

5.5.2.6. Розсіювання рентгенівських променів при малокутовому ковзному падінні

Набір різних експериментальних GISAXS картин інтенсивності, зареєстрований при різних кутах падіння, наведений на рис. 5.30, 5.31. Чітко видно залежність експериментальної GISAXS-інтенсивності від кута падіння α_i . Експериментально спостережувана поведінка інтенсивності може бути прекрасно відтворена за допомогою обчислень при використанні п'яти каналів DWBA наближення (див. рівняння (5.29), (5.30)). Зокрема, дифузне розсіювання біля дзеркального пучка ясно відтворено на симуляціях. При низьких кутах падіння (рис. 5.30) дифузне розсіювання біля крил «Yoneda» та дифузна інтенсивність навколо дзеркального пучка об'єднуються і не можуть бути ясно відділені. Зі збільшенням кута падіння (рис. 5.31) дифузна інтенсивність, яка пов'язана із дзеркальним пучком, переміщується до більш високих значень q_{001} (щодо крил «Yoneda»). Дзеркальний пік і крила «Yoneda» показують $\{111\}$ CTR, які відповідають бічним граням острівців. Ці граневі CTR модулюються інтерференційними смугами, які пов'язані з кінцевим розміром острівців. Внаслідок ефекту заломлення «Yoneda» CTR нахилиється і перетинає вісь q_{001} в кінцевому значенні q_{001} (але не в $q_{001} = 0$ як очікується в кінематичній теорії розсіювання). Навпаки, CTR від дзеркальних пучків з'являються під кутом приблизно $\pm 55^\circ$. Це значення можна приблизно підігнати до кута між площинами $\{111\}$ і $\{001\}$.

Експериментальні і відповідні теоретичні дані знаходяться у дуже гарній відповідності один до одного, і лише тонкі деталі можуть розрізнятися.

1. Примітно, що ці $00l$ CTR є досить широкими, в той час як експериментальні CTR (інтенсивність яких може бути зменшена металевим екраном в експерименті) є дуже вузькими. Цей кінцевий розмірний ефект відповідає обмеженому динамічному діа-

пазону зразків, які використовувались у симуляції. На імітаціях розміри горизонтальної підкладки були в три рази ширші ніж база острівця, а вертикальний розмір був близький до висоти острівця.

2. Зазначимо, що тільки дифузне розсіяння було розраховано DWBA. Тому сильний дзеркальний пучок відсутній в картинах імітації.

3. Гострі сателітні стрижні приблизно в $q_{110} = 0,003 \text{ 1/\AA}$ видимі з експериментальних даних. Ці стрижні створені просторовими кореляціями між сусідніми острівцями, і середня відстань між ними вздовж $\langle 110 \rangle$ дорівнює приблизно $\langle d_{110} \rangle = 210 \text{ нм}$. Просторові кореляції, однак, не розглядалися на імітаціях [62—64].

4. Експериментальна картина інтенсивності, в деякому значенні, розмита порівняно з імітаціями, які мають набагато більше деталей. Це може бути викликано кінцевим розподілом розмірів острівця. Однак, оскільки матриця острівця досить щільна, явища багатократного заломлення і/або розсіяння також могли давати свій вплив. Схема, зображена на рис. 5.27, є ідеалізованим випадком. Дійсно, розсіяний і/або заново відбитий пучки повинні пройти через інший, додатковий, острівець, перш ніж вони можуть покинути зразок. Це може привести до поглинання і явищ багатократного заломлення.

5.5.2.7. Ковзна дифракція падіння

Зосередимо увагу спочатку на експериментальних даних щодо дифузної інтенсивності біля 220-точок оберненої ґратки в площині, яка була зареєстрована при кутах падіння, близьких до критичного кута повного зовнішнього відбиття. Експериментальна картина інтенсивності, показана на рис. 5.32, а, є дуже складною і дійсно визначається комплексною взаємодією між формою, розміром і полем деформації всередині і поблизу SiGe-острівця. У радіальному напрямі, тобто у напрямі вектора розсіяння, можна спостерігати три сильних піки біля $q_r = 3,259, 3,247$ і $3,239 \text{ 1/\AA}$, що обумовлені горизонтально розширеними ділянками усередині острівців. При зменшенні значень q_r спостерігається горизонтальна деформація, що збільшується. Як можна побачити з рис. 5.32, горизонтальний компонент деформації ε_{xx} — строго монотонна функція висоти z в острівці. Тому, дифузне розсіяння при низьких значеннях q_r може бути пов'язане з областями, близькими до вершини острівця, тоді як при високих

5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней

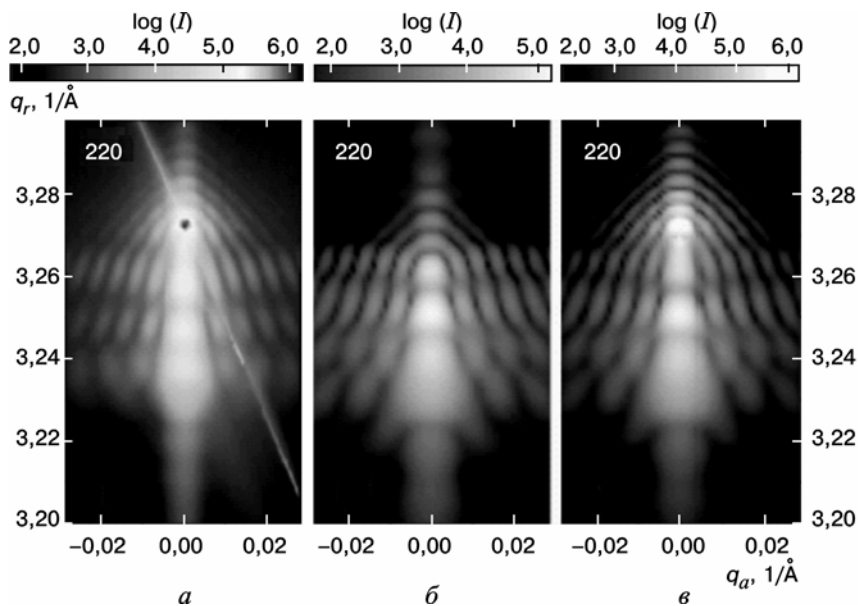


РИС. 5.32. Дифузна інтенсивність в околі 220 (в площині) точки оберненої ґратки: а — експеримент; б — симуляція лише острівці; в — симуляція острівці і підкладка. Кут падіння $\alpha_i = 0,25^\circ$

значеннях q_r спостерігається розсіяння від підкладки острівця. Це також викликає явні інтерференційні смуги, які визначаються обмеженим горизонтальним розміром острівця. При низьких значеннях q_r , відстань між інтерференційними смугами є більшою, і в такий спосіб зондується мале значення латерального розтягу в реальному просторі, тобто вершина острівця. Навпаки, зменшення відстані між інтерференційними смугами при просуванні до більших значень q_r , допускає великий горизонтальний розтяг у реальному просторі. Відповідна область розташована в підкладці острівця.

Цікаво з'ясувати розходження між сигналом розсіяння від острівця безпосередньо і сигналом, що дає початок дифузному розсіянню в підкладці. Як було зазначено, розсіяння від автономних острівців вимагає розгляду двох хвиль (падаючу і дзеркально відбиту), тоді як для дифузного розсіяння від підкладки необхідно обробити всі чотири хвилі, які є в кристалі.

На рис. 5.32, б і в видно, що дифузні інтенсивності від острівця і підкладки майже відділені в оберненому просторі. При низьких зна-

ченнях q_r сигнал розсіяння є результатом деформованих ділянок в острівці, тоді як дифузна інтенсивність від підкладки головним чином сконцентрована при значеннях навколо $q_r = 3,272 \text{ 1/\AA}$. Зазначимо, що частоти інтерференційної картини при більших значеннях q_r розрізняються для різних обчислень. Інтерференційні смуги визначені не фактичним горизонтальним розміром острівця, а латеральною довжиною поля деформації в підкладці. Цей факт повинен дозволити в майбутньому досліджувати поля деформації, які проникають від острівця в підкладку.

Хоча компоненти тензора поперечної деформації — гладка функція z , три явних піки помічені в дифузному розсіянні вздовж q_r . Початок цих піків — ефект фази, і його можна просто пояснити. Спочатку обмежимося прямим каналом розсіяння, що є домінуючим при високих кутах падіння. З одного боку, на основі рівняння (5.25) показникова функція має максимуми, коли бреггівська умова локально виконана в площині і локальна атомна горизонталь періоду може бути відповідно оцінена. З іншого боку, показникова функція дає додаткові максимуми для $q' = qz = q_{001} = 2\pi(n/z)$, де n — значення цілого числа і z — висота в острівці. З простих причин приймемо лінійне збільшення бічних параметрів ґратки зі збільшенням значень z (рис. 5.33, а). Це звичайно досить велике наближення, тому що компоненти тензора поперечної деформації — не лінійна функція z . Крім того, ε_{xx} залежить не тільки від z , а й від x і y (див. рис. 5.33). Однак гладка, монотонна поведінка ε_{xx} як функції z може виправдати лінійну апроксимацію. Для 220-відбиттів положення $(q_z, q_r) = (q_{001}, q_{110})$ максимумів у оберненому просторі задаються так:

$$q_{001} = \frac{2\pi n(a_{yy}^h - a_{yy}^o)}{h} \left[\frac{2\pi\sqrt{8}}{q_{110}} - a_{yy}^o \right]^{-1}. \quad (5.32)$$

Значення a^h і a^o — горизонтальні параметри ґратки нагорі і в основі острівця відповідно; h — висота острівця. Тому що острівець вирощений когерентно на підкладці, a^o ідентична сталій кристалічної ґратки кремнію.

Співвідношення (5.32) наведені на рис. 5.33, б. Із цього рисунка видно, що число максимумів вздовж q_{110} , які є видимими в дифузному розсіянні, збільшується зі збільшенням q_{001} . Максимуми при даному значенні q_{001} є рівновіддалені відносно q_{110} .

5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней

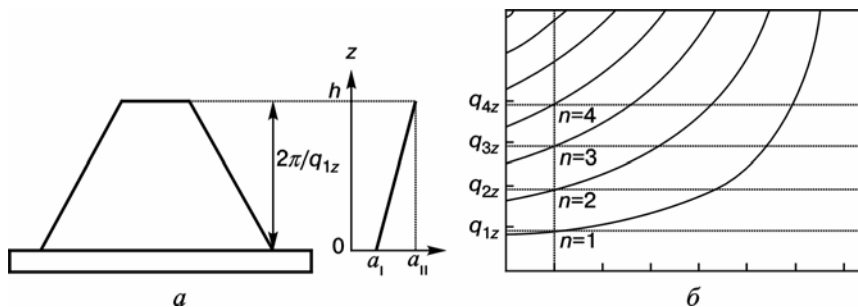


РИС. 5.33. Вплив лінійного росту латерального параметра ґратки (а) на положення максимумів в оберненій ґратці (б)

(З рівняння (5.32) інтервали максимумів — константа для $\varepsilon_{yy}^{\max} = (a_{yy}^h - a_{yy}^o) / a_{yy}^o \leq q_{001}(2\pi / h)$.) Це прямий наслідок латеральної деформації, що лінійно збільшується в зображеному острівці на рис. 5.33, а. Будь-які девіації від цього закону лінійності повинні в такий спосіб приводити до нерівновіддалених положень максимумів. Дійсно, комплексний тензор поля деформації в тривимірному острівці не виправдовує припущення про лінійне збільшення (див. рис. 5.28). Таким чином, дифузне розсіяння від автономного острівця повинно показати так чи інакше різну поведінку положень для піка із простої формули (5.32).

На рис. 5.34 і 5.35 показані експериментальні і симульовані карти дифузного розсіяння в площині q_{110} — q_{001} . Зазначимо, що безпосередньо зображена тільки симуляція розсіяння від острівця, а дифузне розсіяння від підкладки опущено. Дані показують явний вплив α_i на дифузну картину інтенсивності. Спочатку обговоримо більші кути падіння, наприклад $\alpha_i = 0,60^\circ$. В експериментальних даних і симуляції форма дифузної інтенсивності подібна до ізодифузних ліній, зображених на рис. 5.33, і демонструє якісну коректність простої моделі, описаної рівнянням (5.32). При більших кутах α_i відповідні значення q_{001} є більшими, і згідно з рис. 5.33, б уздовж q_{110} з'являються вузькі піки. Вони видні на імітації, але не можуть бути розділені в експерименті. Для менших значень α_i піки уздовж q_{110} зміщені назовні, і тільки два піки видно при $\alpha_i = 0,125$. Крім того, грані $\{111\}$ СТР-острівця сильно просунуті до характеристичної частини, що нахилена приблизно під кутом 55° до відповідної осі q_{001} . До того ж, при менших кутах падіння пряме розсіяння не тільки від острівця, а і від всіх інших каналів розсіяння стає важливим. Це приводить до додаткової структури в дифузному розсіянні.

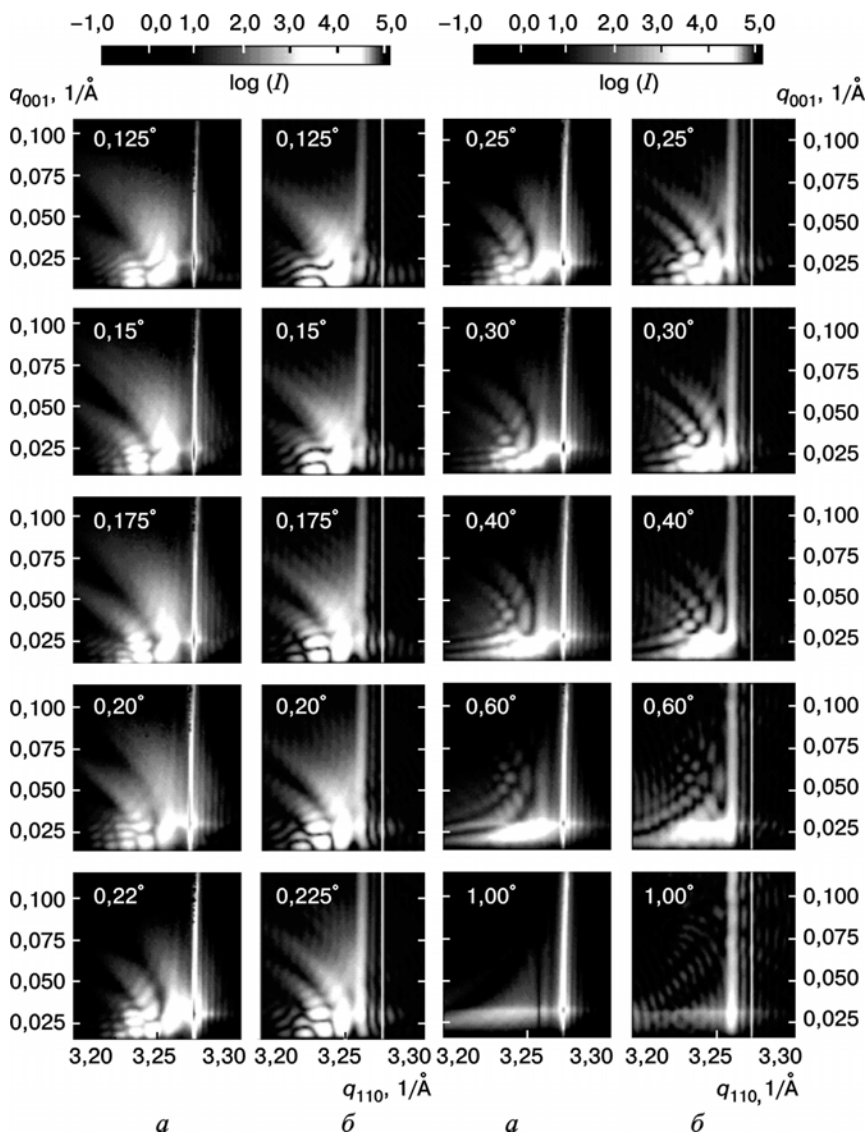


РИС. 5.34. Експериментальні (а) і симульовані (б) розподіли дифузної інтенсивності в GISAXS-експерименті від SiGe-острівців при кутах падіння від $0,125^\circ$ до $0,225^\circ$

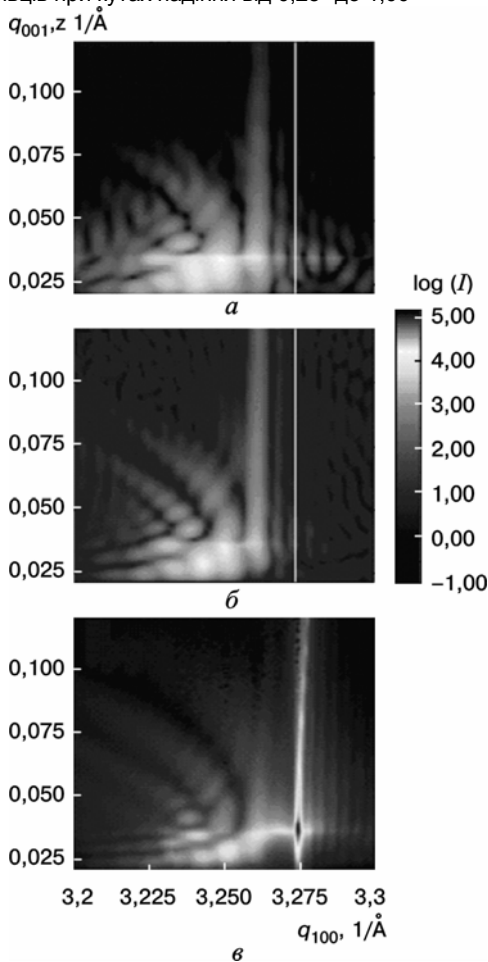
5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней

РИС. 5.35. Експериментальні (а) і симульовані (б) розподіли інтенсивності в GISAXS-експерименті від SiGe-острівців при кутах падіння від $0,25^\circ$ до $1,00^\circ$

РИС. 5.36. Порівняння теоретично розрахованих картин розсіяння (GIS, 220 , $\alpha_i = 0,03^\circ$) які ґрунтуються на чотири- (а) та дев'ятиканальному (б) наближенні DWBA з експериментальною (в) від SiGe-острівців. У розрахунках використана модель, яка наведена на рис. 5.28

Повна картина дифузного розсіяння рентгенівського випромінювання тепер стає дуже складною і не може інтерпретуватися простим зображенням. Однак існує гарна узгодженість між експериментом і теоретичною імітацією на рис. 5.34 і 5.35, що доводить чудове застосування DWBA для описання фактичного сценарію розсіяння автономними острівцями.

Результати обчислення, наведені на рис. 5.32, 5.34 і 5.35, ґрунтуються на розсіянні з дев'ятьма каналами (див. рівняння (5.25) і (5.26)). Як можна помітити на рис. 5.32, б і в, дифузні інтенсивності від острівця й підкладки майже відділені в оберненому просторі. Тому можна очікувати, що звуження тільки до чотирьох каналів розсіяння приведе до картини дифузної інтенсивності. На рис. 5.36, а і б порівнюються обчислення, виконані в структурі із чотирма і дев'ятьма каналами відповідно. У даному випадку обмежимося лише розсіянням від автономних острівців. Якісно всі топологічні елементи дифузного розсіяння, які пов'язані з острівцями, виявляються на обох рисунках. Однак деякі відмінності все ж спо-



стерігаються, і дев'ятиканальне наближення набагато краще узгоджується з експериментом (рис. 5.36, в).

5.6. ДОСЛІДЖЕННЯ ВПОРЯДКУВАННЯ І ФОРМИ МАСИВУ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Найбільш сильні обмеження в трьох вимірах, наприклад InAs КТ на арсенід галієвій підкладці, досягнуті в так званих самоорганізованих системах, вирощених методом Странські—Крастанова [2]. У моделях для наведеної деформації, самоорганізації і впорядкування це показано для вертикально укладених КТ, відокремлених тонкими плівками змочувального шару, які можуть збільшити латеральне і вертикальне впорядкування, а також гомогенність розмірів [65]. Експериментально показано, що деформаційне поле КТ простягається далеко в змочувальну плівку й підкладку [66].

Деформаційне поле, яке оточує кожен КТ, викликає взаємодію між точками, що впливає на ріст сусідніх точок і, таким чином, спричиняє впорядкування і викликає виникнення ближнього порядку в сусідніх точках. Ця схема застосовувалась для інтерпретації вертикального впорядкування в багатошарових InAs/GaAs КТ [67]. Висока експериментальна роздільна здатність рентгенівської дифракції відіграє важливу роль при вивченні структур у вертикальній упаковці InAs КТ [68]. Однак відносно одиничних точкових структур є небагато експериментальних даних про латеральне впорядкування КТ, і рентгенівської дифракції недостатньо для отримання структурної інформації відносно КТ, тому що інтенсивність їх розсіяння дуже мала.

Форма InAs КТ також інтенсивно обговорюється в зв'язку з точним розрахунком електронної структури, яка критично залежить від точної форми КТ [69]. Були запропоновані складні чисельні моделі, щоб розрахувати форму точок, таку як октаедрична, передбачену теорією скінченних елементів [70]. Для дослідження впорядкування і форми відкритих InAs КТ необхідно виконати нові високороздільні GISAXS-експерименти [71] з високим потоком синхротронного випромінювання. Ковзна геометрія за допомогою рентгенівських променів зондує кристалічну поверхню до глибини лише декілька нанометрів так, щоб доля InAs була набагато більшою порівняно з іншими методами дослідження. Крім того, порівняно з вимірюваннями АСМ, відносно велика площа впливає на когерентне розсіяння, тому розподіл може бути визначений з покращеною статистикою. До того ж, GISAXS-метод дозволяє визначити сімейства граней та усереднені розміри граней InAs КТ. Це також дозволяє досліджувати шари InAs з КТ, закриті арсенідом галію, що неможливо зробити за допомогою АСМ.

Розглянемо деякі експериментальні результати, які, на думку авторів, чітко демонструють можливості GISAXS-методів при дослідженні квантових точок. Зокрема, в праці [72] досліджувались параметри як відкритих КТ, вирощених на підкладці GaAs, так і прикритих захисним шаром. У даній монографії латеральна роздільна здатність $2,1 \cdot 10^{-3} \text{ 1/\AA}$ позиційно-чутливого детектора (у напрямі q_x , чи, як позначено в тексті, q_k) була досягнута паралельно поверхні зразка. З такою роздільною здатністю можуть бути визначені відстані між точками (до 300 нм). Дослідження азимутальної орієнтації щодо падаючого пучка рентгенівського випромінювання проведено обертанням зразка навколо нормалі до поверхні. Таким чином, були зроблені азимутальні скани інтенсивності розсіяння для різних зразків, із яких можна оцінити латеральне впорядкування КТ.

Схематична ілюстрація для різних способів латерального розташування КТ наведена на рис. 5.37. Тут показаний розподіл інтенсивності розсіяння від зразків при зміні азимутальної орієнтації від 0° до 360° , де 0° означає $[110]$ азимутальний напрям зразка, 90° для $[1-10]$, 180° для $[-1-10]$ і 270° для $[-110]$ азимутів. Центральна чорна пляма на рисунку показує дзеркально відбиту інтенсивність пучка. Фон позначений світлим кольором, а інтенсивність розсіяння від КТ помічена темним сірим кольором. Випадок невпорядкованого латерального розподілу КТ зображений на рис. 5.37, а, де є лише дзеркальна пляма і ніякого внеску інтенсивності розсіяння від КТ не видно. Також там показаний розподіл інтенсивності при лінійному скануванні перпендикулярно до пучка дзеркальної інтенсивності вздовж $[110]$ напрямку. На рис. 5.37, б наведені типові випадки ближнього порядку в латеральному розташуванні КТ. Добре видно, що для випадку ближнього порядку (при зростанні середньоквадратичного відхилення відстані між точками $\langle \sigma / \bar{d} \rangle$) азимутальний розподіл інтенсивності розсіяння подібний до кільцевої структури. Для випадку малих $\langle \sigma / \bar{d} \rangle$ в розташуванні КТ є кільцеподібний розподіл інтенсивності, але з меншою шириною кільця. У обох випадках радіус кільця відповідає за обернену середню відстань між точками $\langle \sigma / \bar{d} \rangle$, а ширина кільця обернено пропорційна довжині кореляції в розташуванні КТ.

Ще одна особливість ізотропного розташування КТ з ближнім порядком полягає в тому, що середні відстані між точками і ширина кільця не залежать від азимуту зразка. Однак щодо ані-

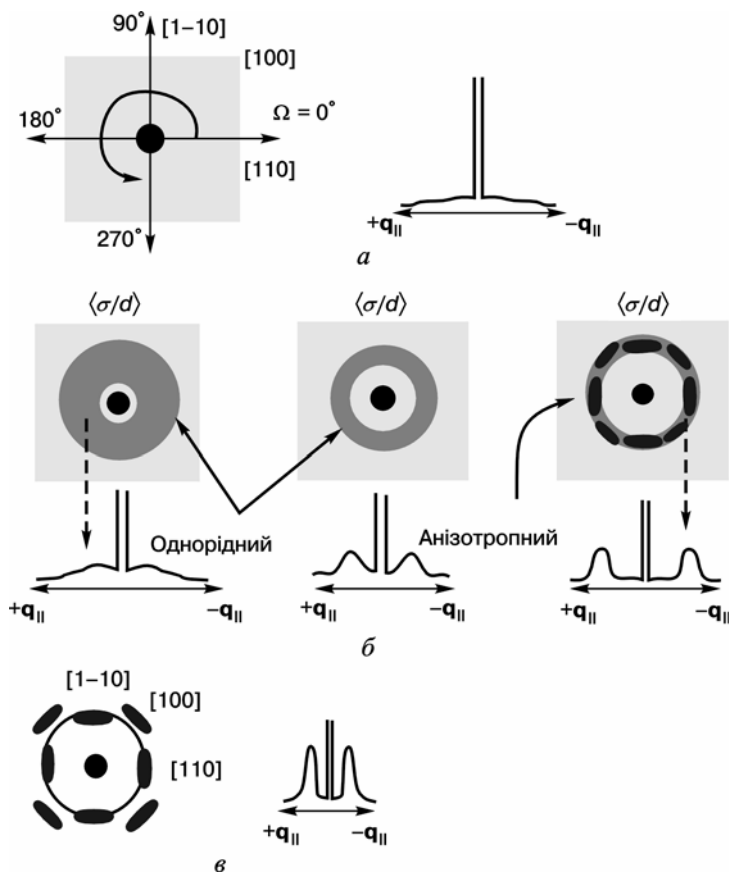


РИС. 5.37. Схема впорядкування в зразках з латеральним розподілом КТ: а — розупорядкований розподіл; б — впорядкування з ближнім порядком; в — доідеальний розподіл

зотропного розташування точок, то картина більш складна порівняно зі згаданими вище випадками. Звичайно потрібно розглянути дві ситуації, щоб зрозуміти точкове анізотропне розташування.

Велика довжина кореляції і більша інтегральна інтенсивність вказують на краще впорядковане розташування InAs КТ. Якщо бічне розташування КТ має структуру точно подібну до кристалічної ґратки, тобто дальній порядок, то відповідні піки інтенсивності розсіяння визначають місце розташування граней як і для випадку, наведеного на рис. 5.37, в.

5.6.1. GISAXS-РЕЗУЛЬТАТИ

Для подальшого аналізу латерального розподілу самоорганізованих InAs КТ GISAXS-експерименти були виконані для різних азимутальних орієнтацій зразка в кутовому інтервалі від -10 до 110° з кроком 5° . Азимут зразка був визначений і $\Omega = 0$, коли напрям $[110]$ був орієнтований паралельно вхідному пучку. ПЧД був встановлений перпендикулярно до вхідного пучка та паралельно поверхні, це дозволяло досліджувати вектор розсіяння q_{\parallel} (і в такий спосіб структурні властивості, наприклад при $\Omega = 0$ у напрямі $[1-10]$). На спектрах дифузного розсіяння в усіх напрямках спостерігаються недзеркальні сателітні піки. Ці сателітні піки розташовані майже симетрично з обох боків дзеркального пучка ($q_{\parallel} = 0$) і можуть бути чітко розділені. Оскільки в еталонному зразку арсеніду галію ніяких сателітних піків не знайдено, вони можуть бути приписані дифузному розсіянню від InAs КТ. На рис. 5.38 зображені GISAXS-профілі для q_{\parallel} паралельного напрямам $[110]$, $[1-10]$ і $[100]$. На цьому ж рисунку чітко видно піки сателітів високого порядку для трьох азимутів, тобто порядків ± 1 , ± 2 , ± 3 , що вказують на впорядковане розміщення точок. Середньоквадратична відстань між точками d визначена з положення сателітних піків першого порядку, тобто $d = 2\pi/q_{\parallel}$. У напрямках $[1-10]$ і $[110]$ отримується одне і те ж значення $d = 64,2$ нм, тоді як в напрямі $[100]$ $d = 72,2$ нм. Відношення відстаней для цих напрямів становить $R = d_{100}/d_{110} = 1,13$. Значення $R = 1,0$ очікується для ізотропного розташування точок. Отже, $R = 1,13$ вказує на присутність анізотропії в упорядкуванні КТ. Анізотропія є меншою, ніж очікується з розрахунків для квадратної основи кристалічної ґратки КТ, для якої $R = 1,41$.

Оцінюючи в такий спосіб ширину сателітних піків, можна знайти локальне розупорядкування серед найближчих сусідів кожного ряду точок для обраного азимута. Із цього припущення може бути отримана довжина кореляції в розташуванні точок [71], котра кількісно показує ступінь впорядкування в їх латеральному розподілі. У ряді праць (див., наприклад, [73]) показано, що середнє відхилення відстані між точками в напрямках $[110]$ і $[1-10]$ дорівнює 30 %, тоді як вздовж $[100]$ — 40 %.

Припустивши ближній порядок в кореляційній функції, в [42] була обчислена довжина кореляції L , яка становить 102,5 нм вздовж напрямів $[1-10]$ і $[110]$ та 90,5 нм вздовж $[100]$. У комбінації з більшою середньою відстанню між точками вздовж напрямку $[100]$ це свідчить про більш слабе впорядкування вздовж

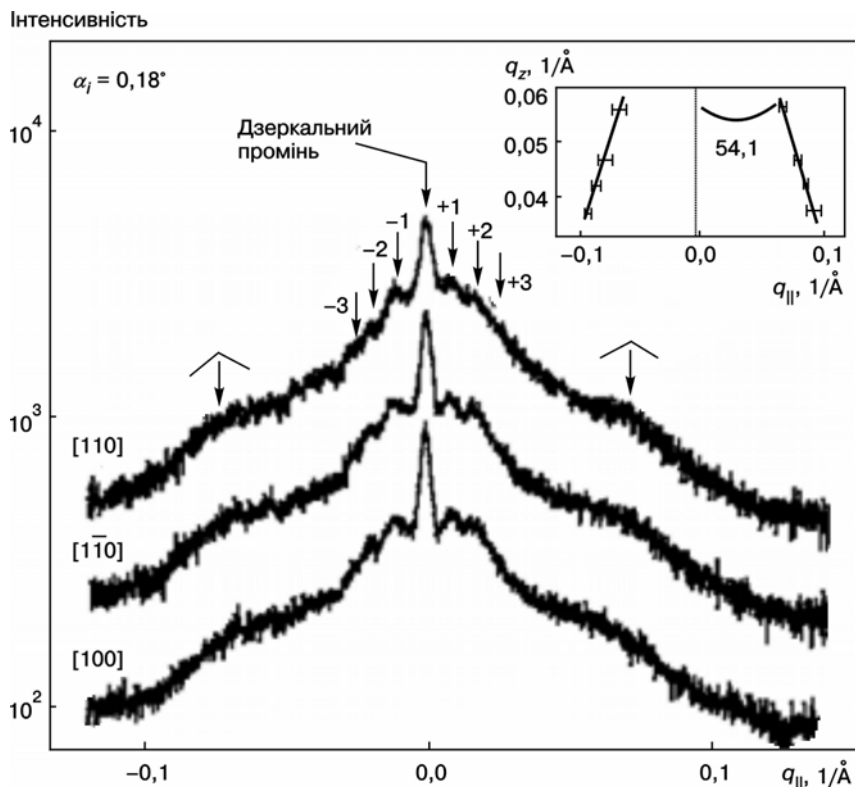


Рис. 5.38. GISAXS-інтенсивності для різних значень $q_{||}$ в напрямках [1-10], [110] і [100] в площині $q_{||}$ - q_z

[100], ніж в напрямках [1-10] і [110]. Інтегральні інтенсивності сателітів як функції азимутальної орієнтації, нормалізовані до відповідної дзеркальної інтенсивності пучка, мають три максимуми, які розташовані під кутами 0, 45 і 90° відповідно. Ці максимуми відображають азимутальну анізотропію в латеральному впорядкуванні точок в напрямках [110], [100] і [1-10]. Зауважимо, що більш висока інтенсивність і вузка азимутальна ширина піка ($\sim 20^\circ$) порівняно з напрямками [110] і [100] спостерігається в напрямі [110]. Хоча для [110] і [1-10] напрямів спостерігається така сама середня відстань і довжина кореляції, ця різниця в інтенсивностях чітко вказує на краще азимутальне впорядкування точок вздовж напрямку [110], ніж [1-10]. Зауважимо, що це узгоджується з АСМ гармонічним аналізом.

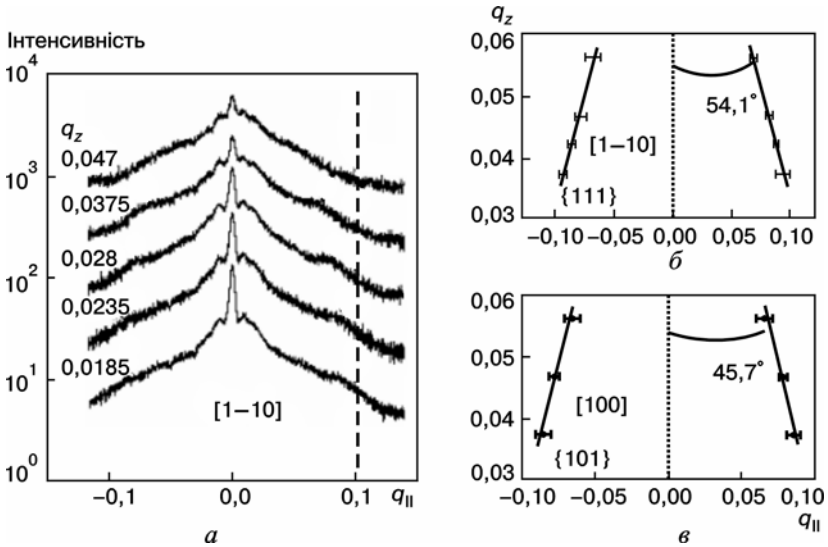


РИС. 5.39. GISAXS-інтенсивності для різних значень q_z для $q_{||}$ в напрямі $[1-10]$ (а), і CTR положення максимумів в площині $q_{||}-q_z$ для $q_{||}$ вздовж напрямів $[1-10]$ (б) та $[100]$ (в)

Анізотропія латерального впорядкування КТ може бути викликана анізотропією деформаційних полів навколо КТ, відповідно до попередніх досліджень на острівцях в InAs плівках, нижче ніж критична товщина [74].

Крім сателітних піків бачимо широкі максимуми в GISAXS-спектрах, які розташовані в $q_{||} = 0,07 \text{ 1/\AA}$ і позначені значком «^» на рис. 5.38. Тут наведені залежності положення $q_{||}$ -піка для $q_{||}$ паралельних напрямів відповідно $[110]$, $[1-10]$ і $[100]$. Приклад дослідження залежності положення $q_{||}$ -піка від q_z , показаний на рис. 5.39, а в напрямі $[110]$, де характеристики GISAXS інтенсивності були зареєстровані при різних q_z значеннях. Стрілки на рисунку позначають зміщення положення пікового максимуму до менших значень $q_{||}$ щодо еталонної точки. Положення максимумів піків інтенсивності в координатах $q_{||}-q_z$ для $q_{||}$ в напрямках $[110]$ і $[100]$ подані на рис. 5.39, б, в.

На рис. 5.38 показаний приклад для напрямку $[110]$. Положення піка може бути описано лінійною залежністю в координатах $q_{||}-q_z$. Це вказує на те, що ці широкі максимуми інтенсивності пов'язані з СТР від граней КТ. Кут нахилу $54,1^\circ$ відносно $[001]$ поверхневої нормалі свідчить про те, що піки спостерігались від

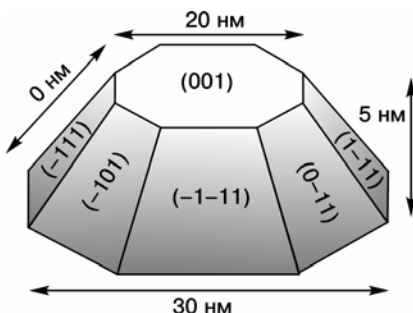


РИС. 5.40. Схема InAs КТ. Розміри основи отримані з АСМ-картини. Форма граней і розміри отримані в GISAXS-експерименті. Форма точки визначається як октагональна базова піраміда в площині (001)

граней $\{111\}$ КТ. Таке саме сімейство граней спостерігалось і для q_{\parallel} паралельного напрямку $[1-10]$ ($54,1^{\circ}$), тоді як в напрямі $[100]$ знайдені грані $\{101\}$ ($45,7^{\circ}$). Плями від граней, які спостерігаються на спектрах, отримані від бреггівських точок в високих порядках і зливаються не в ТОГ (000), а при скінченних значеннях q_z . Це вказує на часткову релаксацію деформації в межах точок InAs.

З існуючих експериментальних результатів можна зробити висновок, що InAs КТ були утворені з восьмигранним базисом і сімействами граней $\{111\}$ і $\{101\}$, що узгоджується з розрахунком [70] і мікроскопічними дослідженнями [67, 75].

Крім того, з напівширини (НШ) СТР-пиків граней можна оцінити усереднений розмір граней [71, 76]. Точні розміри граней можуть бути отримані зі значень напівширини піка деконволюцією широких експериментальних піків з інструментальним піком. На рис. 5.40 показана форма КТ яка визначена з GISAXS.

5.6.2. РОЗСІЯННЯ НА РІВНЯХ ОДНАКОВОЇ ДЕФОРМАЦІЇ

На рис. 5.41 наведено підсумовані ідеї, викладені в попередніх параграфах, не зосереджуючись на технічних аспектах: ідентифікуючи розподіл інтенсивності розсіяних РП в оберненому просторі, можна прямо реконструювати конфігурацію як зміни локальної сталої кристалічної ґратки, так і компонентного складу матеріалу КТ. Таким чином, досягається трансформація даних розсіяння від квантових точок до картини зображення в нанометровій шкалі. Це перетворення від оберненого до реального простору можливе для даного класу наноструктур при виконанні двох фундаментальних умов щодо роздільної здатності для деформації і висоти.

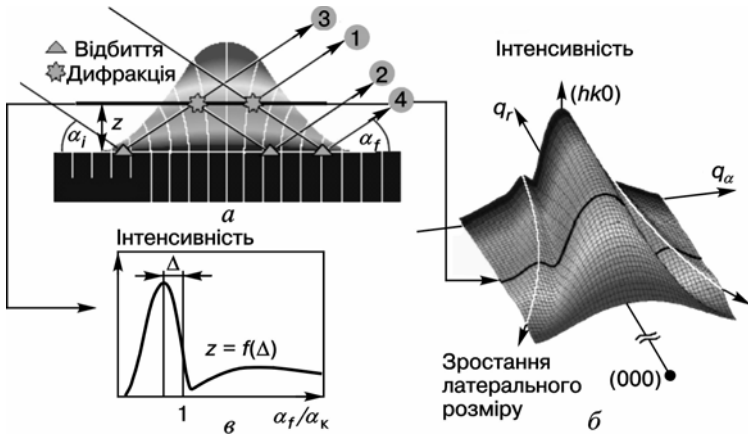


РИС. 5.41. Схема розсіяння на рівні постійної деформації. Частина (а) показує процеси розсіяння для вибраної області постійного латерального параметра кристалічної ґратки на висоті z вище підкладки (вертикальні лінії вказують площини кристалічної ґратки). Дифракційні процеси відхиляють пучок із площини листа, в той час як процес відбиття не змінює азимут поширення пучка. Куті падіння α_i і виходу α_f так само, як перекручування кристалічної ґратки дуже перебільшені. Колір шкали точки відповідає розподілу сталих кристалічної ґратки. Імітований розподіл інтенсивності для перерізу оберненого простору близько до поверхневого бреггівського відбиття $(hk0)$ показаний на (б). Стрілочка вказує на переріз розсіяної інтенсивності зображеної на (а) жирною рисою. Латеральна стала кристалічної ґратки відбита в ширині центрального піка і варіації положень бічних піків, які позначено білими лініями. Частина (в) показує симульований α_f -спектр, що відповідає ділянці постійної деформації на вибраній висоті z (α_k — критичний кут повного зовнішнього відбиття). Чисельне значення z розраховане з положення максимуму α_f^{\max}

1. Якщо стала кристалічної ґратки змінюється монотонно декількома відсотками поперек кристалічного блоку, розміри якого мають порядок 10 нм (рис. 5.41, а), то розподіл інтенсивності буде поширений на досить велику область оберненого простору навколо відбиття від підкладки. Таким чином можна думати про інтенсивність у кожній точці, яка належить області сталого параметра кристалічної ґратки, тобто зрізу квантової точки на певній висоті. Ця псевдороздільна здатність, що вводиться варіацією постійної кристалічної ґратки, ефективно розкладає розсіяння від точки через її внески від областей рівної деформації (рис. 5.41, б).

2. Точки повинні бути автономні: присутність вільної поверхні навколо точок служить вихідним рівнем, з якого середня висота областей рівної деформації в межах точок може бути оцінена. При ду-

же малих кутах падіння (α_i) і виходу (α_f), близьких до критичного кута повного зовнішнього відбиття (α_k), поверхня служить як роздільний пристрій пучка, викликаючи чотири різних процеси розсіювання (див. рис. 5.41, а). Дифракційні процеси, які відбуваються в області постійної деформації, відібрані повним імпульсом, можуть бути об'єднані з двома додатковими відбивними процесами перед і/або після дифракції. Когерентна сума цих чотирьох амплітудних термів викликає явні топологічні елементи в спектрах вздовж кута виходу (α_f), з яких може бути прямо розрахована середня висота КТ вище рівня підкладки з субнанометровою точністю (рис. 5.41, в).

5.6.3. ВИЗНАЧЕННЯ РІВНІВ ПОСТІЙНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ З РОЗСІЯННЯ РП

На рис. 5.42 наведені результати вимірювань тривимірних зображень оберненого простору між (220)-відбиттями арсеніду галію і InAs. Позиційно-чутливий детектор (див. рис. 2.8) записує α_f -спектр при кутовому скануванні вздовж q_a , який повторюється при наступних радіальних положеннях q_r . Кожне значення q_r відповідає різному стану деформації. Дані, які являють собою апроксимацію постійної деформації (див. параграф 2.2), дійсні лише поблизу вибраної області постійної деформації, що впливає на інтенсивність розсіювання в цій точці. Розсіювання від цієї дуже маленької частини поверхні зразка чутливе до дифракційних умов, які ефективно «зати-няють» всі інші стани де-

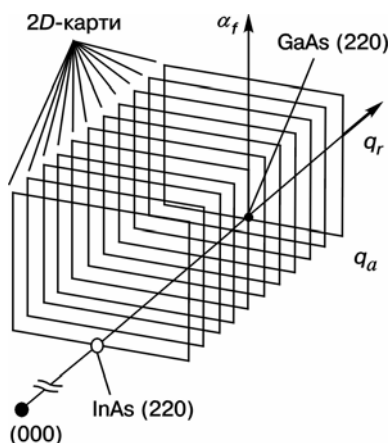


РИС. 5.42. Тривимірні карти оберненого простору між (220) поверхневим відбиттям арсеніду галію і InAs. Система координат утворена двома оберненими координатами q_r (радіальною) і q_a (кутовою), які паралельні реальним просторовим координатам x_r і x_a (рис. 2.9), і кутом виходу α_f . Тривимірна карта є композицією двовимірних карт в (q_a, α_f) -площині для різних значень q_r . В якісних термінах q_r -критерій сталої кристалічної ґратки, q_a показує ефективну бічну форму, в той час, як α_f -напрямок показує висоту і кривизну ділянок постійної деформації формації. Електромагнітне поле додатково зв'язується з приповер-

5.6. Дослідження впорядкування і форми масиву квантових точок

хневою областю, при куті падіння $0,2^\circ$, який значно менший, ніж критичний кут повного зовнішнього відбиття $0,28^\circ$.

Кожен кутовий скан із тривимірного зображення є результатом двовимірних карт оберненого простору, що наведені на рис. 5.43. Аналіз інтенсивності розсіяння дозволяє оцінити три різні параметри з КОП для кожного радіального положення q_r , які показані на рис. 5.44. Наприклад, аналіз КОП, наведений на рис. 5.43, показаний на рис. 5.45. Спочатку, кутова варіація інтенсивності розсіяння, інтегрованої для α_f до α_k (рис. 5.45, а, крок 1 на рис. 5.44), підганяється з використанням (5.33) для отримання латерального розміру області постійної деформації:

$$F(q_r^0, q_a) = (g_Q(x_z^0))^{-1} \frac{\sin \frac{1}{2} q_a D_Q(x_z^0)}{\frac{1}{2} q_a}. \quad (5.33)$$

У випадку аксіально симетричних острівців це відповідає радіусу кругової проекції області постійної деформації. Крім того, середня висота області постійної деформації вище поверхні визначена з положення першого явного максимуму інтенсивності розсіяння вздовж α_f (рис. 5.45, б, відповідно крок 2 на рис. 5.44). Для поліпшення статистики для кожного значення α_f КОП проінтегрована вздовж q_a в області центрального максимуму. Чисельне значення висоти z розраховане з використанням (5.34) можна записати так:

$$z = \frac{1}{k \alpha_{\max,1}} \arccos \frac{\alpha_{\max,1}}{\alpha_k}. \quad (5.34)$$

Для одержання оцінки кривизни областей постійної деформації напівширина центрального піка вздовж q_a зображена як функція α_f (рис. 5.45, в, відповідно крок 3 на рис. 5.44). Варіація в радіусі кривизни, що визначена з бічної форми за співвідношенням (5.33), типово менша ніж 20 % повної зміни в напівширині і може бути відділена від впливу інших параметрів. Варіації в напівширині можна порівняти з порожнім сферичним сегментом з базовим радіусом, взятим з першого кроку. Наступним кроком буде зміна радіуса кривизни для досягнення оптимальної відповідності з експериментальними даними. Цей, останній, крок залежить від фактичної моделі форми і не розповсюджується на точки з довільними формами.

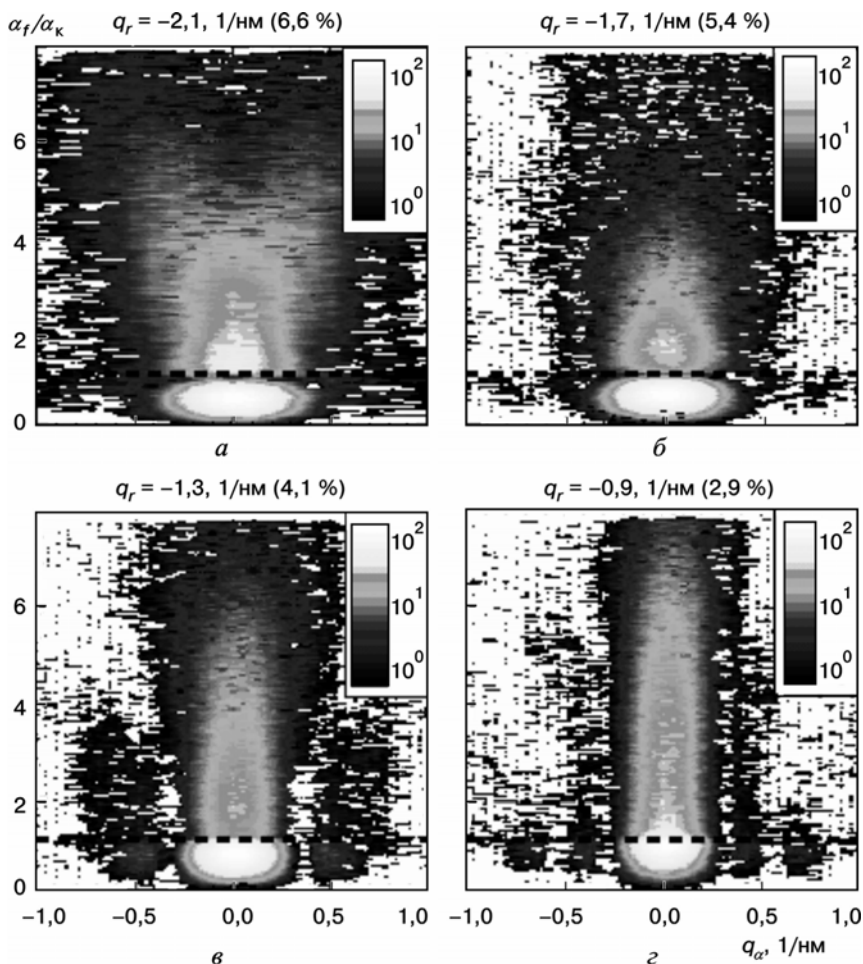


РИС. 5.43. Чотири випадки двовимірних карт оберненого простору в (q_{α}, α_f) -площині. Набір 16 таких карт складає тривимірну карту оберненого простору між двома відбиттями арсеніду галію й InAs. Чотири таких перерізи (а—г) показують збільшення значень q_r , що відповідає зменшенню різниці сталої кристалічної ґратки між відбіраною ділянкою постійної деформації і підкладкою. Різниця у відсотку наводиться в круглих дужках після значення q_r . Ясно видимі ознаки звуження центрального піка при $\alpha_f \leq \alpha_k$ зі зменшенням різниці сталої кристалічної ґратки, що відповідає збільшенню в бічному розмірі точки до підкладки, та збільшення α_f положення глобального максимуму, що вказує на зменшення деформації при малих висотах точки

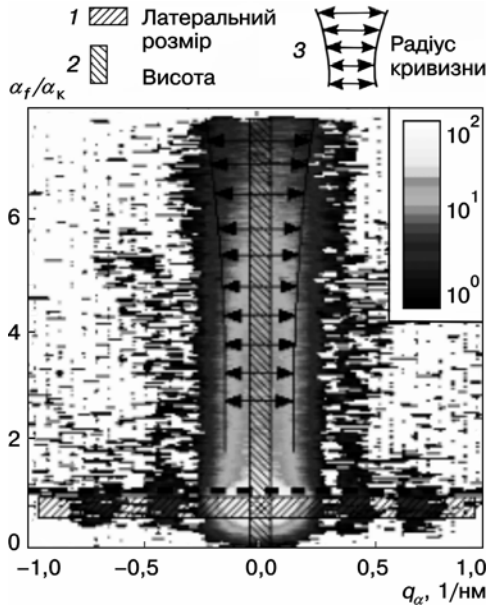


РИС. 5.44. Зображення трикрокового аналізу карт оберненого простору (див. рис. 5.43, а). Латеральний розмір області деформації, для вибраного q_r отримується з розподілу інтенсивності вздовж горизонтального зрізу (крок 1). Аналіз вертикальних зрізів дає середню висоту ділянки постійної деформації вище підкладки (крок 2). Радіус кривизни отримується з напівширини в q_a вздовж α_f/α_k (крок 3)

Інформація щодо хімічного складу в межах острівців може бути отримана з порівняння інтенсивності радіальних сканів уздовж q_r для пари сильних і слабких відбиттів [77] типу (400) і (200) у структурі сфалериту для InAs і арсеніду галію. Різниця атомних чисел Ga і As дорівнює 2, в той час як In має ще на 16 електронів більше ніж As. При цьому інтенсивність розсіяння для (200)-відбиття в сфалериті пропорційна різниці атомних формфакторів, які у свою чергу є приблизно пропорційними числу електронів, InAs (200)-відбиття буде приблизно в 64 рази більш сильним, ніж арсенід галію (200)-відбиття. Цей контраст може бути використаним для визначення концентрації Ga і In в сплавах. Вимірне відношення інтенсивностей від (400)- і (200)- відбиттів має такий вигляд:

$$\rho(q_r) = \left| \frac{c_{\text{In}}(q_r)F_{\text{InAs}}^{400} + c_{\text{Ga}}(q_r)F_{\text{GaAs}}^{400}}{c_{\text{In}}(q_r)F_{\text{InAs}}^{200} + c_{\text{Ga}}(q_r)F_{\text{GaAs}}^{200}} \right|^2, \quad (5.35)$$

де $c_{\text{In}}(q_r)$ і $c_{\text{Ga}}(q_r)$ — усереднені концентрації In і Ga для частини області постійної деформації при даному q_r ; $F_{\text{GaAs/InAs}}^{400/200}$ — структу-

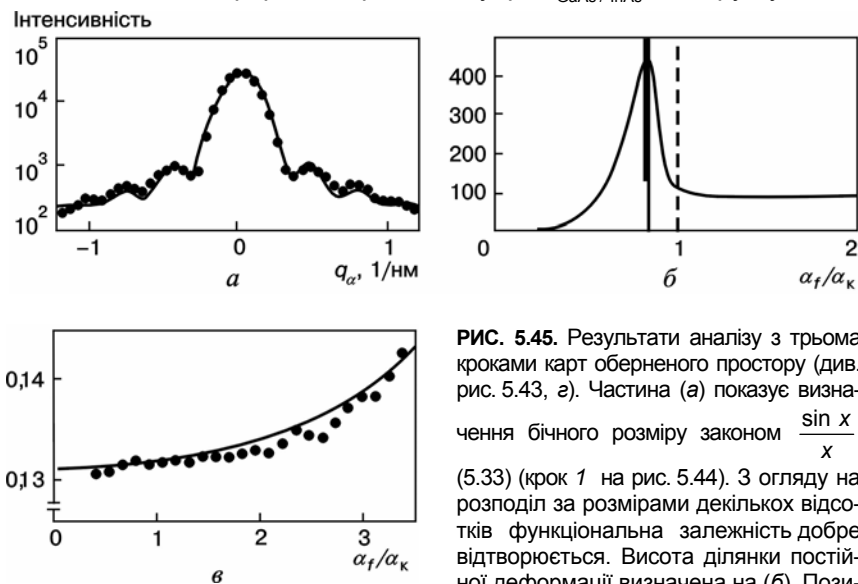


РИС. 5.45. Результати аналізу з трьома кроками карт оберненого простору (див. рис. 5.43, з). Частина (а) показує визначення бічного розміру за законом $\frac{\sin x}{x}$

(5.33) (крок 1 на рис. 5.44). З огляду на розподіл за розмірами декількох відсотків функціональна залежність добре відтворюється. Висота ділянки постійної деформації визначена на (б). Позиція оптичного максимуму в α^{max} відри-

зняється від 1, як очікується для ковзної дифракції падіння на плоских поверхнях. Фактична висота тоді розрахована з (5.34) (крок 2 на рис. 5.44). Припасування кривої показано на (в). Тут, напівширини центрального піка для різних значень α_f фітуються порожньою сферою змінного радіуса кривизни (крок 3 на рис. 5.44)

рні фактори InAs і арсенід галію для (400)- і (200)-відбиттів. Разом зі співвідношенням $c_{\text{In}}(q_r) + c_{\text{Ga}}(q_r) = 1$ і (5.35) можна знайти $C_{\text{In}}(q_r)$. Розрахунок є прямим, незважаючи на складну природу структурних факторів. Експериментальні характеристики показані на рис. 5.46.

На рис. 5.47 зображена тривимірна картина результатів сканування. Дифракційна інтенсивність зображена відносно координат q_x і q_z , які визначають вектор розсіяння в оберненому

5.6. Дослідження впорядкування і форми масиву квантових точок

РИС. 5.46. Радіальний розподіл інтенсивності вздовж q_r для сильного (1) 400- і слабого (2) 200-рефлексів

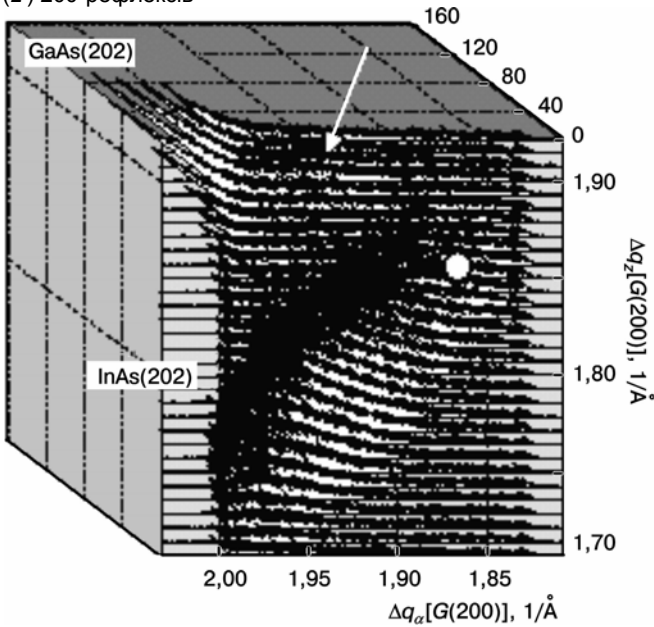
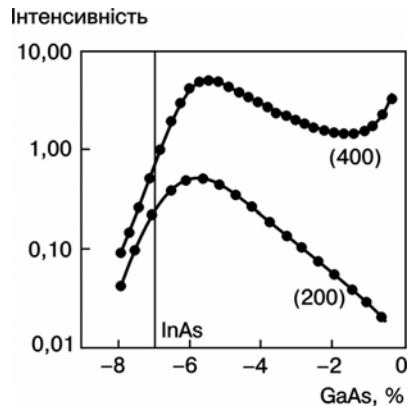


РИС. 5.47. 3D-зображення GIXRD (202) дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі для InGaAs КТ на (001)GaAs

просторі. Положення, яке задається координатами $(q_x; q_z) = (2; 2)$ є (202) брегівським відбиттям для арсеніду галію. Широкий пік інтенсивності локалізований в області малих q_x і q_z визначається деформованими InAs КТ. Біла стрілка вказує на додаткову інтенсивність біля (202) брегівського піка арсеніду галію. Збільшену область амплітуди дифрагованої інтенсивності від деформованих InAs КТ, подано на рис. 5.48, де інтенсивність розсіяння показана у відтинках сірого тону. Тут положення $(q_x; q_z) = (0; 0)$ в одиницях оберненої ґратки (rlu) відповідає брегівській плямі (202) арсеніду галію. У центрі рисунка спостері-



гається широка пляма. Чорна крапка на рисунку вказує на точку дифракції, очікувану для повністю релаксованого InAs, тобто $(q_x; q_z) = (0, 135; -0, 135)$ rlu. Можна чітко побачити, що основна дифракційна інтенсивність неперервно розподілена між цією точкою і положенням $(0; -0, 263)$ rlu, де мала б очікуватися дифракційна інтенсивність повністю деформованого InAs, узгодженого до підкладки арсеніду галію. Максимальна інтенсивність розташована на половині шляху між цими двома точками.

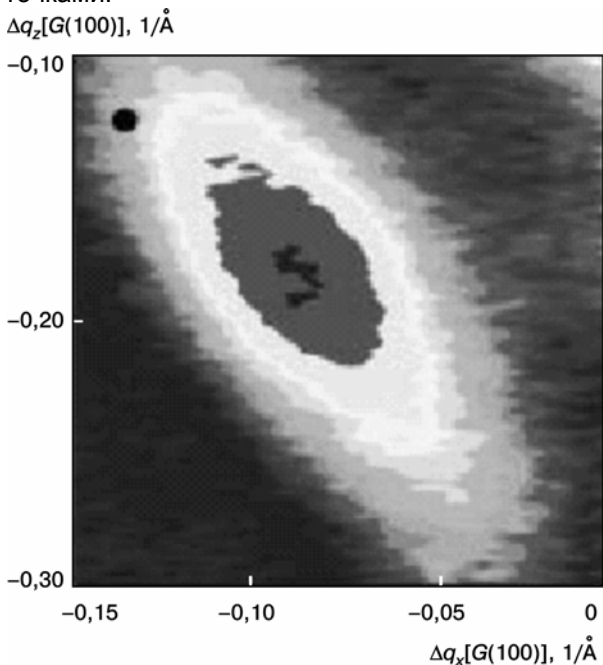


РИС. 5.48. Карта оберненого простору GIXRD брегівського рефлексу 202 для InAs КТ на GaAs (001)

Наявність широкого піка розсіяння в оберненому просторі ясно вказує на присутність InAs КТ із частковою релаксацією деформації всередині. Розширення плями в напрямках q_x і q_z можна пояснити скінченним розміром елемента об'єму для даної деформації.

З розширення максимумів інтенсивності в оберненому просторі можна визначити стан деформації і композицію в точках. Змочу-

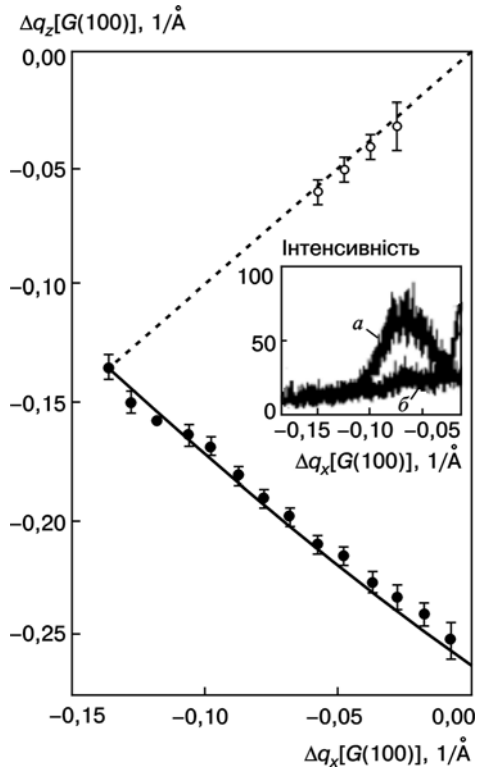
5.6. Дослідження впорядкування і форми масиву квантових точок

вальний шар, в даному випадку, недоступний для дифракції. По-перше, це розширення тільки від декількох атомних шарів, що приводить до дуже широких можливостей в оберненому просторі, тобто в q_z . По-друге, змочувальний шар імовірно повністю окисдований, оскільки точки були не закриті. На рис. 5.49 показано положення максимумів інтенсивності (повні кола), які визначені з q_z перерізів даних на рис. 5.48. Перерізи були зроблені вздовж q_z -напрямку, щоб пояснити форму зображення InAs КТ і уникнути сильного впливу розмірного ефекту.

РИС. 5.49. Положення розподілів GIXRD максимумів інтенсивності в просторі Δq_x — Δq_z : суцільна крива — теорія пружної деформації, штрихова — положення піка для релаксованої структури InGaAs

Розташування положень піків (повні кола) має лінійну залежність в $(q_x; -q_z)$ -координатах, що перебуває в гарній відповідності до функції пружної деформації, що зображена суцільною лінією, тобто $\Delta q_z = \beta - \alpha \Delta q_x$, де $\beta = -0,263$ і $\alpha = 0,945$, які розраховані згідно з пружною теорією для деформованого об'єму подібно InAs [78].

Розподіл положення підтверджує, що широкий пік розсіяння, який досягає максимуму на рис. 5.48, відповідає повністю деформованим елементам InAs усередині КТ. Інтенсивності розсіяння в обох крайніх положеннях повністю релаксованого InAs, так само, як і InAs, майже повністю узгодженого з арсенідом галію, дуже малі. Зокрема, майже відсутній повністю деформований InAs (положення в оберненому просторі в $(q_x; q_z) = (0; -0,263)$), що є дивним з огляду на узгодження між InAs точками і під-



кладкою арсеніду галію. Цей факт може бути з'ясованим при допущенні про існуванням сполук $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ біля поверхні поділу.

Однак це неможливо отримати прямо в експерименті для надзвичайно малих товщин зволожувальної плівки. Поряд з інтенсивним піком підкладки арсеніду галію видно слабкий додатковий пік (рис. 5.49, вставка). Ці скани показують той самий ряд Δq_x в різних значеннях Δq_z з піками, розташованими в $\Delta q_x = 0,06 \text{ \AA}^{-1}$. Роздільна здатність по Δq_z дозволяє розрізнити ефекти деформації і композиції. Незафарбовані точки на рис. 5.49 позначають положення піка дифрагованої інтенсивності для складу $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в Δq_x — Δq_z -площині. Штрихова лінія вказує положення $\Delta q_z = \Delta q_x$, яке очікується для недеформованого $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

У даному випадку відсутній майже повністю деформований InAs на відміну від інтерпретації GIXRD даних, взятих в площині GaAs (220) поблизу брегг-плями [79]. Проте у цьому експерименті перебивається InAs дифрагована інтенсивність з сильним (220) GaAs бреггівським відбиттям, що унеможливує визначення інтенсивності для $\Delta q_x, \Delta q_y \rightarrow 0$.

Для визначення об'ємної частки сплаву $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ і деформованої структури InAs в точці проінтегруємо відповідні дифракційні інтенсивності за областю вимірювання в оберненому просторі. Фракція релаксованого $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ на відміну від частково деформованого InAs прямо пропорційна відношенню відповідних інтегральних інтенсивностей дифракційних піків. Використовуючи це співвідношення, одержуємо значення 3 % для відносної частки сполуки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Проте цей розрахунок, як було пояснено вище, виключає змочувальну плівку. Частка $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ є малою порівняно з попередніми повідомленнями, однак ця невідповідність може бути пояснена різницею в температурних вимірах і умовами вирощування при низькій температурі [80].



ДИФРАКЦІЯ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ З КВАНТОВИМИ ДРОТАМИ

6.1. ВСТУП

Для практичного застосування наноструктур дуже важливим є зменшення розмірів, збільшення густини розподілу по поверхні і ступеня впорядкування. Багатошарові структури з просторово впорядкованими КТ і КН характеризуються високою однорідністю розмірів, форми, відстані між КТ і КН. Було показано, що при вирощуванні $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ багатошарових структур можна отримати латерально впорядковані ланцюжки $(\text{In,Ga})\text{As}$ КТ довжиною до 5 мкм [1] і $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН [1, 2]. Процес термічного відпалу також дозволяє покращувати однорідність розподілу розмірів КТ і КН. Наприклад, при термічному відпалі одношарових $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ КТ [3] була покращена однорідність розмірів КТ і показана можливість поступової зміни енергії випромінювання. Виявлено, що в процесі термічного відпалу InAs КТ важливу роль відіграє процес деформаційно-підсиленої інтердифузії атомів [4]. Однак на сьогодні механізм інтердифузії In/Ga і структурних змін в структурах з $(\text{In,Ga})\text{As}$ КТ, а тим більше в структурах з $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН, до кінця не з'ясований. Дослідження структурних і оптичних властивостей просторово впорядкованих багатошарових структур і їх зміни під час термічного відпалу становить значний інтерес для розуміння механізмів епітаксійного росту, процесу їх формування та для вивчення особливостей механізму релаксації пружних напруг і генерації структурних дефектів.

Відомо, що під час епітаксійного осадження шарів $\text{InGaAs}-\text{GaAs}$ процес формування тривимірних КТ або КН істотно змінює характер розподілу пружних деформацій порівняно з планарними шарами. У багатошарових структурах процес релаксації пружних деформацій, внесених в структуру КТ і КН [5], здійснюється шляхом опти-

мізації їх просторового розміщення [6—8]. При цьому реалізується анізотропний характер розподілу деформацій відносно кристалографічних напрямів типу $\langle 011 \rangle$ [9], що зумовлює анізотропію структурних параметрів (наприклад, пониження структурної симетрії [10]), що спостерігалось в планарних гетероструктурах [11—13]. Така структурна анізотропія впливає на дифракцію рентгенівських променів, що дозволяє використовувати рентгенівську високороздільну дифрактометрію для дослідження анізотропії пружної деформації в термічно-відпалених $(\text{In}, \text{Ga})\text{As}$ КН.

6.2. ДОСЛІДЖЕННЯ АНІЗОТРОПІЇ ЗАЛИШКОВИХ ДЕФОРМАЦІЙ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ $(\text{In}, \text{Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ З КВАНТОВИМИ НИТКАМИ, ПІДДАНИХ ШВИДКОМУ ТЕРМІЧНОМУ ВІДПАЛУ

У цьому параграфі будуть подані результати рентгеноструктурних досліджень багатошарових структур $(\text{In}, \text{Ga})\text{As}/\text{GaAs}(100)$ із самоорганізованими квантовими нитками, підданими швидкому термічному відпалу (ШТВ).

Досліджувалися багатошарові структури $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(100)$ з номінальною атомною часткою індію $x = 0,45$. Після видалення поверхневого оксидного шару шляхом термічного відпалу підкладки при 650°C (10 хв) вирощувався буферний шар GaAs товщиною 500 нм при $T = 600^\circ\text{C}$, швидкості росту 1 МШ/с і тиску парів As $1 \cdot 10^{-5}$ Торр. Тоді температура підкладки понижувалася до 540°C і осаджувалось 17 періодів $(11,5\text{МШ})\text{In}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{As}/(67\text{МШ})\text{GaAs}(100)$. Швидкість росту GaAs і $\text{In}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{As}$ дорівнювала 0,4 і 0,8 МШ/с. При осадженні GaAs розмежовуючого шару проводились зупинки процесу росту [14].

Швидкий термічний відпал проводився в атмосфері аргону при температурах $550\text{—}850^\circ\text{C}$ протягом 30 с. Час встановлення робочих температур дорівнював 10 с. Структурна морфологія поверхні зразків досліджувалася методом атомно-силової мікроскопії (АСМ) в контактній моді.

Вимірювання КДВ для симетричного 400- і асиметричного 311-рефлексів здійснювались на двокристальному спектрометрі (кристал-монохроматор $\text{GaAs}(100)$, CuK_α -випромінювання, порядок відбиття 4).

Рентгенівські дослідження проводились в симетричній і асимет-

ричній бреггівській геометрії відбиття при падінні випроміню-

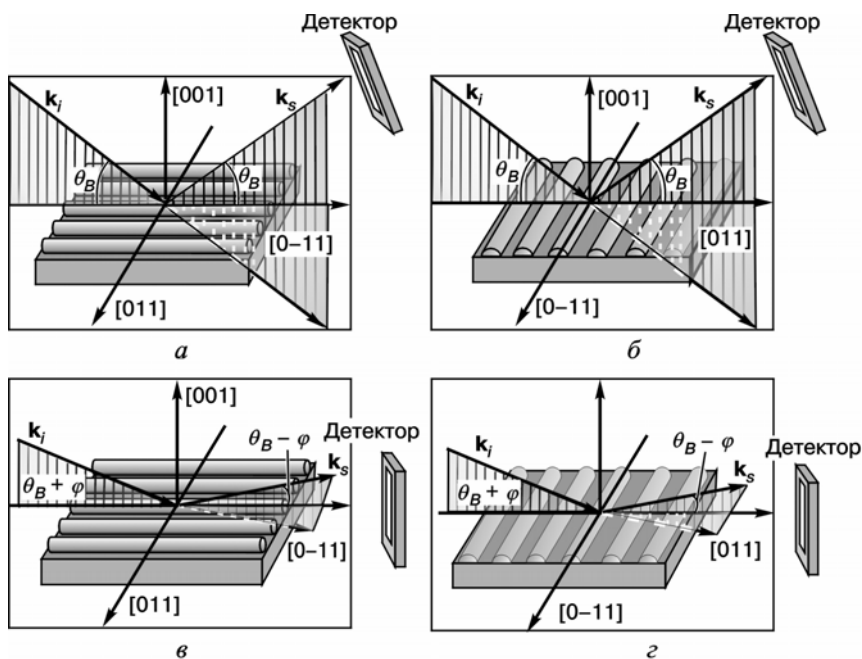


РИС. 6.1. Графічне зображення геометрії експерименту при дослідженні КН: а, б — симетрична геометрія відбиття 004; в, з — асиметрична геометрія відбиття 311, де φ — кут між площиною відбиття і поверхнею

вання вздовж двох азимутальних кристалографічних напрямів: паралельного і перпендикулярного до орієнтації $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН (рис. 6.1).

Дифракційні криві гойдання, зняті в симетричній брегівській геометрії відбиття 004 (брегівський кут $\vartheta_B = 33,02^\circ$, глибина проникнення порядку 3 мкм) дозволяють визначити структурні параметри лише в напрямі, перпендикулярному до площини шару. Криві гойдання при асиметричному відбитті 311, зняті в геометрії ковзного відбиття (рис. 6.1, в, з) ($\vartheta_B - \varphi = 1,625^\circ$ відносно поверхні зразка), екстремально чутливі до параметрів кристалічної структури в площині шару.

Виміряна крива гойдання відповідала латерально усередненій кристалічній структурі багат шарового зразка (ширина когерентного рентгенівського пучка на поверхні зразка дорівнює декільком міліметрам). При юстуванні зразка забезпечувалась максимальна інтенсивність піка відбиття підкладки GaAs.

6.2.1. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 6.2 показано АСМ-зображення верхнього шару 17-періодної структури $\text{In}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{As}/\text{GaAs}$ з квантовими нитками. Морфологія поверхні вихідного зразка являє собою масив періодично розміщених КН. Середня відстань між нитками становить 90 нм, а ширина їх основи змінюється в межах приблизно від 35 до 41 нм. З'ясовано, що в досліджуваних структурах існує бімодальний розподіл висот КН: їх середні значення дорівнюють 3,5 і 6,5 нм, $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН орієнтовані вздовж напрямку $[0-11]$ і мають довжину більше 5 мкм.

На рис. 6.3 показані дифракційні криві відбиття 004 вихідного і відпалених зразків для випадку, коли напрям падаючого пучка променів збігається з кристалографічним напрямом $[011]$, перпендикулярним до напрямку орієнтації $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН (рис. 6.1, а): *A* (вихідний), *B* (відпал при 500 °С), *C* (при 600 °С), *D* (при 650 °С), *E* (при 750 °С) і *F* (при 850 °С). Криві S_A і S_F відповідають симульованим кривим гойдання зразків *A* і *F*. Дифракційні криві гойдання моделювались за допомогою динамічної теорії дифракції рентгенівських променів на основі моделі Такагі—Топена [15]. Вважалось, що $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ — багатошарова структура з $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН — є ідентичною до тетрагонально деформованої $(\text{In,Ga})\text{As}$ (змочувальний шар)/ GaAs (бар'єр) багатошарової структури з квантовими ямами. Як початкові умови для підгонки теоретичних спектрів КДВ до експериментальних використовувались технологічні параметри структур. Кінцева підгонка до значення параметра $\chi = 2,34$ досягалась шляхом введення в розрахунки різних концентрацій індію і товщин шарів. Унаслідок такої процедури були отримані товщина шарів в періоді надґратки, концентрація індію і параметр ґратки в напрямі росту структури. Такий підхід використовувався в працях [16—19] при дослідженні багатошарової InAs/GaAs -структури з КТ, що дозволило оцінити атомну частку індію в 2D InGaAs змочувальному шарі.

Хоча крива гойдання від багатошарової структури для симетричного відбиття 004 є достатньо складною, існує декілька характеристичних особливостей, які використовуються при її аналізі. Крива гойдання вихідного зразка (рис. 6.3, крива *A*) містить у собі: 1) пік підкладки GaAs ; 2) нульовий пік або пік середньої невідповідності, викликаний накладанням бреггівських відбиттів двох складових компонент багатошарової квантової струк-

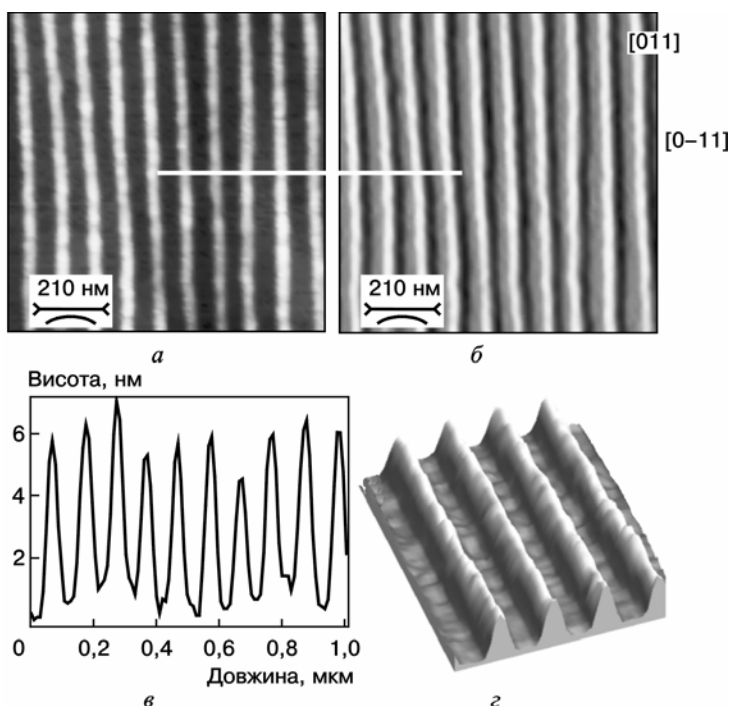


РИС. 6.2. АСМ-зображення 1×1 мкм верхнього InGaAs шару 17-періодної структури (In,Ga)As/GaAs з квантовими нитками (а) і контрастне зображення (dZ/dx) (б). Поперечний переріз профілю поверхні (в) і фрагмент тривимірного зображення КН розміром $0,5 \times 0,5$ мкм (г)

тури (GaAs і InGaAs). Його кутове положення дозволяє оцінити середнє значення атомної частки In $x_{\text{сер}}$ в структурі; 3) набір вторинних піків — «сателітів», які симетрично оточують нульовий пік. Періодичність цих сателітів визначається товщиною шарів, які повторюються, тобто відповідає періоду багатшарової структури. Іншими словами, інтерференційні осциляції відповідають міжшаровій інтерференції багатшарової структури, що є аналогом оптичної інтерференції в тонких плівках. У сукупності все це вказує на високу кристалічну досконалість структури, планарність інтерфейсів і дуже низьку густину протяжних дефектів, які можуть утворюватися під час епітаксійного росту. Необхідно звернути увагу на деякі особливості кривої А порівняно з симульованою кривою S_A (рис. 6.3). Форма піків відбиття є асиметричною зі сторони менших кутів, що пояснюється наявністю

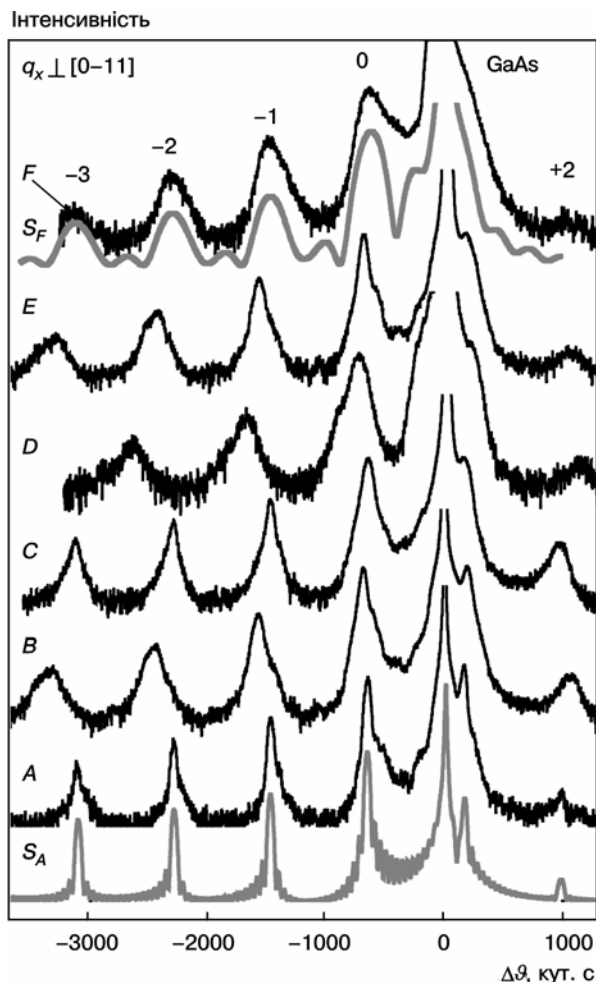


РИС. 6.3. Двовісні криві гойдання для 17-періодної $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ структури з $(\text{In,Ga})\text{As}$ КН (криві А—F) разом із симульованими кривими гойдання (криві S_A і S_F). Криві А—F відповідають температурі ШТВ 550, 600, 650, 750 і 850 °С. Відбиття 004 GaAs, випромінювання $\text{CuK}_{\alpha 1}$. Криві зміщені вертикально. Спектри нормовані на інтенсивність нульового сателіта

азимутальної анізотропії розподілу пружних деформацій (детальний аналіз цього ефекту буде розглянуто нижче).

Із рис. 6.3 видно, що в загальному форма кривої гойдання і кількість сателітів (показані 5 сателітів) є подібними для вихідного і від-

палених зразків. Останнє може свідчити про те, що ШТВ (30 с) при всіх використовуваних температурах не приводить до драматичних змін якості інтерфейсів і структурної якості зразків з $(\text{In,Ga})\text{As KH}$. Однак при підвищенні температури ШТВ, крім зсуву $\Delta g^{(i)}$ положення сателітів, спостерігаються два ефекти: зменшення інтенсивності всіх піків відбиття порівняно з інтенсивністю піка GaAs і асиметричне збільшення напівширини піків сателітів. Той факт, що сателіти надійно реєструються для відпалених зразків, а їх інтенсивність дещо зменшується порівняно з вихідним зразком може свідчити про незначне розмиття інтерфейсів унаслідок процесів інтердифузії на гетерограницях GaAs розмежовуючий шар-2D InGaAs змочувальний шар.

Розширення піків сателітів може бути зумовлено декількома причинами:

1) дислокаціями, які не змінюють кутowego положення піків, а приводять до їх розширення і появи дифузного розсіяння. В зразках наявність дислокацій є малоюмовірною, що підтверджує електронно-мікроскопічні дослідження подібних структур, вирощених при аналогічних технологічних режимах [20]. Опосередкованим підтвердженням зробленого висновку є зміна кутových положень сателітів у відпалених зразках і в спектрах, отриманих в двох взаємно перпендикулярних напрямках падаючого випромінювання (рис. 6.4);

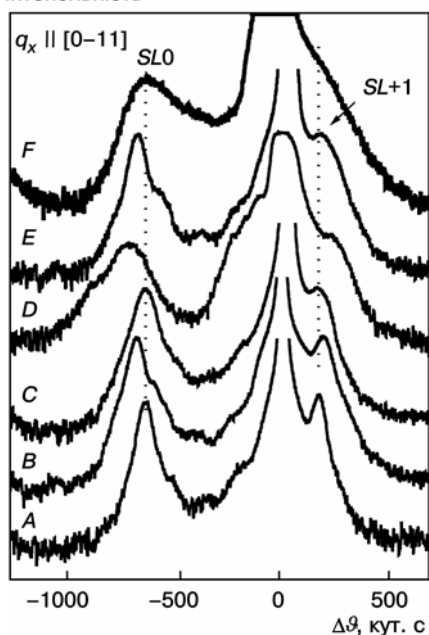
2) шорсткістю інтерфейсів і градієнтом компонентного складу. Шорсткість і градієнт компонентного складу поблизу інтерфейсу неможливо розрізнити при аналізі експериментальної двовісної кривої гойдання. Теоретичні розрахунки [21] показують, що шорсткість інтерфейсу приводить до розширення піків сателітів надгратки n^2 , де n — порядок сателіта. Як видно із рис. 6.4, цей ефект не є домінуючим у даному випадку, хоча може проявлятися для термічно відпалених зразків. Крім того, шорсткість не впливає на пік нульового порядку, оскільки він визначається середньою невідповідністю в системі;

3) мозаїчністю структури плівки — повертання площини частин областей плівки як цілого відносно підкладки GaAs (наприклад, неоднорідності деформацій викликають ефективну дезорієнтацію). У праці [22] показано, що мозаїчність основної структури кристала приводить до розширення, яке майже не змінюється з порядком сателіта;

4) дисперсією періоду в багат шаровій структурі. Дисперсія періоду в межах приблизно 2 % майже не впливає на ширину окремих

пиків сателітів, а приводить до зміни відносної інтенсивності піків товщинних осциляцій [22].

Інтенсивність



РІС. 6.4. Двовісні криві гойдання в області нульового $i+1$ сателіта 17-періодної (In,Ga)As/GaAs-структури з (In,Ga)As КН. Криві А—F відповідають температурі ШТВ 550, 600, 650, 750 і 850 °С. Відбиття 004, $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінювання

Оскільки при вирощуванні багатошарової структури товщина двовимірного змочувального шару зменшується при збільшенні кількості періодів структури (фактично це означає, що всередині багатошарової структури існують дещо різні періоди) і можливі шорсткості інтерфейсів та градієнт компонентного складу, слід очікувати появу незначного розширення сателітів у

вихідному зразку по-рівняно з симульованою кривою гойдання, що спостерігається експериментально (рис. 6.3, криві А і S_A).

Таким чином, у цьому випадку основний внесок в розширення піків відбиття можуть давати шорсткість інтерфейсів, градієнт компонентного складу і мозаїчність структури плівки.

Цікавим також є той факт, що кутове положення піків відбиття змінюється при зростанні температури ШТВ. Аналіз такого кутового зсуву піків відбиття для двох азимутальних напрямів падіння випромінювання подано на рис. 6.4.

Детальний аналіз дифракційних кривих гойдання вихідного і відпалених зразків в області нульового сателіта показує (рис. 6.4), що зі збільшенням температури ШТВ спостерігається незначний зсув нульового сателіта в бік менших кутів від піка GaAs і його розширення. Асиметричне розширення нульового піка, а іноді і його двокомпонентність (наприклад криві В і Е, рис. 6.4), може бути зумовлене

неоднорідностями компонентного складу $2D$ InGaAs-шару в напрямі росту структури. Кутове положення нульового піка переважно визначається структурою $2D$ InGaAs-шару (компонентним складом і деформацією) і співвідношенням товщина—деформація в шарах періоду: $\langle \varepsilon \rangle = (\varepsilon_1 t_1 + \varepsilon_2 t_2) / (t_1 + t_2)$, де t_1 , t_2 і ε_1 , ε_2 — товщина і деформація шарів періоду надґратки. Можна припустити, що спостережуваний зсув відповідає збільшенню $\chi_{\text{сер}}$ внаслідок термічно-активованих процесів інтердифузії In/Ga, наприклад концентрація In в (In,Ga)As КН зменшується, а в $2D$ InGaAs-шарі збільшується. Проте останнє припущення не підтверджується результатами фотолюмінесцентних досліджень (не показано), котрі вказують на те, що концентрація In в (In,Ga)As КН не зменшується при ШТВ до $T = 750$ °С. Інше пояснення спостережуваних структурних змін може ґрунтуватися на моделі «зародження плюс розчинення» [23]. Згідно з цією моделлю під час термічного відпалу середня квантова нитка, яка розташована в латеральній площині, розчиняється в $2D$ -шарі, що приводить до зростання концентрації індію в цьому шарі (можливо і в КН) і збільшення відстані між КН. Підтвердженням актуальності такого процесу в нашому випадку є збільшення латерального періоду КН (див. нижче). Ефект збільшення відстані між вертикальними колонками InAs КТ спостерігався при термічному відпалі багатошарової структури InAs/GaAs [23].

Можливою рушійною силою процесу розчинення (In,Ga)As КН є наявність в багатошаровій структурі залишкових деформацій, зумовлених значними ортогональними спотвореннями структури. Тому при аналізі структурних параметрів КН необхідно враховувати не лише анізотропію квазіперіодичних деформацій вздовж латерального напрямку [011] і напрямку росту [001], а й можливі відхилення впорядкованого розміщення КН відносно цих двох напрямів, що підтверджують рентгенівські дослідження при синхротронному збудженні ниткоподібних структур (ланцюжків КТ), вирощених при аналогічних технологічних режимах [24]. З цієї точки зору, дифузія може забезпечувати релаксацію деформацій.

Таким чином, можна припустити, що при $T = 750$ °С відбувається перерозподіл (релаксація) деформацій в областях на границі поділу КН— $2D$ -шар. Релаксація залишкових деформацій внаслідок термічно активованих і деформаційно-підсилених процесів інтердифузії атомів In/Ga є рушійним механізмом структурних перетворень під час ШТВ (In,Ga)As КН.

Для досліджуваних зразків отриманий хороший збіг розрахункових і експериментальних даних (на рівні 2—5 %) для положень та інтенсивностей по всій кривій гойдання. Із аналізу отриманих експериментальних даних можна визначити основні структурні параметри структури (In,Ga)As/GaAs.

Період багатошарової структури Λ визначався із кутових положень двох будь-яких сателітів за допомогою співвідношення

$$\Lambda = \frac{(m - n) \lambda / 2}{\sin \vartheta_m - \sin \vartheta_n}, \quad (6.1)$$

де λ — довжина хвилі рентгенівського випромінювання $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ($\lambda = 1,54051 \text{ \AA}$); m, n — порядки відбиття рентгенівських променів; ϑ_m, ϑ_n — кути, при яких ці промені відбиваються.

Із кутового положення нульового сателіта ϑ_0 середня атомна частка InAs $x_{\text{сеп}}$ в періоді багатошарової структури визначається згідно з виразом

$$x_{\text{сеп}} = \frac{a_{\text{GaAs}}}{a_{\text{InAs}} - a_{\text{GaAs}}} \frac{1 - \nu}{1 + \nu} \cot \vartheta_B (\vartheta_B - \vartheta_0), \quad (6.2)$$

де $a_{\text{GaAs}} = 5,63375 \text{ \AA}$ ($a_{\text{InAs}} = 6,0584 \text{ \AA}$) — стала ґратки GaAs (InAs); $\nu = 0,333$ — коефіцієнт Пуассона; $\vartheta_B = 33,02^\circ$ — бреггівський кут для підкладки GaAs.

Визначивши із експериментальних спектрів відбиття зміну кутового положення нульового сателіта ($\Delta \vartheta_0$) щодо піка GaAs і використавши співвідношення [25]

$$\varepsilon_{\perp} = [\sin \vartheta_B / \sin (\vartheta_B - \Delta \vartheta_0)] - 1, \quad (6.3)$$

розрахуємо середню деформацію (ε_{\perp}) в шарах у напрямі росту структури. Отримані розрахункові результати наведено в табл. 6.1.

На рис. 6.5 показані дифракційні криві відбиття 004 вихідного (а) і відпаленого при $T_{\text{відп}} = 750 \text{ }^\circ\text{C}$ (б) зразків, що отримані в двох взаємно перпендикулярних азимутальних напрямках падаючого випромінювання: паралельного і перпендикулярного до напрямку орієнтації

6.2. Дослідження анізотропії залишкових деформацій

(In,Ga)As КН. Видно, що асиметричне розширення дифракційних піків відбиття спостерігається у вихідно-

ТАБЛИЦЯ 6.1. Деформація і товщина шарів в структурах InAs/GaAs

$T_{\text{відпалу}}, ^\circ\text{C}$	Відбиття 004 GaAs							Відбиття 311 GaAs	
	$d_{\text{GaAs}}, \text{нм}$	$d_{\text{InGaAs}}, \text{нм}$	Λ^\perp [011], нм	Λ^\parallel [011], нм	$x_{\text{сеп}}$	ε_\perp (GaAs)	ε_\parallel (InGaAs)	Λ^\parallel , нм	$\varepsilon_{ }$ (InGaAs)
Вихідний	19,7	3,09	22,79	22,05	0,27	0,00245	-0,02	83,9	0,0047
550	18,4	3,24	21,64	21,17	0,30	0,0025	-0,022	97,8	0,0052
600	19,7	3,27	22,97	22,93	0,30	0,0025	-0,02	106,5	0,0056
650	18,3	1,46	19,76	20,7	0,30	0,0025	-0,022	—	—
750	18,2	1,3	19,5	20,36	0,30	0,0025	-0,021	—	—
850	18,4	3,3	21,7	22,5	—	—	—	—	—

П р и м і т к а. Параметри структур, отримані із даних високороздільної рентгенівської дифрактометрії і методом чисельного моделювання експериментальних кривих дифракційного відбиття. d_{GaAs} (d_{InGaAs}) — товщина шару GaAs (InGaAs); Λ^\perp (Λ^\parallel) — період структури в напрямі росту (латеральний); $x_{\text{сеп}}$ — середня атомна частка In, що визначена із положення нульового сателіта; ε_\perp (GaAs) (ε_\parallel (InGaAs)) — деформація в напрямі росту структури шару GaAs (InGaAs); $\varepsilon_{||}$ (InGaAs) — деформація в площині шару.

му зразку (рис. 6.5, а), збільшується при ШТВ (рис. 6.5, б) і особливо чітко проявляється зі збільшенням порядку відбиття. Як зазначалося вище, основними причинами розширення піків можуть бути: планарні нерівності інтерфейсів (шорсткість), градієнтний розподіл індію в напрямі росту, мозаїчність структури плівки і наявність двох періодів у структурі. Шорсткість інтерфейсів не є домінуючим ефектом, оскільки експериментально спостерігається зміна кутового положення піків [26], а його внесок в розширення піків відбиття зростає в зразках, підданих ШТВ (рис. 6.5, б). Проведене моделювання кривої гойдання з урахуванням градієнта концентрації індію в напрямі росту структури, аналогічно роботі [27], показало, що товщина шарів, які містять у собі індій, є дуже малою, щоб можна було досягнути відповідної асиметрії експериментальних піків відбиття. Будемо вважати, що основним і домінуючим ефектом, який зумовлює асиметричне розширення піків є виявлена залежність кутового положення піків від кристалографічного напрямку розсіяння. Тобто розширення відповідає асиметричному розщепленню піків відбиття, що пояснюється існуванням у досліджуваних зразках двох над'раткових періодів. Подібний ефект спостерігався в праці [29] при дослідженні квантових точок (In,Ga)As методом високороздільної рентгенівської дифрактометрії.

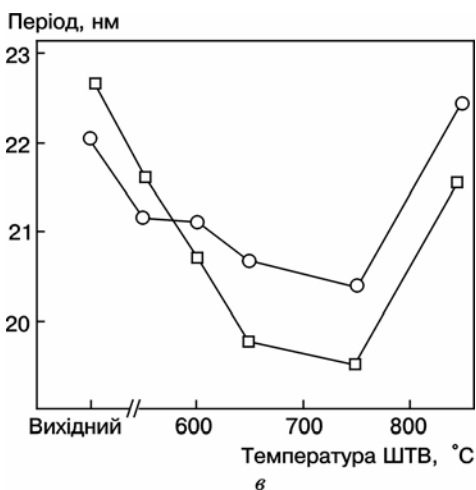
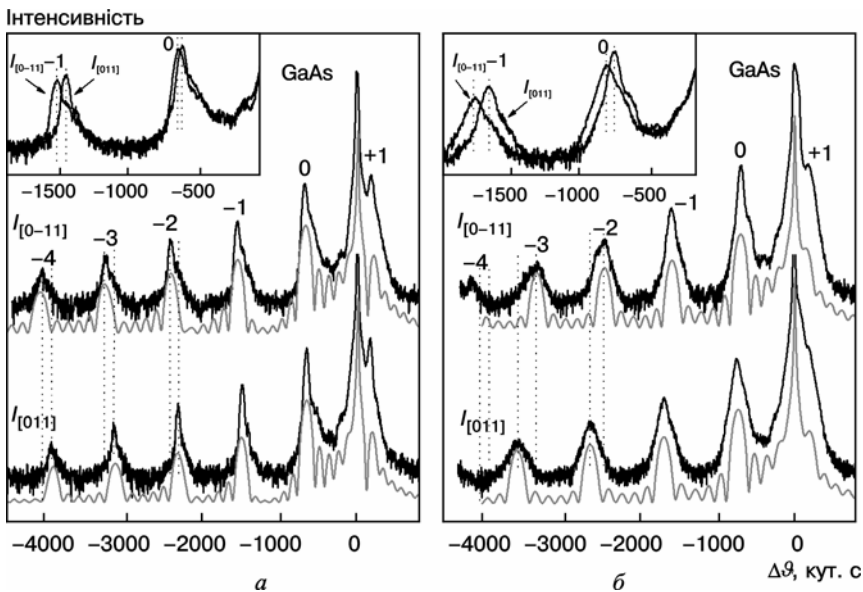


РИС. 6.5. Дифракційні криві відбиття 004 вихідного (а), відпаленого при $T_{\text{відп}} = 750^\circ\text{C}$ (б) зразків і залежність періоду БШС від температури ШТВ (в) для двох кристалографічних напрямів падіння випромінювання: паралельно (q_x [0-11] ($I_{[0-11]}$), рис. 6.1, а) і перпендикулярно (q_y [011] ($I_{[011]}$), рис. 6.1, б) до напрямку орієнтації (In,Ga)As КН. $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінювання: □ — паралельно [011]; ○ — паралельно [0-11]

Сума двох інтерференційних картин, які відповідають структурі з двома періодами 22,05 і 22,8 нм для вихідного зразка (рис. 6.4, крива S_{ab}), чудово узгоджується з експериментальною кривою гойдання. Моделювання інтенсивностей двох інтерференційних картин виконані з ваговим коефіцієнтом 10:3. Поява таких періодів зум-

овлена анізотропним відносно кристалографічних напрямів сімейства площин $\{011\}$ квазіперіодичним розподілом пружної деформації в періодичній структурі $(\text{In,Ga})\text{As}/\text{GaAs}$ [29], виникнення якого зумовлено релаксацією пружних напружень, внесених квантовими нитками. Цей висновок підтверджує порівняння - дифракційних кривих відбиття 004 з площиною розсіяння вздовж напрямів $[0-11]$ і $[011]$ (рис. 6.4).

Для цих двох напрямів спостерігається невелика, але чітка різниця відносних кутових положень нульового піка і сателітів порядків ± 1 , -2 , -3 (рис. 6.3—6.5) відносно піка підкладки GaAs, що вказує на відмінність усередненої деформації (компонентного складу) і періодів надґратки. Ефект анізотропного розподілу деформацій зумовлений анізотропією поверхневої дифузії атомів. Останнє призводить до анізотропного вбудовування атомів In при формуванні на ростовій поверхні квантових ниток. Як наслідок, у багат шаровій структурі формується анізотропний характер розподілу деформацій, що приводить до орторомбічних відхилень від тетрагональної псевдоморфної деформації, характерної для гетеросистеми з квантовими ямами. Таким чином, спостережуваний ефект розщеплення сателітів є результатом двох ефектів — релаксації деформації і пониження симетрії структури. Підтвердженням зробленого припущення є також зміна вертикального періоду структури при температурному відпалі. Залежність періоду для двох кристалографічних напрямів падаючого випромінювання від температури ШТВ показана на рис. 6.4, в. Видно, що при $T_{\text{відп}} = 750$ °C спостерігається значне зменшення періоду, а при $T_{\text{відп}} = 850$ °C період зростає. Крім того, період змінюється в напрямі $[011]$, перпендикулярному до орієнтації КН, значно більше порівняно з напрямом $[0-11]$, паралельним орієнтації КН. Можна було б припустити, що однією із можливих причин зміни періоду є орторомбічні спотворення кристалічної структури 2D-шарів, що приводить до зміни відстані між кристалографічними площинами (параметра ґратки) і кута їх нахилу [30]. Однак оцінки показують, що таке пониження симетрії структури може змінити період лише на 2—3 %. Для кінцевого встановлення природи спостережуваних змін періоду необхідні подальші дослідження. На даному етапі можна лише стверджувати, що характер зміни періоду структури відповідає зміні анізотропного характеру розподілу деформацій.

Інтенсивність

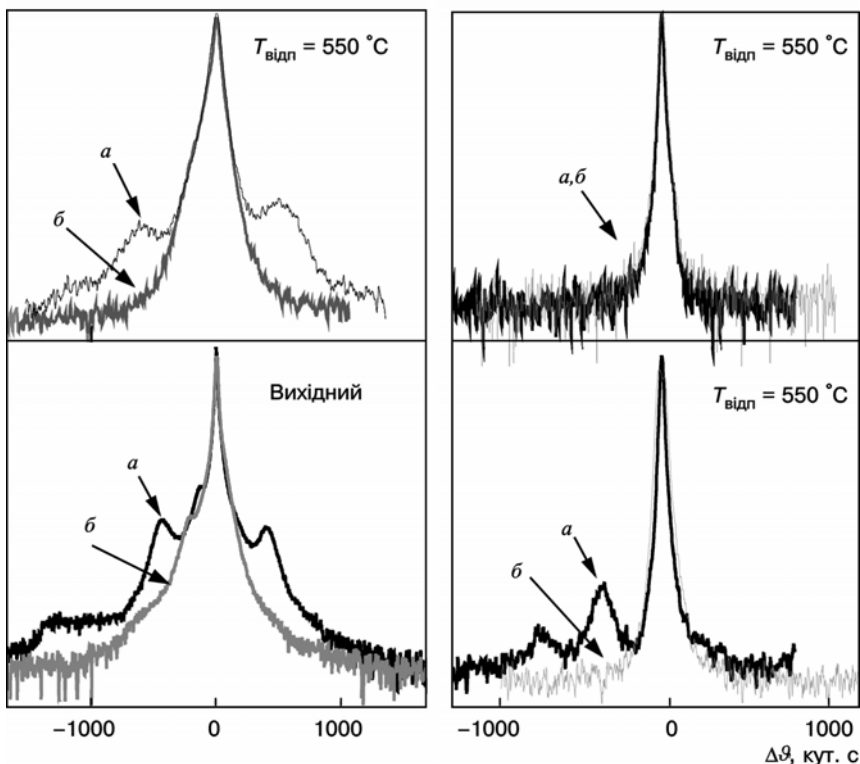


РИС. 6.6. Дифракційні криві асиметричного відбиття 311 (в ковзній геометрії реєстрації) 17-періодної (In,Ga)As/GaAs структури з (In,Ga)As КН (вихідного і відпалених зразків). Падаюче випромінювання паралельне кристалографічному напрямку: а — [011]; б — [0-11]. $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання

На рис. 6.6 показані дифракційні криві асиметричного відбиття 311 (в ковзній геометрії відбитого променя) для вихідного і відпалених зразків. Геометрія експерименту показана на (рис. 6.1, в, е), де кут реєстрації $\vartheta_B - \varphi$ значно менший, ніж кут падіння $\vartheta_B + \varphi$. У цьому випадку дифракційна картина відповідає багатощільній дифракції Фраунгофера на поверхневій ґратці [30]. У цій геометрії дифракційна крива гойдання дуже чутлива до латеральної періодичності модульованих структур [31] унаслідок максимізації когерентного шляху рентгенівського променя.

Дифракційна крива гойдання вихідного зразка при падінні пучка паралельно [011]-напряму, тобто перпендикулярно до напрямку орієнтації (In,Ga)As КН (рис. 6.6), містить у собі центральний пік підкладки GaAs (пік нульового порядку дифракційної ґратки) і навколо нього розміщені симетрично чіткі піки сателітів. Їх інтенсивність визначається геометричними розмірами КН і внутрішньою кристалічною деформацією в межах одного періоду. Така крива відбиття 311 відповідає структурі з вертикально суміщеними і латерально впорядкованими (In,Ga)As КН. При падінні випромінювання паралельно [0–11]-напряму, тобто паралельно напрямку орієнтації (In,Ga)As КН, піки сателітів не реєструються, що вказує на відсутність латерального впорядкування в цьому напрямі.

Латеральна періодичність КН в реальному просторі Λ визначається безпосередньо із відстані між сателітами в оберненому просторі Δq_x згідно з співвідношенням [1, 32, 33]

$$\Lambda^{\text{II}} = \frac{2\pi}{\Delta q_x}, \quad (6.4)$$

де Δq_x — різниця кутових положень першого сателіта і піка підкладки GaAs.

Використавши вираз (6.4), можна розрахувати середній латеральний період (In,Ga)As КН для вихідного зразка, який приблизно дорівнює 83,9 нм, що добре узгоджується з періодом, визначеним методом АСМ.

Із рис. 6.6 видно, що дифракційні спектри відбиття відпалених зразків суттєво змінюються. Спостерігається зміна кутового положення сателітів та їх розширення, що може свідчити про зміну латерального періоду і наявність флуктуацій періоду КН (табл. 6.1). При температурі ШТВ $T_{\text{відп}} = 750$ °С сателіти не реєструються, що може бути зумовлено втратою чіткої латеральної періодичності КН. Останнє приводить до зменшення дифрагованої інтенсивності розсіяння до рівня нижчого, ніж чутливість експериментальної установки. Цікавим є той факт, що при підвищенні температури ШТВ латеральний період збільшується до 106,5 нм ($T_{\text{відп}} = 600$ °С). Це є прямим підтвердженням протікання термічно стимульованих процесів латерального масоперенесення, зумовлених інтердифузиею атомів In/Ga.

Проведені дослідження ВРРД для симетричного і несиметричного відбиттів в двох взаємно перпендикулярних напрямках падаючого випромінювання (паралельному і перпендикулярному до на-

пряму орієнтації КН) виявили анізотропію розподілу пружних деформацій, внесених в структуру КН. Показано, що при $T_{\text{відп}} \leq 750$ °С рушійним механізмом структурних перетворень є релаксація залишкових деформацій внаслідок термічно-активованих і деформаційно-підсиленних процесів інтердифузії атомів In/Ga на границі поділу КН—2D-шар, що не приводить до значної зміни концентрації індію в (In,Ga)As КН. Існування в досліджуваних зразках двох надґраткових вертикальних періодів та їх зміна під час ШТВ пояснюється на основі анізотропного характеру розподілу пружної деформації і пониження симетрії структури. Показано, що збільшення латерального періоду (In,Ga)As КН, підданих ШТВ, зумовлене процесами анізотропної деформаційно-підсиленої інтердифузії атомів In/Ga.

6.3. ВИВЧЕННЯ ТРИВИМІРНОЇ САМООРГАНІЗАЦІЇ InGaAs/GaAs КВАНТОВИХ ТОЧОК МЕТОДОМ АНАЛІЗУ РОЗПОДІЛУ ДИФУЗНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ В ОБЕРНЕНОМУ ПРОСТОРИ

6.3.1. ПРИНЦИП ВИКОРИСТАННЯ ССD-ДЕТЕКТОРА, ТРИВИМІРНЕ КАРТОГРАФУВАННЯ ОБЕРНЕНОГО ПРОСТОРУ

Як уже неодноразово згадувалось у даній праці, синхротронне випромінювання характеризується високою яскравістю, інтенсивністю і монохроматичністю. Поєднання вказаних якостей, а також прогрес в області твердотільних ССD (charge coupling device) детекторів дозволяє не просто підвищити достовірність і точність вимірювань, а й впровадити нові прогресивні методики рентгенівської діагностики.

Зупинимось детальніше на координатно-чутливих ССD-детекторах. На відміну від стандартних сцинтиляційних детекторів люмінесценція, викликана квантами рентгенівського випромінювання, фіксується не інтегрально по всій поверхні люмінофора, а матричним ССD-детектором, як в цифрових фотоапаратах. Вимірювання, таким чином, приймають двовимірний характер. Іншими словами, одночасно поточно реєструється деякий сегмент сфери Евальда, вирізаний екраном, або двовимірний кутовий діапазон (рис. 6.7, а). При цьому зазначимо, що немає потреби в кристалі-аналізаторі. Необхідною умовою кутової роздільної здатності є умо-

6.2. Дослідження анізотропії залишкових деформацій

ва дифракції за Фраунгофером, тобто коли розміри об'єкта, що розсіює, дуже малі порівняно з відстанню до детектора. При ковзній геометрії ця умова може не

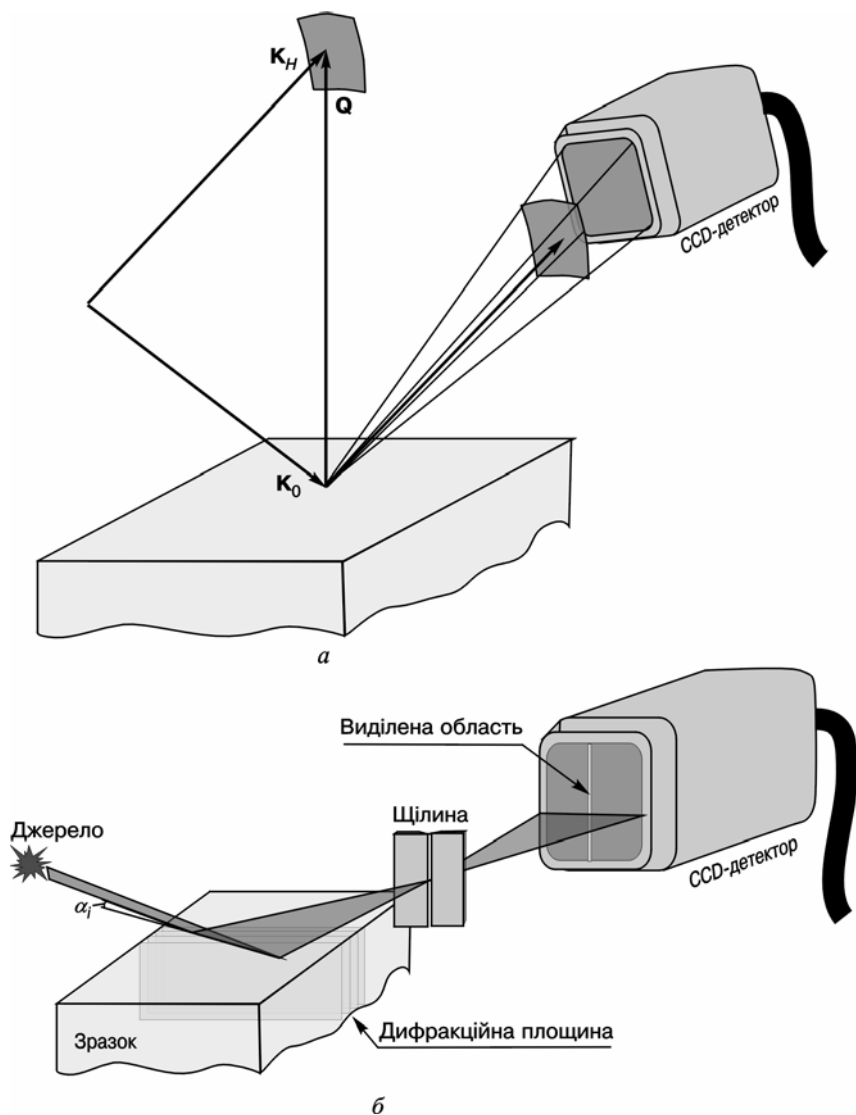


РИС. 6.7. Сектор оберненого простору, який реєструється CCD-детектором при одиничному вимірюванні в класичній геометрії Бреґґа (а). Використання щілини для перетворення просторового розподілу інтенсивності в кутівий в геометрії ковзного відбиття (б)

виконуватись, оскільки зразок освітлюється по всій своїй довжині вздовж напрямку падаючого пучка. У цьому випадку доводиться використовувати додаткову щілину (рис. 6.7, б).

Як було зазначено, якщо одиничне вимірювання інтенсивності з допомогою CCD дає інформацію про деякий сферичний сегмент оберненого простору, то здійснюючи $2\theta-\omega$ або ω -сканування, отримуємо вже інформацію про тривимірний розподіл розсіяної інтенсивності в оберненому просторі. Можливості тривимірного картографування оберненого простору і будуть предметом розгляду в даному параграфі.

6.3.2. ОБ'ЄКТ І МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ

Об'єктом досліджень була 17-шарова InGaAs структура квантових точок, повністю аналогічна періоду, концентрації In, розміру точок на поверхні, структурі, описаній в параграфі 6.2. Однак при вирощуванні вказаної структури унаслідок технологічного збою відбулась зупинка стола для вирощування зразків всередині МПЕ--камери, тобто зразок у процесі росту залишався нерухомим.

Рентгенівські експерименти проводились в лабораторії HASYLAB/DESY з використанням синхротронного випромінювання віглерних станцій W1 і BW2 при енергії $E = 8 \text{ кеВ}$ і $\Delta E/E = 1 \cdot 10^{-4}$, CCD-детектор з роздільним елементом (пікселем) порядку 60 мкм знаходився на відстані приблизно 1 м від зразка.

На рис. 6.8 схематично показаний зразок і вузли оберненої ґратки, які задіяні в експерименті по тривимірному картографуванню оберненого простору. Також вказані прийняті в даному параграфі напрями і індексація компонентів вектора розсіяння. Для вузлів 224, 2–24 і 004, які відповідають копланарній схемі бреґівської дифракції, при розмірі падаючого пучка $100 \times 100 \text{ мкм}$ і вказаних розмірах пікселя і відстані кристал—детектор кутова роздільна здатність становить близько $1 \cdot 10^{-4} \text{ рад}$, що еквівалентно роздільній здатності в оберненому просторі порядку $\Delta Q \sim 4 \times 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$.

Вузли 220 і 2 – 20 досліджувались в геометрії ковзної дифракції. Використання щілини (рис. 6.7, б) розміром 1 мм дозволило згідно з оцінками досягнути роздільної здатності $\Delta Q_z \sim 4 \cdot 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$ по нормалі до поверхні зразка і $\Delta Q_a \sim 4 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$ в площині зраз-

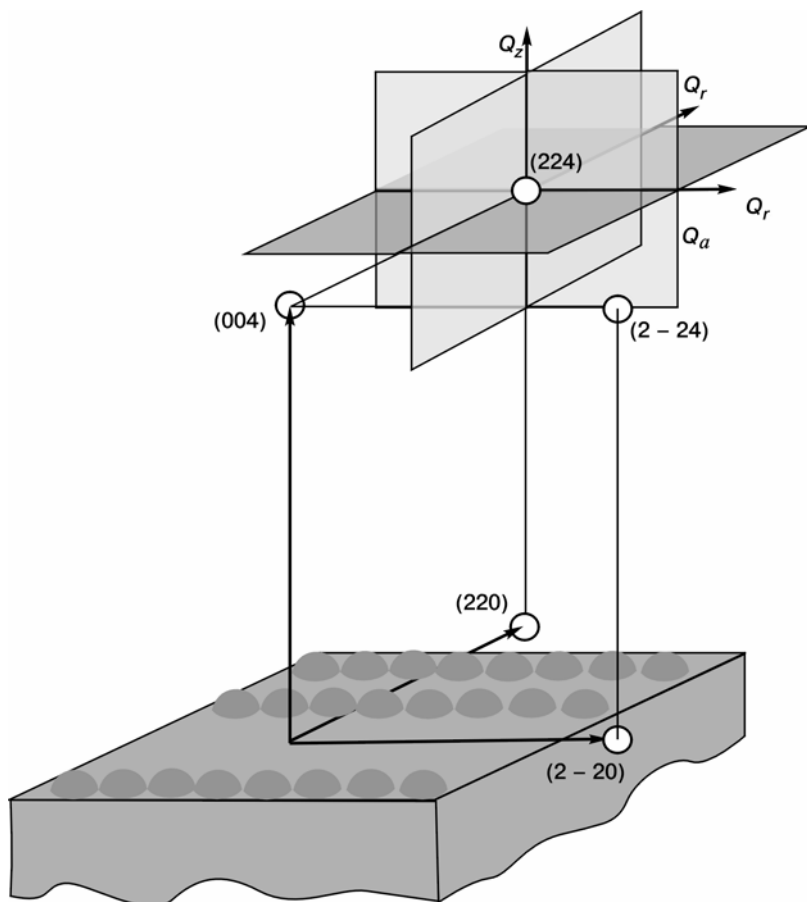


РИС. 6.8. Орієнтація зразка, вузли оберненого простору, задіяні в експериментах, а також орієнтація основних векторів і перерізів оберненого простору

ка. Для даного зразка, приймаючи до уваги характерні розміри квантових точок і, відповідно, область дифузного розсіяння, вказана роздільна здатність видається цілком придатною.

6.3.3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 6.9 наведено розподіли дифузного фону в околі 220-вузла оберненої ґратки (GID) для двох перерізів оберненого простору: Q_r — Q_z (а, в) і Q_a — Q_z (б, г) (див. також рис. 6.8). Для відбиття 220 вектор розсіяння перпендикулярний до напрямку

ланцюжків нанострівців, а розподіл дифузної інтенсивності в радіальному напрямі Q_r , що є періодичною системою вертикальних стрижнів, відбиває періодичність деформаційних полів у напрямі, перпендикулярному до вказаних ланцюжків. При цьому загальний характер розподілу інтенсивності, якщо абстрагуватись від періодичних модуляцій, досить схожий на розподіл інтенсивності дифузного розсіяння від одичної квантової точки або системи некогерентних квантових точок.

З іншого боку, відповідний розподіл інтенсивності дифузного розсіяння вздовж напрямку Q_a унаслідок малості абсолютних значень вказаної компоненти нечутливий до спотворень і несе інформацію про форму і просторові кореляції нанострівців. З урахуванням орієнтації зразка сателіти, які спостерігаються на рис. 6.9, б, відповідають просторовій кореляції стрівців в ланцюгах або, в припущенні, що стрівці дотикаються, їх середньому розміру. На рис. 6.9, в, г наведено результати чисельного моделювання дифракційного експерименту методом DWBA. Точний опис моделі буде подано пізніше.

Використовуючи відоме співвідношення періодичностей в прямому і оберненому просторах $\Delta g = 2\pi/\Delta L$, були оцінені середні відстані між ланцюжками квантових точок $\Delta L_{chain} = 80$ нм і між сусідніми квантовими точками в ланцюгу $\Delta L_{QD-QD} = 40$ нм. Отримані результати є результатом усереднення за великим ансамблем нанострівців як на поверхні, так і в об'ємі зразка, проте знаходяться в доброму узгодженні з результатами АСМ.

Переважна орієнтація ланцюгів нанострівців може бути виявлена на перерізі оберненого простору Q_r-Q_a , паралельному поверхні зразка. Відповідні перерізи були отримані для вузлів 220 і 2-20 (рис. 6.10). В обох випадках пружні спотворення кристалічної ґратки проявляють себе вздовж напрямку Q_r , утворюючи в даному випадку деякий періодичний рисунок.

Крім того, як було зазначено раніше, періодичні флуктуації електронної густини, що зумовлені корелюючими функціями форми окремих стрівців, які утворюють ланцюг або кореляцією самих ланцюгів, проявляються в напрямі Q_a . Зазначимо суттєву різницю картин дифузного розсіяння для двох вузлів оберненої

РИС. 6.9. Експериментальний і розрахунковий розподіл інтенсивності дифузного розсіяння поблизу 220-вузла оберненої ґратки при куті падіння $\alpha = 0,3^\circ$ для Q_r-Q_z (а, в) і Q_a-Q_z (б, г) перерізів оберненого простору.

Логарифмічна шкала інтенсивності зображена відтінками сірого кольору і послідовно проходить у чорний—білий—чорний

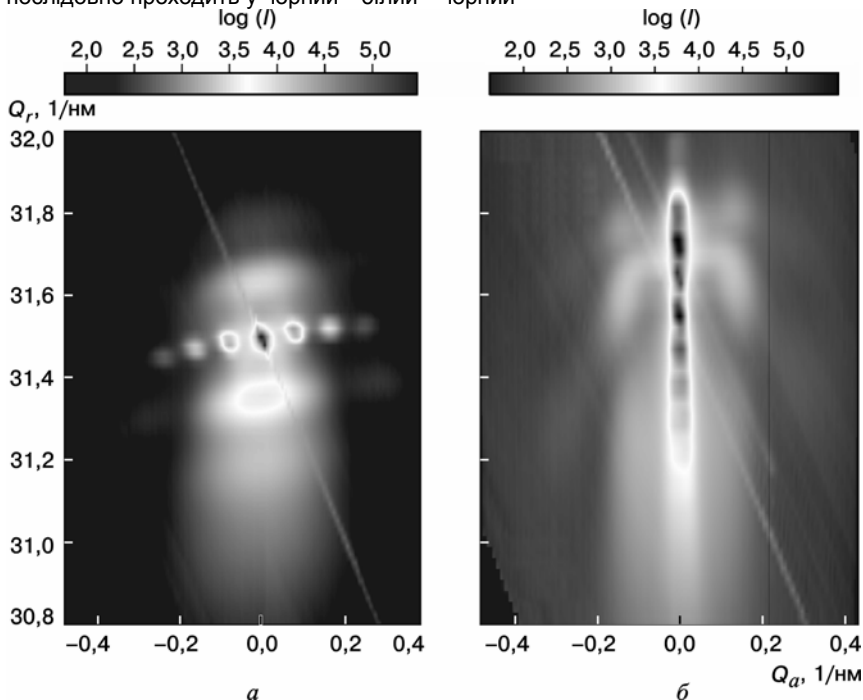


РИС. 6.10. Розподіл інтенсивності дифузного розсіяння в площині поверхні зразка Q_r — Q_a поблизу 2—20 (а) і 220 (б) вузлів оберненої ґратки. Геометрія ковзного відбиття, $\alpha_i = 0,3^\circ$

ґратки. Так, в напрямі, близькому до перпендикулярного до напрямку ланцюгів (Q_a на рис. 6.10, а), спостерігається серія прекрасно виражених сателітів, розташованих зліва і справа від основного рефлексу GaAs від підкладки зразка. У той же час у напрямі вздовж ланцюгів (Q_a на рис. 6.10, б) спостерігаються лише розмиті максимуми дифузного розсіяння, що свідчить про досить слабку кореляцію острівців в ланцюгу або про значний розкид їх розмірів в припущенні, що острівці в ланцюгу розташовані впритул.

Зазначимо також, що сімейство сателітів на рис. 6.10, а не перпендикулярне до Q_r . Іншими словами, спостерігається дезорієнтація порядку 8° між кристалографічним напрямом $[1-10]$ і переважним напрямом ланцюгів. Ця ж дезорієнтація, хоча і не так

яскраво, проявляється і на рис. 6.10, б для 220-відбиття. Причини подібного ефекту на сьогодні невідомі.

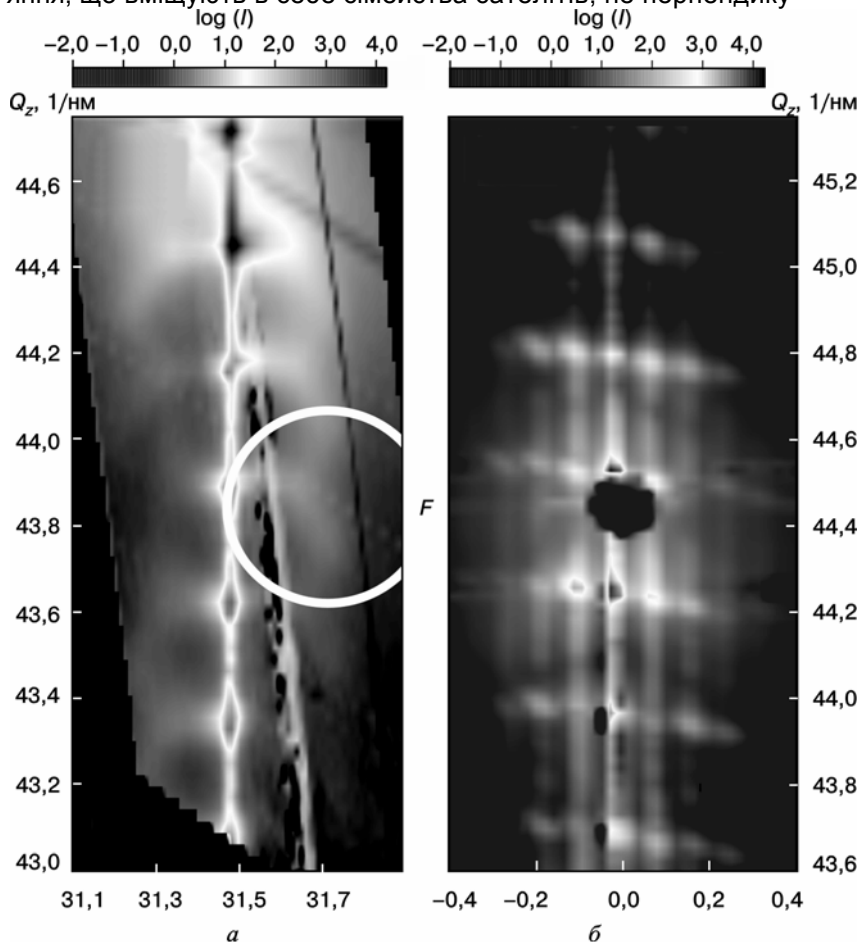
Дифракція в геометрії ковзного відбиття втягує в процес розсіяння лише приповерхневі шари матеріалу, а також характеризується вектором розсіяння, паралельним поверхні зразка. Це зумовило її високу ефективність при діагностиці планарного розподілу полів деформацій і кореляції розсіювальних об'єктів. Крім того, традиційна компланарна геометрія дифракції за Бреггом дозволяє отримати додаткову інформацію про поля напружень та кореляції об'єктів в об'ємі матеріалу або, у випадку, який викликає найбільший інтерес, в усій надґратці.

Розподіли інтенсивності дифузного розсіяння поблизу 2–24 вузла оберненої ґратки GaAs для перерізів Q_r — Q_z і Q_a — Q_z подані на рис. 6.11. На обох експериментальних перерізах добре помітна періодична модуляція інтенсивності вздовж CTR, котра відображає вертикальну періодичність ($T = 22,8$ нм) надґратки. Інтенсивність поза CTR сконцентрована в так званих полосах резонансного дифузного розсіяння, наявність особливостей в котрих зумовлена ступенем вертикальної і горизонтальної впорядкованості квантових точок. Нагадаємо, що для рефлексу 2–24 його складова Q_r направлена вздовж ланцюгів наноострівців. З урахуванням цього відсутність якої-небудь сформованої періодичної структури (рис. 6.11, а) в планарному напрямі легко пояснюється вже згаданим розкидом в розмірах острівців.

З іншого боку, на розподілі інтенсивності дифузного розсіяння в перерізі Q_a — Q_z (рис. 6.11, б) спостерігається високорозвинута структура сателітів, зумовлена планарною і вертикальною кореляцією ланцюгів квантових точок. Причому, окрім «головних», найбільш інтенсивних сателітів, можна помітити також серію більш слабких, частково розділених сателітів, що заповнюють вертикальні проміжки між головними сателітами одного порядку. Подібна виразна сателітна структура можлива лише за умови високого ступеня впорядкованості — як вертикального, так і латерального — розсіювальних об'єктів, у даному випадку — ланцюги наноострівців (рис. 6.12).

Зазначимо, якщо вертикальний розмір сателітів, що лежать на CTR, обернено пропорційний загальному розміру НГ, то вертикальний розмір бокових сателітів є мірою вертикальної кореляції положень ланцюгів. Порівняння цих двох розмірів дозволяє оцінити довжину вертикальної кореляції в 200—250 нм, що становить приблизно 2/3 загальної товщини надструктури.

Звертає на себе увагу також те, що полоси резонансного розсіювання, що вміщують в себе сімейства сателітів, не перпендику-



лярні до напрямку Q_z , тобто не паралельні поверхні зразка. Цей факт дозволяє припустити похилий, з кутом нахилу порядку 9° , характер наслідування положення ланцюга островів щодо ланцюга, розташованого нижче (рис. 6.12). Подібне похиле наслідування спостерігалось у випадку міжшарових шорсткостей для $\text{PbSe}/\text{Pb}_x\text{Eu}_x\text{Te}$ (111) НГ [34], і спричиняла його сильна анізотропія пружних властивостей в кристалічній матриці. Згадана анізотропія

пружних властивостей в іншому випадку приводила навіть до цілком досконалої тривимірної впорядкованості квантових точок [35]. Однак розрахунки, проведені для системи

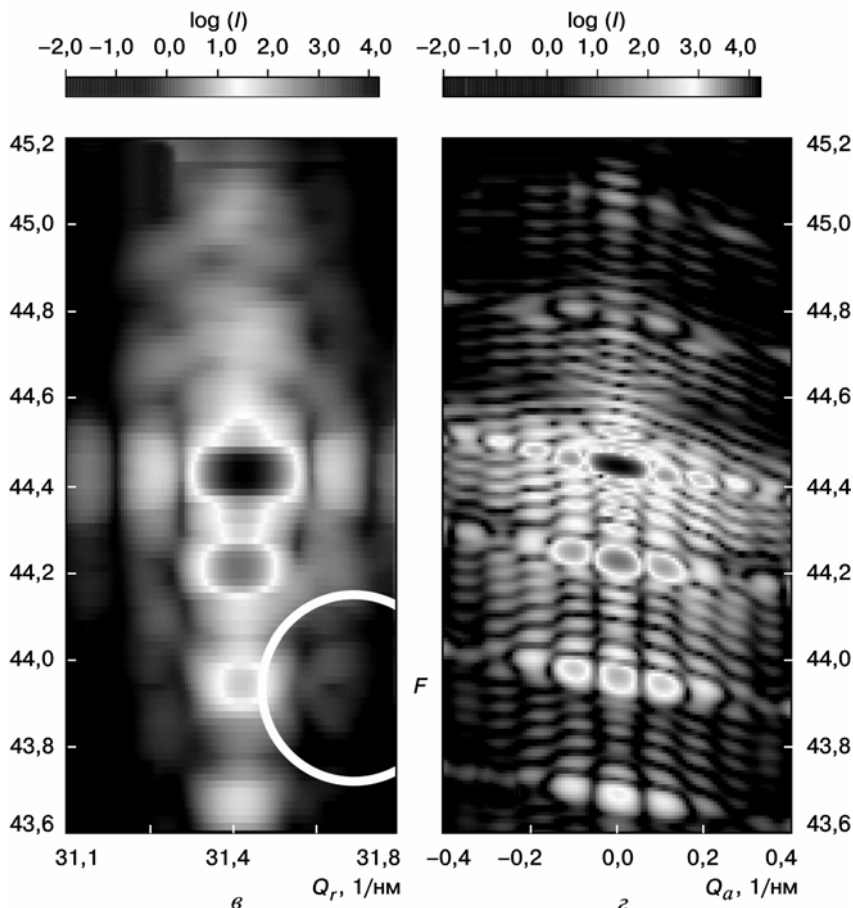


РИС. 6.11. Експериментальні (а, б) і розраховані розподіли інтенсивності дифузного розсіяння для перерізів Q_r — Q_z (а, в) при $Q_a = 0,02 \text{ nm}^{-1}$ та Q_a — Q_z (б, г) при $Q_r = 31,48 \text{ nm}^{-1}$ відповідно. Буквою F і кружечком позначена характерна особливість «риб'ячий хвіст» в розподілі інтенсивності

InGaAs/GaAs (001), показали, що для мінімізації пружної енергії системи найбільш сприятливим є, очевидно, все-таки строго вертикальне наслідування. Тобто, не існує ніякої видимої причини для похилого наслідування. Додаткові трудомісткі електронно-мікроскопіч-

ні дослідження (варто також відзначити їх руйнівний характер і до-роговизну) підтвердили висловлену на основі рентгенівських даних гіпотезу (рис. 6.13).

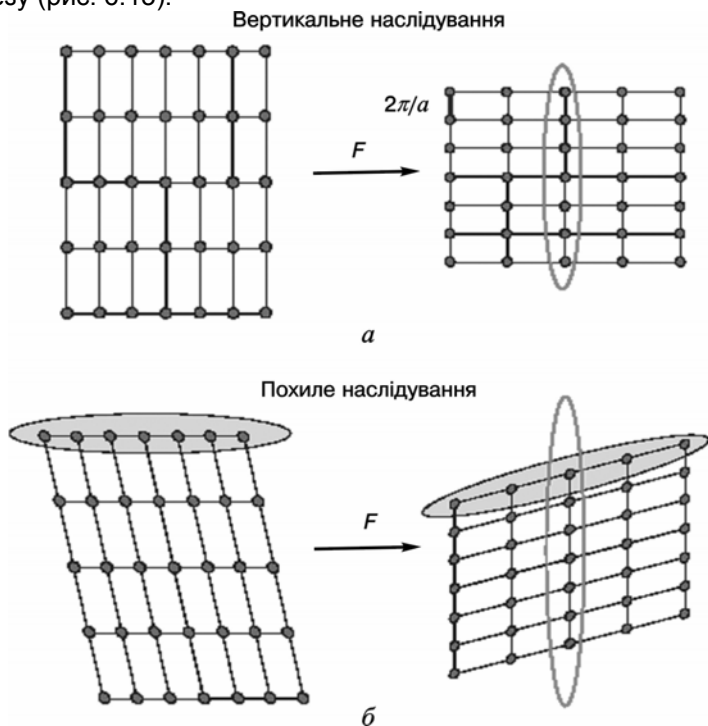


РИС. 6.12. Взаємозв'язок між кореляцією розсіювальних центрів в прямому просторі (зліва) і сателітною структурою в оберненому просторі (справа) для строго вертикального (а) і з нахилом (б) наслідування розсіювальних центрів

Абсолютне положення піків інтенсивності на СТР є чутливим до усередненого періоду комірки в кожному із періодів підґратки, але не напряму, а з урахуванням пружних спотворень — до середнього вмісту Іп в матеріалі. Розміри індивідуальних квантових точок в багатошаровій структурі можна оцінити моделюючи дифракційний експеримент, використавши метод скінченних елементів для розрахунку полів деформацій і DWBA-підходу, описаного в розділах 1, 5, а також в [36—38] для розрахунку розподілу інтенсивності дифузного розсіяння.

Модель для числових розрахунків спочатку ґрунтувалась на головних геометричних співвідношеннях, встановлених під час рентгенодифракційних експериментів, а саме вважали, що період підґратки $T = 22,8$ нм, латеральні розміри квантової точки і відстань між ланцюгами були прийняті такі: $\Delta Q_D = 40$ нм і $\Delta L_{chain} =$

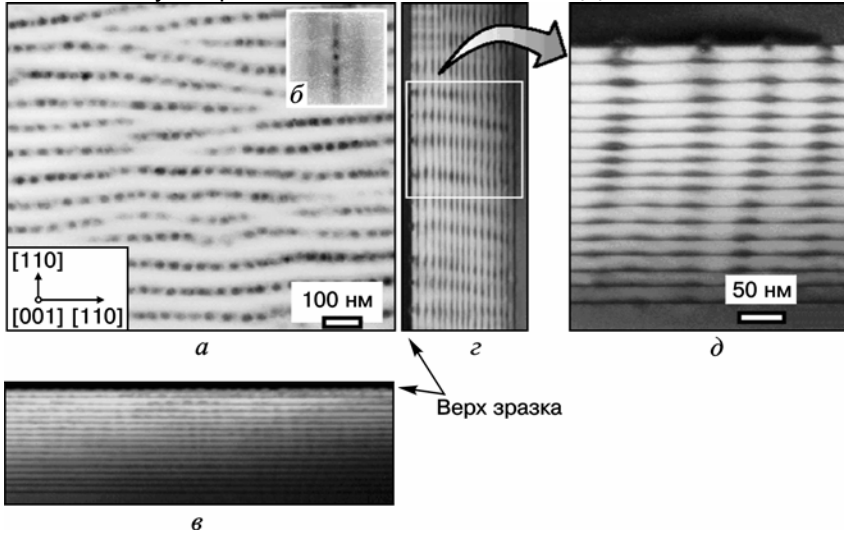


РИС. 6.13. Похиле наслідування системи ланцюгів за результатами електронної високороздільної мікроскопії (ЕМ) і АСМ. *а* — АСМ-зображення; *б* — фур'є-перетворення зображення *а*; *в* — ЕМ-зображення 110-площини зразка; *г* — ЕМ-зображення 1 – 10-площини зразка; *д* — збільшений фрагмент зображення *г*

$= 80$ нм відповідно, а вміст In в квантовій точці вважався рівним номінальному, тобто 50 %. Останнє, без сумніву, є доволі грубим наближенням. Товщина остаточного (змочувального) шару InGaAs, котрий в основному і визначає вертикальну періодичність структури (див. рис. 6.13, *д*) була прийнята рівною трьом моноатомним шарам. Окрім цього, в узгодженні з результатами АСМ квантові точки вважались асиметричними (круглими в площині) і їх тривимірна форма приймалась як сегмент сфери з основою D і різною для різних моделей висотою (випуклістю) сегмента.

Порівняння отриманих розрахункових розподілів інтенсивності з експериментальними дозволило ітераційно відібрати і покращити модель об'єкта. Тут доречно згадати про принципові обмеження, що накладаються самим методом скінченних елементів, а саме модель завжди має скінченні розміри, які часто абсолютно не відповідають реальним розмірам зразка. Унаслідок цього (див. розд. 1) фур'є-об-

разом вказаної моделі в оберненому просторі завжди буде набір сателітів. І якщо у випадку, наведеному на рис. 6.11, б, ця обставина авторів цілком влаштовує і відповідає реально спостережуваній періодичності зразка в напрямі [110], то напрям [1-10] якраз відрізняється відсутністю періодичності (просторової кореляції) розсіювальних об'єктів.

На останній стадії при розрахунках інтенсивності враховувались внески семи подібних моделей. Всі ці моделі містили у собі вісім (а не шістнадцять, як в дійсності) періодів InGaAs/GaAs, оптимальна висота квантових точок була оцінена в 7,9 нм вже при згаданих планарних розмірах точки. При цьому, щоб проявився ефект нахилу сімейств сателітів щодо напрямку Q_z (рис. 6.11, б), моделі були нахилені на 9° до вертикалі в напрямі [110], тобто перпендикулярно до ланцюгів наноостровів. Для того щоб внести деяку хаотичність і, таким чином, відобразити відсутність кореляції наноостровів уздовж ланцюгів, тобто в напрямі [1-10], у цьому напрямі моделі повинні бути також похиленими в межах від -9° до 9° з кроком 3° (тобто було створено сім подібних моделей). Істотним моментом є те, що питома вага внеску від кожної з моделей була однаковою, а саме підсумовування було некогерентним, тобто додавались не комплексні амплітуди, а інтенсивності. Результати розрахунків (див. рис. 6.11, в, г) демонструють добре узгодження з експериментом. Природно, обмежений розмір моделей виявився в тому, що максимуми інтенсивності в оберненому просторі є більш розмитими порівняно з експериментом. Виявляється також відсутність когерентної складової інтенсивності розсіяння, що особливо помітно поблизу СТР (рис. 6.11, в). Однак на розрахункових картинах проявляються навіть деякі тонкі особливості розподілу дифузного фону, зокрема характерна у вигляді «риб'ячого хвоста» чи «віяла», додаткові максимуми інтенсивності, позначені буквою F . Кутове розкриття такого «віяла» дозволяє оцінити відхилення від вертикалі (розупорядкування в положенні) квантових точок у сусідніх шарах НГ у напрямі [1-10].

На завершення скажемо, що порівняння інтенсивності сателітів різного порядку на експериментально отриманих картах дозволило визначити стандартні відхилення для величин Δ_{QD} і ΔL_{chain} : $\sigma_{\alpha_{chain}} = 5$ нм, $\sigma_{\Delta_{QD}} = 7$ нм.

6.4. ВИСНОВОК

Таким чином, зазначимо наступне.

- Використання ССD-детекторів дозволяє порівняно легко і швидко отримати картину тривимірного розподілу інтенсивності в оберненому просторі, уникаючи незмінного в інших експери-

ментальних підходах інтегрування (сцинтиляційний детектор) або ускладнення експериментальної схеми (як у випадку пози-ційно-чутливого детектора).

- Одержана тривимірна інформація дозволяє з більшою достовірністю робити висновок про особливості розташування (і кореляції) розсіювальних об'єктів. При цьому перші числові дані про кореляції в надгратці можуть бути отримані досить експресно.

- Подальше числове моделювання дозволяє, експериментуючи з формою квантових точок, профілем концентрації легуючих елементів або, як в описаному випадку, з типом вертикального наслідування, отримати додаткову і абсолютно неочевидну на перший погляд інформацію.

ЗАКЛЮЧНА ЧАСТИНА

У даній монографії викладені результати праць, у яких при врахуванні динамічних ефектів багаторазовості розсіяння розглянуті методи кількісної неруйнівної діагностики характеристик нанорозмірних структур на основі монокристалів зі складною гетерогенною структурою, зокрема: гетерошарами і квантовими ямами і періодичною шаруватою структурою (надґратками) із самоорганізованими ґратками квантових точок.

Дифракція має найважливіші застосування в структурному аналізі конденсованих матеріалів. Як уже зазначалося, при використанні ковзних кутів падіння (кути між пучком випромінювання і поверхнею монокристала) рентгенівські дифракційні методи стають поверхнево-чутливими. Як наслідок, поверхневі дифракційні методи стають важливою структурною методикою для характеристики поверхонь і тонкоплівкових гетеросистем, які є доповненням до традиційних дифракційних методів, зокрема дифракції електронів. Інтенсивності дифрагованих променів динамічного діапазону зразка пропорційні розсіювальному об'єму і в поверхневій дифракції є виправданими лише при використанні синхротронного випромінювання.

Фізичні властивості матеріалів можуть бути змінені при створенні додаткової структурної періодичності шляхом осадження додаткових тонких плівок. Довжина хвилі періодичності повинна бути такою, щоб фізичні параметри впливали на цю періодичність, і це відрізняє надґратку від багат шарової структури.

У даній праці обговорюється аналіз структури надґратки з використанням кінематичної і динамічної дифракційних теорій, включаючи границі їх обґрунтованості. Були розглянуті важливі параметри: період надґратки, індивідуальні товщини плівки і гранична шорсткість.

Крім того, тут обговорюється використання високороздільних методів, що відкриває великі можливості в аналізі дифракційних

картин. Було продемонстровано, що рентгенівська дифракція є настільки чутлива, що дійсно може виявляти девіації від досконалого об'єкта, тому для практичного аналізу необхідний компроміс, котрий залежить від інформації, яку необхідно отримати.

Проаналізовано багато праць, які присвячені розумінню структурного формування ультратонких плівок InAs, впроваджених в арсенід галію, оскільки інформація щодо будови атомної поверхні поділу істотна для повного розуміння електронних властивостей таких гетероструктур.

Повна стала кристалічної ґратки є фундаментальною константою, властивою кожному напівпровіднику. Однак у випадку InAs на арсеніді галію утворюються тривимірні острівці з дислокаціями, як тільки товщина InAs покриття перевищує критичну товщину. Для InAs епітаксійних плівок з товщиною нижче критичної, щоб оцінити атомні зміщення існують дві протилежні моделі деформації: пружна модель і модель збереження довжини зв'язків. Деякі моменти цих непростих питань також знаходять своє відображення в даній праці.

Один з розділів монографії присвячений висвітленню питань, пов'язаних з особливостями формування спектрів кривих дифракційного відбиття в короткоперіодних надґратках (Ga, Al)As/GaAs для квазізаборонених відбиттів. Обговорюються причини виникнення й загасання сателітної картини спектрів залежно від різних причин: структурної досконалості шарів, напруги на границях поділу, нерівності границь і товщин шарів. Показано високу чутливість інтенсивності надґраткових сателітів до дефектів структури в субшарах.

При дослідженні з використанням двовимірних карт розсіяння в оберненому просторі багат шарових структур із квантовими точками $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ встановлена періодичність квантових точок у цих структурах як у напрямі росту, так і в площині інтерфейсу. Виявлено нормальну й латеральну впорядкованість системи квантових точок у системі $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Самоорганізований ріст наноострівців віднедавна став досить великим полем для досліджень, головним чином, як можливих пристроїв для оптоелектроніки. Ці острови отримують епітаксійним вирощуванням з малою різницею сталих кристалічної ґратки між підкладкою і осадженим матеріалом. Результуюча деформація на границі поділу підкладки/плівка зрештою приводить до утворення самоорганізованих острівців при відомому режимі вирощування Странські—Крастанова. Морфологічна характеристика цих острів-

ців проводиться звичайно з використанням сканувальних методів мікроскопії чи розсіяння рентгенівського випромінювання. Останній метод має переваги, наприклад може використовуватись навіть для прикритих острівців, і вся поверхня зразків може бути проаналізована зі значно кращою статистикою для усереднених значень. Рентгенівське розсіяння використовується для визначення двох параметрів: розміру і форми острівців при використанні ковзної геометрії рентгенівських променів при малих кутах падіння GISAXS. Крім цього, рентгенівські промені можуть проаналізувати внутрішню кристалічну структуру острівців, їх орієнтацію і стан деформацій, що використовуються в дифракції ковзаючого падіння, чи перерізу кристалічних стержнів рентгенівського випромінювання СТР. Аморфне оксидне покриття плівок острівців, наприклад, може також бути відділене від кристалічної центральної частини. Кути між гранями квантових точок можуть бути визначені з більш високою точністю, ніж в сканувальній зондовій мікроскопії. Однак інтерпретація даних розсіяння є менш прямою, ніж це має місце в реальних просторових зображеннях і потребує відповідної теорії.

Показано, що DWBA може використовуватись, коли поверхнева відбивна здатність для вхідного або вихідного пучка висока, тобто не більша ніж кут повного зовнішнього відбиття. Таким чином, форма, розмір і повна симетрія острівців можуть бути визначені за даними рентгенівського випромінювання.

Продемонстрована можливість опису дифузного розсіяння рентгенівського випромінювання від періодичних мультишарів з поверхнями розділу.

Було викладено результати розробки нових високоінформативних методів, застосованих для діагностики нанорозмірних дефектів, які не можуть спостерігатися традиційними неруйнуючими методами, такими як рентгенівська топографія, для якої такі дрібні (нанорозмірні) дефекти виявляються за межами чутливості методу.

Для з'ясування впливу товщин деформованих шарів, градієнтів і амплітуди деформації на характеристики КДВ, якісні аналітичні методи в теорії динамічного рентгенівського розсіяння, що полягають у якісному дослідженні рішень диференціальних рівнянь, здійснюваному з позицій математичної теорії стійкості. Ці методи можуть бути використані для широкого класу модельованих профілів деформації, що містять у собі не тільки НГ, а й структури з монотонними довільними градієнтами деформації. Ступінь узагальнення, який досягається якісним аналізом, дозволяє виявити ряд закономірностей дифракційної картини при мінімальній конкретизації характеру розпо-

ділу деформації за глибиною кристала. Основні закономірності КДВ у кристалі із заданим законом зміни деформації за глибиною можуть бути отримані з рішення рівнянь Такагі.

У монографії узагальнені результати експериментальних досліджень ряду епітаксійних композицій, освітлені методичні аспекти використання рентгенівської дифрактометрії для визначення складу і товщини окремих шарів гетероструктур, послідовності їх розташування, різкості гетерограниць і деформації шарів.

Показано, що використання диференціальної дифрактометрії та комбінації декількох геометрій дифракції з наступним аналізом як напівширин, так і форми дифракційних піків дозволяє зробити висновок про регулярність розподілу дефектів різних типів в епітаксійних шарах.

Високороздільна двокристална дифрактометрія багат шарових наноструктур із квантовими ямами вперше виконана з урахуванням дифузної складової в усіх шарах, що забезпечує повний збіг розрахунку в рамках динамічної теорії з експериментом. Це дало змогу вперше здійснити кількісну діагностику дефектів у кожному шарі таких гетероструктур.

Викладені також результати праць, у яких методами дво- і трикристалної дифрактометрії із застосуванням нових теоретичних моделей проведена кількісна діагностика характеристик багат шарових періодичних структур (надґраток) із самоорганізованими ґратками квантових точок та продемонстрована висока інформативність цих нових методів у дослідженнях таких унікальних наноструктур.

До розділу 1

1. *Helmholtz H.V.* // *Crelles Journ.* — 1986. — **100.** — P. 213.
2. *Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff S., Stanley Y.B.* // *Phys. Rev. B.* — 1988. — **38.** — P. 2297.
3. *Kaganer V.M., Ploog K.H.* // *Phys. Rev. B.* — 2001. — **64.** — P. 205—301.
4. *Даценко Л.И., Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Молодкін В.Б.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии. — Киев: Академперіодика, 2002.
5. *Andrews S.R., Cowley R.A.* // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1985. — **18.** — P. 6247.
6. *Robinson I.K.* // *Phys. Rev. B.* — 1986. — **33.** — P. 3830.
7. *Parrat L.G.* // *Phys. Rev.* — 1954. — **95.** — P. 359.
8. *Baumbach G.T., Holy V., Pietsch U., Gailhanou M.* // *Physica.* — 1994. — **198.** — P. 249.
9. *Zachariasen W.H.* *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals.* — Wiley, New York, 1994.
10. *Batterman B., Cole H.* *Dynamical Diffraction of X-Rays by Perfect Crystals* // *Reviews of Modern Physics.* — 1964.
11. *Кривоглаз М.А.* Дифракция рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в неидеальных кристаллах. — Киев: Наук. думка, 1983. — 401 с.
12. *Кривоглаз М.А.* Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах. — Киев: Наук. думка, 1984. — 288 с.
13. *Молодкін В.Б., Олиховський С.И., Кисловський Е.Н., Кривицкий В.П. і др.* // *Металлофізика і новітні технології.* — 1997. — **19,** № 12. — С. 25—34.
14. *Taupin D.* // *Bull. Soc. Fr. Mineral. Crist.* — 1964. — **87.** — P. 469.
15. *Takagi S.* // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1969. — **26.** — P. 1239.
16. *Bartels W.J.* // *J. Vac. Sci. Technol. B.* — 1983. — **1.** — P. 338.
17. *Wie C.R., Kim H.M.* // *J. Appl. Phys.* — 1991. — **69.** — P. 6406.
18. *Holy V., Pietsch U., Baumbach T.* *High-resolution X-ray Scattering from Thin Films and Multilayers.* — Springer-Verlag, Berlin, 1999.
19. *Bowen D.K., Tanner B.K.* *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography.* — Tailor & Francis, 1998.

20. Бушув В.А., Кюмм Р.Н., Хапачев Ю.П. Физические принципы рентгенодифрактометрического определения параметров реальной структуры многослойных эпитаксиальных пленок. — Нальчик: КБГУ, 1996.
21. Pietsch U., Holy V., Baumbach T. High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films to Lateral Nanostructures. — 2004. — 408 p.

До розділу 2

1. Fewster P.F., Andrew N.L. // J. Appl. Phys. — 1993. — **74**. — P. 3121.
2. Fewster P.F., Andrew N.L. // J. Phys. D. — 1995. — **28**. — P. A97.
3. Zhang K., Heyn Ch., Hansen W., Schmidt Th., Falta J. // Appl. Phys. Lett. — 2000. — **76**. — P. 2229.
4. Heyn Ch., Ender D., Zhang K., Hansen W. // J. Cryst. Growth. — 2000. — **210**. — P. 421.
5. Study on distribution and shape of self-assembled InAs quantum dots grown on GaAs (001) / K. Zhang, J. Falta, Ch. Heyn, Th. Schmidt, G. Materlik, W. Han-sen // Special Topic issue on Pure and Applied Chemistry (IUPAC). — 2000. — **72**. — P. 199.
6. Fewster P.F., Andrew N.X. // J. Appl. Cryst. — 1995. — **28**. — P. 451.
7. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в неидеальных кристаллах. — Киев: Наук. думка, 1983. — 401 с.
8. Parrat L.J. // Phys. Rev. — 1954. — **95**. — P. 359.
9. Bartels W.J., Nijman W. // J. Cryst. Growth. — 1978. — **44**. — P. 518.
10. Giannini C., De Caro L., Tapfer L. // Solid State Commun. — 1994. — **91**. — P. 635.
11. Tapfer L., Ploog K. // Phys. Rev. B. — 1986. — **33**. — P. 5565.
12. Takagi S. // J. Phys. Soc. Japn. — 1969. — **26**. — P. 1239.
13. Taupin D. // Bull. Soc. Fr. Mineral. Crist. — 1964. — **87**. — P. 469.
14. Bartels W.J., Hornstra J., Lobeek D.J.W. // Acta Cryst. Sect. A. — 1986. — **42**. — P. 539.
15. Halliwell M.A.G., Lyons M.H., Hill M.J. // J. Cryst. Growth. — 1984. — **68**. — P. 523.
16. Matthews J.W., Blakeslee A.E. // Ibid. — 1974. — **27**. — P. 118.
17. Yang K., Anan T., Schowalter L.J. // Appl. Phys. Lett. — 1994. — **65**. — P. 2789.
18. Hornstra J., Bartels W.J. // J. Cryst. Growth. — 1978. — **44**. — P. 513.
19. Sanz-Herva's K., Aguilar M., Sa'nchez-Rojas J.L. et al. // Appl. Phys. Lett. — 1996. — **69**. — P. 1574—1579.
20. Sanz-Herva's K., Aguilar M., Sa'nchez-Rojas J.L. et al. // J. Appl. Phys. — 1997. — **82**, N 7. — P. 3297—3305.
21. Zaus R. // J. Appl. Cryst. — 1993. — **26**. — P. 801.
22. Holloway H. // J. Appl. Phys. — 1990. — **67**. — P. 6229.
23. Lohmeier M., Vlieg E. // J. Appl. Cryst. — 1993. — **26**. — P. 706.
24. Zabel H., Robinson I.K. Surface X-ray and Neutron Scattering. — Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1992.
25. Wollschlager J. // Surf. Sci. — 1997. — **383**. — P. 103.
26. Schmidbauer M., Wiebach Th., Raidt H. et al. // Phys. Rev. B. — 1998. — **58**. — P. 10523.
27. Shiraishi K., Yamaguchi E. // Ibid. — 1990. — **42**. — P. 3064.

28. Song S., Mochrie S.G.J. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — **73**. — P. 995.
29. Song S., Mochrie S.G.J. // Phys. Rev. B. — 1995. — **51**. — P. 10068.
30. Strassburg M., Kutzer V., Pohl U.W. et al. // Appl. Phys. Lett. — 1998. — **72**. — P. 942.
31. Dosch H. Critical Phenomena at Surfaces and Interfaces: Evanescent X-ray and Neutrons Scattering. — Springer-Verlag, Berlin, 1992.
32. Ferrer S., Petroff Y. Surface science done at third generation synchrotron radiation facilities // Surf. Sci. — 2002. — **500**. — P. 605.
33. Veron M.B., Sauvage Simkin M., Etgens V.H. et al. Atomic structure of the CdTe(001) (2 × 2) reconstructed surface: a grazing incidence X-ray diffraction study // Appl. Phys. Lett. — 1995. — **67**. — P. 3957.
34. Torrelles X., Rius J., Boscherini F. et al. Application of X-ray direct methods to surface reconstructions: the solution of projected superstructures // Phys. Rev. B. — 1998. — **57**. — P. R4281.
35. Torrelles X., Rius J., Miravittles C., Ferrer S. Application of the direct methods' difference sum function to the solution of reconstructed surfaces // Surf. Sci. — 1999. — **423**. — P. 338.
36. Torrelles X., Rius J., Hirnet A. et al. Real examples of surface reconstructions determined by direct methods // J. Phys.: Condens. Mat. — 2002. — **14**. — P. 4075.
37. Eymery J., Leroy F., Fournel F. GIXRD of nanoscale strain patterning in wafer bonding // Nucl. Instrum. Meth. B. — 2003. — **200**. — P. 73.
38. Holy V., Pietsch U., Baumbach T. High-resolution X-ray Scattering from Thin Films and Multilayers. — Springer-Verlag, Berlin, 1999.
39. Robinson I.K. Surface diffraction on semiconductor surfaces and interfaces // Appl. Surf. Sci. — 1992. — **56—58**. — P. 117.
40. Robinson I.K. // Phys. Rev. B. — 1986. — **33**. — P. 3830.
41. Falta J., Bahr D., Materlik G. et al. // Surf. Rev. Lett. — 1998. — **5**. — P. 145.

До розділу 3

1. Authier A. X-ray and Neutron Dynamical Diffraction. Theory and Application // Plenum Press. — New York, 1996.
2. Daniel V., Lipson H. // Proc. R. Soc. London. — 1943. — **A181**. — P. 368.
3. De Fontaine D. Local Atomic Arrangement Studies by X-Ray Diffraction. — Gordon and Breach, New York, 1966.
4. Segmuller A. // Appl. Phys. Lett. — 1976. — **28-1**. — P. 39.
5. Lynn J.V., Kjems J.K., Passel L. et al. // J. Appl. Cryst. — 1976. — **9**. — P. 454.
6. Sears V.F. // Acta Cryst. — 1977. — **A53**. — P. 649.
7. Friedel G. // C. R. Acad. Sci. — 1913. — **157**. — P. 1533—1536.
8. Schoenborn B.P., Caspar D.L.D., Kammerer O.F. // J. Appl. Cryst. — 1974. — **7**. — P. 508—510.
9. Saxena A.M., Schoenborn B.P. // Acta Cryst. — 1977. — **A33**. — P. 805—813.
10. Guinier P.F. // J. Phys. D: Appl. Phys. — 1993. — **26**. — P. A142.
11. Guinier A. X-ray Diffraction in Crystal, imperfect Crystal and Amorphous Bodies / W.H. Freeman. — San Francisco, 1963.
12. Speriosu V.S., Vreelang T. // J. Appl. Phys. — 1984. — **56**, N 6. — P. 1591—1600.

13. *Tapfer I., Ploog K.* // *Phys. Rev. B.* — 1989. — **40**, N 14. — P. 9802—9810.
14. *Holy V., Pietch U., Baumbach T.* High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers. — Berlin, Springer, 1998.
15. *Holy V., Kubena J., Ploog K.* // *Phys. Stat. Sol. (B).* — 1990. — **162**, N 3. — P. 347—361.
16. *Keravec J., Baudet M., Caulet J.* // *J. Appl. Cryst.* — 1984. — **17**. — P. 196.
17. *Fewster P.F.* // *Philips J. Res.* — 1986. — **41**. — P. 268.
18. *Fewster P.F.* // *Thin Films Growth Techniques.* — Plenum Press, New York, 1987.
19. *Fullerton E.E., Shuller I.K.* // *Phys. Rev. B.* — 1992. — **45**. — P. 9292.
20. *Fewster P.F.* // *J. Appl. Cryst.* — 1988. — **21**. — P. 524.
21. *Tapfer I., Ploog K.* // *Phys. Rev. B.* — 1986. — **33**. — P. 5565—5574.
22. *Shuller I.K.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1980. — **44**, N 24. — P. 1597.
23. *Fewster P.F.* // *Rep. Prog. Phys.* — 1996. — **59**. — P. 1339—1407.
24. *Пунегов В.И.* // ФТТ. — 1995. — **37**, № 4. — С. 1134.
25. *Пунегов В.И.* // Письма в ЖТФ. — 1992. — **18**, № 4. — С. 66.
26. *Пунегов В.И.* // Кристаллография. — 1990. — **35**, № 3. — С. 576.
27. *Kyutt R.N., Petrashen P.V., Sorokin L.M.* // *Phys. Stat. Sol. (a).* — 1980. — **60**, N 11. — P. 381.
28. *Бушув В.А.* // ФТТ. — 1989. — **31**, № 11. — С. 70.
29. *Кладько В.П., Даценко Л.И., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б.* // *Металлофизика и новейшие технологии.* — 2003. — **25**, № 4. — С. 556—564.
30. *Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Прокопенко И.В. и др.* // Там же. — 2004. — **26**, № 2. — С. 217—227.
31. *Kladko V., Datsenko L., Machulin V. et al.* // *J. Appl. Cryst.* — 2004. — **37**. — P. 150—155.
32. *Kladko V., Datsenko L., Korchovy A. et al.* // *Semicond. Phys. Quantum and Optoelectr.* — 2003. — **6**, N 3. — P. 293—298.
33. *Kyutt R.N., Shubina T.V., Sorokin S.V. et al.* // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 2003. — **36**, N 3. — P. A166—A171.
34. *Haase M., Prost W., Velling P. et al.* // *Thin Sol. Films.* — 1998. — **319**, N 1—2. — P. 25—28.
35. *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.
36. *Дроздов Ю.Н., Гусев С.А., Садова Е.Н. и др.* // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* — 2003. — № 2. — С. 67.
37. *Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Гудименко О.Й. та ін.* *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології.* — 2003. — **1**, вип. 2. — С. 447—457.
38. *Mukai K., Nakata Y., Otsubo K. et al.* // *IEEE J. Quantum Electron.* — 2000. — **36**. — P. 556.
39. *Li H., Zhuang Q., Wang Z., Daniels-Race T.* // *Appl. Phys. Lett.* — 2000. — **87**. — P. 188.
40. *Brussaferri L., Sanguinatti S., Grilli E.* // *Ibid.* — 1996. — **69**. — P. 3354.
41. *Chu L., Zrenner A., Bohm G., Abstraiter G.* // *Ibid.* — 2000. — **76**. — P. 1944.
42. *Пунегов В.И.* // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* — 2003. — № 2. — С. 21.

43. Zhang K., Heyn Ch., Hansen W. // Appl. Phys. Lett. — 2000. — **77**, N 9. — P. 1295.
44. Kegel I., Metzger T.H., Lorke A. et al. // Phys. Rev. Lett. — 2000. — **85**, N 8. — P. 1694.
45. Yashar P., Pillai M.R., Mirecki-Millunchick J., Barnett S.A. // J. Appl. Rhys. — 1998. — **83**, N 4. — P. 2010.
46. Peng C.S., Pavelescu E.-M., Jouhti T. et al. // Appl. Rhys. Let. — 2002. — **80**, N 25. — P. 4720.
47. Boudet N., Eumery J., Magnea N. // Phys. Rev. — 1997. — **55**, N 23. — P. 15804.
48. Тхорик Ю.А., Хазан Л.С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. — Киев: Наук. думка, 1983. — 304 с.
49. Bartels W.J., Hornsrtta J., Lobeek D.J.W. // Acta Cryst. — 1986. — **A42**. — P. 539.
50. Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. — СПб.: Наука, 2002.
51. Ефанов А.Н., Кладько В.П. // Металлофизика и новейшие технологии. — 2005. — **27**, № 12. — С. 1234.
52. Fewster P.F. X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction // Proceedings of NATO Advanced Study Institute on X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction: Theory and Applications. — Erice, Italy, 1996. — **358**. — P. 289—300.

До розділу 4

1. Eisenberger P., Alexandropoulos N.G., Platzmann P.M. // Phys. Rev. Lett. — 1972. — **28**, N 23. — P. 1519—1524.
2. Iida A., Kohra K. // Phys. Stat. Sol. (A). — 1979. — **51**. — P. 533—542.
3. Zaumseil P. // Ibid. — 1985. — **91**. — P. K31—K35.
4. Кютт П.Н. // ФТТ. — 1989. — **31**, № 8. — С. 270—272.
5. Charniy L.A., Morozov A.N., Bublik V.T. et al. // J. Cryst. Growth. — 1992. — **118**, N 1. — P. 163—175.
6. Кютт П.Н. // ФТТ. — 1997. — **39**, № 7. — С. 1188—1193.
7. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в неидеальных кристаллах. — Киев: Наук. думка, 1983. — 401 с.
8. Кривоглаз М.А. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах. — Киев: Наук. думка, 1984. — 288 с.
9. Dederichs P.H. // Phys. Rev. (B). — 1970. — **1**, N 4. — P. 1306—1316.
10. Trinkhaus H., Spalt H., Peisl H. // Phys. Stat. Sol. (a). — 1970. — **2**. — P. K97.
11. Кладько В.П., Домагала Я., Молодкин В.Б. и др. // Металлофизика и новейшие технологии. — 2001. — **23**, № 2. — С. 241—254.
12. Neumann H.B., Rutt U., Bouchard R. et al. // J. Appl. Cryst. — 1994. — **27**. — P. 1030—1038.
13. Bloch R., Bahr D., Olde J. et al. // Phys. Rev. (B). — 1990. — **42**, N 8. — P. 5093—5099.
14. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Кисловский Е.Н. и др. // Металлофизика и новейшие технологии. — 1997. — **19**, № 12. — С. 25—34.

15. *Molodkin V.B., Nemoshkalenko V.V., Olikhovskii S.I. et al.* Theoretical and experimental principles of the differential-integral triple-crystal X-ray diffraction of imperfect single crystals // Preprint UNSC 3. — Kyiv, 1998. — 22 p.
16. *Kladko V.P., Datsenko L.I., Machulin V.F. et al.* // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2001. — **34**, N 10A. — P. A87—A92.
17. *Кладько В.П., Олиховский С.И., Даценко Л.И.* // Металлофизика и новейшие технологии. — 2000. — **22**, № 6. — С. 20—27.
18. *Holy V., Pietch U., Baumbach T.* High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers. — Berlin, Springer, 1998. — 254 p.
19. *Боуэн А.К., Таннер Б.К.* Высокорастворимая рентгеновская дифрактометрия и топография. — СПб.: Наука, 2002. — 274 с.
20. *Fewster P.F.* // Rep. Prog. Phys. — 1996. — **59**. — P. 1339—1407.
21. *Фалеев Н.Н., Мусихин Ю.Г., Суворова А.А. и др.* // Физика и техника полупроводников. — 2001. — **35**, вып. 8. — С. 969—978.
22. *Lomov A.A., Zaumseil P., Winter U.* // Acta Cryst. (A). — 1985. — **41**, N 3. — P. 223—227.
23. *Бушув В.А., Петраков А.П.* // Поверхность. — 1992. — № 9. — С. 64—70.
24. *Tapfer L., Sciacovelli H., De Caro L.* // J. Phys. D: Appl. Phys. — 1995. — **28**. — P. A179—A183.
25. *Kladko V.P., Datsenko L.I., Maksimenko Z.V. et al.* // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. — 2000. — **3**, N 3. — P. 5—10.
26. *Бушув В.А., Кюмм Р.Н., Хапачев Ю.П.* Физические принципы рентгено-дифрактометрического определения параметров реальной структуры многослойных эпитаксиальных пленок. — Нальчик: КБГУ, 1996. — 278 с.
27. *Fewster P.F., Andrew N.L.* // J. Appl. Phys. — 1993. — **74**. — P. 3121.
28. *Fewster P.F.* Review article: X-ray diffraction from low dimensional solids // Semicond. Sci. Technol. — 1993. — **8**. — P. 1915.
29. *Кладько В.П.* Вплив точкових дефектів і їх асоціацій на розсіяння рентгенівських променів реальними кристалами напівпровідників: Автореф. дис. ... докт. фіз.-мат. наук. — Київ, 2000. — 32 с.

До розділу 5

1. *Херман М.* Полупроводниковые сверхрешетки. — М.: Мир, 1989.
2. *Stranski N., von Krastanov L.* // Akad. Wiss. Lit. Mainz, Natur. K1. — 1939. — IIb **146**. — P. 797.
3. *Zhuang Z., Stangl J., Darchuber A.A.* // J. Mater. Science. — 1999. — **10**. — P. 215.
4. *Tersoff J., Teichert C., Lagalli M.G.* Phys. // Rev. Lett. — 1996. — **76**. — P. 1675.
5. *Holy V., Pietch U., Baumbach T.* High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers. — Berlin: Springer, 1998.
6. *Holy V., Stangl J., Springholz G. et al.* // Physica (B). — 2000. — **283**. — P. 65.
7. *Darchuber A.A., Schittenhelm P., Holy V. et al.* // Phys. Rev. — 1997. — **B55**. — P. 15652.
8. *Li J.H., Holy V., Meduna M. et al.* // Ibid. — 2002. — **B66**. — P. 115 и т.д. 312.
9. *Gailhanou M., Baumbach T., Marti U. et al.* // Appl. Phys. Lett. — 1993. — **62**. — P. 1623.
10. *Dekard L., Tapfer L.* // Phys. Rev. (B). — 1994. — **49**. — P. 11 и т.д. 127.
11. *Holy V., Darchuber A.A., Bauer G. et al.* // Ibid. — 1995. — **B52**. — P. 7934.

12. Zachariasen W.H. Theory of X-Ray Diffraction in Crystals. — Wiley, New York, 1994.
13. Shen Q., Kysia S. // Phys. Rev. (B). — 1997. — P. 15791.
14. Pashke K., Geue T., Baberka T.A. et al. // Appl. Phys.Lett. — 1997. — **70**. — P. 1031.
15. Darowski N., Pietch U., Zhuang Y. et al. // Ibid. — 1998. — **73**. — P. 806.
16. Brussaferri L., Sanguinatti S., Grilli E. // Ibid. — 1996. — **69**. — P. 3354.
17. Xie Q., Madhukar A., Chen P., Kobayashi N.P. // Phys. Rev. Lett. — 1995. — **75**. — P. 2542.
18. Holy V., Darchuber A.A., Stangl J. et al. // Phys. Rev. — 1998. — **B58**. — P. 7934.
19. Darchuber A.A., Koppensteiner E., Bauer G. et al. // J. Phys. D: Appl.Phys. — 1995. — **28**, N 4. — P. 195—199.
20. Kladko V.P., Datsenko L.I., Kuchuk A.V. et al. // Ukr.Phys.Journ. — 2004. — **49**, N 1. — P. 345.
21. Pavlov K.M., Punegov V.I. // Acta Cryst.(A). — 2000. — **A56**. — P. 227.
22. Molodkin V.B., Olikhovski S.I., Osinovski M.E. // Phys. Metals. — 1984. — **5**. — P. 1.
23. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Молодкін В.Б., Єфанов О.М. та ін. // Металлофізика и новейшие технологии. — 2004. — **26**, № 10. — P. 1255.
24. Фалеев Н.Н., Павлов К.М., Пунегов В.И. и др. // ФТП. — 1999. — **33**, № 11. — P. 1359.
25. Holy V., Kubena J., Ploog K. // Phys. Stat. Sol. (b). — 1990. — **162**, N 3. — P. 347.
26. Hsieh K.C., Baillargeon J.N., Cheng K.J. // Appl. Phys. Lett. — 1990. — **57**. — P. 2244.
27. Chen A.C., Moy A.M., Chou L.J. et al. // Ibid. — 1995. — **66**. — P. 2694.
28. Chou S.T., Chen K.J., Chou L.J., Hsieh K.C. // J. Appl. Phys. — 1995. — **78**. — P. 6270.
29. Normann A.G., Achrenkiel S.P., Moutinho H. et al. // Appl. Phys. Lett. — 1998. — **73**. — P. 1844.
30. Glas F. // J. Appl. Phys. — 1987. — **62**. — P. 3201.
31. Stokes D.W., Forrest R.L., Li J.H. et al. // Ibid. — 2003. — **93**. — P. 3116.
32. Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff S., Stanley H.B. // Phys. Rev. B. — 1988. — **38**. — P. 2297.
33. Stangl J., Daniel A., Holy V. et al. // Appl. Phys. Lett. — 2001. — **79**. — P. 1474.
34. Rastelli, Kummer M., von Kalnel H. // Phys. Rev. Lett. — 2001. — **87**. — P. 256101.
35. Petroff P., Lorke A., Imamoglu A. // Phys. Today. — 2001. — **54**. — P. 5, 46.
36. Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N.N. Quantum Dot Heterostructures. — Wiley, Chichester, 1999.
37. Brunner K., Zhu J., Abstreiter G. et al. // Thin Solid Films. — 2000. — **369**. — P. 39.
38. Hesse M., Stangl J., Holy V. et al. // Phys. Rew. B. — 2002. — **66**. — P. 085321.
39. Shchukin V., Ledentsov N.N., Bimberg D. Epitaxy of Nanostructures, Nanoscience and Technology Springer. — Berlin, 2003.

40. Schmidbauer M. X-Ray Diffuse Scattering from Self-Organized Mesoscopic Semiconductor Structures, Springer Tracts in Modern Physics. — Springer, Berlin, 2004. — **199**.
41. Levine J.R., Cohen J.B., Chung Y.W., Georgopoulos P. // J. Appl. Cryst. — 1989. — **22**. — P. 528.
42. Schmidbauer M., Wiebach T., Raidt H. et al. // Phys. Rev. B. — 1998. — **58**. — P. 10523.
43. Kegel I., Metzger T.H., Peisl J. et al. // Appl. Phys. Lett. — 1999. — **74**. — P. 2978.
44. Kegel I., Metzger T.H., Lorke A. et al. // Phys. Rev. Lett. — 2000. — **85**. — P. 1694.
45. Rauscher M., Paniago R., Metzger H. et al. // J. Appl. Phys. — 1999. — **86**. — P. 6763.
46. Kegel I., Metzger T.H., Lorke A. et al. // Phys. Rev. B. — 2001. — **63**. — P. 035318.
47. Zhong Z., Ambacher O., Link A. et al. // Appl. Phys. Lett. — 2002. — **80**. — P. 3521.
48. Kaganer V.M., Stepanov S.A., Köhler R. // Phys. Rev. B. — 1995. — **52**. — P. 16369.
49. Grigoriev D., Hanke M., Schmidbauer M. et al. // J. Phys. D. — 2003. — **36**. — P. A225.
50. Jach T., Cowan P.L., Qun S., Bedzyk M.J. // Phys. Rev. B. — 1989. — **39**. — P. 5739.
51. Afanasyev A.M., Melkoyan M.K. // Acta Cryst., Sect. A, Found. Cryst. — 1983. — **39**. — P. 207.
52. Stepanov S.A., Köhler R. // J. Appl. Phys. — 1994. — **76**. — P. 7809.
53. Christiansen S., Albrecht M., Strunk H.P., Maier H.J. // Appl. Phys. Lett. — 1994. — **64**. — P. 3617.
54. Wiebach T., Schmidbauer M., Hanke M. et al. // Phys. Rev. B. — 2000. — **61**. — P. 5571.
55. Benabbas T., Francios P., Androussi Y., Lefebvre A. // J. Appl. Phys. — 1996. — **80**. — P. 2763.
56. Grundmann M., Stier O., Bimberg D. // Phys. Rev. B. — 1995. — **52**. — P. 11969.
57. Hanke M., Schmidbauer M., Grigoriev D. et al. // Ibid. — 2004. — **69**. — P. 075317.
58. Kegel I., Metzger T.H., Fratzl P. et al. // Europhys. Lett. — 1999. — **45**. — P. 222.
59. Bauser E. Crystal Growth of Electronic Materials. — Elsevier, New York, 1985. — P. 41.
60. Hanke M., Schmidbauer M., Köhler R. et al. // Appl. Phys. Lett. — 2004. — **84**. — P. 5228.
61. Dorsch W., Strunk H.P., Wawra H. et al. // Ibid. — 1998. — **72**. — P. 179.
62. Hanke M., Raidt H., Köhler R., Wawra H. // Appl. Phys. Lett. — 2003. — **83**. — P. 4927.
63. Meixner M., Schöll E., Schmidbauer M. et al. // Phys. Rev. B. — 2001. — **64**. — P. 245307.

64. Schmidbauer M., Hanke M., Köhler R. // Phys. Rev. B. — 2005. — **71**. — P. 115323.
65. Tersoff J., Teichert C., Lagally M.G. // Phys. Rev. Lett. — 1996. — **76**. — P. 1695.
66. Strassburg A., Kutzer V., Pohl U.W. et al. // Appl. Phys. Lett. — 1998. — **72**. — P. 942.
67. Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N.N. et al. // Thin Solid Films. — 1995. — **267**. — P. 32.
68. Darhuber A.A., Holy V., Stangl J. et al. // Appl. Phys. Lett. — 1997. — **70**. — P. 955.
69. Stier O., Grundmann M., Bimberg D. // Phys. Rev. — 1999. — **B59**. — P. 5688.
70. Moll N., Scheler M., Pehlke E. // Ibid. — 1998. — **B58**. — P. 4566.
71. Hanke M., Schmidbauer M., Grigoriev D. et al. // Ibid. — 2004. — **B69**. — P. 075317.
72. Schmidt H., Medeiros-Ribeiro G., Garcia J., Petroff P.M. // Appl. Phys. Lett. — 1997. — **70**. — P. 1727.
73. Wollschlager J. // Surface Sci. — 1995. — **328**. — P. 325.
74. Bressler-Hill V., Lorke A., Varma S. et al. // Phys. Rev. — 1994. — **B50**. — P. 8479.
75. Chu L., Arzberger M., Brohm G., Abstreiter G. // J. Appl. Phys. — 1999. — **85**. — P. 2355.
76. Song S., Mochrie S.G.J. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — **73**. — P. 995.
77. Warren E. X-ray Diffraction. — Dover Publications Inc., New York, 1990.
78. Nye J.F. Physical properties of crystals. Clarendon press, Oxford, 1957.
79. Kegel I., Metzger T.H., Fratzl P. et al. // Europhys. Lett. — 1999. — **45**. — P. 222.
80. Joyce B.A., Sudijono J.L., Belk J.L. et al. // Jpn. J. Appl. Phys. — 1997. — **36**. — P. 4111.

До розділу 6

1. Ma W., Nötzel R., Trampert A. et al. // Appl. Phys. Lett. — 2001. — **78**, N 9. — P. 1297.
2. Leon R., Kim Y., Jagadish C. et al. // Ibid. — 1996. — **69**, N 13. — P. 1888—1893.
3. Xu S.J., Wang X.C., Chua S.J. et al. // Ibid. — 1998. — **72**, N 25. — P. 3335—3342.
4. Xu S.J., Wang H., Li Q. et al. // Ibid. — 2000. — **77**, N 14. — P. 2130—2137.
5. Tersoff J., Teichert C., Lagally M.G. // Phys. Rev. Lett. — 1996. — **76**, N 10. — P. 1675—1683.
6. Teichert C., Lagally M.G., Peticolas L.J. et al. // Phys. Rev. B. — 1996. — **53**, N 24. — P. 16334—16341.
7. Ipatova I.P., Malyshkin V.G., Shchukin V.A. // J. Appl. Phys. — 1993. — **74**, N 12. — P. 7198—7203.
8. Shchukin V.A., Borovkov A.I., Ledensov N.N., Kop'ev P.S. // Phys. Rev. B. — 1995. — **51**. — P. 17767—17774.
9. Фалеев Н.Н., Мусихин Ю.Г., Суворова А.А. и др. // ФТП. — 2001. — **35**. — P. 969—981.
10. Tapfer L., Sciacovelli P., De Caro L. // J. Phys. D: Appl. Phys. — 1995. — **28**. — P. A179—A183.

11. *Ponchet A., Rocher A., Ougazzaden A., Mircea A.* // J. Appl. Phys. — 1994. — **75**. — P. 7881—7887.
12. *Ponchet A., Le Corre A., Godefroy A. et al.* // J. Cryst. Growth. — 1995. — **153**. — P. 71—78.
13. *Headrick R.L., Baribeau J.-M., Strausser Y.E.* // Appl. Phys. Lett. — 1995. — **66**. — P. 96—102.
14. *Wang Z.M., Holms K., Mazur Yu.I., Salamo G.J.* // Ibid. — 2004. — **84**. — P. 1931—1939.
15. *Tokura Y., Takagi H., Uchida S.* // Nature (London). — 1989. — **337**. — P. 345—356.
16. *Krost A., Heinrichsdor F., Bimberg D. et al.* // Appl. Phys. Lett. — 1996. — **68**. — P. 785—789.
17. *Pal D., Towe E., Chen S.* // Ibid. — 2001. — **78**. — P. 4133—4137.
18. *Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Гудименко О.Й.* // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. — 2003. — **1**, вип. 2. — С. 447—457.
19. *Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Молодкін В.Б. та ін.* // Металлофізика и новейшие технологии. — 2004. — **26**, № 10. — С. 1255—1267.
20. *Mazur Yu.I., Ma W.Q., Wang X. et al.* // Appl. Phys. Lett. — 2003. — **83**. — P. 987—992.
21. *Holy V., Kubena J., Abramof E. et al.* // J. Phys. D: Appl. Phys. — 1993. — **26**. — P. A146—A152.
22. *Боуэн А.К., Таннер Б.К.* Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. — СПб.: Наука, 2002. — 274 с.
23. *Chen W., Shin B., Goldman R.S. et al.* // J. Vac. Sci. Technol. B. — 2003. — **21**, N 4. — P. 1920—1923.
24. *Grigoriev D., Schmidbauer M., Schaefer P. et al.* Three-dimensional self-ordering in an InGaAs/GaAs multilayer quantum dot structure investigated by X-ray diffuse scattering. // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2004. — **38**, N 3. — P. A154—A159.
25. *Krishna S., Raghavan S., Gray A.L. et al.* // Appl. Phys. Lett. — 2002. — **80**. — P. 3898.
26. *Krost A., Bauer G., Woitok J.* High Resolution X-ray Diffraction in: Optical Characterization of Epitaxial Semiconductor Layers / Eds G. Bauer, W. Richter. — Springer, Berlin, 1996. — P. 347.
27. *Krost A., Heinrichsdorff F., Bimberg D. et al.* // Cryst. Res. Technol. — 1999. — **34**. — P. 89.
28. *Фалеев Н.Н., Павлов К.М., Пунегов В.И. и др.* // Там же. — 1999. — **33**. — P. 1359.
29. *Sanz-Hervas A., Aguilar M., Sanchez-Rojas J.L. et al.* // J. Appl. Phys. — 1997. — **82**, N 7. — С. 3297—3305.
30. *Tapfer L., Rocca G.C.La., Lage H. et al.* // Surf. Sci. — 1992. — **267**. — P. 227.
31. *De Caro L., Sciacovelli P., Tapfer L.* // Appl. Phys. Lett. — 1994. — **64**. — P. 34—41.
32. *Mano T., Nötzel R., Hamhuis G.J. et al.* // J. Appl. Phys. — 2002. — **92**. — P. 4043—4048.
33. *Qun Shen, Stefan W. Kycia, Tentarelli E.S. et al.* // Phys. Rev. B. — 1996. — **54**. — P. 16381—16388.

Список літератури







34. *Kondrashkina E.A., Stepanov S.A., Opitz R. et al.* // Phys. Rev. B. — 1997. — **56**. — P. 10469.
35. *Springholz G., Holy V., Pinczolit M., Bauer G.* // Science. — 1998. — **282**. — P. 734.
36. *Hanke M., Grigoriev D., Schmidbauer M. et al.* // Appl. Physica E. — 2004.
37. *Wiebach T., Schmidbauer M., Hanke M. et al.* // Phys. Rev. B. — 2000. — **61**. — P. 5571.
38. *Grigoriev D., Hanke M., Schmidbauer M. et al.* // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2003. — **36**. — P. A225.



ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	3
СПИСОК ОСНОВНИХ УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА СКОРОЧЕНЬ	7

РОЗДІЛ   ТЕОРІЯ	РОЗСІЯННЯ
ВИПРОМІНЮВАНЬ	9
1.1. Вступ	9
1.2. Оптичні принципи розсіяння	9
1.2.1. Електромагнітні хвилі, хвильове рівняння	9
1.2.2. Принцип Гюйгенса. Формулювання Кірхгофа	11
1.2.3. Перше наближення Борна	13
1.2.4. Принцип взаємності	15
1.3. Розсіяння на сукупності атомів	15
1.3.1. Розсіяння електронами і окремими атомами	15
1.3.2. Дифракція як перетворення Фур'є, прямий і обернений простір. Функція форми	18
1.3.2.1. Розсіяння точковим об'єктом	19
1.3.2.2. Розсіяння лінійним об'єктом	19
1.3.2.3. Розсіяння групою прямокутних об'єктів	21
1.3.2.4. Дифракція на періодичних об'єктах	25
1.3.3. Дифракція на впорядкованій групі атомів	28
1.3.4. Кінематичне розсіяння ідеальними кристалами	30
1.3.5. Усереднена ґратка, когерентне та дифузне розсіяння	36
1.4. Метод ковзного відбиття і рентгенівський аналіз наноструктур. Моделювання ефектів рентгенівського розсіяння	38
1.4.1. Малокутове розсіяння за умов ковзного відбиття на ідеальних кристалах	38
1.4.2. Дифракція за умов ковзного відбиття на ідеальних кристалах	43
1.4.3. Чисельне моделювання дифракційного експерименту. Метод теорії збурень за Борном	47
1.5. Методи числових розрахунків спектрів	49
1.5.1. Узагальнена теорія Такаґі—Топена	49
1.5.2. Матричне наближення	52

РОЗДІЛ   ДИФРАКТОМЕТРІЯ ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУР	53
2.1. Вступ	53

2.2. Чутливість рентгенівських променів до структурних властивостей гетероструктур	53
2.2.1. Макроскопічна форма	54
2.2.2. Метод визначення товщини за інтенсивністю розсіяння	54
2.2.3. Вимірювання товщини, що ґрунтується на інтерференційних смугах	55
2.2.4. Вимірювання товщини шарів моделюванням профілів	56
2.2.5. Напруги і невідповідність параметрів ґраток	57
2.2.6. Особливості дифракції в непогоджених епітаксійних системах	60
2.3. Методи рентгенівської дифрактометрії	65
2.3.1. Роздільна здатність дифрактометричних вимірювань	66
2.3.2. Дифракція за умов ковзного падіння	69
2.3.3. Розсіяння рентгенівських променів при ковзному малокутовому падінні	73
2.3.4. Відбиття X-променів при ковзному падінні	76
2.4. Перерізи кристалічних стрижнів	77
2.4.1. Поверхнева дифракція	77
2.5. Висновки	80
РОЗДІЛ   НАДґРАТКИ. ОСНОВНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ	81
3.1. Вступ	81
3.2. Дифракція від багат шарових когерентних структур	82
3.3. Дослідження формування рентгенівських спектрів від надґраток	87
3.3.1. Структурний фактор надґраток. Інтенсивності сателітів	90
3.4. Загальні характеристики надґраток	94
3.4.1. Джерело сателітів	94
3.4.2. Вимірювання періоду	97
3.4.3. Варіації періоду	98
3.4.4. Вимірювання індивідуальних товщин шарів надґраток	100
3.5. Поведінка сателітних дифракційних максимумів короткоперіодних надґраток GaAs—AlAs з різним ступенем кристалічної досконалості шарів	103
3.6. Особливості формування дифракційних спектрів для квазізаборонених рефлексів у надґратках	110
3.7. Застосування квазізаборонених рентгенівських рефлексів для дослідження багат шарових періодичних структур	118
3.8. Рентгенодифракційні дослідження 2D—3D структурних переходів у багат шарових періодичних структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$	125
3.9. Моделювання дифракції рентгенівських променів від багат шарової структури з різним градієнтом складу на границях шарів	132
3.10. Обмеження та проблеми дослідження багат шарових структур	140
РОЗДІЛ   ТРИКРИСТАЛЬНА РЕНТГЕНІВСЬКА ДИФРАКТОМЕТРІЯ	142
4.1. Вступ	142
4.2. Основні принципи трикристалльної диференціальної дифрактометрії	143
4.3. Використання трикристалльної дифрактометрії для дослідження гетероструктур. Загальні положення	155
4.4. Розподіл дезорієнтацій і деформацій ґратки	163
РОЗДІЛ   ДИФРАКЦІЯ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ	165

5.1. Вступ	165
5.2. Аналітична модель вертикального впорядкування квантових точок у багат шарових структурах	166
5.3. Вплив тривимірного впорядкування періодичних структур на розподіл дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі	171
5.3.1. Дифракція на одновимірному масиві квантових дротів	174
5.3.2. Дифракція на масиві квантових точок	179
5.4. Дослідження структур з латеральними модуляціями складу за допомогою двовимірних карт розсіяння рентгенівських променів в оберненому просторі	188
5.5. Дифракція на квантових острівцях з вираженою структурою граней	193
5.5.1. Компланарна дифракція в квантових острівцях. Порівняння теорії з експериментом	193
5.5.1.1. Рентгенодифракційні вимірювання	196
5.5.1.2. Аналіз рентгенодифракційних даних	198
5.5.2. Особливості дифракції за умов ковзного падіння на самоорганізованих нанорозмірних острівцях	203
5.5.2.1. Теорія GISAXS і GID методів	205
5.5.2.2. GISAXS в автономних острівцях	208
5.5.2.3. Дифракція при ковзному падінні в автономних острівцях	210
5.5.2.4. Розрахунок поля деформацій методом скінченних елементів	211
5.5.2.5. Експериментальні результати	214
5.5.2.6. Розсіювання рентгенівських променів при малокутовому ковзному падінні	215
5.5.2.7. Ковзна дифракція падіння	218
5.6. Дослідження впорядкування і форми масиву квантових точок	224
5.6.1. GISAXS-Результати	227
5.6.2. Розсіяння на рівнях однакової деформації	230
5.6.3. Визначення рівнів постійної деформації з розсіяння РП	232
РОЗДІЛ   ДИФРАКЦІЯ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ З КВАНТОВИМИ ДРОТАМИ	241
6.1. Вступ	241
6.2. Дослідження анізотропії залишкових деформацій в багат шарових структурах (In,Ga)As/GaAs- з квантовими нитками, підданих швидкому термічному відпалу	242
6.2.1. Експериментальні результати і обговорення	244
6.3. Вивчення тривимірної самоорганізації InGaAs/GaAs квантових точок методом аналізу розподілу дифузного випромінювання в оберненому просторі	256
6.3.1. Принципи використання CCD-детектора, тривимірне картографування оберненого простору	256
6.3.2. Об'єкт і метод дослідження	258
6.3.3. Результати і обговорення	259
6.4. Висновок	268
ЗАКЛЮЧНА ЧАСТИНА	270
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ	274