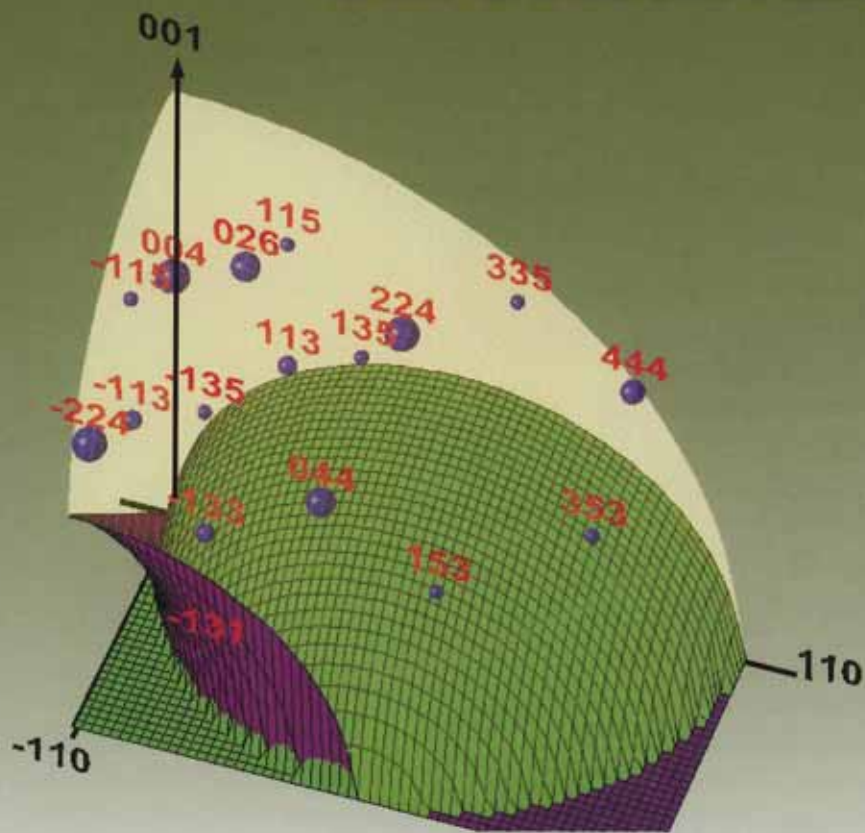


О.М. ЄФАНОВ  
В.П. КЛАДЬКО  
В.Ф. МАЧУЛІН  
В.Б. МОЛОДКІН

# ДИНАМІЧНА ДИФРАКЦІЯ Х-ПРОМЕНІВ У БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ



О. М. ЄФАНОВ, В. П. КЛАДЬКО,  
В. Ф. МАЧУЛІН, В. Б. МОЛОДКІН

**ДИНАМІЧНА ДИФРАКЦІЯ  
X-ПРОМЕНІВ  
У БАГАТОШАРОВИХ  
СТРУКТУРАХ**

---

*ПРОЕКТ  
«НАУКОВА КНИГА»*

---

КИЇВ НАУКОВА ДУМКА 2008

УДК ♣♣♣

Дана монографія присвячена розвитку теорії методів високороздільної Х-променевої дифрактометрії (ВРХД) на основі динамічної теорії дифракції. Основна увага приділена використанню багатохвильової дифракції Х-променів у багат шарових структурах із використанням компланарної геометрії та асиметричного і ковзного бреггівського відбиття від кристала.

Важливою проблемою, яка тут описана, є обмеженість застосування існуючих теорій для опису дифракції в багат шарових структурах, яка пов'язана з відсутністю відповідних алгоритмів розрахунку інтенсивності дифракції в багат шарових структурах з урахуванням багатьох хвиль, а також часткової релаксації системи і локальної розорієнтації вектора оберненої ґратки.

Крім того, велика увага приділена підвищенню однозначності результатів дифракційного структурного аналізу з використанням карт оберненого простору. Приведені відповідні розрахунки (моделювання цих карт).

Для широкого кола читачів, у першу чергу, науковців, аспірантів та студентів, які бажають поглибити та структурувати свої знання в галузі Х-променевої дифракції та структурного аналізу.

*Рекомендовано до друку Вченою радою Інституту  
фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова*

*Видання здійснене за державним контрактом  
на випуск наукової друкованої продукції*

Науково-видавничий відділ фізико-математичної  
та технічної літератури

Редактор *І.Я. Яловнича*

**ISBN 978-966-00-0910-0**

© О. М. Єфанов, В. П. Кладько,  
В. Ф. Мачулін, В. Б. Молодкін, 2008

## Передмова

Дослідженнями  $X$ -променевої структури кристалічних речовин користуються вже близько 100 років, однак зі зміною об'єктів дослідження змінюються і вимоги як до експерименту, так і до теорії розсіювання  $X$ -променів. Монографію присвячено найбільш досконалий на сьогодні динамічній теорії дифракції та її застосуванню для аналізу багатошарових напівпровідникових структур. У книзі описано експериментальні методи дослідження найсучасніших структур з нанорозмірними квантовими дротами і точками, а також наведені приклади експериментального дослідження таких структур.

Монографію структурно поділено на чотири розділи. У першому розділі наведено принципи побудови оберненого простору і продемонстровано зв'язок між оберненим та прямим просторами за допомогою дифракції. Для пояснення використано багато ілюстративного матеріалу. У цьому розділі наведено формули, за якими можна розрахувати геометрію експерименту для дослідження конкретної області оберненого простору. Другий розділ присвячено основам динамічної теорії дифракції, методам розв'язку дисперсійних рівнянь. У ньому також описано різні алгоритми розрахунку дифракції в багатошарових структурах. Наведено найвідоміші методи моделювання динамічної дифракції та два оригінальні, один з яких на сьогодні є найбільш точним. У третьому розділі розглянуто застосування описаних теоретичних методів для аналізу експериментальних даних. Тут наведено рекомендації із застосування описаних в другому розділі алгоритмів для різних геометрій дифракції й для розв'язку таких задач, як визначення анізотропії пружних деформацій і перехідних областей у багатошарових структурах. У четвертому розділі описано різноманітні методи визначення параметрів структур напряму з експерименту без розв'язку оберненої задачі. Тут наведено багато експериментально вимірних картин дифракції і показано, як з цих картин можна отримати інформацію про досліджувану структуру.

Книга буде цікава широкому колу читачів, які бажають поглибити та структурувати знання в галузі  $X$ -променевої дифракції. Перший розділ корисний для розуміння явища дифракції як студентам, так і людям, які бажають краще зрозуміти для чого потрібен обернений простір. Другий і третій розділи стануть у пригоді тим, хто хоче впорядкувати знання з теорії динамічного розсіювання  $X$ -променів або обрати метод для розв'язку тієї чи іншої експериментальної задачі. Четвертий розділ зацікавить експериментаторів, яким необхідно отримати інформацію досліджувану про структуру, не заглиблюючись у теорію дифракції.

Автори монографії вважають своїм приємним обов'язком висловити щире подяку співробітникам відділу дифракційних досліджень структури напівпровідників Інституту фізики напівпровідників НАН України, зокрема, М. В. Слободяну, Н. М. Проскуренко та О. Й. Гудименку за участь у дослідженнях багатопарових структур та за допомогу в підготовці рукопису до друку, співробітникам інституту — В. В. Стрельчуку та Ю. І. Мазуру за плідну співпрацю, а також М. М. Єфанову за допомогу в редагуванні книги і корисні поради.

Автори

## Умовні позначення

КДВ	—	крива дифракційного відбиття
ОКС	—	однокристальний спектрометр
ДКС	—	двокристальний спектрометр
ТКС	—	трикристальний спектрометр
КГ	—	крива гойдання
КОП	—	карта оберненого простору
ТОП	—	точка оберненого простору
ПЧД	—	позиційно-чутливий детектор
МПЕ	—	молекулярно-променева епітаксія
RMA	—	Recursion Matrices Algorithm
TMA	—	Transfer Matrices Algorithm
ВРХД	—	високороздільна X-променева дифрактометрія
ЛПД	—	лінія повної деформації
НГ	—	надґратка
НП	—	напівпровідник
ЛМС	—	латеральні модуляції складу
Сайт	—	<a href="http://x-ray.net.ua">http://x-ray.net.ua</a>

## Вступ

Одним з основних засобів неруйнівного структурного аналізу є дифракція  $X$ -променів. Високороздільна  $X$ -променева дифрактометрія (ВРХД) застосовується для дослідження внутрішньої структури напівпровідникових кристалів. Останнім часом досить часто виникає необхідність дослідження об'єктів субмікронного масштабу — надґраток, структур з квантовими точками і дротами. Тому методи високороздільної рентгенівської дифрактометрії для розв'язання подібних задач повинні забезпечувати субмікронну роздільну здатність за об'єктом, а також достатню точність визначення параметрів таких структур. Дану книгу присвячено висвітленню основних та більш нових етапів розвитку теорії методів ВРХД на основі динамічної теорії дифракції рентгенівських променів. Велику увагу приділено використанню багатохвильової дифракції в багатошарових структурах із використанням компланарної та некомпланарної геометрій і асиметричного та ковзного бреггівського відбиттів від кристала. Основне завдання праці полягає у відображенні нових досягнень розвитку теоретичних основ динамічної дифракції  $X$ -променів у багатошарових структурах у різних геометріях, а також у дослідженні деформаційних та композиційних властивостей багатошарових напружених структур з квантовими ямами і точками.

Оскільки більшість методів  $X$ -променевого структурного аналізу безпосередньо дають явний вигляд оберненої ґратки, то явища дифракції зручно описувати і пояснювати, використовуючи поняття оберненого простору та ґратки. Тому значну частину монографії присвячено введенню поняття оберненого простору та його побудові. Досить детально проаналізовано принципи компланарної і некомпланарної схем дифракції, а також алгоритм побудови областей доступності оберненого простору для дифракції за Лауе та Бреггом. Розглянуто різні способи сканування оберненого простору навколо вузлів оберненої ґратки. Оскільки ця робота є, можна сказати, підручником для

студентів та аспірантів, матеріал викладено досить просто з великою кількістю пояснювальних рисунків.

Деякі параметри досліджуваної структури можна отримати методами  $X$ -променевого аналізу з розв'язку прямої задачі, тобто безпосередньо аналізуючи дифракційну картину — таким методам присвячено четвертий розділ монографії. Однак для більш точного аналізу необхідно розв'язувати *обернену задачу*. Робиться це зазвичай таким чином: експериментально вимірюється дифракційна картина від деякої структури; виходячи з уже відомих параметрів досліджуваної структури (технологічно задані параметри або отримані з розв'язку прямої задачі), будується модель структури, розраховується дифракційна картина та порівнюється з експериментально вимірюваною. Потім параметри моделі змінюються і знову розраховується дифракція і порівнюється. Цій крок повторюють, поки не буде досягнуто задовільного збігу модельованої дифракційної картини з експериментальною.

В основі більшості методик аналізу, що застосовуються сьогодні, лежить розв'язання оберненої задачі за допомогою кінематичної або двопроменевої динамічної теорії. Однак однозначна інтерпретація рентгєнівських дифракційних спектрів багатошарових напівпровідникових структур має суттєві обмеження навіть для ідеальних шарів при використанні цих теорій. Пов'язано це з тим, що вплив сусідніх вузлів оберненої ґратки на дифракційну картину може бути суттєвим при далеких кутових відхиленнях від точного положення бреггівського кута (випадок короткоперіодної надґратки (НГ) або для шарів з великою невідповідністю параметрів ґраток). Ще однією важливою проблемою є неоднозначність визначення розподілу компонентів на границях інтерфейсу в багатокомпонентних квантових шарах НГ та вплив анізотропії деформаційних полів на криві дифракційного відбиття (КДВ). Крім того, більшість існуючих методів розрахунку дифракції не придатні для структур з товстими шарами (порядку довжини екстинкції).

Обмеженість застосування існуючих теорій для опису дифракції в багатошарових структурах пов'язана також із відсутністю відповідних алгоритмів розрахунку інтенсивності дифракції в багатошарових структурах з урахуванням одночасної дифракції на декількох наборах атомних площин, а також часткової релаксації системи і локальної розорієнтації вектора оберненої ґратки. Разом з тим, для підвищення однозначності результатів  $X$ -променевого структурного аналізу необхідно використання карт оберненого простору замість КДВ, а їхня інтерпретація вимагає відповідних розрахунків (модельовання цих карт).



Проведений аналіз показує, що неврахування цих факторів може призвести до неправильного трактування дифракційних ефектів і відповідно структури нанокристалічних об'єктів. Таким чином, розробка теоретичних основ дифракції на багатошарових планарних структурах і методик їх аналізу є актуальною й у той самий час складною практичною задачею. Саме тому в книзі велику увагу приділено розробці і застосуванню більш коректних (з меншою кількістю спрощень) теорій.

Оскільки динамічній теорії дифракції рентгенівських променів в багатошарових структурах присвячено багато робіт [1–10], ми спробували надати короткий опис розроблених методів динамічного моделювання взаємодії випромінювання з речовиною. В монографії розглянуто, що таке динамічна теорія, звідки вона з'явилась та які її різновиди існують. Далі значну частину присвячено аналізу теоретичних підходів для опису процесів динамічної дифракції  $X$ -випромінювання в багатошарових структурах, методів чисельного розв'язку дисперсійних рівнянь та моделюванню впливу основних структурних параметрів плівок на спектри відбиття  $X$ -променів у різних геометріях дифракції. Обґрунтовано та апробовано нові теоретичні підходи для опису й аналізу спостережуваних одно- та двовимірних профілів розподілу дифрагованих інтенсивностей, які базуються на динамічній теорії дифракції. Розглянуто проблему отримання з аналізу однієї інтегральної кривої багатьох структурних параметрів.

З огляду на те, що на даний момент у світовій літературі існує багато робіт, присвячених технічній стороні, зокрема проблемам монохроматизації випромінювання, детектування відбитого сигналу, в монографії ми їх не порушували. У більшості теоретичних і розрахункових методах існують проблеми, які тут не знайшли відображення. Це, зокрема, необхідність урахування сферичності (циліндричності) випромінювання та його немонохроматичності ( $\Delta\lambda/\lambda$ ). Також не розглянуто проблему когерентності випромінювання та врахування дифузного розсіяння  $X$ -променів на багатошарових структурах в умовах багатохвильової дифракції. Вирішення останньої проблеми вимагає нових підходів і перебуває в планах подальших наукових розробок.

## Розділ 1

# ОБЕРНЕНИЙ ПРОСТІР

Явище дифракції зручно описувати і пояснювати, використовуючи поняття оберненого простору та оберненої ґратки. Тим більше, що деякі методи  $X$ -променевого структурного аналізу безпосередньо дають явний вигляд оберненої ґратки. У більшості робіт зі структури кристалічних речовин та дифракції поняття оберненого простору вводиться дуже схематично і з малою кількістю ілюстративного матеріалу [11–13]. Тому в цьому розділі буде багато малюнків, якими буде проілюстровано, як вводиться обернена ґратка для різних типів кристалічних ґраток і як вона пов'язана з явищем дифракції. Зважаючи на те, що деякі з демонстрацій (наприклад різні типи сканування оберненого простору) дуже важко зобразити у вигляді статичних картинок, ми рекомендуємо читачеві завантажити розроблену нами навчальну програму XVis [14, 15] з веб-сторінки відділу дифракційних досліджень структури Інституту фізики напівпровідників: <http://x-ray.net.ua/XVis.html>. Також там можна знайти анімації для найбільш складних демонстрацій.

Дифракцію розглядатимемо без зв'язку із природою випромінювання: це може бути як дифракція рентгенівських променів, так і дифракція електронів чи нейтронів. Звичайно, видиме світло розглядати немає сенсу, тому що його довжина хвилі не співмірна з характерними розмірами кристалічної ґратки. У випадках, коли існує принципова різниця дифракційних явищ залежно від довжини хвилі опромінення чи його природи, це буде вказано явно (наприклад, при багатохвильовій дифракції).

У цьому розділі спочатку буде розглянуто побудову в оберненому просторі кубічної, тетрагональної і триклинної кристалічних ґраток. Оскільки гексагональну ґратку можна зобразити у вигляді ромбодричної, яка, у свою чергу, являє собою частинний випадок триклинної, окремо її не розглядатимемо. Далі викладено основи дифракції у прямому та оберненому просторах. При цьому вперше у літературі будуть розглянуті правильні області оберненого простору, доступні для вивчення за допомогою дифракції в різних геометріях. Окремий параграф присвячено багатохвильовій дифракції. Наведено приклади різних дифракційних експериментів і їх зв'язок з оберненим простором — деякі експериментальні методики сканування оберненого простору. Наприкінці розділу викладено, як і чому обернений простір можна отримати за допомогою фур'є-перетворення прямого простору, а також основи побудови оберненого простору для шаруватих структур.

## 1.1. Побудова оберненого простору

**Обернена ґратка.** Для означення поняття оберненого простору та оберненої ґратки виділимо елементарну комірку кристалічної ґратки у прямому просторі. Ця комірка може бути і *не примітивною*, тобто коли елементарній комірці належить більше одного атома (інше означення — коли елементарна комірка складається більше ніж з восьми атомів). Опишемо комірку за допомогою трьох базисних векторів  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  (рис. 1.1, *a*) — у загальному випадку не ортогональних, проте не колінеарних (інакше комірка не буде об'ємною). Тоді базисні вектори оберненої ґратки визначають таким чином (рис. 1.1, *b*) [12]:

$$\mathbf{a}^R = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{V}, \quad \mathbf{b}^R = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{V}, \quad \mathbf{c}^R = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{V}; \quad (1.1)$$

де  $V$  — об'єм елементарної комірки в прямому просторі, який визначається як змішаний добуток базисних векторів:

$$V = \mathbf{a} \mathbf{b} \mathbf{c},$$

або через напрямляючі кути  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  (між сторонами паралелепіпеда на рис. 1.1, *a*):

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma},$$

де  $a$ ,  $b$ ,  $c$  — довжини відповідних векторів.

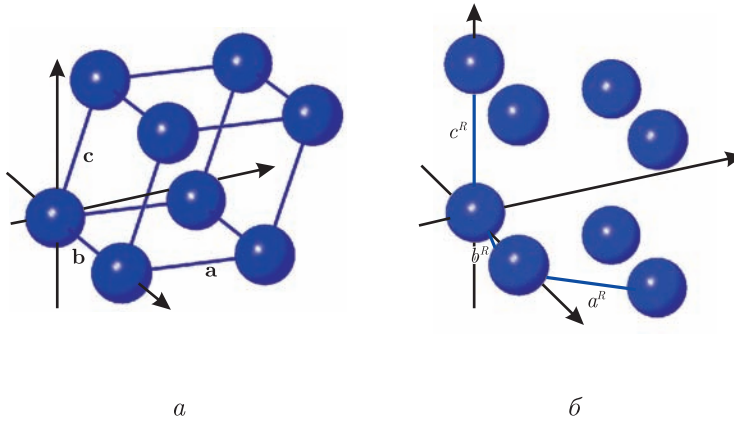


Рис. 1.1. Елементарна комірка тригональної ґратки:  $a$  — прямий простір;  $b$  — обернений

Звичайно, зворотний перехід від оберненої ґратки до прямої відбувається за подібними формулами, тільки об'єм вже береться для елементарної комірки в оберненому просторі.

Зрозуміло, що для ромбічної ґратки (всі кути по  $90^\circ$ ) базові вектори оберненої комірки колінеарні базовим векторам прямого простору, а їх довжини дорівнюють:

$$a^R = \frac{1}{a}, \quad b^R = \frac{1}{b}, \quad c^R = \frac{1}{c}. \quad (1.2)$$

Обернена ґратка будується так само як і пряма: базисна елементарна комірка розмножується за допомогою трансляції в усі напрямки на базисні вектори, домножені на довільні цілі числа. Відповідно, простір, у якому будується ця ґратка, називається *оберненим*. Кожний «атом» оберненої ґратки називають *вузлом*, а при дослідженні дифракції *рефлексом* чи *відбиттям*. Далі можна обрати довільний вузол оберненої ґратки (оскільки всі вузли еквівалентні) і провести через нього площину, паралельну поверхні у реальному просторі (орт нормалі  $\mathbf{n}$  має однакові координати в обох просторах!). Цей вузол зазвичай і обирають початком координат в оберненому просторі.

Мнемонічне правило для побудови оберненого простору на базі прямого таке: довжини беруться обернені до відповідних довжин у прямому просторі, а напрямки зберігаються. В деяких роботах зустрічається теза, що зберігаються кути, однак це вірно для векторів, які являють

собою лінійну комбінацію базових — наприклад векторів, перпендикулярних атомним площинам та векторів дифракції; проте кути між базисними векторами в прямому та оберненому просторах у загальному випадку різні, окрім випадку коли вони всі прямі.

**Індекси Міллера.** Побудуємо в оберненому просторі довільний вектор, що являє собою лінійну комбінацію базисних векторів оберненої ґратки:

$$\mathbf{h}_{ijk} = i\mathbf{a}^R + j\mathbf{b}^R + k\mathbf{c}^R, \quad (1.3)$$

де  $i, j, k$  — довільні цілі числа. Звичайно, якщо спрямувати цей вектор із початку координат, то його кінець завжди буде вказувати на якийсь вузол оберненого простору. Тому кожен вузол оберненої ґратки можна позначити трьома цілими числами:  $ijk$ . Ці три числа називають *індексами Міллера*. У такій координатній системі початок координат записують як вузол 000. Зрозуміло, що вектори  $\mathbf{h}$ , які називають *векторами оберненої ґратки*, для вузлів з індексами Міллера  $ijk$  та  $Ni.Nj.Nk$  (точкою відділяють індекси, якщо вони є числами, більшими ніж 9, а у нашому випадку — для зручності), де  $N$  ціле, будуть паралельні. Таким чином, для визначення напрямку досить індексів  $ijk$ , поділених на найбільший спільний множник — саме так найчастіше використовують індекси Міллера, однак для структурного аналізу індекси Міллера неохідні в нескороченій формі, що буде продемонстровано в подальших розділах. Зазначимо, що зазвичай індекси Міллера в структурному аналізі позначають трьома іншими літерами:  $hkl$ .

З'ясуємо тепер, що саме індекси Міллера відображають у реальному просторі [11, 12]. Для цього спочатку знайдемо таке додатне ціле число  $N$ , яке при множенні на  $1/i, 1/j, 1/k$  дасть також цілі числа. Далі відкладемо відносно довільного атома ґратки три вектори  $(N/i)\mathbf{a}$ ,  $(N/j)\mathbf{b}$ ,  $(N/k)\mathbf{c}$  (звісно, у цих точках теж будуть знаходитись атоми) і через кінці цих векторів проведемо площину. Потім із обраного атома опустимо перпендикуляр на отриману площину — цей перпендикуляр буде колінеарним відповідному вектору оберненої ґратки  $\mathbf{h}_{ijk}$ , а його довжина становитиме  $d = 1/h$ . Зрозуміло, що якщо відкласти відносно того самого атома вектори  $(2N/i)\mathbf{a}$ ,  $(2N/j)\mathbf{b}$ ,  $(2N/k)\mathbf{c}$  і теж побудувати площину (яка за теоремою Фалеса паралельна побудованій раніше площині), то перпендикуляр до цих площин буде також колінеарним вектору  $\mathbf{h}_{ijk}$  і матиме таку саму довжину  $d = 1/h$ . Отже, довільна точка оберненого простору характеризує деякий набір паралельних атомних площин у кристалі: модуль вектора оберненої ґратки, що проведений до цієї точки, являє собою обернену відстань

між двома сусідніми площинами, а напрямком цього вектора збігається з напрямком нормалі до відповідного сімейства площин. Оскільки ми домножували індекси Міллера на ціле число  $N$ , у реальному просторі всі кратні індекси будуть відповідати одним і тим самим атомним площинам. Наприклад, маємо індекси 111, для описаного перетворення необхідно обрати  $N = 1$ , тоді отримуємо в реальному просторі множники 1, 1, 1. Якщо ж взяти індекси 333, то необхідно покласти  $N = 3$ , однак у реальному просторі знов отримуємо множники 1, 1, 1. Не дивлячись на це, нескорочений запис індексів Міллера стане у пригоді далі, при розгляді дифракції.

Декілька слів про різні види запису індексів Міллера. Зазвичай запис  $hkl$  або 123 означає вузол оберненої ґратки (рефлекс), запис  $(hkl)$  або  $(123)$  — відповідну кристалічну площину або сімейство площин, запис  $[hkl]$  або  $[123]$  — кристалографічний напрямок, а запис  $\langle hkl \rangle$  або  $\langle 123 \rangle$  — сімейство кристалографічних напрямків типу  $[hkl]$ .

Окрім індексів Міллера, в літературі зустрічаються інші типи індексів — наприклад індекси Браве (див. [11, 12]). Цей тип індексування досить зручний при аналізі гексагональних структур, однак, оскільки гексагональну ґратку можна подати як ромбоєдричну, нами таке індексування розглядатись не буде.

### 1.1.1. Кубічна ґратка

Це найбільш простий випадок, однак у дещо модернізованому вигляді він дуже часто зустрічається на практиці, тому що багато більш складних кристалічних ґраток (наприклад, алмазу чи цинкової обманки) можна утворити з декількох кубічних ґраток, які вкладені одна в одну (детальніше в п. 1.2.2).

З назви ґратки витікає, що сторони елементарної кристалічної комірки:  $a = b = c$  та відповідні кути  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  (рис. 1.2, *a*). Відповідно в оберненому просторі елементарна комірка буде мати всі сторони довжиною  $1/a$  (див. формулу (1.2)) та кути по  $90^\circ$  (рис. 1.2, *b*).

### 1.1.2. Тетрагональна ґратка

Для цієї ґратки виконуються співвідношення:  $a = b \neq c$  та  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  (рис. 1.3, *a*). Цей випадок досить часто зустрічається при *псевдоморфному* *рості* багатшарової структури — коли кристалічна будова епітаксійної плівки відтворює структуру підкладки. Тобто, якщо маємо товсту підкладку з якоюсь модифікацією кубічної ґратки (напри-

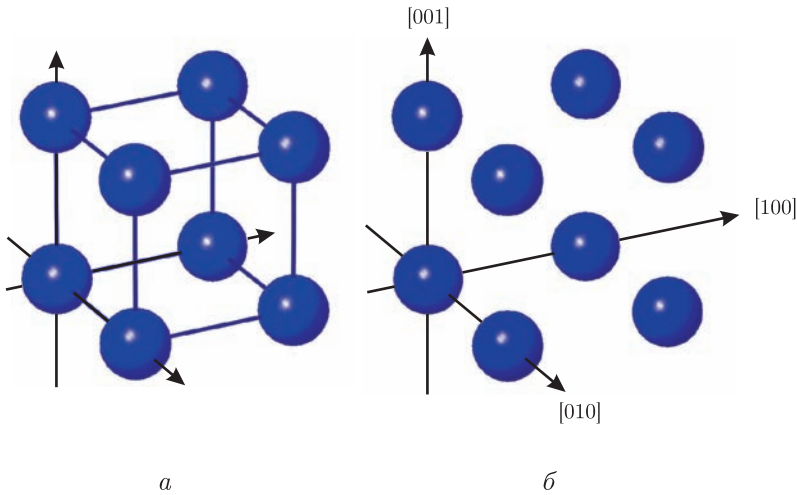


Рис. 1.2. Елементарна комірка кубічної ґратки: *a* — прямий простір, *б* — обернений

клад, структура сфалериту) і за допомогою молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) на підкладці вирощується шар з подібною кристалічною структурою (випадок вирощування Ge плівки на Si підкладці, або AlAs чи InAs на GaAs), то елементарні комірки шару, що вирощується, деформуються таким чином, щоб латеральні параметри ґратки дорівнювали відповідним значенням для підкладки. При цьому стала ґратки у напрямку нормалі збільшується, якщо параметр релаксованої ґратки шару більший, або зменшується в протилежному випадку. Звичайно таке вирощування можливо лише до деякої скінченної товщини шару (так звана *докритична товщина*), яка тим більша, чим менша невідповідність параметрів ґратки шару і підкладки  $\Delta a/a$ . Докладніше це буде описано в параграфі 1.6 та в розділі 4, присвяченому експериментальним дослідженням шаруватих структур.

Для тетрагональної ґратки перехід між прямим та оберненим простором визначається рівнянням (1.2) (рис. 1.3, б).

### 1.1.3. Триклинна ґратка

Найбільш загальний випадок кристалічної ґратки — триклинна (рис. 1.1, *a*). Тут  $a \neq b \neq c$  та  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ . У цьому випадку для переходу між прямою і оберненою ґратками треба використовувати

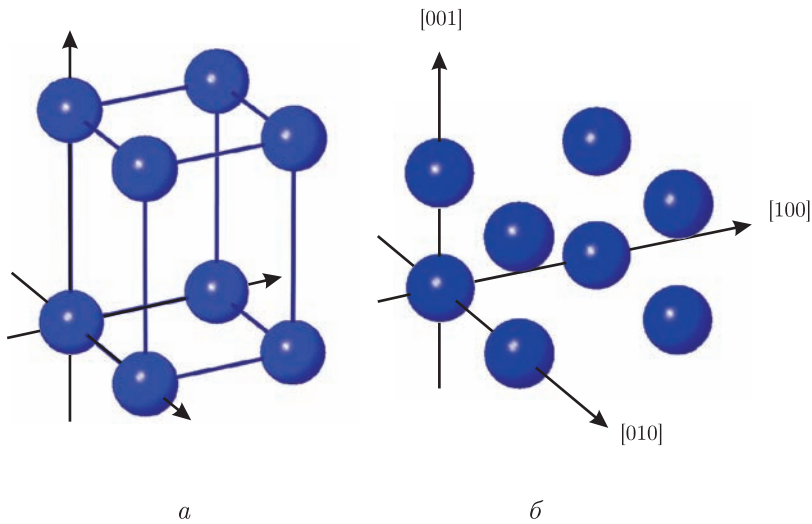


Рис. 1.3. Елементарна комірка тетрагональної ґратки: *a* — прямий простір; *b* — обернений

загальні рівняння (1.1). Звичайно, в оберненому просторі елементарна комірка буде дещо схожа на комірку в прямому просторі, однак без розрахунку складно отримати вигляд цієї комірки в оберненому просторі (рис. 1.1, *b*).

Інші типи ґраток Браве можна розглядати як частинний випадок триклинної, прирівнюючи деякі кути до  $90^\circ$  та деякі сторони між собою. Кубічна і тетрагональна ґратки були розглянуті окремо як найбільш поширені випадки, а ще тому, що деякі автори помилково переносять досить прості правила переходу між прямою та оберненою тетрагональною чи кубічною ґратками (рівняння (1.2)) на більш складні випадки, де необхідно використовувати загальні рівняння (1.1). Крім того, зважаючи на можливості сучасної обчислювальної техніки, можна запрограмувати один раз універсальне рівняння (1.1), а не використовувати специфічні формули для кожної сингонії.

Щодо непримітивних ґраток, далі буде показано, що і для них можна застосовувати наведені методи побудови оберненої ґратки, однак деякі вузли будуть відсутні завдяки фазовим співвідношенням (див. п. 1.2.2). Але, щоб зрозуміти, до чого тут взагалі фаза, треба спочатку показати зв'язок оберненого простору з явищем дифракції.



## 1.2. Зв'язок дифракції з оборненим простором

Нехай на кристал з кубичною ґраткою падає електромагнітне випромінювання з довжиною хвилі співмірною з відстанню між атомами: характерна довжина рентгенівського випромінювання, що використовується на лабораторному обладнанні (так звана  $\text{Cu K}\alpha_1$  лінія)  $\lambda = 1,540562 \text{ \AA}$ , а параметр ґратки кремнію (Si)  $a = 5,43086 \text{ \AA}$ .

Спочатку введемо декартові системи координат у прямому і оборненому просторах. Досить зручно обрати в обох просторах поверхню кристала за площину  $XY$ , а вісь  $Z$  направити по зовнішній нормалі до поверхні. Тоді залишається пов'язати, наприклад, вісь  $X$  з якимось напрямком, а вісь  $Y$  буде утворювати праву трійку векторів з уже визначеними осями. Нехай вісь  $X$ , для зручності, буде напрямлена вздовж проекції променя, що падає на кристал, однак протилежно до напрямку променя для *кутів падіння* (кут між променем і поверхнею) менше ніж  $90^\circ$  (рис. 1.4). Площину  $XZ$  називають площиною падіння, оскільки у введеній системі координат промінь, що падає, завжди лежить у цій площині. В оборненому просторі обрані напрямки осей зберігаються, оскільки, як вже було зазначено, напрямки в обох просторах не змінюються. Звичайно, можна ввести осі координат іншим чином, наприклад, пов'язати вісь  $X$  з якимось напрямком у кристалі, проте, як буде показано в параграфі 1.3, це може ускладнити розв'язок задачі пошуку променя, що дифрагував на структурі.

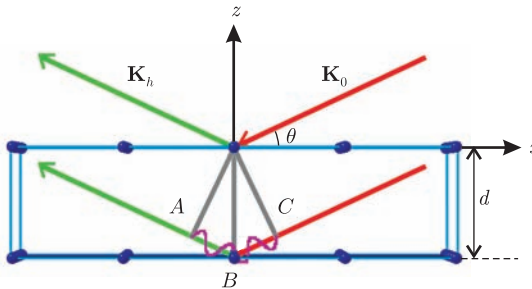


Рис. 1.4. Ілюстрація закону Вульфа–Брегга. Різниця ходу між променями дорівнює  $3\lambda$  і позначена синусоїдою. Падаючі промені  $\mathbf{K}_0$  — червоні, дифраговані  $\mathbf{K}_h$  — зелені

Якщо для деяких кристалічних площин з міжплощинною віддаллю  $d$  виконується співвідношення Вульфа–Брегга:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1.4)$$

де  $\theta$  — кут між променем, що падає, та площинами, а  $n$  — натуральне число, то відбувається дифракція (рис. 1.4). Це досить легко пояснити наглядно: у цьому випадку різниця ходу між променями, які дифрагували на різних атомних площинах ( $ABC$  на рис. 1.4) дорівнює цілому числу хвиль, тому ці хвилі підсилюють одна одну, і саме в напрямку, вказаному на рисунку, відбувається дифракція. Цей напрямок для геометричного розгляду дифракції відповідає *закону Снелліуса*: кут падіння на атомну площину дорівнює куту дифракції. В оберненому просторі падаючу хвилю зазвичай зображають як вектор (так званий *хвильовий вектор  $\mathbf{K}$* ), напрямком якого збігається з напрямком хвилі, що падає у прямому просторі (точніше з напрямком вектора Умова–Пойнтінга падаючої хвилі), а довжина  $K = 1/\lambda$ . Зазначимо, що в деяких роботах довжину хвильового вектору вводять як  $K = 2\pi/\lambda$ , однак це роблять з міркувань більш компактного запису фазових множників  $\exp(2\pi\mathbf{K}\mathbf{r})$ . Але це не збігається з введенням оберненого простору за допомогою формул (1.1), тому такий підхід потребує ще і переозначення оберненого простору. Якщо дифракція виникає внаслідок пружної взаємодії випромінювання з речовиною (розгляд випадку непружної взаємодії виходить за рамки монографії), то довжина хвилі дифрагованого випромінювання теж дорівнює  $\lambda$  і довжина хвильового вектора  $K$  також зберігається.

Як було зазначено, атомні площини з віддаллю між ними  $d$  в оберненому просторі можна задати вектором оберненої ґратки  $\mathbf{h}$ , довжина якого  $h = 1/d$ , а напрямком збігається з нормаллю до площин, що розглядаються. Інакше кажучи, вектор оберненої ґратки поєднує початок координат оберненого простору (точку 000) з точкою оберненого простору, що відповідає набору атомних площин, дифракція від яких досліджується.

За законом Снелліуса вектор падаючої хвилі  $\mathbf{K}_0$ , дифрагованої хвилі  $\mathbf{K}_h$  та вектор  $\mathbf{h}$  при виконанні умови Вульфа–Брегга (1.4) утворюють рівнобедрений трикутник з основою  $\mathbf{h}$  і кутами при основі  $90^\circ - \theta$ . Дійсно, якщо покласти  $n = 1$  та поділити ліву і праву частину рівняння (1.4) на  $\lambda d$  і згадати, як введені довжини векторів  $\mathbf{K}$  і  $\mathbf{h}$ , отримуємо:  $K \sin \theta = h/2$ , що є вірним для рівнобедреного трикутника (рис. 1.5).

Таким чином, дифракція відбувається тоді і тільки тоді, коли падаючий і дифрагований промені та вектор оберненої ґратки, що сполучає

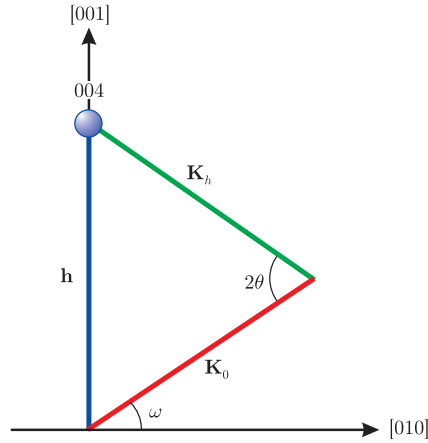


Рис. 1.5. Рівнобедрений трикутник з основою  $h$  та сторонами  $K_0$  і  $K_h$ .  $\omega$  — кут падіння, в симметричному випадку  $\omega = \theta$

початок координат з деяким вузлом оберненої ґратки, утворюють рівнобедрений трикутник. Тобто для заданої точки оберненого простору геометричне місце можливих початків падаючого хвильового вектора описує коло (рис. 1.6, а). Саме із цих точок у напрямку початку координат оберненого простору необхідно пускати падаючий промінь для отримання дифракції. Вибір конкретної точки відбувається при заданні площини падіння за допомогою обертання кристала. Як видно з рисунка 1.6, б, для заданого азимутального положення зразка зазвичай існує 2 шляхи променів для досягнення дифракції від точки оберненого простору, що розглядається. Причому, не завжди обидва шляхи можна реалізувати експериментально (детальніше див. параграф 1.3).

Описаний вище рівнобедрений трикутник пояснює ще один дуже важливий аспект. Позначимо через  $2\theta$  зовнішній кут при вершині, протилежній основі цього трикутника, — це кут між продовженням падаючого променя і дифрагованим (рис. 1.5). При будь-якому розташуванні вектора оберненої ґратки  $h$  відносно поверхні кут  $2\theta$  завжди буде одним і тим самим (при заданій довжині хвилі). Тобто значення кута  $2\theta$  є однозначною характеристикою відповідного рефлексу для конкретного матеріалу. Цей факт покладено в основу порошкового аналізу матеріалів (метод Дебая–Шеррера), при якому саме за значеннями кутів  $2\theta$ , при яких спостерігається дифракція, можливо з'ясувати склад досліджуваного порошку чи полікристалічного мате-

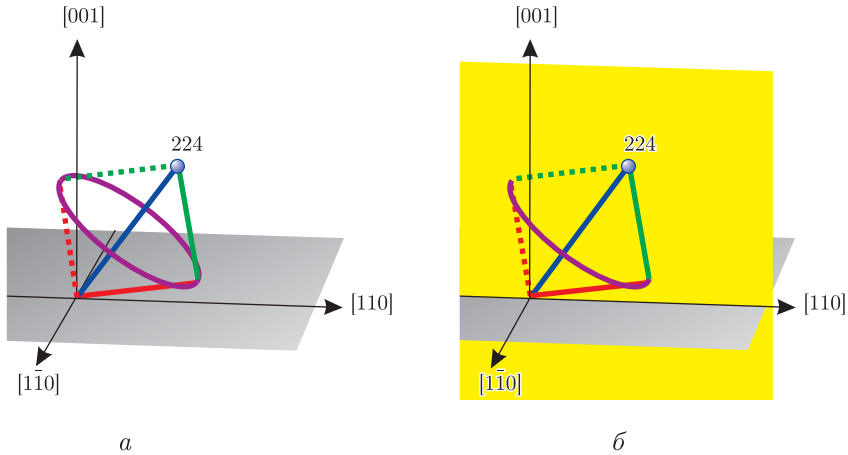


Рис. 1.6. Можливі початки  $\mathbf{K}_0$  (коло) для виконання закону Вульфа–Брегга для рефлексу 224: *a* — коло в оберненому просторі; *б* — перетин кола з площиною падіння (жовта)

ріалу. Крім того, саме за цим кутом можна розрахувати вектор дифракції для конкретного рефлексу, а через нього і параметр ґратки досліджуваного матеріалу (формули (1.3) та (1.1)).

### 1.2.1. Кратні рефлекси

Як зазначалося, для характеристики атомних площин достатньо індексів Мюллера, поділених на найбільший спільний множник. Однак у рентгеноструктурному аналізі дуже часто використовуються так звані кратні рефлекси (наприклад, 004, 224 чи 333). Зрозуміло, що для примітивної ґратки такі рефлекси утворюються тими самими атомними площинами, що і їх скорочені варіанти, так рефлекс 333 утворено площинами (111). Розглянемо фізичну природу кратних рефлексів.

На рис. 1.7 проілюстровано закон Вульфа–Брегга (1.4) для площин (001), паралельних поверхні кристала: дифракція відбувається тоді, коли набіг фаз між двома сусідніми атомними площинами дорівнює цілому числу довжин хвиль (у даному випадку  $n = 1$ ). Тепер розглянемо рефлекс 002 (рис. 1.8). Відстань між атомними площинами залишилась та сама (досліджується кристал з міжплощинною віддалю  $d$ ), однак між сусідніми дифрагованими променями вже «набігає» дві довжини хвилі ( $n = 2$ ). Для рефлексу 004 — відповідно 4 довжи-

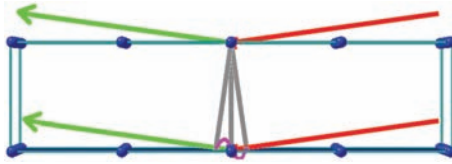


Рис. 1.7. Ілюстрація закону Вульфа–Брегга для рефлексу 001 у кубічній ґратці

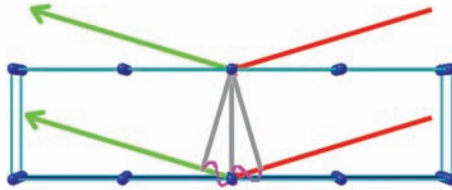


Рис. 1.8. Ілюстрація закону Вульфа–Брегга для рефлексу 002

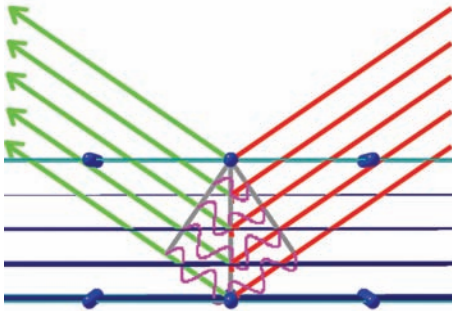


Рис. 1.9. Ілюстрація закону Вульфа–Брегга для рефлексу 004 з віртуальними площинами

ни хвилі ( $n = 4$ ) (рис. 1.9). Рефлекс 003 зображено на рис. 1.4. Інша інтерпретація кратних рефлексів така: можна уявити додаткові атомні площини, на яких відбувається дифракція (рис. 1.9). Насправді, як буде показано далі, у непримітивних ґратках такі площини можуть існувати.

Використання кратних рефлексів пов'язано із заборонаю деяких рефлексів, а також із наявністю геометричних обмежень на умови експерименту (докладніше див. параграф 1.3).

### 1.2.2. Ґратки алмазу та сфалериту. Заборонені рефлекси

Це дуже поширені типи ґраток для напівпровідників, тому вони викликають особливий інтерес для дослідження. Елементарна комірка такої ґратки може складатись з одного компонента — наприклад, Si чи Ge (рис. 1.10, *a*) — ґратка типу алмаза, або з двох: GaAs, InAs, AlAs (рис. 1.10, *b*) — ґратка типу сфалериту (цинкової обманки ZnS), чи навіть з трьох і більше:  $Al_xGa_{1-x}As$ ,  $In_xGa_{1-x}As$  — у таких структурах атоми Al чи In просто займають місце Ga. Це кубічна комірка, в яку вкладено атоми від ще семи елементарних комірок. Тому, хоча це кубічна ґратка, деякі вузли оберненої ґратки будуть відсутні (так звані *заборонені рефлекси*). Пов'язано це з таким явищем: усередині елементарної комірки існують додаткові атоми, і тому можна виділити додаткові атомні площини. Промені, що дифрагують на цих площинах, можуть попадати в детектор з фазою, що протилежна (тобто відмінна на  $\pi$ ) фазі променів, які зазнали дифракції на основних атомах, розташованих у кутах елементарної комірки. Розглянемо це явище детальніше.

З'ясуємо, чому рефлекс 001 заборонений для ґратки типу алмазу і сфалериту. Будемо називати *основними атомними площинами* ті, що сформовані атомами у вузлах примітивної кубічної ґратки, що розглядалась раніше (рис. 1.4). Таким чином, в елементарній комірці алмазу можна виділити додаткову атомну площину, утворену атомами в центрах граней, яка буде давати дифрагований промінь у протифазі до

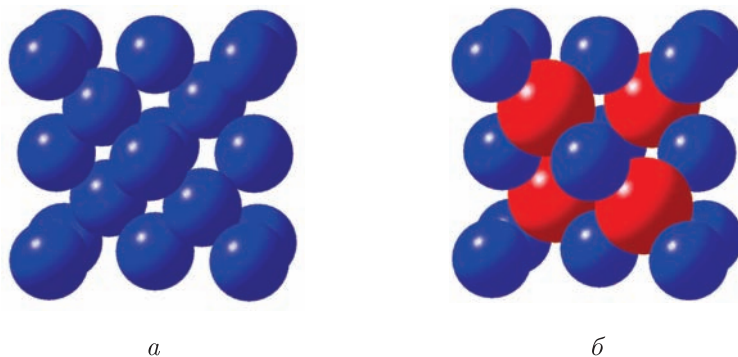


Рис. 1.10. Елементарні комірки *a* — Si, *b* — GaAs

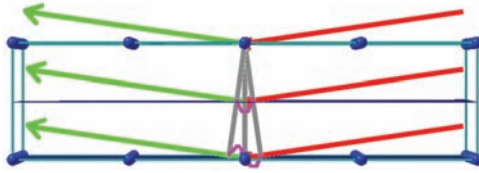


Рис. 1.11. Ілюстрація закону Вульфа–Брегга для ґратки сфалериту. Рефлекс 001

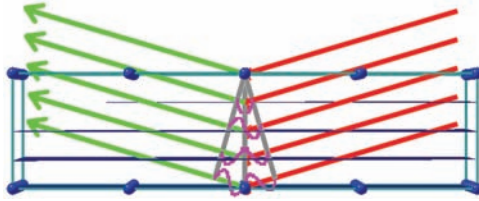


Рис. 1.12. Ілюстрація закону Вульфа–Брегга для ґратки сфалериту. Рефлекс 002

променю, що дифрагував на основній площині (рис. 1.11). Тобто дифракція не буде спостерігатись. Те саме стосується рефлексу 002, тому що в елементарній комірці алмазу можна виділити ще дві площини, паралельні основним (001) (рис. 1.12). З тієї ж причини неможливо отримати дифракцію від, наприклад, кожної другої атомної площини.

У двокомпонентних сполуках із ґраткою типу сфалериту ( $\text{GaAs}$ , або ще краще  $\text{InAs}$ ) деякі із заборонених вузлів стають доступними, хоч і слабкими — це так звані *квазізаборонені* рефлекси. Справа в тому, що для подібних структур можна виділити площини, складені з атомів різного сорту (наприклад,  $\text{Ga}$  та  $\text{As}$ ), а оскільки здатність розсіювати рентгенівські промені у цих атомів різна, дифрагована інтенсивність відмінна від нуля навіть тоді, коли промені, що дифрагували на різних площинах, попадають у детектор з протилежними фазами. Зрозуміло, що чим більше відрізняються розсіювальні здатності атомів сполуки (зазвичай ця різниця пропорційна різниці атомних номерів), тим більша інтенсивність дифрагованого на квазізаборонених рефлексах випромінювання. Так для  $\text{InAs}$  дифрагована інтенсивність від квазізаборонених рефлексів, наприклад 002 (рис. 1.12), буде значно більшою, ніж для  $\text{GaAs}$ . Перевага таких рефлексів полягає в тому, що вони дуже чутливі до спотворень ґратки, однак оскільки вони мають досить малу інтенсивність, їх більш важко досліджувати.

Розглянемо рефлекс 003. Для нього різниця фаз між променями, відбитими від основних атомних площин, дорівнює  $6\pi$ , тобто між променями, що дифрагували на цих площинах «набігає» 3 довжини хвилі. Для комірки сфалериту фази променів, дифрагованих на всіх чотирьох атомних площинах комірки, дадуть:

$$e^0 + e^{\frac{1}{4}6\pi} + e^{\frac{1}{2}6\pi} + e^{\frac{3}{4}6\pi} = 1 + e^{\frac{3\pi}{2}} + e^{\pi} + e^{\frac{\pi}{2}} = 1 - i - 1 + i = 0. \quad (1.5)$$

Таким чином, хвилі, що дифрагували на різних атомних площинах комірки сфалериту, гасять одна одну. Саме тому рефлекси різної кратності для таких структур є забороненими.

### 1.2.3. Багатохвильова дифракція

Поки що ми розглядали здебільшого двоххвильову дифракцію — коли є падаюча хвиля  $\mathbf{K}_0$  і дифрагована  $\mathbf{K}_h$ . Це відбувається зазвичай при виконанні умови Вульфа–Брегга. Частіше відбувається однохвильова дифракція — є тільки одна падаюча хвиля  $\mathbf{K}_0$  і відсутня дифрагована, тобто умова Вульфа–Брегга не виконана. Однак можна створити такі умови, тобто підібрати такий напрямок падаючої хвилі  $\mathbf{K}_0$ , що одночасно дифракція буде відбуватись на декількох наборах атомних площин. Це і називається *багатохвильовою дифракцією*. Така дифракція хоч і зумовлена одним падаючим променем  $\mathbf{K}_0$ , напрямки дифрагованих хвиль  $\mathbf{K}_{hi}$  будуть різні (рис. 1.13). Іноді вирізняють *компланарну* багатохвильову дифракцію, коли всі дифраговані промені лежать у площині падіння, і *некомпланарну*. У деяких роботах введено поняття

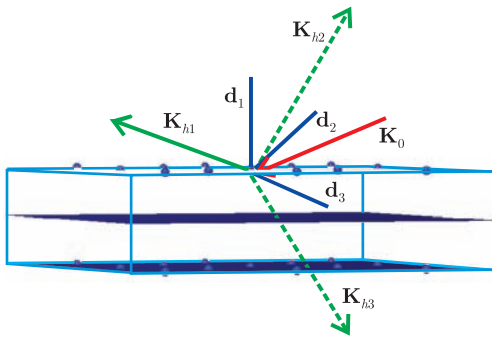


Рис. 1.13. Багатохвильова дифракція, прямий простір:  $\mathbf{d}_1$ ,  $\mathbf{d}_2$ ,  $\mathbf{d}_3$  — перпендикуляри до відповідних атомних площин



*систематичної* (коли точки оберненого поростору, які беруть участь у дифракції, лежать в одній площині та утворюють коло з радіусом, меншим радіуса сфери Евальда) та *випадкової* багатохвильової дифракції (в інших випадках) [7]. Ці поняття важливі для компланарної багатохвильової дифракції, а в некопланарній можна спостерігати ці випадки одночасно. Для розуміння явища багатохвильової дифракції ці поняття не важливі, тому детально не розглядатимуться.

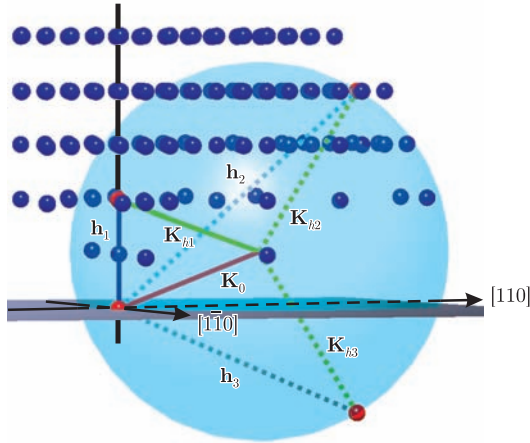


Рис. 1.14. Багатохвильова дифракція, обернений простір

Найпростіший спосіб для знаходження багатохвильової дифракції — так зване *ренінгерівське сканування*: обирається деякий *симетричний рефлекс* (набір площин, паралельний поверхні кристала); кристал обертається відносно нормалі доти, доки на *сферу Евальда*, сформовану можливими кінцями векторів  $\mathbf{K}_h$ , при фіксованому  $\mathbf{K}_0$  не вийде якийсь вузол оберненої ґратки (рис. 1.14). Експериментально найчастіше основний вузол обирають квазізабороненим (наприклад, 002 для структури з поверхнею, паралельною (001)), і коли при обертанні зразка якийсь інший дозволений вузол (або одночасно декілька вузлів) вийде на сферу Евальда, спостерігається підсилення інтенсивності для забороненого рефлексу. Таке підсилення відбувається внаслідок «перекачки» енергії з однієї дифрагваної хвилі в іншу. Звичайно можна спостерігати багатохвильову дифракцію і налаштувавшись на дозволений рефлекс, тоді при обертанні інтенсивність може падати, коли інші рефлекси виходять на сферу Евальда.

Основна проблема описаного методу полягає в тому, що в реальних кристалах завжди існує деяка непаралельність кристалічних площин до поверхні, тому при обертанні основний набір площин, від яких спостерігається дифракція, може вийти з відбивного положення. Насправді для точного проведення ренінгерівського сканування зразок потрібно обертати не відносно нормалі до поверхні, а відносно вектора дифракції основного рефлексу. Однак такий експеримент важче виконати, оскільки багато навіть сучасних установок не дозволяють задати такий режим обертання зразка, хоча насправді це не так складно.

Для чого ж потрібна багатохвильова дифракція? Справа в тому, що така дифракція спостерігається у дуже малому діапазоні кутів азимутального обертання зразка, тому це дає додатковий дуже чутливий метод контролю спотворень кристалічної ґратки. Як розраховувати багатохвильову дифракцію буде описано в п. 2.4.11, а деякі приклади її застосування — у розділі 3.

Багатохвильова дифракція для електронів спостерігається значно частіше, оскільки їх довжина хвилі значно менша. Наприклад, в електронному мікроскопі з прискорюючою напругою 100 кВ довжина хвилі електронів становить приблизно  $0,04 \text{ \AA}$ , тобто вона в 40 разів менша, ніж довжина хвилі  $\text{Cu K}\alpha 1$  лінії ( $1,54 \text{ \AA}$ ). Якщо побудувати сферу Евальда для дифрагованого електронного променя, то вона буде проходити через велику кількість точок оберненого простору. На рис. 1.15 зображено багатохвильову дифракцію для довжини хвилі  $0,4 \text{ \AA}$  (для довжини хвилі  $0,04 \text{ \AA}$  роздивитись вже нічого неможливо).

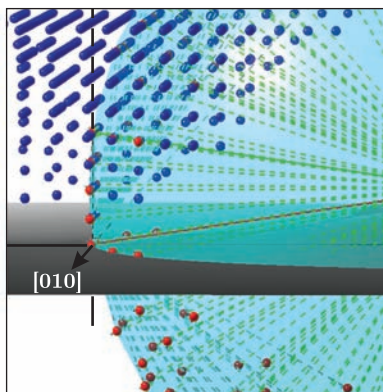


Рис. 1.15. Багатохвильова дифракція для довжини хвилі  $0,4 \text{ \AA}$  в оберненому просторі

### 1.3. Область доступності в оберненому просторі

Для заданої довжини хвилі та геометрії експерименту можна отримати дифракцію тільки від деякої області оберненого простору, яку називають *областю доступності* [16]. Під *геометрією експерименту* зазвичай розрізняють 2 випадки: *Брегга*, коли дифрагований промінь виходить з тієї ж сторони кристала, з якої входить падаючий (рис. 1.16, *а*), та *Лауе*, коли дифрагований промінь виходить з іншого боку кристала скінченної товщини (рис. 1.16, *б*). Крім того, є ще один ступінь вільності при описі геометрії експерименту, пов'язаний із обертанням кристала відносно нормалі до поверхні. Тому для визначеності будемо працювати в описаній вище системі координат, у якій зафіксовано площину падіння  $XZ$ , а вісь  $Z$  спрямована вздовж нормалі до поверхні. Падаючий промінь  $\mathbf{K}_0$  потрапляє на поверхню кристала в напрямку зменшення значень  $Z$  (інакше він мав би виходити з кристала), тобто в описаних координатах  $K_{0z} \leq 0$ .

Зрозуміло, якщо довжина хвилі  $\lambda$ , то область оберненого простору, розташована за границею сфери радіуса  $2K$  з центром у початку координат, буде недоступна для аналізу. Тобто модуль *вектора дифракції*  $\mathbf{Q} = \mathbf{K}_h - \mathbf{K}_0$  точок, доступних для аналізу, має бути менше ніж  $2K$  і досягати максимального значення  $2K$  при антипаралельному розташуванні  $\mathbf{K}_h$  та  $\mathbf{K}_0$  (рис. 1.17, *а*). Таким чином перше (зовнішнє) обмеження на область доступності в оберненому просторі — сфера радіусом  $2K$  (рис. 1.17, *б*).

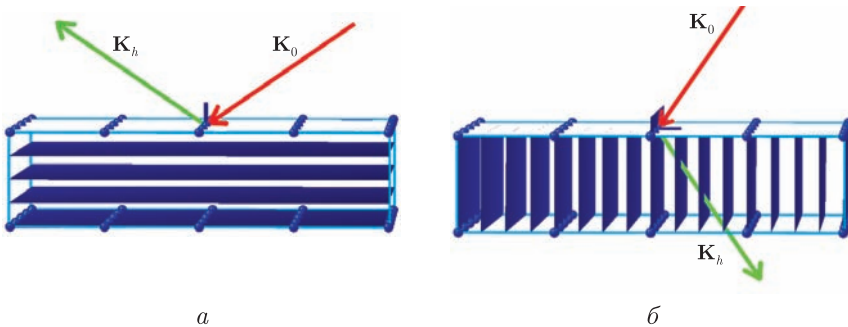


Рис. 1.16. Дифракція в геометрії: *а* — Брегга, *б* — Лауе

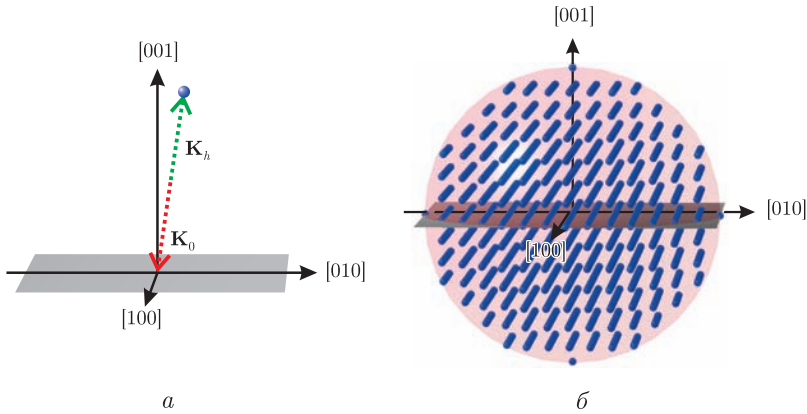


Рис. 1.17. Обернений простір, який можна досліджувати при даній довжині хвилі: *a* – гранична точка, *б* – вся область

Оскільки хвильовий вектор падаючої хвилі  $\mathbf{K}_0$  лежить у площині падіння, точки, які розташовані на відстані більшій ніж  $K$  від цієї площини, також неможливо дослідити за допомогою дифракції (для даного положення площини падіння). Тобто до таких точок вектор  $\mathbf{K}_h$  просто «не дотягується» (рис. 1.18, *a*).

Наступним обмеженням буде те, що для заданого кута падіння (кута між падаючим променем  $\mathbf{K}_0$  і поверхнею) геометричне місце точок оберненого простору, які можуть приймати участь у дифракції, являє собою сферу радіусом  $K$ . Отже, початок вектора  $\mathbf{K}_h$  зафіксовано, тому

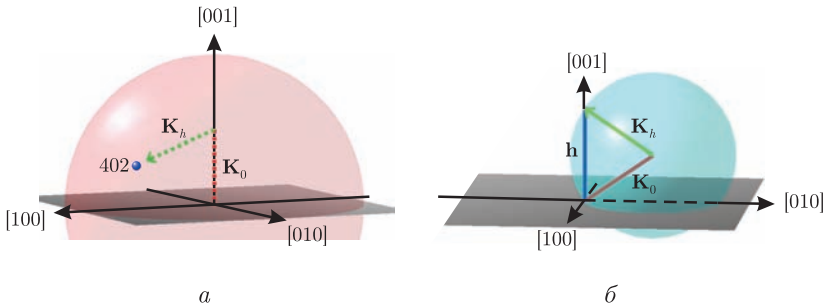


Рис. 1.18. *a* – точка, недоступна при заданій площині падіння; *б* – сфера Евальда для даного положення  $\mathbf{K}_0$

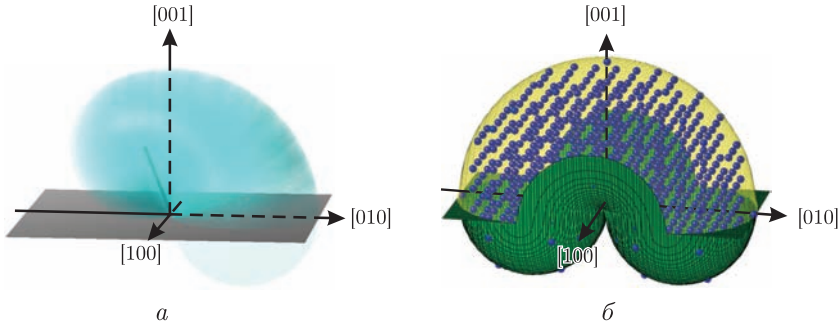


Рис. 1.19. Область доступності при заданій площині падіння та у випадку, коли промінь  $\mathbf{K}_0$  падає на поверхню кристала: *a* — рух сфери Евальда для різних кутів падіння; *б* — вся доступна область

що він завжди збігається з початком вектора  $\mathbf{K}_0$ , а його кінець описує, зрозуміло, сферу (рис. 1.18, *б*) — так звану *сферу Евальда*. Якщо розглянути всі можливі положення  $\mathbf{K}_0$  у площині падіння, тобто якщо обертати центр отриманої сфери відносно осі  $Y$  (рис. 1.19, *a*), то отримаємо тор. Однак частина цього тора буде недоступна, оскільки для її досягнення необхідно, щоб падаючий промінь прийшов із кристала, що протирічить постановці задачі. Тому область доступності зменшується і утворює фігуру, зображену на рис. 1.19, *б*. Необхідно зазначити, що ця фігура, на відміну від сфери Евальда на рис. 1.18, *б*, вже не є порожньою — всі точки всередині принципово доступні (ця фігура утворена зміщенням сфери, однак, оскільки точки на поверхні сфери можуть давати дифракцію, вся область всередині фігури теоретично доступна — рухому демонстрацію цього факту дивіться на сайті [14]).

Врахуємо згадані раніше геометрії експерименту Брегга та Лауе. В геометрії Брегга дифрагований промінь  $\mathbf{K}_h$  може виходити лише з тієї сторони кристала, на яку падає промінь  $\mathbf{K}_0$  (рис. 1.16, *a*), тобто  $K_{hz} \geq 0$ . Таким чином, з області, наведеній на рис. 1.19, *б*, ще вирізається частина, для якої  $K_{hz} < 0$  (рис. 1.20). Уявити побудову цієї фігури нескладно — її описує півсфера радіусом  $K$ , центр якої переміщують по півколу радіусом  $K$  відносно осі  $Y$  (просторова орієнтація півсфери відносно поверхні зберігається), і всі точки, через які проходить при цьому поверхня півсфери, доступні в геометрії Брегга. Зазначимо, що область недоступності, що лишається біля осі  $Y$  і заглиблюється до початку координат, не має форми внутрішньої поверхні тора, а є дещо складнішою фігурою з лінійчатим ребром у верхній частині.

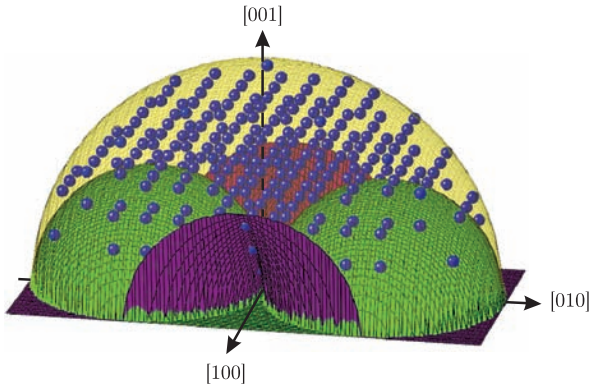


Рис. 1.20. Область доступності в геометрії Брегга

Таким чином, можна побачити, що тривимірна область доступності в геометрії Брегга суттєво відрізняється від наведеної в деяких роботах [17,18] (рис. 1.21).

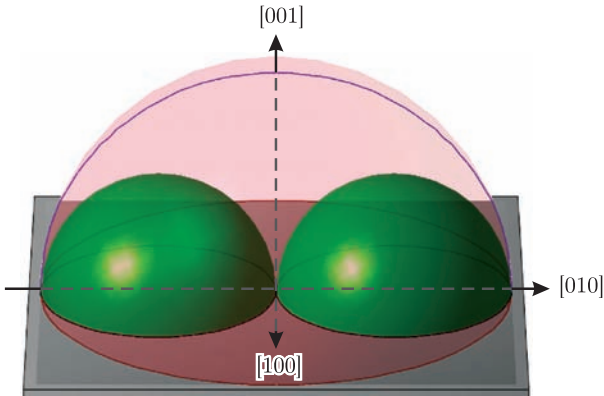


Рис. 1.21. Неправильна область доступності в геометрії Брегга

У геометрії Лауе необхідно відкинути точки, для яких  $K_{hz} > 0$ . Отримаємо фігуру, зображену на рис. 1.22.

Як бачимо з наведених рисунків 1.23, деякі точки оберненого простору можна досліджувати як за допомогою дифракції Брегга, так і за допомогою дифракції Лауе (рис. 1.24).

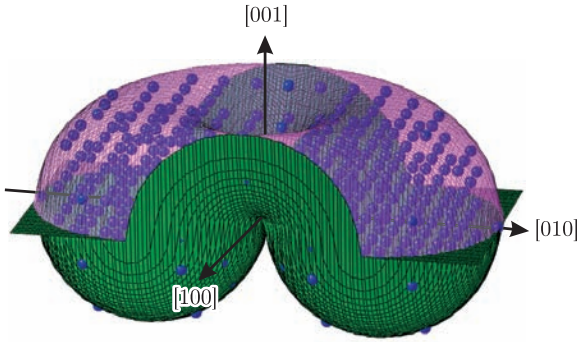
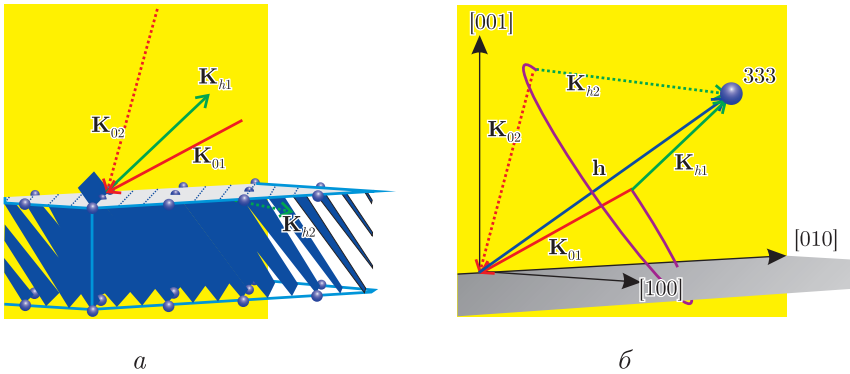


Рис. 1.22. Область доступності в геометрії Лауе

Рис. 1.23. Рефлекс, доступний в обох геометріях. Відбиття 333: *a* — в прямому просторі; *б* — в оберненому просторі

Треба відзначити, що область доступності в компланарній геометрії Бреґга, яку описують у багатьох роботах [8,9] є правильною (рис. 1.25, *a*). Однак тут не можна говорити, що один з недоступних «півкіл» це область, у якій падаючий промінь виходить з кристала, а інший, дифрагований, входить у кристал, тому що працює принцип взаємності: можна поміняти місцями падаючий і дифрагований промені — і нічого не зміниться. Тобто порожністі півкола на рис. 1.25, *a* відповідають обом заборонам геометрії Бреґга ( $K_{0z} > 0$  та  $K_{hz} < 0$ ). Область доступності для компланарної геометрії Лауе показана на рис. 1.25, *б* — це просто два кола радіусом  $K$ .

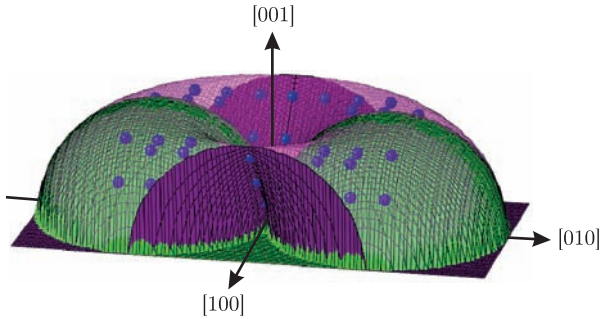
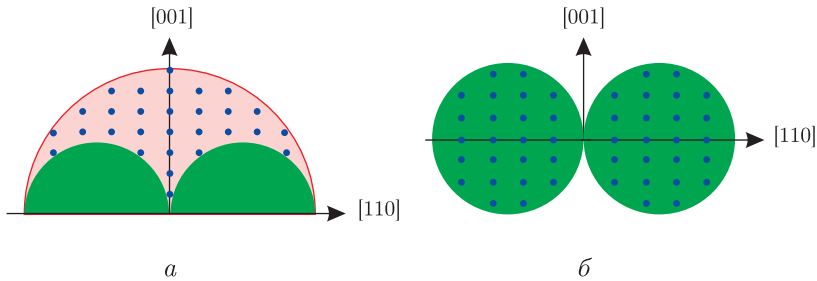


Рис. 1.24. Область рефлексів, доступних в обох геометріях, обернений простір

Рис. 1.25. Область доступності в оберненому просторі в компланарній геометрії: *а* — Брегга; *б* — Лауе

Звичайно, при зміні довжини хвилі всі описані області обернено пропорційно змінюють свої розміри, не змінюючи форму (рис. 1.26).

У деяких експериментах фіксується кут падіння (наприклад, його обирають рівним критичному), у той час як зразок може обертатись (площина падіння не зафіксована). Область доступності для такого випадку зображено на рис. 1.27.

Якщо врахувати всі можливі азимутальні орієнтації заразку, можна отримати області фундаментально доступні в обох геометріях — рис. 1.28.

Для чого потрібні всі ці красиві тривимірні рисунки? Справа в тому, що для дослідження сучасних структур із квантовими точками та квантовими дротами необхідно використовувати *некомпланарну дифракцію* — коли падаючий промінь  $\mathbf{K}_0$ , нормаль до поверхні  $\mathbf{n}$  і дифрагований промінь  $\mathbf{K}_h$  не лежать в одній площині. Тому необхі-



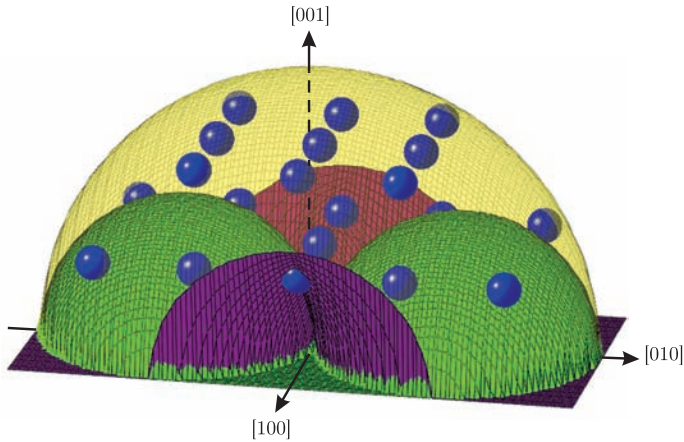


Рис. 1.26. Область доступності для геометрії Бреґґа при  $\lambda = 4 \text{ \AA}$

дно визначити геометрію експерименту, при якій можливо дослідити необхідну область оберненого простору. На рис. 1.29 зображено одну восьму частину оберненого простору для кристала кремнію. Легко побачити, які рефлекси можна досліджувати при даній довжині хвилі і площині падіння.

**Формули для побудови області доступності [16].** Для математичного пояснення наведених рисунків наведемо формули, за якими все це було побудовано. Основні формули для довільної геометрії такі:

$$|\mathbf{K}_0| = K; \quad (1.6)$$

$$|\mathbf{K}_h| = K; \quad (1.7)$$

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{Q}; \quad (1.8)$$

$$(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{P}) = 0; \quad (1.9)$$

$$(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{N}) \leq 0. \quad (1.10)$$

де вектор  $\mathbf{P}$  — перпендикуляр до площини падіння,  $\mathbf{N}$  — нормаль до поверхні зразка.

Для геометрії Бреґґа:

$$(\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{N}) > 0. \quad (1.11)$$

Для геометрії Лауе:

$$(\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{N}) < 0. \quad (1.12)$$

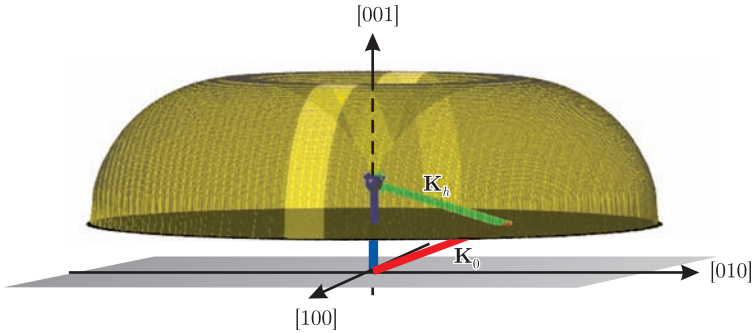


Рис. 1.27. При фіксованому куті падіння доступні точки оберненого простору знаходяться в приведеному об'ємі

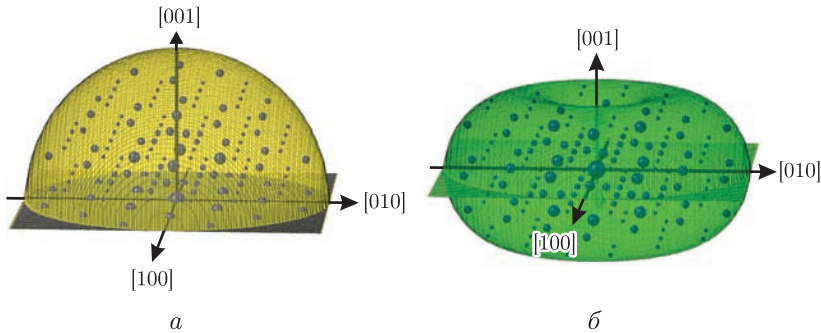


Рис. 1.28. Область доступності в оберненому просторі для всіх азимутальних орієнтацій зразка в геометрії: *а* — Брегга; *б* — Лауе

У випадку, коли  $(\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{N}) = 0$ , обидві геометрії дають однаковий результат.

Наведемо пояснення записаних формул. Як зазначалося, формули (1.6) та (1.7) справедливі для пружної взаємодії, коли довжина хвилі зберігається. Формула (1.8) є означенням вектора дифракції  $\mathbf{Q}$ . Формула (1.9) вказує на те, що  $\mathbf{K}_0$  лежить у площині падіння (перпендикулярній до її нормалі  $\mathbf{P}$ ), а формула (1.10) доповнює це тим фактом, що хвиля падає на «лицьову» поверхню зразка. Звичайно, для геометрії Брегга дифрагована хвиля поширюється з того ж боку кристала, що і падаюча (формула (1.11)), а у випадку Лауе — в протилежному (1.12).

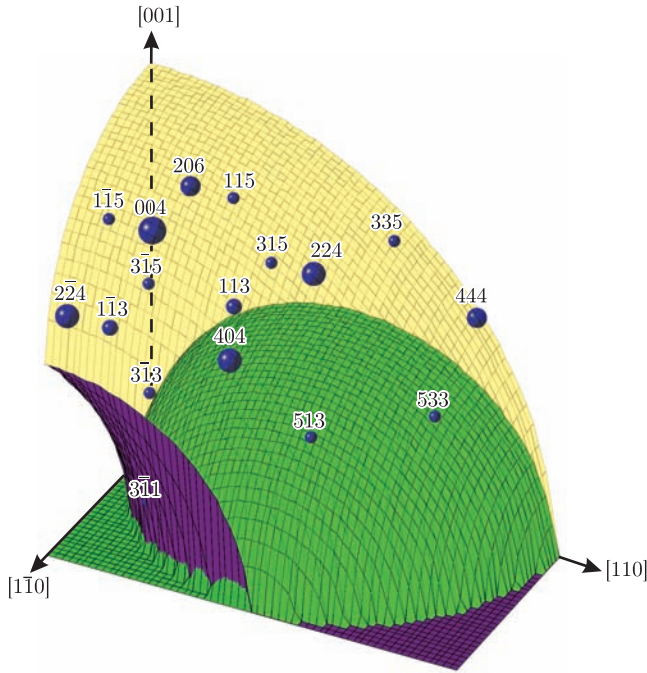


Рис. 1.29. Четверть області доступності для геометрії Брегга для кристалу Si, площини падіння  $[1\bar{1}0]$  і, як і раніше,  $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$

Для того щоб скористатися наведеними векторними формулами, перейдемо до декартової системи координат. Для точки оберненого простору з вектором  $\mathbf{Q}$  ( $|\mathbf{Q}| = Q \leq 2K$ ) і площини падіння, заданої нормаллю  $\mathbf{P}$ , знайдемо падаючий промінь  $\mathbf{K}_0$ . Для цього з рівнянь (1.6)–(1.8) отримаємо рівняння, яке пов'язує вектори  $\mathbf{K}_0$  та  $\mathbf{Q}$ :

$$(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{Q}) = -\frac{Q^2}{2}. \quad (1.13)$$

Далі рівняння (1.13) та (1.9) можна зобразити в скалярному вигляді відносно  $K_{0x}$ :

$$\begin{aligned} & ((Q_y P_z - P_y Q_z)^2 + (Q_z P_x - P_z Q_x)^2 + (Q_x P_y - P_x Q_y)^2) K_{0x}^2 - \\ & - Q^2 (Q_z P_x P_z + Q_y P_x P_y - Q_x (P_y^2 + P_z^2)) K_{0x} + \\ & + \frac{Q^4 (P_y^2 + P_z^2)}{4} - K^4 (Q_y P_z - P_y Q_z)^2 = 0, \end{aligned} \quad (1.14)$$

а інші складові  $\mathbf{K}_0$  виглядатимуть так:

$$K_{0y} = \frac{-P_z Q^2/2 + (P_x Q_z - P_z H_x) K_{0x}}{P_z H_y - P_y H_z}; \quad (1.15)$$

$$K_{0z} = \frac{-P_y Q^2/2 + (P_x Q_y - P_y H_x) K_{0x}}{P_y H_z - P_z H_y}. \quad (1.16)$$

Дифрагований промінь  $\mathbf{K}_h$  легко знайти з рівняння (1.8) у скалярному вигляді:

$$K_{hx} = K_{0x} + Q_x; \quad K_{hy} = K_{0y} + Q_y; \quad K_{hz} = K_{0z} + Q_z. \quad (1.17)$$

Ці формули можуть бути використані для знаходження експериментальної геометрії при дослідженні деякої точки оберненого простору. Тобто, щоб отримати дифракцію від точки оберненого простору, заданої вектором  $\mathbf{Q}$ , за формулами (1.14)–(1.16) можна розрахувати, як треба спрямувати падаючий промінь, а за формулою (1.17) — розрахувати положення детектора для фіксації дифрагованого променя. Зазначимо, що формули (1.14)–(1.17) справедливі для довільної декартової системи координат. Якщо перейдемо до описаної вище системи координат, де вісь  $Z$  паралельна зовнішній нормалі, а вісь  $X$  лежить у площині падіння, то вектори  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{P}$  та  $\mathbf{K}_0$  матимуть вигляд:  $\mathbf{N} = (0, 0, N_z)$ ;  $\mathbf{P} = (0, P_y, 0)$ ;  $\mathbf{K}_0 = (K_{0x}, 0, K_{0z})$ . Зазвичай довільну систему координат можна звести до цієї за допомогою максимум двох поворотів. Для зручності вектори  $\mathbf{N}$  та  $\mathbf{P}$  можна вважати ортами:  $|\mathbf{N}| = 1$  та  $|\mathbf{P}| = 1$ . У такій системі координат нерівність (1.10) зводиться до

$$\mathbf{K}_{0z} \leq 0, \quad (1.18)$$

а рівняння (1.14)–(1.16) приймають вигляд

$$(Q_z^2 + Q_x^2) K_{0x}^2 + Q^2 Q_x^2 K_{0x} + \frac{Q^4}{4} + K^4 Q_z^2 = 0; \quad (1.19)$$

$$K_{0y} = 0; \quad K_{0z} = \pm \sqrt{K^2 - K_{0x}^2}. \quad (1.20)$$

Якщо з рівнянь (1.6)–(1.10) виключити  $\mathbf{K}_0$  та  $\mathbf{K}_h$ , то в описаній системі координат фундаментально доступна область оберненого простору (половина тору для  $Q_z > 0$  на рис. 1.19, б, жовта поверхня на рис. 1.20, зелена для  $Q_z > 0$  на рис. 1.22) приймає вигляд

$$Q_z^4 + 2(Q_x^2 + Q_y^2 - 2K^2)Q_z^2 + (Q_x^2 + Q_y^2)^2 - 4K^2 Q_x^2 = 0. \quad (1.21)$$

Тут і далі  $-2K \leq Q_x \leq 2K$  та  $-K \leq Q_y \leq K$  задаються, а  $Q_z$  розраховується. За цією формулою знаходяться лише додатні значення  $Q_z$ , а поверхня для  $Q_z < 0$  визначається рівнянням  $K_{0z} = 0$ , яке буде розглянуто далі.

Щоб знайти границі області доступності для геометрій Лауе та Брега, необхідно розв'язати рівняння поверхні, для якої  $\mathbf{K}_h$  паралельне поверхні кристала ( $K_{hz} = 0$ ):

$$Q_z^4 + 2(Q_x^2 - Q_y^2)Q_z^2 + (Q_x^2 + Q_y^2)^2 - 4K^2Q_x^2 = 0. \quad (1.22)$$

Підкреслимо, що це не є поверхня розмежування двох геометрій. Просто одні корені є граничною поверхнею для першого випадку, інші — для другого. Один із розв'язків цього рівняння зображено фіолетовим кольором на рис. 1.22, а інший — фіолетовим на рис. 1.20. Ще два корені від'ємні і недосяжні завдяки наявності поверхні, описаної нижче.

Границя області оберненого простору з  $Q_z < 0$ , яку можна досліджувати (звісно, тільки в геометрії Лауе), а також нижня границя області доступності в геометрії Брега, визначаються умовою паралельності  $\mathbf{K}_0$  поверхні кристала ( $K_{0z} = 0$ ):

$$Q_z^2 = -Q_x^2 - Q_y^2 + 2K|Q_x|. \quad (1.23)$$

Корені показані зеленим на рис. 1.20 ( $Q_z > 0$ ) та на рис. 1.22 ( $Q_z < 0$ ).

Області доступності для геометрій Брега та Лауе перетинаються (рис. 1.24), тобто, як було вже зазначено, для деяких точок оберненого простору можуть бути реалізовані обидві геометрії (див. рис. 1.23).

Область доступності для випадку зафіксованого кута падіння ( $K_{0z} = \text{const}$ ) задається рівнянням

$$Q_z^2 + 2K_{0z}Q_z + Q_x^2 + Q_y^2 - 2\sqrt{(K^2 - K_{0z}^2)(Q_x^2 + Q_y^2)} = 0. \quad (1.24)$$

Розв'язок для  $Q_z \geq K_{0z}$  (геометрія Брега) зображено на рис. 1.27 жовтим кольором ( $-2K \leq Q_y \leq 2K$ ).

## 1.4. Експериментальні геометрії дифракції

З попередніх параграфів стає зрозумілим зв'язок оберненого простору з дифракцією. Тепер необхідно продемонструвати, як саме виконуються дифракційні експерименти, які їх різновиди існують і що саме

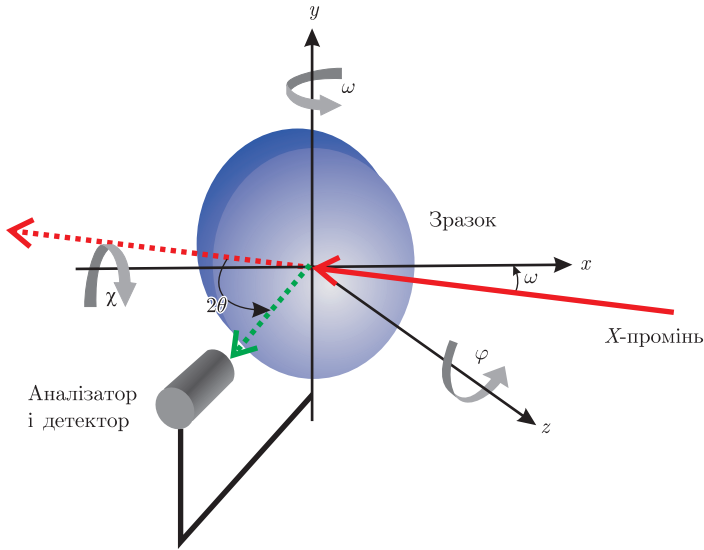


Рис. 1.30. Чотиривісний гоніометр [9]

за допомогою цих експериментів можна дослідити. У цьому параграфі будуть описані саме дифракційні методики експериментів, які використовуються на лабораторних дифрактометрах та синхротронах. Оскільки топографія виходить за рамки даної книги, вона розглядатись не буде.

Розглянемо дифрактометр зі звичайним чотиривісним гоніометром (рис. 1.30) і джерелом монохроматичної плоскої хвилі. У *двокристальній схемі*, ДКС, (перший кристал — монохроматор, другий — зразок) найчастіше використовується «точковий» детектор (сцинтиляційний або пропорційний) з деякою вхідною апертурою ( $\Delta\theta_D \approx 1\text{--}2^\circ$ ), перед яким для експериментів із високою роздільною здатністю (так званий *трьохкристальний спектрометр*, ТКС) ставлять аналізатор (третій кристал) з характерною апертурою  $\Delta\theta_A \approx 10''$ . Необхідно додати, що іноді для підвищення точності вимірювань у двокристальній схемі перед детектором ставлять щілину, чим зменшують вхідну апертуру (далі буде зрозуміло, для чого це потрібно). Інший варіант детектора — позиційно-чутливий детектор (ПЧД), для якого зазвичай вводять такий параметр, як роздільна здатність (найкращі значення — декілька мікрометрів). Оскільки в цьому розділі розглядаються тільки геомет-

ричні основи сканування оберненого простору, інтерпретація експериментальних результатів і деякі закономірності у вимірних кривих будуть описані в розділі 4.

Розглянемо найбільш поширені варіанти обертання гоніометра і що вони являють собою в оберненому просторі. Як і раніше, падаючий промінь позначатимемо вектором  $\mathbf{K}_0$ , а напрямок, в якому встановлено детектор, — вектором  $\mathbf{K}_{hD}$  (якщо детектор має ненульову апертуру,  $\mathbf{K}_{hD}$  спрямовано в його центр) — рис. 1.31, *a*. В оберненому просторі напрямки хвильових векторів зберігаються, тому відкладемо ці вектори таким чином: кінець вектора  $\mathbf{K}_0$  спрямуємо в початок координат (точка 000), а початок вектора  $\mathbf{K}_{hD}$  сумістимо з початком вектора  $\mathbf{K}_0$ . Позначимо вектор оберненого простору, спрямований із початку координат у кінець вектора  $\mathbf{K}_{hD}$  як  $\mathbf{Q}$ . Тоді виконується умова (рис. 1.31, *б*):

$$\mathbf{K}_{hD} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{Q}. \quad (1.25)$$

Таким чином, в *ідеальних умовах* (ідеальний напівнескінченний зразок, повністю монохроматична і плоска хвиля та детектор з нульовою апертурою) напрямок падаючої хвилі і напрямок, у якому фіксується дифрагована хвиля, однозначно задають точку оберненого простору (що задана вектором  $\mathbf{Q}$ ), якій відповідає дифрагована в даних геометричних умовах інтенсивність. Звичайно, якщо умови не такі ідеальні, зафіксована інтенсивність відповідатиме не точці в оберненому просторі, а деякому скінченному об'єму (приклади дещо далі).

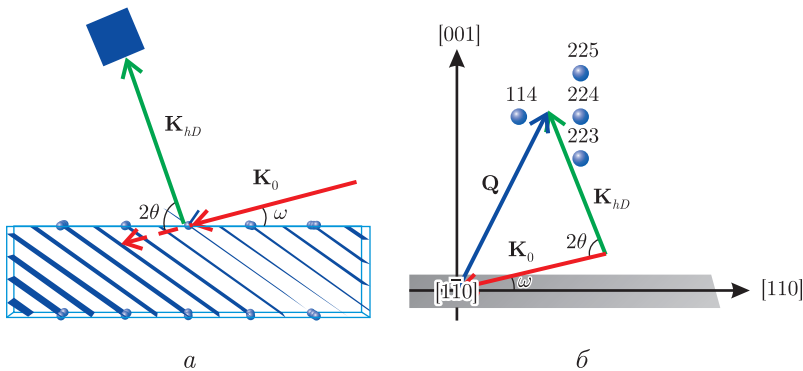


Рис. 1.31. Падаючий промінь  $\mathbf{K}_0$  та промінь, що фіксується детектором  $\mathbf{K}_{hD}$  у просторах: *a* — прямому, *б* — оберненому

При виконанні умови Вульфа–Брегга, тобто  $\mathbf{Q} = \mathbf{h}$ , дифрагований промінь спрямований точно в детектор:  $\mathbf{K}_{hD} = \mathbf{K}_h$ .

Перейдемо до розгляду найбільш розповсюджених методів сканування оберненого простору. Для цього продемонструємо рух падаючого променя і детектора відносно кристала (або рух кристала і детектора при закріпленому джерелі випромінювання) в прямому просторі і покажемо, що при цьому описує кінець вектора  $\mathbf{K}_{hD}$  в оберненому.

### 1.4.1. $\omega/2\theta$ -сканування

Найпоширеніший метод сканування — це так зване  $\omega/2\theta$ -сканування (рис. 1.32). У цьому випадку гоніометр рухається так, щоб зміна кута, під яким фіксується дифрагований промінь, дорівнювала зміні кута входу падаючого променя. Найбільш просто можна зобразити це сканування, одночасно рухаючи з рівними сталими швидкостями детектор в одному напрямку, а джерело — у протилежному (рис. 1.32). Відносно кристалічних площин, на яких відбувається дифракція, це сканування відповідає закону Снелюса. Назва такого сканування пов'язана з тим, що зміна кута падіння  $\omega$  супроводжується в два рази більшою зміною кута між падаючим променем і напрямком, у якому спостерігається дифракція — так званий кут  $2\theta$ , тобто  $2\Delta\omega = \Delta(2\theta)$ . Іншими словами, якщо джерело випромінювання зафіксовано, що характерно для більшості експериментальних установок, і зразок рухається зі сталою кутковою швидкістю, то детектор — у два рази швидше (рис. 1.33).

В оберненому просторі таке сканування описує пряму, яка проходить через початок координат (точку 000) (рис. 1.34). Звичайно, у *симетричному* випадку (кут падіння відносно поверхні дорівнює куту дифракції відносно поверхні), ця пряма збігається з нормаллю до поверхні.

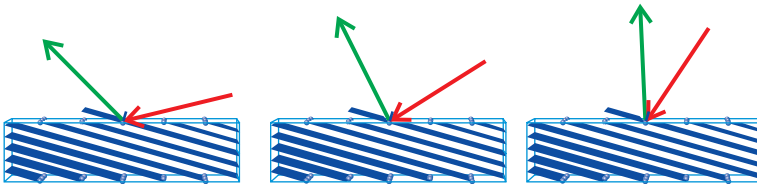
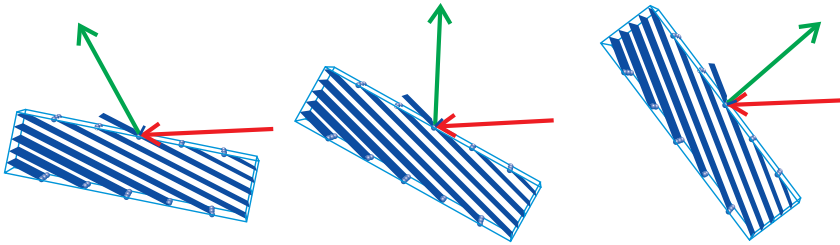
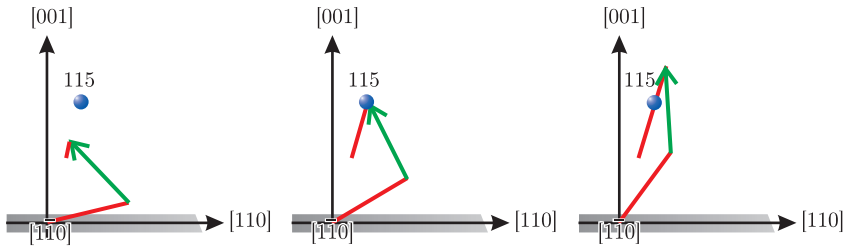


Рис. 1.32.  $\omega/2\theta$ -сканування в прямому просторі з зафіксованим зразком

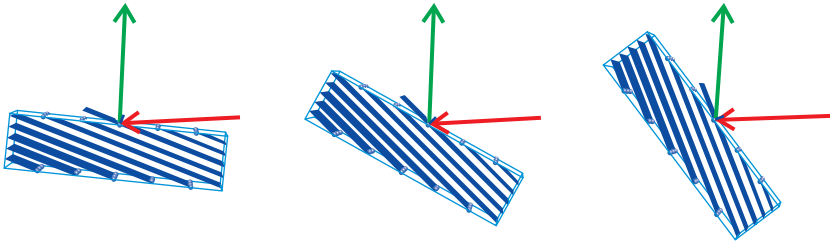
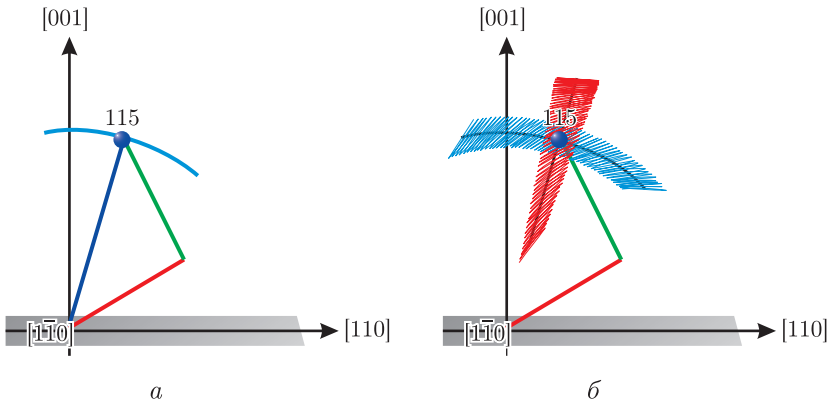


Рис. 1.33.  $\omega/2\theta$ -сканування в прямому просторі з зафіксованим джереломРис. 1.34.  $\omega/2\theta$ -сканування в оберненому просторі

Саме такий режим руху гоніометра, а точніше його симетричний варіант, коли  $\omega = \theta$ , зазвичай використовують для аналізу порошків чи полікристалів. Детальний опис цього методу не є важливим для розуміння принципів дифракції і побудови оберненого простору, тому в монографії наведений не буде.

### 1.4.2. $\omega$ -сканування

При  $\omega$ -скануванні обертається лише зразок, а джерело випромінювання і детектор залишаються нерухомими (рис. 1.35). Саме тому криву дифракційного відбиття, що можна отримати таким чином, називають *кривою гойдання*. Відповідно в оберненому просторі такий тип сканування описує дугу (рис. 1.36, *a*). Звичайно, що при такому скануванні закон Снелюса не виконується, і в ідеальних умовах (ідеальний нескінченний зразок, повністю монохроматична і плоска хвиля та детектор з нульовою апертурою) дифракційна картина являла би дещо подібне до дельта-функції. Однак у реальності експеримент завжди неідеальний (як мінімум, зразок не може бути нескінченним), тому

Рис. 1.35.  $\omega$ -сканування в прямому просторі з зафіксованим джереломРис. 1.36. Сканування в оберненому просторі: *a* —  $\omega$ , ТКС; *б* —  $\omega/2\theta$  та  $\omega$ , ДКС

цей тип сканування дає криву гойдання зі скінченною напівшириною. Оскільки падаюче випромінювання можна зробити досить монохроматичним, а кутову апертуру аналізатора звести до декількох кутових секунд, то цей метод є дуже чутливим до неідеальностей досліджуваної структури. Таке сканування особливо корисне для дослідження латерально-неоднорідних структур (детальніше вплив подібних неідеальностей на дифракцію описаний у розділі 4).

Окремого розгляду потребує цей тип сканування в двокристалному випадку (ДКС). На рис. 1.36, *б* показано, що являють собою двокристалні  $\omega/2\theta$ - та  $\omega$ -скани в оберненому просторі. Кожній точці на довгій дузі, яка відповідає руху центра детектора, приписується інтенсивність, виміряна вздовж відповідної короткої дуги, довжина якої відповідає кутівій апертурі детектора. Насправді детектор зазвичай

має деяку апертуру не тільки в площині дифракції, однак для пояснення різниці між двокристалльною та трикристалльною схемами це неважливо, оскільки навіть остання має зазвичай досить велику апертуру в напрямку, перпендикулярному площині дифракції (детальніше це питання розглядатиметься в параграфі, присвяченому позиційно чутливим детекторам).

У найбільш поширеному випадку, коли розподіл максимуму інтенсивності в оберненому просторі відбувається вздовж нормалі до поверхні, обидва режими сканування в межах кутової апертури детектора дають однакову інформацію. Це легко пояснити на прикладі симетричної дифракції: область вздовж нормалі в оберненому просторі відповідає закону Снелюуса, і саме вздовж нормалі проходить  $\omega/2\theta$ -сканування. При  $\omega$ -скануванні кут  $\omega$  збільшується, а кут  $2\theta$  — пропорційно зменшується (детектор нерухомий), і дифрагована інтенсивність попадає в детектор на відстані  $2\omega$  від його центра. Таким чином, якщо половина кутової апертури детектора  $\Delta\theta_D/2 > 2\omega$ , то дифрагована інтенсивність попаде в детектор. Тобто при симетричній дифракції на відхиленнях  $\omega$  до  $\pm\Delta\theta_D/4$  скани  $\omega/2\theta$  та  $\omega$  дають одну і ту саму картину дифракції.

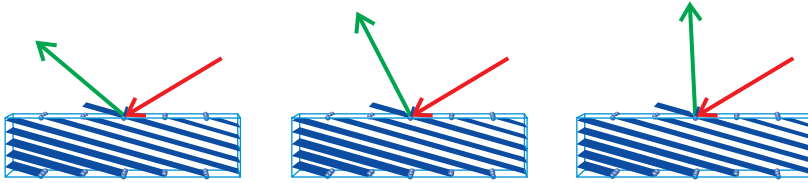
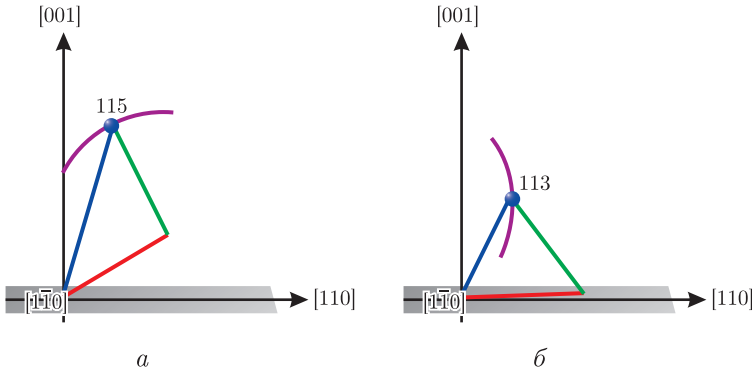
### 1.4.3. $2\theta$ -сканування

Це досить простий тип сканування — рухається лише детектор, а зразок і джерело залишаються нерухомими. Підкреслимо, що для ідеального кристала таке сканування майже нічого не дає, оскільки воно протирічить закону Снелюуса. Звичайно, як впливає із попереднього пункту, у двокристалльному випадку без щілини таке сканування майже не має сенсу — детектор буде інтегрувати всю інтенсивність у кутовому діапазоні, рівному його вхідній апертурі.

На рис. 1.37 показано рух детектора в прямому просторі для  $2\theta$ -сканування, а на рис. 1.38, а — в оберненому. Основне призначення сканування такого типу — побудова карт оберненого простору — продемонстровано у відповідному розділі.

### 1.4.4. $\omega/N\theta$ -сканування

Такий тип сканування дуже зручний при дослідженні високоякісних багатошарових структур. У розділі 4 показано, що для таких структур найбільш важлива область оберненого простору, яка потребує дослідження, розташована на прямій, паралельній нормалі до поверх-

Рис. 1.37.  $2\theta$ -сканування в прямому просторіРис. 1.38. Сканування в оберненому просторі:  $a - 2\theta$ ;  $b - \omega/\theta$ 

ні зразка. Тому саме вибором коефіцієнта  $N$  можна досягнути, щоб в області досліджуваного вузла оберненої ґратки сканування проходило майже по прямій, паралельній нормалі. Наприклад, для дослідження рефлексу 113 у структурі з поверхнею, паралельною площинам (001), можна обрати  $N = 1$  (рис. 1.38, б).

#### 1.4.5. Карти оберненого простору та позиційно-чутливі детектори

Як було продемонстровано в попередніх пунктах, довільне сканування за допомогою точкового детектора дає розподіл інтенсивності в оберненому просторі вздовж деякої лінії. Однак для повної інформації про обернений простір необхідно отримати об'ємну картину розподілу дифрагованої інтенсивності. Оскільки отримати таку тривимірну картину, використовуючи точковий детектор, досить складно експериментально, зазвичай спочатку отримують двовимірні *карти обер-*

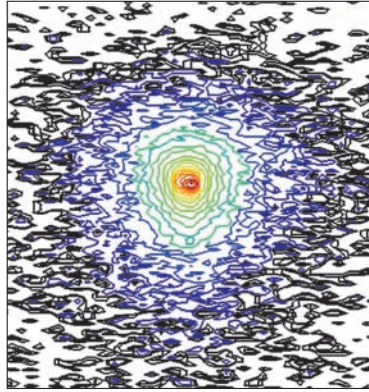


Рис. 1.39. Приклад карти оберненого простору для симетричного рефлексу 111 від кристала Si

*неного простору* (КОП), розташовані в площині дифракції (рис. 1.39). Потім, змінюючи просторову орієнтацію площини дифракції, наприклад, обертаючи зразок відносно нормалі, отримують набір таких КОП, об'єднавши які, можна побудувати відповідну ділянку оберненого простору.

Зупинимось докладніше на методах отримання КОП. Це можна зробити кількома способами, комбінуючи описані вище типи скану-

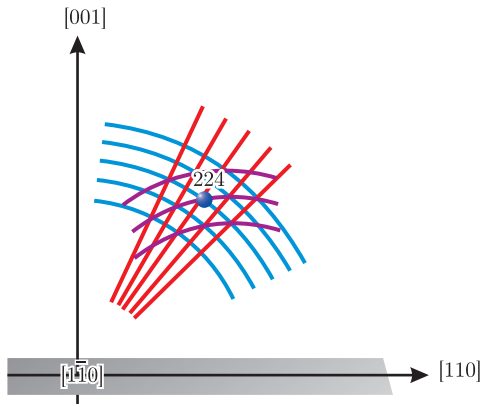


Рис. 1.40. Різні варіанти побудови двовимірної карти оберненого простору

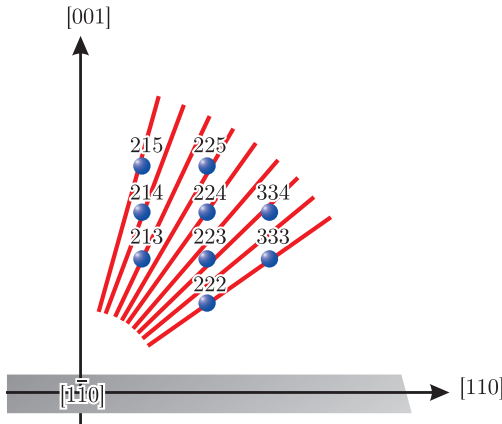


Рис. 1.41. Побудова карти оберненого простору за допомогою  $\omega/2\theta$ - сканування

вання. На рис. 1.40 показано, як одну ділянку можна досліджувати за допомогою  $\omega$ -,  $\omega/2\theta$ - та  $2\theta$ -сканувань. Зазвичай достатньо лише одного сканування та зсуву вздовж лінії іншого сканування. Найпоширеніша комбінація —  $\omega/2\theta$ -сканування та зсув по  $\omega$ . Робиться це так: спочатку гоніометр налаштовується на центр вузла оберненої ґратки, потім зразок відвертається по  $\omega$  на якийсь кут і проводиться  $\omega/2\theta$ -сканування (у трикристальному або в двокристальному режимі зі щілиною). Далі  $\omega$  знову змінюється (в напрямку вузла оберненої ґратки), і повторюється  $\omega/2\theta$ -сканування. І так далі (приклад побудови див. на рис. 1.41).

З розвитком реєструвальних приладів виникла можливість для більш продуктивного дослідження оберненого простору із використанням *позиційно-чутливого детектора* (ПЧД). У геометричному плані цей прилад являє собою пластину, на яку нанесена матриця детекторів 1.42, а. В якості ПЧД зазвичай використовується ССД-матриця. Такий детектор характеризується наступними параметрами: розміром кожного чутливого елемента, відстанню між ними, кількістю цих елементів по двох осях і дімичним діапазоном елемента. Іноді використовується більш проста модифікація ПЧД — лінійний детектор, у якому чутливі елементи встановлені лише вздовж однієї лінії. Якщо такий детектор розташувати в площині дифракції, це значно прискорить вимірювання двовимірних карт оберненого простору (пояснення дивись у наступному абзаці).

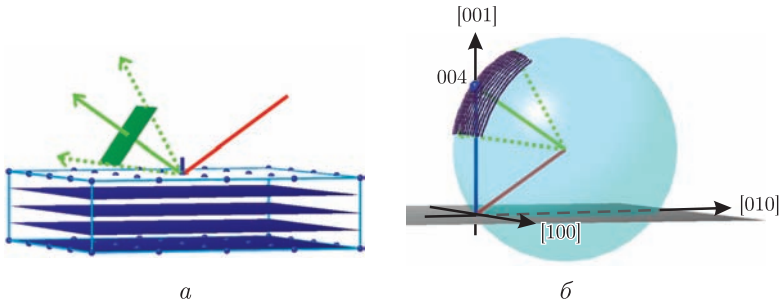


Рис. 1.42. Позиційно-чутливий детектор: *a* — прямий простір (зелена пластина); *б* — обернений простір (фіолетові лінії), рефлекс 004

Що ж реєструє двовимірний ПЧД в оберненому просторі? Якщо розташувати цю матрицю перпендикулярно напрямку дифрагованої хвилі, то в оберненому просторі цей детектор буде відразу реєструвати сектор сфери Евальда (рис. 1.42, *б*). Таким чином, для отримання об'ємної картини фрагмента оберненого простору достатньо використовувати ПЧД і рухати гоніометр лише вздовж однієї лінії в оберненому просторі, наприклад вздовж лінії зміни  $\omega$  (рис. 1.43, *a*). Звичайно, якщо необхідна інформація лише в площині дифракції, можна використовувати лінійний ПЧД і розташовувати його саме в цій площині, тобто він буде відразу фіксувати всю криву вздовж лінії  $2\theta$  (рис. 1.38, *a*).

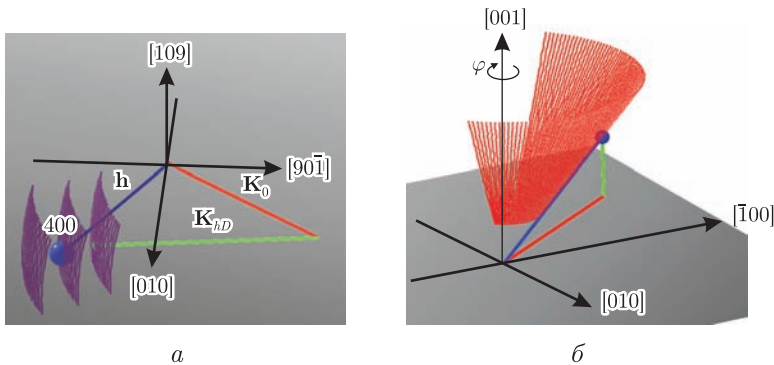


Рис. 1.43. *a* — тривимірне сканування оберненого простору за допомогою ПЧД, GID 400; *б* — карта  $\omega/2\theta - \varphi$  поблизу рефлексу 224

Саме з використанням ПЧД зазвичай проводять експерименти з *малокутової дифракції*, коли промінь падає на зразок під дуже малим кутом і дифрагований промінь реєструється також при малих кутах. Цей метод використовують для дослідження, наприклад, біологічних об'єктів.

### 1.4.6. Інші варіанти сканування

Звичайно, описаними вище видами сканування оберненого простору їх перелік не обмежується. Однак більшість інших варіантів використовується не дуже часто. Зупинимось ще на двох більш-менш розповсюджених скануваннях.

**Карта розподілу  $2\theta/\omega - X - Y$ .** При такому скануванні зразок (зазвичай напівпровідникова пластина) рухається так, щоб виміряти  $2\theta/\omega$ -скани в його різних точках. Як зазначалося, за кутом  $2\theta$  можна розрахувати деяку складову параметра ґратки — наприклад, при симетричній дифракції від тетрагональної ґратки розраховується складова, паралельна нормалі до поверхні (формула (1.2)). Таким чином можна отримати значення параметра ґратки в різних точках досліджуваної пластини. З напівширин отриманих кривих можна оцінити досконалість пластини в кожній точці. Такі вимірювання дуже поширені при виготовленні напівпровідникових пластин, і зазвичай є частиною технологічного процесу. Такий тип сканування є скоріше скануванням прямого простору, оскільки він дає інформацію про різні точки пластини в прямому просторі.

**Карта  $\omega/2\theta - \varphi$ .** Досить цікавим виявляється сканування оберненого простору в режимі, коли знімається  $\omega/2\theta$ -скан, потім зразок обертається відносно нормалі за кутом  $\varphi$  (рис. 1.30) і знову знімається  $\omega/2\theta$ -скан, і так далі. Таким чином, для асиметричного рефлексу можна отримати конус в оберненому просторі, твірна якого проходить вздовж лінії  $\omega/2\theta$  (рис. 1.43, б). Такий тип сканування дуже зручний для аналізу багатохвильової дифракції. Приклад моделювання такого сканування і експериментальна карта розглянуті в параграфі 3.7.

**Більш складні гоніометри.** Крім описаних чотирирівнісних існують ще так звані шестирівнісні та восьмирівнісні гоніометри, в яких окрім довільного положення зразка можна задавати довільне положення детектора. Для таких дифрактометрів кількість можливих комбінацій обертань ще більша. Однак, користуючись принципами, описаними в цьому розділі, легко уявити, що будуть являти собою інші довільні комбінації обертань гоніометра в прямому і оберненому просторах.



## 1.5. Формування оберненого простору за допомогою фур'є-перетворення

Якщо електронна щільність є періодичною в трьох вимірах:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \delta(x - na, y - mb, z - pc), \quad (1.26)$$

то її фур'є-перетворення утворює [19]:

$$F(\mathbf{u}) = \sum_h \sum_k \sum_l \left( u - \frac{h}{a}, v - \frac{k}{b}, w - \frac{l}{c} \right), \quad (1.27)$$

тобто саме обернену ґратку!

Таким чином, зробивши обернене перетворення Фур'є від оберненого простору, взагалі-то можна отримати вигляд прямої ґратки. Проте це не так легко зробити, оскільки необхідно проміряти весь обернений простір (у нескінченних межах). Крім того, заважає скінченний динамічний діапазон і шуми реєструвальних приладів. Однак цей метод широко застосовується, наприклад, для аналізу біологічних об'єктів.

На рис. 1.44 наведено приклад двовимірної ґратки та її швидкого фур'є-перетворення (FFT). Як бачимо, фур'є-перетворення дещо спотворене, оскільки пряма ґратка має досить невелику кількість вузлів, а для коректного перетворення, як зазначалося, необхідна нескінченна кількість вузлів.

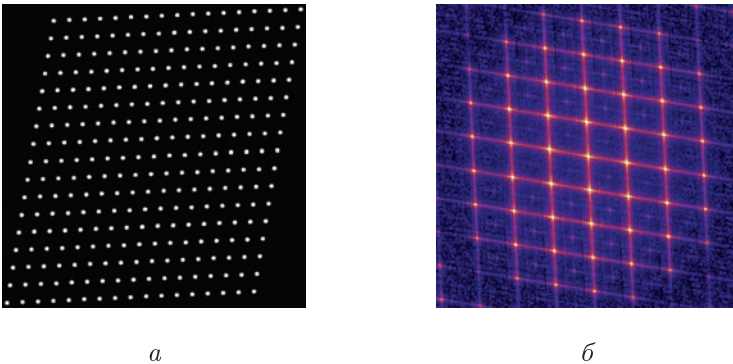


Рис. 1.44. Двовимірна ґратка (а) та частина її швидкого фур'є-перетворення (б)

## 1.6. Обернений простір для двошарових структур

Розглянемо структуру, складену з товстої підкладки та тонкого шару з подібною до підкладки кристалічною ґраткою (наприклад Si та Ge). Такі структури зазвичай виготовляють наступним чином: на монокристалічну підкладку, виготовлену з одного матеріалу методом молекулярно-променевої епітаксії наносять шар іншого матеріалу. В такій структурі підкладка зазвичай вважається ідеальною та недеформованою, а шар, в залежності від умов росту, матеріалу та товщини, може бути напружений, або частково чи повністю релаксований. Повністю напруженим називають шар, латеральний параметр ґратки (в площині поверхні) якого дорівнює відповідному параметру ґратки підкладки (рис. 1.45, *a*). Повністю релаксованим називається шар, кристалічна ґратка якого неспотворена (рис. 1.45, *b*). Досить часто зустрічається проміжний стан шару — так званий частково релаксований або частково напружений. Такі шари зазвичай мають неоднорідну структуру вздовж напрямку росту. На рис. 1.46 зображено карту оберненого простору поблизу рефлексу 224 для структури, складеної з товстої GaAs підкладки з нанесеним не неї частково релаксованим ZnSe шаром.

Подібна поведінка кристалічної ґратки шару, що наноситься на підкладку, пояснюється наступним. Щоб зберегти внутрішню енергію мінімальною, кристалічна ґратка шару деформується таким чином, щоб відтворювати кристалічну ґратку підкладки в площині росту (паралельно поверхні). Однак параметри ґратки двох матеріалів зазвичай відрізняються, тому нормальний параметр ґратки шару змінюється для того, щоб зменшити енергію кристалічної комірки (рис. 1.45, *a*). При такому рості зі збільшенням товщини шару його надлишкова внутрішня енергія збільшується і при досягненні деякої критичної товщини кристалічна ґратка релаксує за рахунок утворення дислокацій. Критична товщина шару залежить від його матеріалу, матеріалу підкладки та умов росту.

Оскільки ріст шару відбувається зазвичай при температурі, відмінній від кімнатної (для більшості напівпровідникових матеріалів близько 500 °C), ґратка шару «притосована» до ґратки підкладки саме при цій температурі. Однак параметри термічного розширення матеріалів шару та підкладки можуть суттєво різнитися, тому при охолодженні структури ґратка може суттєво деформуватись. Внаслідок

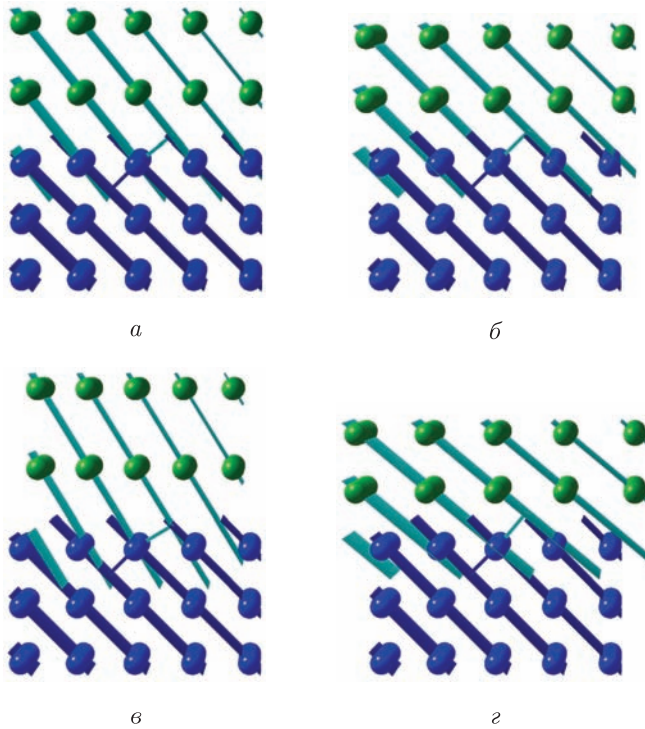


Рис. 1.45. Двошарові структури з різним ступенем релаксації шару: *a* — повністю напружений; *б* — релаксований; *в* — перенапружений; *г* — перерелаксований. Синім кольором зображено підкладку, зеленим — шар. Кристалічні площини (011)

цього можуть виникнути ситуації, наведені на рис. 1.45, *в* та 1.45, *г*. Такі ґратки будемо називати відповідно перенапруженими та перерелаксованими.

Зазначені види деформованих шарів в оборненому просторі зображено на прикладі рефлексів 004 та 044 на рис. 1.47, *a*. На цьому рисунку точки відповідають: точка (*a*) — напруженому (рис. 1.45, *a*), (*б*) — релаксованому (рис. 1.45, *б*), (*в*) — перенапруженому (рис. 1.45, *в*) та точка (*г*) — перерелаксованому (рис. 1.45, *г*) шарам. З рисунка видно, що в структурі з релаксованим шаром (точка (*б*)) відповідні вузли оборненої ґратки шару та підкладки впорядковано вздовж відповідного вектора оборненої ґратки, оскільки відповідні кристалічні площини в таких шарах паралельні (рис. 1.45, *б*). Водночас у напруженому

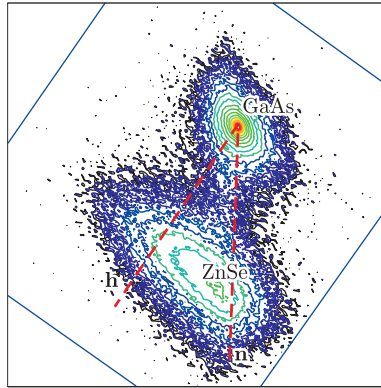


Рис. 1.46. КОП для рефлексу 224 від ZnSe шару на GaAS підкладці. Вертикальна пряма — нормаль до поверхні  $\mathbf{n}$ , похила — вектор оберненої ґратки  $\mathbf{h}$

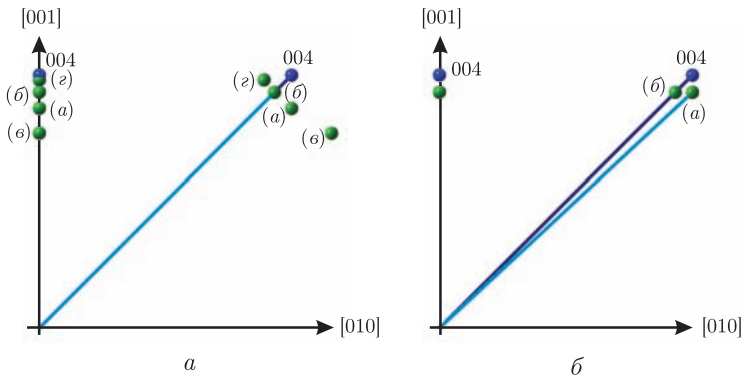


Рис. 1.47. Обернений простір для двошарових структур:  $a$  — різний ступінь релаксації шару, точки  $(a)$ – $(z)$  відповідають рисунку 1.45;  $b$  — шари з різним складом і релаксацією, точки  $(a)$ – $(b)$  відповідають рисунку 1.48. Сині — вузли підкладки, зелені — шару

шарі латеральний параметр ґратки дорівнює відповідному параметру підкладки (рис. 1.45,  $a$ ), тому відповідні вузли в оберненому просторі впорядковані вздовж нормалі до поверхні (рис. 1.47,  $a$ , точка  $(a)$ ).

Необхідно зазначити важливу особливість: оскільки симетричні відбиття (004 на рисунку 1.47,  $a$ ) не залежать від латерального параметру ґратки, шари з різного матеріалу та з різним напруженням

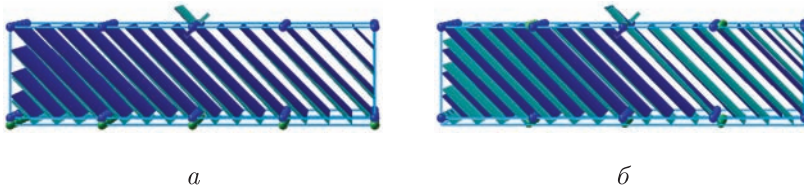


Рис. 1.48. Двошарові структури: *a* — повністю напружений  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  (зелений) на  $\text{GaAs}$  підкладці (синя); *б* — релаксований  $\text{InAs}$  (зелений) на  $\text{GaAs}$  підкладці (синя). Шари накладено на підкладку з метою більш легкого порівняння. Кристалічні площини (004)

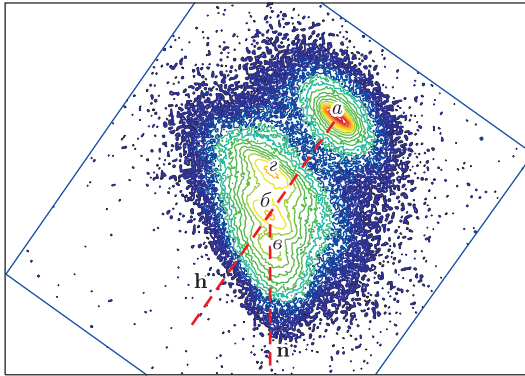


Рис. 1.49. КОП для рефлексу 224 від багат шарової структури. Точка (*a*) — підкладка, (*б*) — релаксований шар, (*с*) — напружений по відношенню до (*б*) шар, (*е*) — перерелаксований шар. Вертикальна пряма — нормаль до поверхні  $\mathbf{n}$ , похила — вектор оберненої ґратки  $\mathbf{h}$

досить важко розрізнити, виходячи з аналізу симетричних рефлексів. Для такого аналізу необхідно використовувати несиметричні відбиття. На рис. 1.47, *б* зображено симетричне відбиття 004 та асиметричне 044 для напруженого шару  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  та релаксованого  $\text{InAs}$ . Як видно з рис. 1.48, ці шари мають однаковий нормальний параметр ґратки, однак різний латеральний. Тому симетричні відбиття для цих шарів співпадають, у той час як асиметричні легко розрізнити (рис. 1.47, *б*).

На рис. 1.49 наведено приклад карти оберненого простору поблизу рефлексу 224 для структури, в якій одночасно можна спостерігати різні ступені напруження. Точка (*a*) — рефлекс від підкладки, (*б*) — рефлекс від шару, релаксованого відносно підкладки (розташований

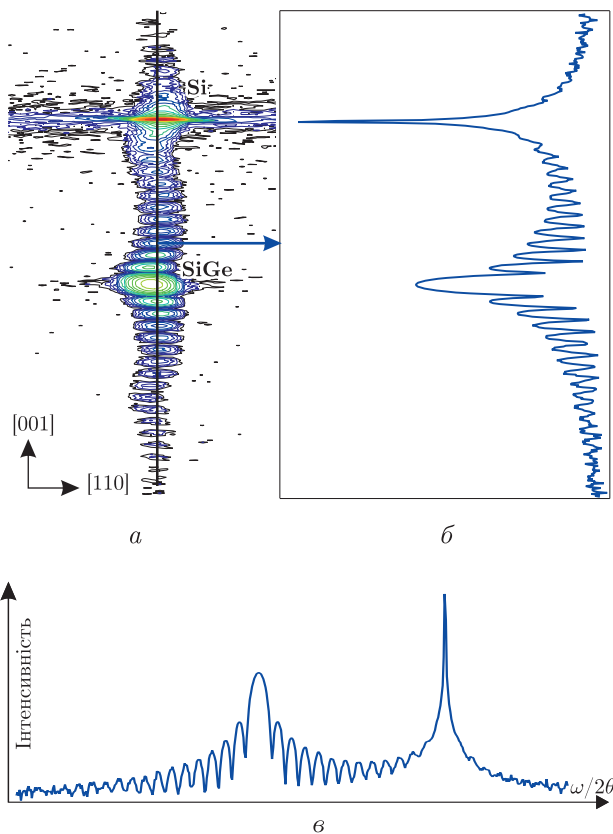


Рис. 1.50. *a* — КОП для рефлексу 004 від SiGe шару на Si(001) підкладі; *б* — скан вздовж чорної лінії на КОП; *в* — той самий скан в координатах кривої дифракційного відбиття

вздовж вектора оберненої ґратки  $\mathbf{h}$ ), точка (*в*) — шар, напружений по відношенню до шару (*б*) (розташований на лінії нормалі до поверхні зразка  $\mathbf{n}$ ), точка (*з*) — перерелаксований шар.

Як зазначалося, при релаксації виникають дислокації (детальніше див. розділ 4), тому високоякісні структури намагаються виростити повністю напруженими. Саме такі структури використовуються в сучасній електроніці, тому аналізу здебільшого таких структур буде присвячено наступні два розділи. На рис. 1.50, *a* зображено карту оберненого простору для повністю напруженого шару SiGe на Si(001)

підкладці. Як видно з рисунку, окрім вузлів оберненого простору для Si та SiGe на карті з'являються додаткові вузли. Це так звані *товщинні осциляції*, які виникають внаслідок інтерференції хвиль у тонкому SiGe шарі. На рис. 1.50, б наведено скан карти оберненого простору вздовж нормалі до поверхні, яка в симетричному випадку співпадає з вектором оберненої ґратки (чорна лінія на рис. 1.50, а). Зазвичай такий скан малюють в інших координатах, як зображено на рис. 1.50, в — це так звана *крива дифракційного відбиття* (КДВ).

Аналіз КДВ є одним з найбільш поширених методів отримання інформації про багаточастотну структуру. Наступні два розділи будуть присвячені в основному методам моделювання і аналізу КДВ від шаруватих структур.

## Розділ 2

# ДИНАМІЧНА ТЕОРІЯ ДИФРАКЦІЇ ДЛЯ БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУР

### 2.1. Динамічна теорія дифракції: класифікація та історична довідка

Існує дві поширені теорії, які описують дифракцію рентгенівських променів у кристалах: кінематична та динамічна. Оскільки розгляд кінематичної теорії виходить за рамки цієї роботи, нагадаємо лише, що ця теорія базується на незалежному розгляді розсіювання від кожного елемента об'єму з урахуванням втрати енергії внаслідок лише звичайного поглинання, не враховуючи взаємодії дифрагованого випромінювання з речовиною. Динамічна теорія дифракції враховує всю взаємодію випромінювання з речовиною.

Вперше динамічну теорію дифракції розглянуто Дарвіном [20, 21] у 1914 році: він розробив теорію, що являла собою розширену кінематичну — було враховано ефекти багатократного розсіювання, тобто взаємодія кристала не лише з хвилею, що падає, а і з розсіяною хвилею.

Паралельно Евальд у 1916 році [22–24] розробив власну динамічну теорію. Він розглядав атоми в кристалічній ґратці як диполі і розраховував їх самоузгоджене поле. У 1931 році Лауе [25, 26] переформулю-



вав теорію Евальда, розглянувши взаємодію рентгенівських променів з речовиною за допомогою рівнянь Максвелла, що дозволило значно простіше отримати ті самі результати, що і в теорії Евальда.

Слід зазначити, що хоча всі три теорії були виведені зовсім порізному, проте вони дають однаковий результат. Деякі автори не можуть навіть дійти згоди, з якої теорії виведено рівняння Такагі: Отъє [1] виводить ці рівняння з теорії Лауе, а Іверонова [6] зазначає, що їх виведено з теорії Дарвіна.

Розвитку динамічної теорії дифракції присвячено багато робіт, серед яких виділимо роботи Захаріасена [27], Джеймса [3, 28], Отъє [1, 29], Бормана [30–32], Като [33–37] та ін. [2, 10, 38, 39].

Наступний етап розвитку динамічної теорії розсіяння  $X$ -променів пов'язаний з дифракцією в спотворених кристалах. Її початком можна вважати піонерську роботу Пенніга і Полдера [40], у якій розвинуто основи так званої хвильової або ейкональної теорії дифракції у слабко спотворених кристалах.

У цій монографії розглянуто теорію Евальда, модернізовану Лауе. Вона, на наш погляд, найбільш зрозуміла, послідовна і точна [1].

Підкреслимо, що теорія Лауе є інтегральною (використовуються такі макропараметри системи, як діелектрична та магнітні сприйнятливості речовини). Саме цей факт іноді закидають як недолік методів, що базуються на теорії Лауе, оскільки часто розглядається взаємодія випромінювання з об'єктами, розміри яких в одному з напрямків порядку атомних і навіть менші (див. приклад у параграфі 3.4). Правомірність такого розгляду пояснюється тим, що такий параметр, як поляризованість вводиться як функція координат  $\chi(r)$ , а не як стала, тому її можна розрахувати для будь-якої фізичної моделі. Крім того  $X$ -променевиий структурний аналіз є інтегральним методом, опромінюється досить велика область зразка, що аналізується. Отже, при латеральних розмірах пучка  $10 \text{ мм}^2$  кількість атомів навіть в одному атомному шарі становить близько  $10^{12}$  — цілком достатньо, щоб вважати структуру такою, що змінюється плавно за однією з координат.

## 2.2. Виведення головних формул динамічної теорії дифракції

Оскільки в більшості робіт, присвячених  $X$ -променевому структурному аналізу, рівняння розповсюдження наведено у спрощеному вигляді без доведення та опису припущень, у цьому параграфі всі рівняння

виведено з рівнянь Максвелла з детальним описом застосованих спрощень і припущень.

### 2.2.1. Рівняння розповсюдження

Рівняння Максвелла в системі Сі для середовища з діелектричною проникністю  $\varepsilon$  та магнітною проникністю  $\mu$  у непровідному середовищі без вільних зарядів<sup>1</sup> має вигляд:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}; \quad (2.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \quad (2.2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0; \quad (2.3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (2.4)$$

де  $\mathbf{E}$  і  $\mathbf{D}$  — відповідно напруженість та індукція електричного поля;  $\mathbf{H}$  і  $\mathbf{B}$  — відповідно напруженість та індукція магнітного поля.

Матеріальні рівняння:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}; \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu \mathbf{H}, \quad (2.6)$$

тут  $\varepsilon_0 = 8,85418782 \cdot 10^{-12}$  Ф/м,  $\mu_0 = 1,256637061 \cdot 10^{-6}$  Гн/м.

Розв'язок рівнянь Максвелла шукаємо у вигляді

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \nu t) \quad (2.7)$$

де  $\nu$  — частота,  $t$  — час та  $\mathbf{r}$  — радіус-вектор.

Якщо взяти  $\operatorname{rot}$  від рівняння (2.2) та підставити туди (2.1), то з урахуванням (2.5) та (2.6) отримаємо:

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\mu_0 \mu \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}. \quad (2.8)$$

Врахуємо що швидкість світла  $c = 1/\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$  та  $\nu = Kc$ , де  $K = 1/\lambda$  — довжина хвильового вектора у вакуумі,  $\lambda$  — довжина хвилі. Замість діелектричної сприйнятливості  $\varepsilon$  введемо поляризованість  $\chi$ ,

<sup>1</sup>Рентгенівські промені взаємодіють з електронами, що знаходяться на близьких до ядра оболонках, тому вільні та валентні електрони можна не враховувати.

пов'язану співвідношенням:  $\varepsilon = 1 + \chi$ . Покладемо  $\mu = 1$ , що правомірно для рентгенівських хвиль (див. [1] та пояснення припущень наприкінці розділу) і, скоротивши часову залежність  $\exp(2\pi i \nu t)$ , отримаємо рівняння розповсюдження:

$$\text{rot rot } \mathbf{E} - 4\pi^2 K^2 (1 + \chi) \mathbf{E} = 0. \quad (2.9)$$

Скориставшись співвідношенням

$$\text{rot rot} = \text{grad div} - \Delta,$$

запишемо рівняння розповсюдження у вигляді

$$\Delta \mathbf{E} - \text{grad div } \mathbf{E} + 4\pi^2 K^2 (1 + \chi) \mathbf{E} = 0. \quad (2.10)$$

Звернемо увагу на другий доданок у (2.10) — у більшості робіт ним просто нехтують. Це пояснюється тим, що величина поляризованості  $\chi$  досить мала (порядку  $10^{-5}$ ), тому напруженість  $\mathbf{E}$  та індукція  $\mathbf{D}$  електричного поля відрізняються слабо. Враховуючи це, рівняння (2.3) часто заміняють  $\text{div } \mathbf{E} = 0$ , і другий доданок просто зникає. Однак таке припущення є хибним у випадках малих кутів дифракції [41]. Тому в п. 2.4.11 буде розглянуто розв'язок без цього припущення.

Координатна частина (2.7) для плоскої хвилі в середовищі з показником заломлення  $n = \sqrt{\varepsilon\mu} \approx \sqrt{1 + \chi}$  має вигляд

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.11)$$

де  $k = nK$  — довжина хвильового вектора в середовищі.

Виконавши підстановку (2.11) в рівняння розповсюдження (2.10), отримаємо

$$\frac{k^2}{K^2} \mathbf{E} - \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{k}}{K^2} - (1 + \chi) \mathbf{E} = 0. \quad (2.12)$$

Враховуючи, що кристал — це періодичне середовище, розглянемо  $X$ -променеву хвилю як суму блохівських хвиль, кожна з яких відповідає точці оберненого простору, що бере участь у дифракції:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_h \mathbf{E}_h \exp(2\pi i \mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}), \quad (2.13)$$

а також запишемо поляризованість у вигляді її фур'є-розкладу (розклад відбувається за векторами оберненої ґратки  $\mathbf{h}$ , які ведуть до тих самих точок оберненого простору):

$$\chi = \sum_{h'} \chi_{h'} \exp(2\pi i \mathbf{h}' \cdot \mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Підставивши (2.13) та (2.14) в рівняння розповсюдження (2.12), отримаємо систему рівнянь

$$\frac{(k_h^2 - K^2)}{K^2} \mathbf{E}_h = \frac{(\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{E}_h) \mathbf{k}_h}{K^2} + \sum_{h'} \chi_{h-h'} \mathbf{E}_{h'}. \quad (2.15)$$

Значимо, що в більшості робіт цю систему рівнянь записують у спрощеному вигляді, нехтуючи першим доданком у правій частині рівності, який відповідає  $\text{div } \mathbf{E}$ . Тоді система прийме вигляд

$$\frac{(k_h^2 - K^2)}{K^2} \mathbf{E}_h = \sum_{h'} \chi_{h-h'} \mathbf{E}_{h'}. \quad (2.16)$$

Систему рівнянь 2.15 можна звести до скалярної двома способами: 1) розкласти за координатами (кожне векторне рівняння трансформується в три скалярних); 2) ввести поляризацію хвилі і розглядати окремо дві поляризації (кожне рівняння розкладається на два). Перший шлях більш точний, і у випадку багатохвильової дифракції тільки він дозволяє правильно розв'язати задачу, однак другий шлях простіший, тому він застосовується у більшості алгоритмів розрахунку дифракції.

Рівність нулю детермінанта системи (2.15) являє собою дисперсійне рівняння, тобто рівняння, яке зв'язує хвильові вектори у системі із показником заломлення:

$$\det \Delta_E = 0. \quad (2.17)$$

Найбільш розповсюджений випадок дифракції рентгенівських хвиль — коли задіяно дві сильні хвилі, зазвичай їх позначають індексами 0 та  $h$  (звісно, однохвильовий випадок зустрічається частіше, однак практично не має застосування):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{E}_h \exp(2\pi i \mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}). \quad (2.18)$$

За умови колінеарності векторів  $\mathbf{E}$  і  $\mathbf{D}$ , а також при  $\chi \approx \chi_0$  (достить обгрунтоване припущення, оскільки  $\chi_0$  на 1–2 порядки більше за  $\chi_h$ ) рівняння розповсюдження (2.15) у двоххвильовому випадку набуває вигляду

$$\begin{cases} \frac{(k_0^2 - (1 + \chi_0)K^2)}{K^2} \mathbf{E}_0 = C \chi_h \mathbf{E}_h; \\ \frac{(k_h^2 - (1 + \chi_0)K^2)}{K^2} \mathbf{E}_h = C \chi_h \mathbf{E}_0, \end{cases} \quad (2.19)$$

а дисперсійне рівняння (2.17) записується так:

$$(k_0^2 - (1 + \chi_0)K^2)(k_h^2 - (1 + \chi_0)K^2) = C^2 K^4 \chi_{\bar{h}} \chi_h, \quad (2.20)$$

де  $\bar{h}$  відповідає зворотній хвилі;  $C$  — поляризаційний множник ( $C = 1$  для  $\sigma$ - і  $C = \cos(2\theta)$  для  $\pi$ -поляризації,  $\theta$  — кут між атомною площиною, від якої йде дифракція, і падаючим променем). У більшості робіт використовують спрощений вигляд поляризаційного множника  $C$  для  $\pi$ -поляризації:  $C = \cos(2\theta_0)$ , де  $\theta_0$  — кут Брегга, але таке припущення може бути використано тільки поблизу точного бреггівського кута.

Рівняння розповсюдження (2.10) можна записати також для індукції електричного поля  $\mathbf{D}$  (див. п. 2.3.2), але в цьому випадку необхідно похідні брати від виразу  $\mathbf{D}/\varepsilon$ , що значно ускладнює розв'язок. Тому при записі рівняння розповсюдження в термінах  $\mathbf{D}$  використовують припущення про малу величину поляризованості. Спрощена система рівнянь (аналогічна 2.16) приймає вигляд

$$\frac{(k_h^2 - K^2)}{k_h^2} \mathbf{D}_h = \sum_{h'} \chi_{h-h'} \mathbf{D}_{h'}. \quad (2.21)$$

Насправді немає різниці, в яких величинах розв'язувати задачу, оскільки матеріальне рівняння (2.5) є цілком точним, тому обидва підходи рівноцінні. В наступних параграфах застосовано обидва підходи для забезпечення найбільш близького до авторського викладення відповідних алгоритмів розрахунку дифракції.

Розв'язавши рівняння (2.15), можна знайти хвильові вектори ( $\mathbf{k}_h$ ) та з точністю до деякого множника хвильові поля в середовищі ( $\mathbf{E}_h$ ). Однак, щоб остаточно визначити величини полів, необхідно накласти на розв'язок граничні умови.

### 2.2.2. Граничні умови

На границі поділу двох середовищ мають виконуватись такі умови: неперервність тангенціальних (паралельних границі) складових електричного та магнітного полів ( $\mathbf{E}_t$ ,  $\mathbf{H}_t$ ) та нормальних (перпендикулярних границі) складових їх індукцій ( $\mathbf{D}_n$ ,  $\mathbf{B}_n$ ):

$$\mathbf{E}_t = \text{const}; \quad (2.22)$$

$$\mathbf{H}_t = \text{const}; \quad (2.23)$$

$$\mathbf{D}_n = \text{const}; \quad (2.24)$$

$$\mathbf{B}_n = \text{const.} \quad (2.25)$$

Якщо врахувати рівності, отримані з (2.2) та (2.5),

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0(1 + \chi)\mathbf{E}, \quad (2.26)$$

$$\mathbf{H} = \frac{[\mathbf{k} \times \mathbf{E}]}{K}, \quad (2.27)$$

а також (2.13), (2.14) та припущення  $\mu = 1$ , граничні умови можна записати у вигляді:

$$\sum_h (\mathbf{E}_h)_t = \text{const}; \quad (2.28)$$

$$\sum_h \left( (\mathbf{E}_h)_n + \sum_{h'} \chi_{h-h'} (\mathbf{E}_{h'})_n \right) = \text{const}; \quad (2.29)$$

$$\sum_h [\mathbf{k}_h \times \mathbf{E}_h] = \text{const.} \quad (2.30)$$

У випадку псевдоморфної структури рівність нормальних компонент у рівнянні (2.30) (тобто рівняння (2.25)) являє собою лінійну комбінацію рівнянь (2.28), тому що латеральні компоненти (паралельні площині границі поділу) хвильових векторів у різних шарах однакові.

У більшості робіт нехтують різницею між напруженістю та індукцією полів, записуючи граничні умови у вигляді двох скалярних рівнянь:

$$E = \text{const}; \quad k_n E = \text{const},$$

де  $k_n$  — проекція хвильового вектора на нормаль до поверхні. В інших роботах ці умови записують для індукції електричного поля. Однак такий запис справедливий лише з точністю до величини поляризованості, типове значення якої має порядок  $10^{-5}$ .

Підсумуємо зроблені при виведенні формул *припущення* та їх мотивацію:

- *Розглядаються плоскі монохроматичні хвилі.* Подібне припущення добре збігається з експериментом на сучасних синхротронах, де відстань від джерела випромінювання до досліджуваного зразка може сягати 1 км, а відносна зміна довжини хвилі  $\Delta\lambda/\lambda \approx 10^{-8}$ .
- *Середовище кристалічне і в межах шару однорідне.* Саме на базі таких кристалів будуються сучасні напівпровідникові прилади, а

неоднорідність у напрямку нормалі до поверхні легко врахувати, розбиваючи на більш тонкі однорідні шари. Крім того, існуючі неоднорідності середовища (наприклад, квантові точки та дроти, а також теплові коливання атомів ґратки) можна врахувати за допомогою фактора Дебая–Валлера ( $DW = 0 \dots 1$ ,  $DW = 1$  для ідеально кристалічного середовища і  $DW = 0$  для аморфного), на який домножується поляризованість ( $\chi_h$ ).

- *Відсутні заряди та струми.* Як зазначалося,  $X$ -промені взаємодіють з електронами на внутрішніх оболонках атомів, тому наявність вільних електронів майже не впливає на розсіювання. Струми не розглядаються з тієї самої причини.
- $\mu = 1$ . Взаємодія рентгенівських променів з магнітним полем значно слабше, ніж з електричним [ [42]]. Відношення амплітуди магнітного розсіяння до електричного дорівнює:

$$\frac{A_{\text{magnetic}}}{A_{\text{charge}}} = \frac{\hbar\omega}{mc^2}.$$

Для випромінювання з енергією 10 кеВ (близько 1Å) це відношення приблизно дорівнює 0,01. Тобто відношення інтенсивностей буде близько до  $10^{-4}$ . Тому необхідність враховувати взаємодію з магнітним полем  $X$ -променів виникає тільки у випадку аномального розсіювання — коли енергія випромінювання близька до енергії власних електронних переходів речовини, що досліджується. Розгляд аномального розсіювання виходить за рамки цієї монографії.

## 2.3. Розв'язок дисперсійного рівняння

Розв'язок дисперсійного рівняння (2.17) дозволяє знайти хвильові вектори у речовині [43]. Спочатку опишемо, як зазвичай розв'язується дисперсійне рівняння, а потім розглянемо деякі методи точного розв'язку цього рівняння.

Розглянемо спочатку варіанти розв'язку найбільш важливого випадку двох сильних хвиль, а потім — випадок трьох та чотирьох хвиль. Метод розв'язку у випадку ще більшої кількості хвиль (майже до нескінченності) наведено у п. 2.4.11.

### 2.3.1. Розрахунок хвильових векторів

У значній кількості робіт з  $X$ -променевого дифракційного аналізу для задання дифрагованих векторів у рівняннях вводиться кутова змінна [29]:

$$\beta_h = \frac{k_0^2 - k_h^2}{K^2}, \quad (2.31)$$

де  $k_0$  та  $k_h$  — відповідно довжини падаючого та дифрагованого хвильових векторів у середовищі,  $K$  — довжина хвильового вектора в вакуумі.

Існують два способи визначення змінної  $\beta_h$ : 1) точний розрахунок хвильових векторів; 2) наближене визначення через кут Вульфа–Брегга  $\theta_0$  (тут і далі  $\theta$  — кут між променем та атомною площиною, на якій відбувається дифракція) та відхилення  $\Delta\theta$  падаючого променя від  $\theta_0$ . Зазвичай для багатопроменевої дифракції наближені обчислення майже неможливо використати, тому застосовують точний чисельний розв'язок, іноді з деякими спрощеннями (див. п. 2.4.8 та 2.4.11).

**Параметр відхилення від бреггівського кута.** Найбільш поширений наближений запис кутової змінної  $\beta_h$  при симетричній дифракції [1]:

$$\beta_h = 2\Delta\theta \sin(2\theta_0), \quad (2.32)$$

Однак вираз (2.32) виведено в лінійному наближенні (кола поблизу точки Лоренца замінені на дотичні — див. рис. 2.4, *a*), тому цей вираз можна застосовувати лише поблизу точного бреггівського кута. Заус [44] ввів цю змінну більш строго [45]:

$$\beta_h = 2\gamma_h \left[ \Delta\theta \frac{\sin 2\theta_0}{\sin(\theta_0 + \Phi)} + \frac{1}{2}(\Delta\theta)^2 \left( \frac{\cos 2\theta_0}{\sin(\theta_0 + \Phi)} - \frac{\sin^2(\theta_0 - \Phi)}{\sin^3(\theta_0 + \Phi)} \right) \right], \quad (2.33)$$

де  $\gamma_0 = \sin(\theta - \Phi)$  та  $\gamma_h = -\sin(\theta + \Phi)$  — параметри асиметрії;  $\Phi$  — кут між поверхнею та кристалічними площинами, від яких відбувається дифракція.

Звичайно, наближені формули дозволяють більш швидко розраховувати дифракцію, проте вони застосовні лише для невеликих відхилень від кута Брегга, тобто для  $\beta_h \ll 1$ . Для кутів  $\beta_h \approx 1$  ці формули не можна використовувати, крім того вони не застосовні для розрахунку зворотної дифракції (при  $\theta \approx 90^\circ$ ).



**Точний розрахунок.** Окрім наближених формул, для знаходження хвильових векторів можна використовувати пряме обчислення. Для цього у дисперсійному рівнянні залишають тільки одну змінну. Це можна зробити завдяки умові неперервності на границі поділу середовищ складової хвильового вектора, яка паралельна цій границі, а також зв'язку між хвильовими векторами вигляду  $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$ . Для двоххвильового випадку дисперсійне рівняння є рівнянням четвертого ступеня і може бути розв'язане чисельно або аналітично. У випадках, коли інформація про дзеркально відбитий промінь та промінь, що пройшов, неважлива, можна використати спрощене дисперсійне (квадратне) рівняння. Розглянемо детальніше методи точного знаходження хвильових векторів.

### 2.3.2. Чисельний та наближений аналітичний розв'язки у двоххвильовому випадку

Дисперсійна поверхня є одним із найбільш зручних і наочних інструментів дослідження дифракції рентгенівських променів. Для успішного моделювання дифракційних процесів потрібно знати хвильові вектори всіх наявних у системі хвиль, для чого необхідно якомога точніше розв'язати дисперсійне рівняння (2.17).

Цією проблемою займалися багато авторів [1, 4, 10, 29], проте у більшості робіт це були або наближені геометричні моделі, або чисельні моделі окремих випадків. Дуже часто уявлення про дисперсійну поверхню для геометрії Лауе переносилися на геометрію Бреґга: картинку просто повертали на  $90^\circ$  (рис. 2.1). Найбільш повний аналіз диспер-

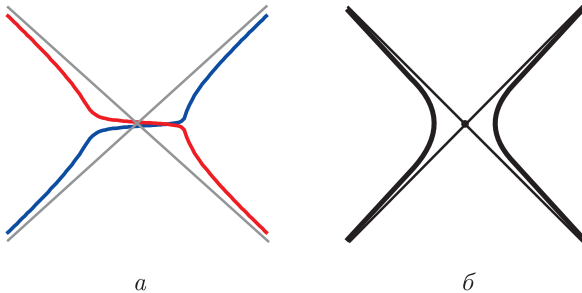


Рис. 2.1. Дисперсійна крива для симетричної геометрії Бреґга: *a* — точно розрахована; *б* — типова ([8])

сійного рівняння для випадку Бреґга наведено у роботах Т. Fukamachi [46–48], проте графіки були приведені тільки для симетричної дифракції зі спрощеннями та з аналізом деяких умовних параметрів, які не мають фізичного змісту.

У цій главі представлено чисельний розв'язок дисперсійного рівняння для двохвильового випадку як у геометрії Бреґга, так і Лауе, декількома різними методами, а також аналітичний розв'язок наближеного рівняння поблизу кута Бреґга (для двох коренів). Крім того, проаналізовано приблизний підхід для пошуку хвильових векторів, що застосовується в більшості програмах для розрахунку кривих дифракційного відбиття, а також порівняно цей підхід з чисельним розв'язком.

Цінність запропонованого точного розв'язку дисперсійного рівняння виявляється найчіткіше при аналізі експериментальних кривих гойдання далеко від бреґгівського положення. Це завдання стає все актуальнішим зі зменшенням характерних розмірів досліджуваних об'єктів, таких як квантові точки і квантові дроти, надтонкі шари (товщиною в кілька постійних ґратки) і т.ін. Перевагою чисельного розв'язку є також точніший аналіз структур, що складаються з матеріалів, які значно різняться параметрами ґраток. Такий підхід має значно збільшити точність аналізу експериментальних кривих, одержаних у сильно асиметричній геометрії, зокрема, при ковзній дифракції (GID).

**Чисельний розв'язок дисперсійного рівняння 4-го ступеня (геометрія Бреґга).** Перейдемо до безрозмірних хвильових векторів, а також векторів оберненої ґратки:

$$k_0 \equiv \frac{k_0}{K}, \quad k_h \equiv \frac{k_h}{K}, \quad h \equiv \frac{h}{K}. \quad (2.34)$$

Дисперсійне рівняння у двохвильовому випадку (2.20) приймає вигляд

$$(k_0^2 - n^2)(k_h^2 - n^2) = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (2.35)$$

Відзначимо, що для рівняння розповсюдження, записаного для індукції електричного поля (2.21), дисперсійне рівняння з наведеними хвильовими векторами матиме вигляд [1]:

$$\left( \frac{k_0^2 - 1}{k_0^2} - \chi_0 \right) \left( \frac{k_h^2 - 1}{k_h^2} - \chi_0 \right) = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (2.36)$$

Можна показати, що ця формула зводиться до (2.35) при заміні

$$n \rightarrow \sqrt{\frac{1 - \chi_0}{(1 - \chi_0)^2 - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}} \approx \sqrt{1 + \chi_0}, \quad (2.37)$$

що говорить про те, що обидва ці підходи практично еквівалентні (даний факт був підтверджений моделюванням).

Перейдемо до декартової системи координат, враховуючи, що при заломленні зберігаються тангенціальні складові хвильових векторів (дорівнюють  $x$  для  $\mathbf{K}_{0i}$  і  $\mathbf{K}_0$  та  $d$  для  $\mathbf{K}_{hi}$  і  $\mathbf{K}_h$  на рис. 2.2). Введемо такі величини (рис. 2.2):

$$z = h \cos \varphi, \quad x = -\cos \alpha, \quad d = -x + h \sin \varphi,$$

де  $\mathbf{h}$  — вектор оберненої ґратки,  $\alpha$  — кут між падаючим з вакууму на поверхню променем  $\mathbf{K}_0$  і поверхнею,  $\varphi$  — кут між нормаллю і вектором  $\mathbf{h}$ .

Тоді квадрати модулів хвильових векторів можна виразити так:

$$\begin{aligned} k_0^2 &= x^2 + y^2, \\ k_h^2 &= (z - y)^2 + d^2 = y^2 - 2zy + z^2 + d^2. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Підставивши дані вирази в дисперсійне рівняння, одержимо:

$$(y^2 + (x^2 - n^2))(y^2 - 2zy + (z^2 + d^2 - n^2)) = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}.$$

Або після перетворення:

$$\begin{aligned} y^4 - 2zy^3 + (z^2 + d^2 + x^2 - 2n^2)y^2 - 2z(x^2 - n^2)y + \\ + (x^2 - n^2)(z^2 + d^2 - n^2) - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Отримане рівняння четвертого ступеня легко розв'язати за допомогою методу Лагера [49], оскільки він дозволяє знайти комплексні корені. Проте необхідно враховувати, що після застосування чисельного методу, корені необхідно відсортувати відповідно до їх фізичного сенсу (у цьому випадку — за величинами дійсної і уявної частин).

Розв'язавши рівняння (2.39) і підставивши результати в (2.38), знайдемо  $k_0^i$  і  $k_h^i$ , де  $i = 1 \dots 4$ . Після підстановки знайдених величин хвильових векторів у (2.19) одержимо відношення амплітуд дифрагованої і падаючої хвиль:

$$c_i = \frac{E_h^i}{E_0^i} = \frac{k_0^2 - (1 + \chi_0)K^2}{CK^2 \chi_{\bar{h}}} = \frac{CK^2 \chi_h}{k_h^2 - (1 + \chi_0)K^2}. \quad (2.40)$$

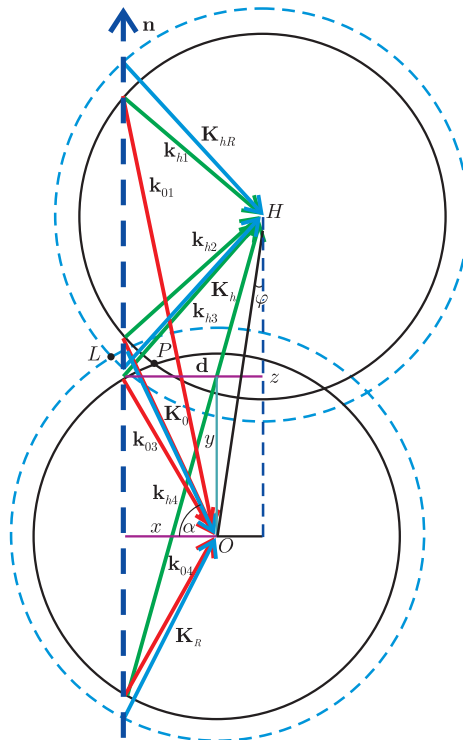


Рис. 2.2. Переріз дисперсійної поверхні площиною дифракції в оберненому просторі: великі кола (радіус  $K$ ) — у вакуумі, менші (радіус  $k$ ) — у середовищі. Геометрія Брегга.  $P$  — точка Лоренца,  $L$  — точка Лауе

Для напівнескінченного кристалу один з цих коефіцієнтів і буде дифракційною здатністю кристала, яка у випадку Брегга має вигляд

$$R = \frac{\sqrt{1 - d^2}}{\sqrt{1 - x^2}} c_i^2. \tag{2.41}$$

**Чисельний розв'язок дисперсійного рівняння 4-го ступеня в геометрії Лауе.** У геометрії проходження дисперсійна поверхня виглядатиме таким чином (рис. 2.3).

У геометрії Лауе величини дорівнюють:

$$z = h \cos(\varphi), \quad x = (\alpha), \quad d = h \sin(\varphi).$$

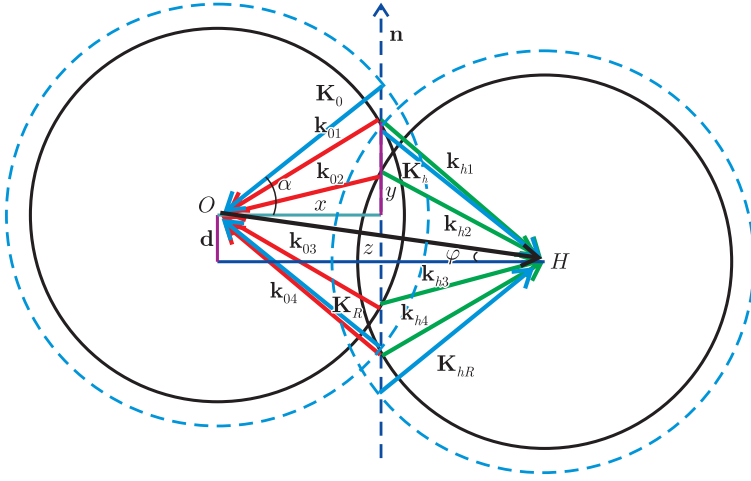


Рис. 2.3. Переріз дисперсійної поверхні площиною дифракції в оберненому просторі (геометрія Лаяе)

Тоді квадрати модулів хвильових векторів можна виразити так:

$$k_0^2 = x^2 + y^2,$$

$$k_h^2 = (z - x)^2 + (y + d)^2 = y^2 + 2dy + (x^2 - 2zx + z^2 + d^2).$$

Підставивши ці вирази в дисперсійне рівняння (2.35), після перетворення одержимо

$$y^4 - 2dy^3 + (z^2 + d^2 + 2x^2 - 2n^2 - 2zx)y^2 - 2d(x^2 - n^2)y + (x^2 - n^2)(z^2 + d^2 + x^2 - n^2 - 2zx) - C^2\chi_h\chi_{\bar{h}} = 0.$$

**Аналітичний розв'язок спрощеного дисперсійного рівняння 2-го ступеня поблизу кута Бреґґа в геометрії Бреґґа.** Якщо в дисперсійному рівнянні (2.35) прийняти, що  $k_0 \approx k_h \approx n$ , одержимо спрощене дисперсійне рівняння другого ступеня:

$$\xi_0\xi_h = \frac{1}{4}C^2\chi_h\chi_{\bar{h}}, \quad (2.42)$$

де  $\xi_0 = k_0 - n$ ,  $\xi_h = k_h - n$ .

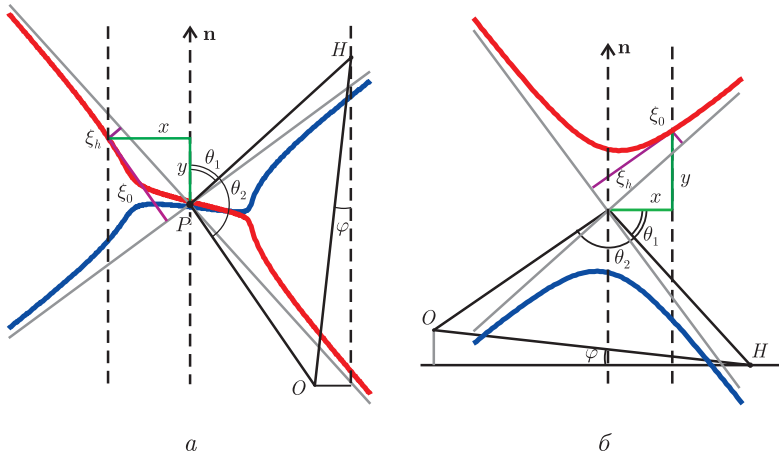


Рис. 2.4. Проекція дисперсійної поверхні поблизу точного бреггівського положення в геометрії: *a* – Брега *б* – Лауе ( $\Delta\alpha = 5$  сек)

У декартовій системі координат  $\xi_0$  і  $\xi_h$  можна записати так (рис. 2.4, *a*):

$$\begin{aligned} \xi_0 &= x \sin \theta_2 \pm y \cos \theta_2, \\ \xi_h &= x \sin \theta_1 \pm y \cos \theta_1, \end{aligned} \tag{2.43}$$

де кути  $\theta_1$  і  $\theta_2$  визначені таким чином [5]:

$$\theta_1 = \arctg \left| \frac{X_0 - h \sin \varphi}{z - Y_0} \right|, \quad \theta_2 = \pi - \arctan \left| \frac{X_0}{Y_0} \right|,$$

а  $X_0$  і  $Y_0$  є координатами точного бреггівського положення (точка Лоренца), тобто точки перетину двох кіл радіусами  $n$  з центрами в точках  $O$  і  $H$ :

$$\begin{aligned} X_0 &= -\sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cos \varphi + \frac{h \sin \varphi}{2}, \\ Y_0 &= \sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \sin \varphi + \frac{z}{2}. \end{aligned}$$

Підставивши (2.43) у (2.42), одержимо:

$$\cos \theta_1 \cos \theta_2 y^2 \pm x \sin(\theta_1 + \theta_2) y + x^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 - \frac{1}{4} C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0,$$

Звідси знайдемо координату  $y$ :

$$y = \frac{\pm x \sin(\theta_1 + \theta_2)}{2 \cos \theta_1 \cos \theta_2} \times \left( \mp \sqrt{x^2 \sin^2(\theta_1 + \theta_2) - \cos \theta_1 \cos \theta_2 (4x^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}})} \right). \quad (2.44)$$

Необхідно також враховувати сортування коренів за величиною уявної частини.

Такий підхід дозволяє досить точно розв'язати дисперсійне рівняння поблизу точного положення Брегга, проте далеко від точки Лоренца його не можна застосувати, оскільки кола апроксимуються прямими. Виграш у швидкості розрахунку досягає 6–10 разів порівняно з чисельним розв'язком формули (2.40), а це є дуже непогано.

**Аналітичний розв'язок спрощеного дисперсійного рівняння 2-го ступеня поблизу кута Брегга в геометрії Лауе.** У геометрії Лауе координати  $\xi_0$  і  $\xi_h$  у декартовій системі координати можна виразити таким чином:

$$\begin{aligned} \xi_0 &= y \sin \theta_2 \pm x \cos \theta_2, \\ \xi_h &= y \sin \theta_1 \pm x \cos \theta_1, \end{aligned} \quad (2.45)$$

але координати  $x$  і  $y$  матимуть дещо інше значення (рис. 2.4, б).

Кути  $\theta_1$  і  $\theta_2$  будуть перевизначені:

$$\theta_1 = \arctan \left| \frac{Y_0 + h \sin \varphi}{z - X_0} \right|, \quad \theta_2 = \pi - \arctan \left| \frac{Y_0}{X_0} \right|,$$

а координати  $X_0$  и  $Y_0$  виглядатимуть так:

$$\begin{aligned} X_0 &= \sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \sin(\varphi) + \frac{z}{2}, \\ Y_0 &= -\sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cos(\varphi) - \frac{h \sin(\varphi)}{2}. \end{aligned}$$

Підставивши (2.45) у (2.42), одержимо:

$$y^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \pm x \sin(\theta_1 + \theta_2) y + x^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \frac{1}{4} C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0.$$

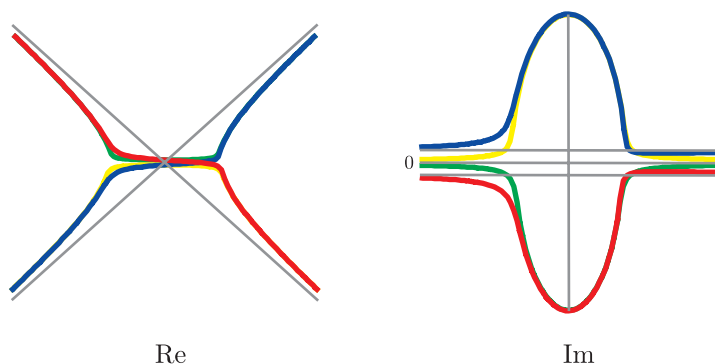


Рис. 2.5. Червона і синя криві — «точний» розв'язок дисперсійного рівняння за формулою (2.39); жовта і зелена — «наближений» за формулою (2.47) ( $\Delta\alpha = 5$  с)

Звідси знайдемо координату  $y$ :

$$y = \frac{\pm x \sin(\theta_1 + \theta_2)}{2 \sin(\theta_1) \sin(\theta_2)} \times \left( \mp \sqrt{x^2 \sin^2(\theta_1 + \theta_2) - \sin \theta_1 \sin \theta_2 (4x^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}})} \right). \quad (2.46)$$

**Порівняння точної дисперсійної кривої з приближеною.** У літературі ([4]) часто використовують наближену формулу для  $y$ , яка в симетричному випадку (при  $\varphi = 0$  на рис.1) має вигляд

$$y = \pm \sqrt{\beta^2 - 4C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}, \quad (2.47)$$

де  $\beta = 2(\alpha - \theta_B) \sin(2\theta_B)$ ,  $\theta_B$  — кут Бреґга.

Як видно з наведених графіків (рис. 2.5), наближений розв'язок непогано відображає поведінку дисперсійної поверхні поблизу кута Бреґга. Проте, як видно з рисунка для дійсних частин хвильових векторів, напрямок вектора Пойнтінга при проходженні через точне бреггівське положення дуже сильно змінюється, що не відповідає дійсності. Крім того, з дисперсійної кривої для уявної частини хвильових векторів видно, що далеко від точного бреггівського положення у наближеному методі поглинання прямує до нуля, а отже, виникає необхідність вносити додатково поглинання при розрахунку кривих гоїдання. Ще один недолік спрощеного підходу — це, як зазначено вище, його незастосовність далеко від бреггівського положення, оскільки тут кола дис-



персійної кривої апроксимуються прямими (асимптоти на графіку для дійсної частини хвильових векторів).

У геометрії Лауе збіг чисельного і наближеного аналітичного методів значно кращий (з точністю до товщини лінії дисперсійної кривої на графіку), а тому застосування цього підходу поблизу кута Брегга, більш виправдано.

Тут і далі  $\text{Re}$  означає дійсну частину, а  $\text{Im}$  — уявну. Всі рисунки проєкції дисперсійної поверхні поблизу точки Лоренца приведені для діапазону кутів падаючої хвилі  $\Delta\alpha = 5^\circ$  (по  $2,5^\circ$  з ліворуч і праворуч від точного кута Брегга), якщо не вказано інше.

**Модельовання різних фізично важливих окремих випадків описаними вище підходами.** Окрім описаних вище методів розв'язку дисперсійних рівнянь, були також реалізовані такі:

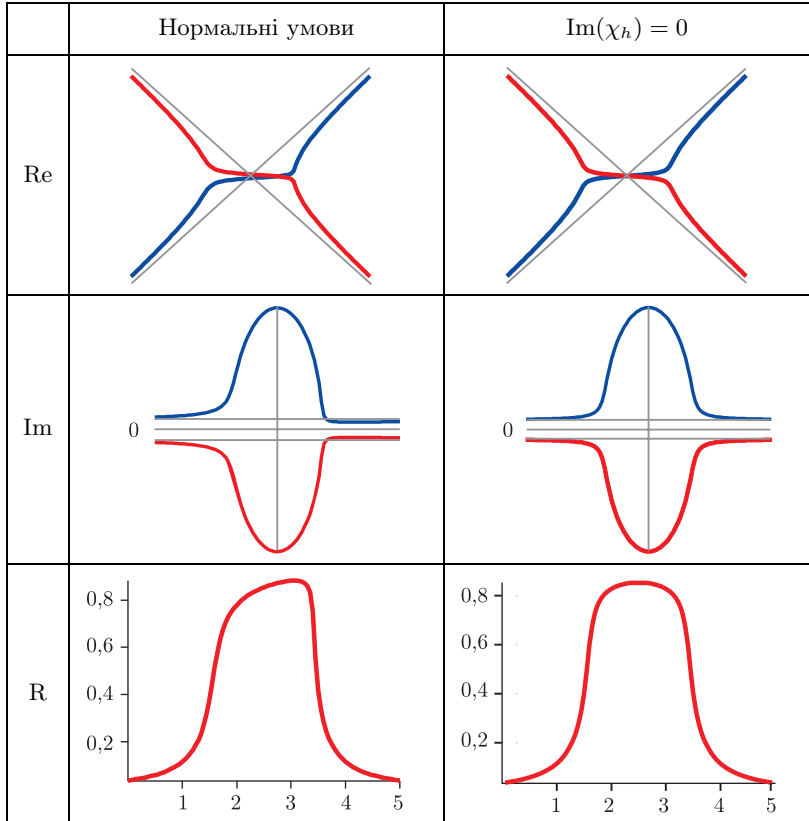
- запропонований у [8] метод, у якому вводиться позначення  $K \cdot \delta \mathbf{n} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{K}_0$  і одержане рівняння 4-го ступеня розв'язується чисельно;
- чисельний розв'язок рівняння для  $\mathbf{D}$  (формула (2.36));
- аналітичні наближені формули Fukamachi [6].

Проте результати застосування першого методу повністю збігалися з розв'язком формули (2.39) — різниця тільки у геометричній інтерпретації (рівняння четвертого ступеня необхідно вирішувати відносно невідомої  $\delta$ , а не  $y$ ). Другий метод з точністю до обумовленої вище заміни (2.37) також зводиться до розв'язку рівняння (2.39). Щодо третього методу, то розрахунок за Fukamachi слабо відрізняється від розв'язку формули (2.44), оскільки при виведенні цього методу були відкинуті квадрати уявної частини хвильових векторів для того, щоб алгебраїчним чином перейти від векторних рівнянь до скалярних на відміну від описаного геометричного підходу.

Порівняння чисельного (2.39) і аналітичного (2.44) розв'язків показує, що поблизу точки Лоренца графіки співпадають з точністю до товщини лінії (у діапазоні кутів падіння в межах одного градуса), проте на відстані декількох градусів від кута Брегга наближений аналітичний підхід (2.44) стає слабо застосовним.

Приведені в табл. 1 графіки розраховано для кристала Si з орієнтацією площин (333) для  $\pi$ -поляризації Cu K $\alpha$  випромінювання в симетричній геометрії Брегга. Корені рівнянь відсортувано з урахуванням вимоги безперервності дисперсійних кривих, що у випадку Брегга призводило до фізичної доцільності формули (2.41) для відбиття від напівнескінченного кристала. У рядках таблиці подано зверху вниз:

Таблиця 1. Геометрія Брегга



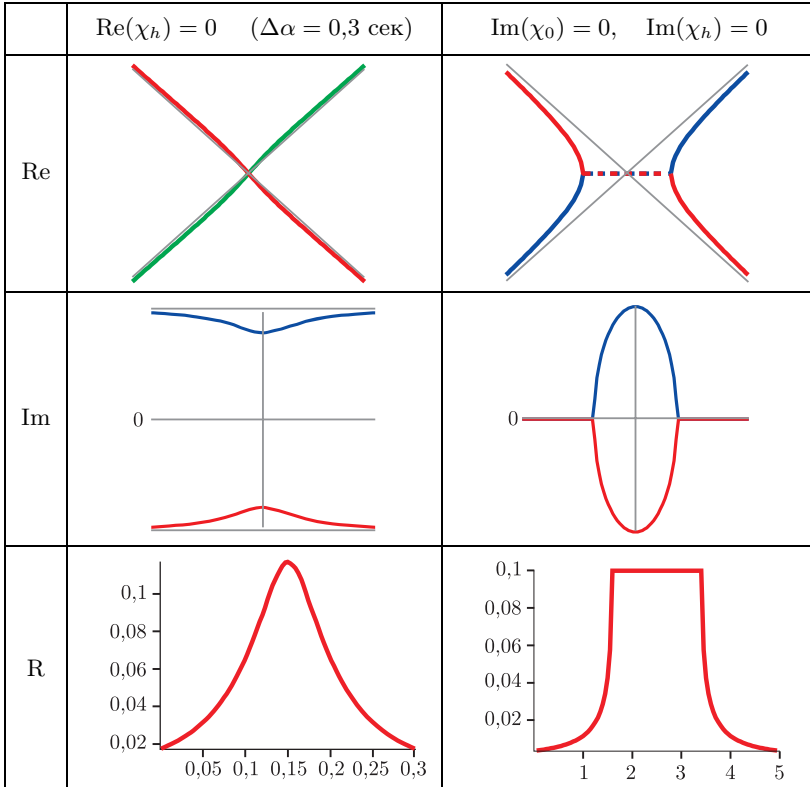
дійсна і уявна частини хвильових векторів поблизу точки Лоренца і коефіцієнт відбиття від напівнескінченного кристала (формула (2.41)).

Як і очікувалося, далеко від точного положення Брегга уявна і дійсна частини хвильових векторів прямують до їх значення в кристалі  $n$  (штрихові прямі на графіках) як у разі однієї сильної хвилі.

У першому стовпчику табл. 1 зображено переріз дисперсійної поверхні площиною дифракції при описаних вище параметрах.

За умови рівності нулю уявної частини  $\chi_h$  (другий стовпчик табл. 1) усі графіки стають строго симетричними, що говорить про те, що асиметрію вносить саме уявна частина  $\chi_h$ .

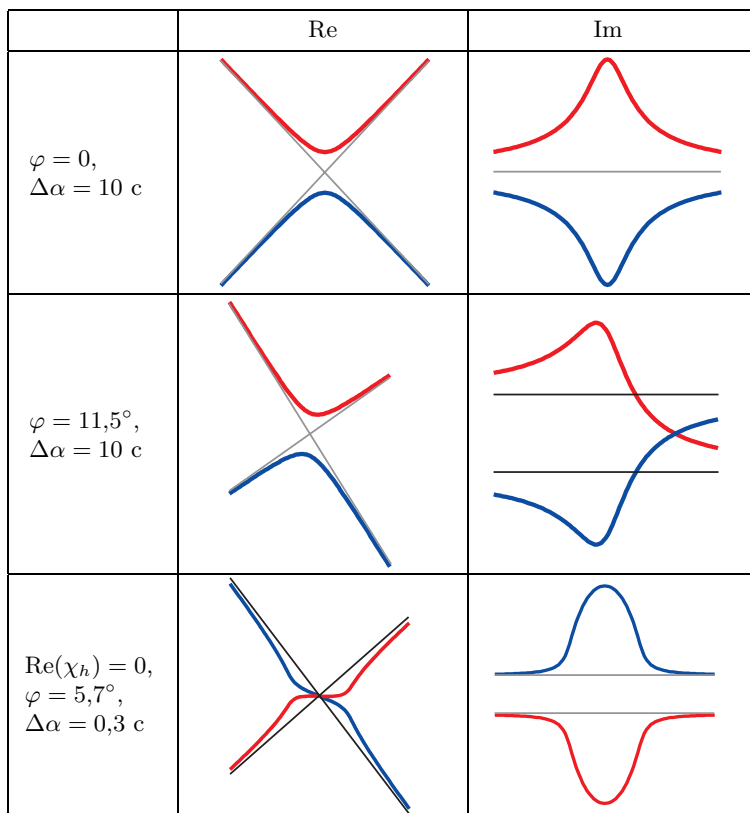
Таблиця 1. Геометрія Брегга (продовження)



Якщо ж дорівнює нулю дійсна частина  $\chi_h$  (перший стовпчик продовження табл. 1), то, як і очікувалося, дифракція на кристалі сильно слабшає, і пік відбиття стає дуже вузьким (останній графік у третьому стовпчику). Крім того, хід дійсної частини дисперсійних кривих у цьому випадку нагадує випадок Лауе (рис. 2.5).

Найцікавіший останній випадок — нулю дорівнюють уявні частини, як  $\chi_0$ , так і  $\chi_h$  (другий стовпчик продовження табл. 1). Саме цей графік для уявної і дійсної частин хвильових векторів у кристалі найчастіше видають за дисперсійну криву. У цих умовах зникають поглинання та асиметрія, і з'являється область повного відбиття. Крім того, тільки в цьому випадку можна говорити про дисперсійну криву

Таблиця 2. Геометрія Лауе



у випадку Брегга як про дві гіперболи (і лише у разі неправильного сортування коренів!) Так само з цих графіків видно, що тільки у разі чисто дійсного дисперсійного рівняння можна говорити про «діаметр» дисперсійної поверхні в геометрії Брегга.

**Порівняння результатів моделювання дифракції в геометрії Брегга і Лауе.** За тих же умов, що і для геометрії Брегга, побудовано дисперсійні криві в геометрії Лауе. У цьому випадку для сортування коренів можна використати цілком фізичну вимогу відсутності стрибка на графіку уявної частини хвильових векторів. Отримані графіки наведено у табл. 2.

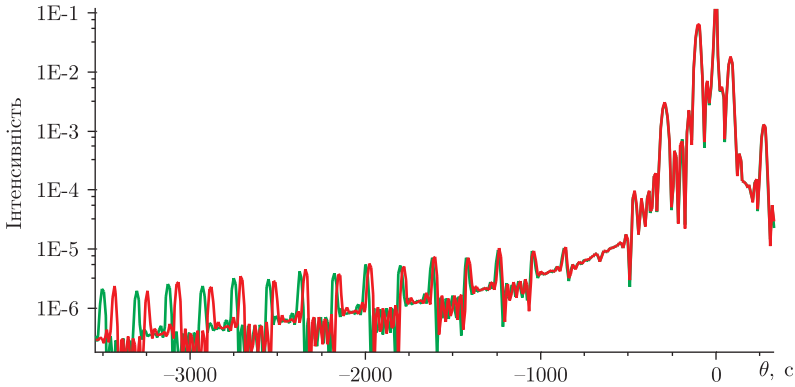


Рис. 2.6. Відбиття 004 від надгратки AlAs/GaAs на GaAs (5 пар шарів по  $5 \cdot 10^{-8}$  м кожен). Зелена крива — чисельний розрахунок, червона — наближений аналітичний

У першому рядку таблиці зображено хід дійсної і уявної частин хвильового вектора в симетричній геометрії Лауе. Як і очікувалося, проекція на площину дифракції дійсної частини являє собою дві гіперболи, асимптотичні до дійсної частини показника заломлення  $n$ . Уявні частини обох хвильових векторів позитивні, що говорить про те, що поглинання позитивне для обох сильних хвильових полів, які виникають у кристалі, але для одного хвильового поля воно більше, а для іншого менше, як і було описано в [29] і [4], (так звані сильно- та слабопоглинаючі гілки).

У разі асиметричної геометрії Лауе (другий рядок табл. 2) ситуація сильно змінюється: поглинання на одній гілці при деякому значенні кута падіння стає більше за поглинання на другій гілці. Це досить цікавий результат, слабо описаний у літературі (подібний графік для уявної частини хвильового вектора приведено в [4], але на цьому факті не акцентовано увагу).

У випадку, коли дійсна частина  $\chi_h$  дорівнює нулю, вигляд дисперсійної кривої (третій рядок табл. 2) практично ідентичний її вигляду в геометрії Бреґґа (табл. 1), проте і тут поглинання для обох гілок залишається позитивним.

**Вплив різних методів знаходження хвильового вектора на вигляд КДВ.** На рис. 2.6 і 2.7 наведено криві дифракційного відбиття від надґраток, змодельовані рекурсивним методом Бартелза та

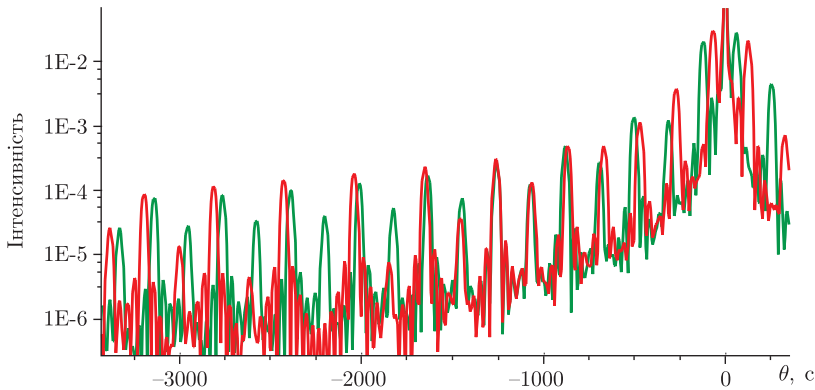


Рис. 2.7. Надгратка InAs/GaAs на GaAs (5 пар шарів по  $5 \cdot 10^{-8}$  м кожен). Зелена крива — чисельний розрахунок, червона — наближений аналітичний

ін. [9] для ідеальних недеформованих шарів. Цей метод досить точний для так званої «звичайної дифракції» плоскої хвилі на кристалі. При виведенні методу не передбачається близькість до точного положення Бреґга [4], суттєвою є тільки умова слабкості ще двох хвильових полів, що існують у кристалі (це несправедливо лише в деяких екзотичних випадках, наприклад, у ковзній геометрії). Звичайно, саме в цих «екзотичних випадках» перевага чисельного методу знаходження хвильових векторів має виявитися особливо явно, однак у рамках цього розділу розглядається тільки так звана «звичайна дифракція».

У наведених на рис. 2.6 та 2.7 КДВ зелена крива відповідає чисельно знайденим хвильовим векторам, а червона — знайденим за наближеною аналітичною формулою (2.47).

Для надграток, що складаються з матеріалів з близькими параметрами ґратки, обидва методи дають досить схожі КДВ поблизу кута Бреґга, проте, як і очікувалося, на кутових віддалях більше ніж  $1^\circ$  від піку підкладки починаються помітні розбіжності (рис. 2.6).

Зовсім інакше відбувається для надграток з різними постійними ґратки. Тут КДВ різняться дуже сильно навіть поблизу піку підкладки. Цей факт пояснюється тим, що X-промені, які падають на кристал під кутами, близькими до кута Бреґга для підкладки, можуть бути далекі від кута Бреґга для конкретних шарів. Це означає, що для шарів з параметром ґратки, який дуже відрізняється від, напри-

клад, підкладки, формула (2.47) і побудований на ній приблизний підхід, не застосовні. На рис. 2.7 зображено криву гойдання для надґратки GaAs/InAs. Кут Бреґга для InAs дорівнює  $30,57^\circ$ , а для GaAs —  $33,03^\circ$ , тобто відрізняються на  $2,5^\circ$ . Крім того, якщо шари InAs тонкі, то необхідно врахувати, що їх постійна ґратки в латеральному напрямі практично дорівнює цьому параметру підкладки з GaAs і відповідно перпендикулярний параметр ґратки (у напрямі нормалі до поверхні) збільшується, а отже, різниця кутів Бреґга в різних шарах може досягти  $5^\circ$ . Очевидно, що на таких великих відстанях від точки Лоренца допущені при виведенні формули (2.47) апроксимації не застосовні, і цей метод не працює. Спроба ввести поправку розузгодження постійних ґратки [4] практично не покращує ситуацію.

**Висновки.** Як і слід було чекати у геометрії Бреґга, перетин дисперсійної поверхні площиною дифракції не є просто поверненими на  $90^\circ$  двома гіперболами, які є дисперсійною кривою у геометрії Лауе. Це впливає хоча б з того, що вектор Пойнтінга для дифрагованої хвилі має, в цілому, зберігати свій напрям під час переходу кута падіння через кут Бреґга, а для двох гіпербол це можливо тільки за наявності стрибка з однієї на іншу, чого в реальності не спостерігається.

Як видно із графіків, у випадку Бреґга поглинання (уявна частина хвильового вектора) для однієї з гілок позитивне (згасання), а для іншої — негативне (посилення). Відповідно для напівнескінченного кристала фізично доцільна тільки перша гілка. У випадку Лауе при симетричній геометрії для однієї з гілок поглинання більше, для іншої менше, але для обох гілок йде згасання. Проте у разі несиметричної геометрії ситуація змінюється: при деяких кутах падіння променя на кристал, сильнопоглинальна і слабопоглинальна гілки міняються місцями, тобто в товстих кристалах залежно від кута падіння на виході буде домінувати одне або інше хвильове поле.

Вплив більш точного чисельного методу знаходження хвильових векторів на вигляд кривої гойдання стає дуже помітним далеко від точного положення Бреґга саме там, де виявляються найцікавіші ефекти, пов'язані з квантовими точками і іншими квантово-розмірними елементами. Крім того, чисельне знаходження хвильових векторів необхідно для аналізу структур, що складаються з матеріалів з параметрами ґратки, що сильно відрізняються.

### 2.3.3. Точний аналітичний розв'язок у двохвильовому випадку

У п. 2.3.2 було показано можливість точного чисельного розв'язку дисперсійного рівняння для випадку двох сильних хвиль (2.20). Однак це дисперсійне рівняння є рівнянням четвертого ступеню (2.39) і може бути розв'язано аналітично за допомогою дещо модернізованого методу Феррарі [52]. Опишемо зміст методу.

Для рівняння четвертого ступеня:

$$x^4 + A_3x^3 + A_2x^2 + A_1x + A_0 = 0 \quad (2.48)$$

вводимо змінні

$$\begin{aligned} p &= A_2 - 3\frac{A_3^2}{8}, & q &= A_1 - \frac{A_2A_3}{2} + \frac{A_3^3}{8}, \\ r &= A_0 - \frac{A_1A_3}{4} + \frac{A_2A_3^2}{16} - 3\frac{A_3^4}{256} \end{aligned} \quad (2.49)$$

та будемо рівняння третього ступеню:

$$y^3 + B_2y^2 + B_1y + B_0 = 0 \quad (2.50)$$

з коефіцієнтами

$$B_0 = q^2, \quad B_1 = p^2 - 4r, \quad B_2 = -2p, \quad B_3 = 1. \quad (2.51)$$

Для розв'язання рівняння 2.50 вводимо змінні

$$\begin{aligned} Q &= \frac{3B_1 - B_2^2}{9}, \\ R &= \frac{9B_1B_2 - 27B_0 - 2A_2^3}{54}, \\ S &= (R + \sqrt{Q * Q * Q + R * R})^{1/3}, \\ T &= (R - \sqrt{Q * Q * Q + R * R})^{1/3}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

тоді розв'язок 2.50 матиме вигляд:

$$\begin{aligned} y_1 &= -\frac{B_2}{3} + (S + T), \\ y_2 &= -\frac{B_2}{3} - \frac{S + T}{2} + i\frac{\sqrt{3}(S - T)}{2}, \\ y_3 &= -\frac{B_2}{3} - \frac{S + T}{2} - i\frac{\sqrt{3}(S - T)}{2}. \end{aligned} \quad (2.53)$$



І розв'язок 2.48 запишемо так:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= -\frac{1}{2}(\sqrt{-y_3} + \sqrt{-y_2} - \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4}, \\
 x_2 &= -\frac{1}{2}(\sqrt{-y_3} - \sqrt{-y_2} + \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4}, \\
 x_3 &= -\frac{1}{2}(-\sqrt{-y_3} + \sqrt{-y_2} + \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4}, \\
 x_4 &= -\frac{1}{2}(-\sqrt{-y_3} - \sqrt{-y_2} - \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4}.
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Таким чином, рівняння (2.39) можна розв'язати аналітично. Звісно, результат не відрізняється від знайденого чисельно за допомогою методу Лагера [49], однак такий розрахунок у декілька разів швидший.

Значимо, що, крім описаного вище методу, було реалізовано та використано ще оригінальний метод Феррарі, описаний у [53], проте результат був, звичайно, тим самим.

### 2.3.4. Чисельний розв'язок у трьох та чотирьохвильовому випадках

На рис. 2.8 наведено схематичну побудову перетину дисперсійної поверхні площиною дифракції в компланарному чотирьохвильовому випадку.

У трихвильовому та чотирьохвильовому випадках дисперсійне рівняння (2.17) являє собою відповідно рівняння шостого та восьмого ступенів. Зрозуміло, що аналітичний розв'язок для таких рівнянь отримати в загальному випадку неможливо, тому це було зроблено чисельно за допомогою того ж методу Лагера [49]. Скориставшись наведеною вище методикою, ці рівняння були отримані в явному вигляді.

Запишемо дисперсійне рівняння для чотирьохвильового випадку (точки оберненого простору  $O$ ,  $H$ ,  $P$ ,  $Q$  на рис. 2.8). Введемо позначення:

$$sx = \sin(\alpha), \quad hhh = 2(\sin \alpha - h \cos \phi),$$

$$ppp = 2(\sin \alpha - h \cos \phi + p \cos \psi),$$

$$qqq = 2(\sin \alpha - h \cos \phi + q \cos \eta),$$

$$doph = h(h - 2 \sin(\alpha - \phi)) + 1 - n_2,$$

$$dopp = h(h - 2 \sin(\alpha - \phi)) + p(p + 2 \sin(\alpha - \psi)) - 2hp \cos(\psi - \phi) + 1 - n_2,$$

$$dopq = h(h - 2 \sin(\alpha - \phi)) + q(q + 2 \sin(\alpha - \eta)) - 2hq \cos(\eta - \phi) + 1 - n_2,$$

де  $n_2 = n^2$ .

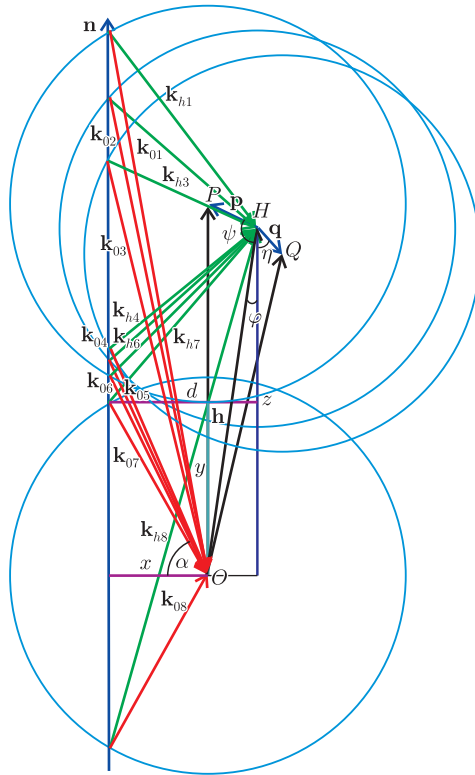


Рис. 2.8. Дисперсійна поверхня в чотиривхвильовому випадку

Тоді коефіцієнти рівняння восьмого ступеня:

$$a_8 x^8 + a_7 x^7 + a_6 x^6 + a_5 x^5 + a_4 x^4 + a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0 \quad (2.55)$$

будуть такі:

$$\begin{aligned} a_0 = & -(1 - n2) \cdot Hqh \cdot Hhq \cdot dopp - (1 - n2) \cdot Hqh \cdot Hhp \cdot Hpq - \\ & -(1 - n2) \cdot Hph \cdot Hhq \cdot Hqp - (1 - n2) \cdot Hph \cdot Hhp \cdot dopq - \\ & -(1 - n2) \cdot doph \cdot Hpq \cdot Hqp + (1 - n2) \cdot doph \cdot dopp \cdot dopq - \\ & - Hh \cdot Hph \cdot H_q \cdot Hqp - Hh \cdot Hqh \cdot H_p \cdot Hpq + \\ & + Hh \cdot H_h \cdot Hpq \cdot Hqp + Hq \cdot Hph \cdot H_q \cdot Hhp - \\ & - Hq \cdot Hph \cdot H_p \cdot Hhq - Hq \cdot H_h \cdot Hhp \cdot Hpq - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -H_p \cdot H_q h \cdot H_q \cdot H h p + H_p \cdot H_q h \cdot H_p \cdot H h q - \\
& -H_p \cdot H_h \cdot H h q \cdot H q p - H h \cdot H_h \cdot d o p p \cdot d o p q - \\
& -H h \cdot H p h \cdot H_p \cdot d o p q - H h \cdot H q h \cdot H_q \cdot d o p p - \\
& -H_p \cdot H_h \cdot H h p \cdot d o p q - H_p \cdot H_p \cdot d o p h \cdot d o p q - \\
& -H_p \cdot H_q \cdot H q p \cdot d o p h - H q \cdot H_h \cdot H h q \cdot d o p p - \\
& -H q \cdot H_p \cdot H p q \cdot d o p h - H q \cdot H_q \cdot d o p h \cdot d o p p; \\
a_1 = & -H q \cdot H_p \cdot H p q \cdot h h h - H q \cdot H_h \cdot H h q \cdot p p p + \\
& + (1 - n 2) \cdot d o p h \cdot d o p p \cdot q q q + ((1 - n 2) \cdot d o p h \cdot p p p + \\
& + ((1 - n 2) \cdot h h h + 2 \cdot s x \cdot d o p h) \cdot d o p p) \cdot d o p q - 2 \cdot H p h \cdot H h q \cdot H q p \cdot s x - \\
& - ((1 - n 2) \cdot h h h + 2 \cdot s x \cdot d o p h) \cdot H p q \cdot H q p - H_p \cdot H_q \cdot H q p \cdot h h h - \\
& - H h \cdot H q h \cdot H_q \cdot p p p - H h \cdot H p h \cdot H_p \cdot q q q - H q \cdot H_q \cdot d o p h \cdot p p p - \\
& - H q \cdot H_q \cdot h h h \cdot d o p p - 2 \cdot H q h \cdot H h p \cdot H p q \cdot s x - \\
& - H_p \cdot H_p \cdot d o p h \cdot q q q - H_p \cdot H_p \cdot h h h \cdot d o p q - \\
& - (1 - n 2) \cdot H p h \cdot H h p \cdot q q q - 2 \cdot H p h \cdot H h p \cdot s x \cdot d o p q - \\
& - H_p \cdot H_h \cdot H h p \cdot q q q - H h \cdot H_h \cdot d o p p \cdot q q q - H h \cdot H_h \cdot p p p \cdot d o p q - \\
& - (1 - n 2) \cdot H q h \cdot H h q \cdot p p p - 2 \cdot H q h \cdot H h q \cdot s x \cdot d o p p; \\
a_2 = & - (1 - n 2) \cdot H q h \cdot H h q - (1 - n 2) \cdot H p h \cdot H h p + \\
& + (1 - n 2) \cdot d o p h \cdot d o p p - H q h \cdot H h q \cdot d o p p - H p h \cdot H h q \cdot H q p + \\
& + ((1 - n 2) \cdot d o p h \cdot p p p + ((1 - n 2) \cdot h h h + 2 \cdot s x \cdot d o p h) \cdot d o p p) \cdot q q q + \\
& + ((1 - n 2) \cdot d o p h + ((1 - n 2) \cdot h h h + 2 \cdot s x \cdot d o p h) \cdot p p p + \\
& + (1 - n 2 + 2 \cdot s x \cdot h h h + d o p h) \cdot d o p p) \cdot d o p q - \\
& - (1 - n 2 + 2 \cdot s x \cdot h h h + d o p h) \cdot H p q \cdot H q p - H q h \cdot H h p \cdot H p q - \\
& - H p h \cdot H h p \cdot d o p q - H h \cdot H p h \cdot H_p - H h \cdot H q h \cdot H_q - \\
& - H_p \cdot H_h \cdot H h p - H_p \cdot H_q \cdot H q p - H q \cdot H_h \cdot H h q - H q \cdot H_p \cdot H p q - \\
& - H h \cdot H_h \cdot d o p q - H h \cdot H_h \cdot p p p \cdot q q q - H h \cdot H_h \cdot d o p p - \\
& - H_p \cdot H_p \cdot d o p q - H_p \cdot H_p \cdot h h h \cdot q q q - H_p \cdot H_p \cdot d o p h - \\
& - H q \cdot H_q \cdot d o p p - H q \cdot H_q \cdot h h h \cdot p p p - H q \cdot H_q \cdot d o p h - \\
& - 2 \cdot H q h \cdot H h q \cdot s x \cdot p p p - 2 \cdot H p h \cdot H h p \cdot s x \cdot q q q; \\
a_3 = & - (2 \cdot s x + h h h) \cdot H p q \cdot H q p - H q \cdot H_q \cdot h h h - H q \cdot H_q \cdot p p p + \\
& + (1 - n 2) \cdot d o p h \cdot p p p + ((1 - n 2) \cdot h h h + 2 \cdot s x \cdot d o p h) \cdot d o p p + \\
& + ((1 - n 2) \cdot d o p h + ((1 - n 2) \cdot h h h + 2 \cdot s x \cdot d o p h) \cdot p p p + \\
& + (1 - n 2 + 2 \cdot s x \cdot h h h + d o p h) \cdot d o p p) \cdot q q q + ((1 - n 2) \cdot h h h + \\
& + 2 \cdot s x \cdot d o p h + (1 - n 2 + 2 \cdot s x \cdot h h h + d o p h) \cdot p p p + \\
& + (2 \cdot s x + h h h) \cdot d o p p) \cdot d o p q - 2 \cdot H p h \cdot H h p \cdot s x - \\
& - H p h \cdot H h p \cdot q q q - H h \cdot H_h \cdot p p p - H h \cdot H_h \cdot q q q - 2 \cdot H q h \cdot H h q \cdot s x -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -Hqh \cdot Hhq \cdot ppp - Hp \cdot Hp \cdot hhh - Hp \cdot Hp \cdot qqg; \\
a_4 = & -Hp \cdot Hp - Hph \cdot Hhp - Hh \cdot Hh - Hqh \cdot Hhq - Hq \cdot Hq - \\
& -Hprq \cdot Hqp + (1 - n2) \cdot doph + ((1 - n2) \cdot hhh + 2 \cdot sx \cdot doph) \cdot ppp + \\
& + (1 - n2 + 2 \cdot sx \cdot hhh + doph) \cdot dopp + ((1 - n2) \cdot hhh + 2 \cdot sx \cdot doph + \\
& + (1 - n2 + 2 \cdot sx \cdot hhh + doph) \cdot ppp + (2 \cdot sx + hhh) \cdot dopp) \cdot qqg + \\
& + (1 - n2 + 2 \cdot sx \cdot hhh + doph + (2 \cdot sx + hhh) \cdot ppp + dopp) \cdot dopq; \\
a_5 = & (1 - n2) \cdot hhh + 2 \cdot sx \cdot doph + (1 - n2 + 2 \cdot sx \cdot hhh + doph) \cdot ppp + \\
& + (2 \cdot sx + hhh) \cdot dopp + (1 - n2 + 2 \cdot sx \cdot hhh + doph + \\
& + (2 \cdot sx + hhh) \cdot ppp + dopp) \cdot qqg + (2 \cdot sx + hhh + ppp) \cdot dopq; \\
a_6 = & 1 - n2 + 2 \cdot sx \cdot hhh + doph + (2 \cdot sx + hhh) \cdot ppp + dopp + \\
& + (2 \cdot sx + hhh + ppp) \cdot qqg + dopq; \\
a_7 = & ppp + qqg + 2 \cdot sx + hhh; \\
a_8 = & 1;
\end{aligned}$$

$Hh$ ,  $Hq$ ,  $Hp$ ,  $Hhq$ ,  $Hprq$ ,  $Hhp$  та інші варіанти — відповідні поляризованості:

$$\begin{aligned}
Hh &= \chi_h; & Hh &= \chi_{\bar{h}}; \\
Hp &= \chi_p; & Hp &= \chi_{\bar{p}}; \\
Hq &= \chi_q; & Hq &= \chi_{\bar{q}}; \\
Hhq &= \chi_{h-q}; & Hqh &= \chi_{q-h}; \\
Hprq &= \chi_{p-q}; & Hqp &= \chi_{q-p}; \\
Hhp &= \chi_{h-p}; & Hph &= \chi_{p-h}.
\end{aligned}$$

Слід відзначити, що для трьох і більше сильних хвиль слід не розкладати вектори дифракції на декартові компоненти, а ввести допоміжну змінну, яка є різницею між нормальними компонентами хвильових векторів у кристалі та вакуумі (див. рис. 2.10):

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h} + K\epsilon\mathbf{n}. \quad (2.56)$$

Необхідність такого кроку пов'язана з кінцевою машинною точністю — навіть використання типу `extended` у мові Pascal (або `long double` в мові C++) не допоможе вже в трихвильовому випадку при виконанні умов дифракції одночасно для всіх хвиль. Відбувається це тому, що поблизу точного положення кута Брегга є три дуже близькі за значенням корені, різниця між якими на багато порядків менша, ніж їх значення. Тобто, якщо в приведених одиницях (2.34) довжина кожного хвильового вектора приблизно дорівнює 1, та проекція  $x$ , що фігурує в

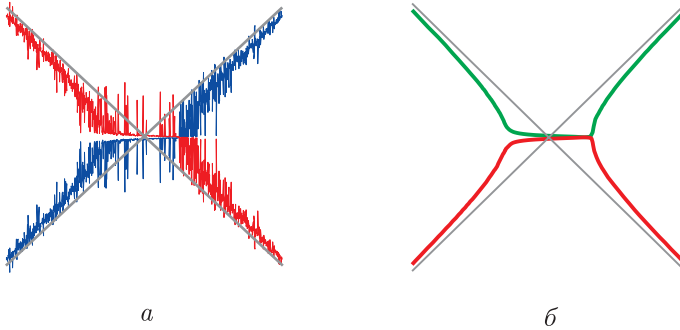


Рис. 2.9. Поганий (а) і правильний (б) розв'язки

(2.55) для звичайних умов дифракції становить від 0,1 до 0,9, то різниця між різними коренями  $x$  при виконанні умови трихвильової дифракції може становити приблизно  $10^{-5}$ . Тому при чисельному розв'язку розрізнити ці корені неможливо. Якщо ж ввести описані вище способом нову змінну  $\varepsilon$ , то проблема зникає, оскільки ця змінна і  $\varepsilon$  різницею між хвильовими векторами (рис. 2.10). Отже, можна зазначити, що в багатохвильовому випадку замість використання параметра  $k/K$  як змінної необхідно використовувати  $(k/K - 1)$ .

На рис. 2.9 показано, що відбудеться, якщо не перейти до нової змінної. Зауважимо, що для уникнення зображених на рисунку проблем було розроблено кілька програм мовою C++ з використанням різних бібліотек для роботи з комплексними числами. Потім замість методу Лаггера було використано метод Дженкінза–Трауба [54] із бібліотеки IMSL [55]. Наступною спробою подолати чисельні проблеми було використання пакета MathLab 6.5. Але всі ці спроби не дозволили покращити розв'язок, і тільки після заміни змінних проблему було усунуто. Результат можна бачити із порівняння зображень на рис. 2.9.

## 2.4. Методи розрахунку динамічної дифракції від багат шарових структур

У цьому параграфі розглянуто найбільш розповсюджені методи розрахунку дифракції рентгенівських хвиль у багат шарових кристалічних структурах за допомогою динамічної теорії дифракції. Зазначимо, що в цьому розділі, на відміну від першого, хвильові вектори мають ви-

гляд  $\mathbf{K} = 2\pi/\lambda$ . Це пов'язано з коротшим записом фазових множників  $\exp(-ikz)$ . Тому вектор оберненої ґратки, введений у першому розділі, потрібно домножити на  $2\pi$ :  $h \rightarrow 2\pi h$ .

### 2.4.1. Метод матриць Абеле

Взаємодію електромагнітних хвиль з речовиною можна описати за допомогою рівнянь Максвелла. Зазвичай спочатку записують і розв'язують рівняння розповсюдження в речовині, а потім застосовують граничні умови на границях структури. Такий метод досить зручний для опису дифракції електромагнітних хвиль у шаруватих структурах — структурах, у яких параметри сталі на кожній площині, перпендикулярній фіксованому напрямку [56].

Щоб перейти від векторних рівнянь Максвелла до скалярних, зазвичай розглядають лінійно поляризовані хвилі ТЕ (електричний вектор є перпендикулярним до площини падіння) або ТМ (магнітний вектор є перпендикулярним до площини падіння). Всі інші випадки можна отримати лінійною комбінацією цих двох [56].

Оскільки граничні умови між шарами являють собою систему лінійних рівнянь, їх досить зручно записувати у матричному вигляді. Саме цей принцип покладено в основу методу матриць Абеле [57, 58]. Матриця кожного шару формується так, щоб при добутку матриць сусідніх шарів отримати єдину матрицю структури, складеної з цих шарів. Звичайно для побудови власної матриці кожного шару використовують величини, знайдені при розв'язку рівняння розповсюдження для цього шару (наприклад, хвильові вектори).

Цей метод широко застосовують для аналізу оптичних явищ. Він також лежить в основі більшості методів моделювання взаємодії  $X$ -променів з шаруватим середовищем, які будуть описані нижче.

### 2.4.2. Одновимірні рівняння Такагі

З усіх описаних нижче алгоритмів метод рівнянь Такагі [59–62] займає окрему позицію — ці рівняння виведено з рівнянь Максвелла за умов припущення повільної зміни амплітуди хвилі та вилучення з розгляду дзеркального відбиття (тобто відкидається друга похідна полів за координатою), а також приблизної рівності  $k_0 \approx k_h \approx k$  (детальніше див. в [1]). Рівняння Такагі у випадку двох сильних хвиль являють собою

систему з двох диференційних рівнянь першого ступеня:

$$\begin{cases} \frac{\partial D_0(\mathbf{r})}{\partial x_0} = -i\pi K C \chi_{\bar{h}} D_h(\mathbf{r}), \\ \frac{\partial D_h(\mathbf{r})}{\partial x_h} = -i\pi K [C \chi_h D_0(\mathbf{r}) - 2\beta_h D_h(\mathbf{r})]. \end{cases} \quad (2.57)$$

При розгляді структур (наприклад, надґратки), властивості яких змінюються лише за однією координатою, цю систему можна звести до одного диференційного рівняння першого ступеня [45]:

$$\frac{dX}{dz} = iG(AX^2 + 2BX + E), \quad (2.58)$$

де  $X = D_h/D_0$  — коефіцієнт дифракції,  $z$  — координата, вздовж якої змінюються параметри структури;  $A, B, E, G$  задані рівняннями:

$$\begin{aligned} A &= -\frac{C\chi_{\bar{h}}}{b}, \\ B &= \frac{1}{2} \left[ \chi_0 \left( \frac{b-1}{b} \right) - \beta_h \right], \\ E &= C\chi_h, \\ G &= -\frac{\pi}{\lambda\gamma_h}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

$b = \gamma_0/\gamma_h$  — фактор асиметрії,  $\chi_0, \chi_h, \chi_{\bar{h}}$  — фур'є-компоненти поляризованості (детальніше див. параграф 2.2), параметри  $\beta_h, \gamma_0$  і  $\gamma_h$  описано в п. 2.3.1. Рівняння (2.58) можна проінтегрувати аналітично [9, 45], тоді на глибині  $z = Z$  від поверхні коефіцієнт дифракції  $X(z, \theta)$  можна виразити через відомий на глибині  $z = Z_0$  коефіцієнт  $X_0 = X(Z_0, \theta)$  так:

$$X(z, \theta) = \frac{X_0 S + i(E + X_0 B) \operatorname{tg}[(z - Z_0)GS]}{S - i(B + X_0 A) \operatorname{tg}[(z - Z_0)GS]}, \quad (2.60)$$

де  $S = \sqrt{B^2 - AE}$ .

Для напівнескінченної підкладки вираз для коефіцієнта дифракції матиме вигляд:

$$X_{\text{sub}}(\theta) = \frac{-E}{B + \{\operatorname{sign}[-2G \operatorname{Im}(S)]\} S}, \quad (2.61)$$

де функції  $\operatorname{Im}()$  — уявна частина, а  $\operatorname{sign}()$  — знак.

Відповідно, застосовуючи рівняння (2.61) для підкладки і послідовно застосовуючи рівняння (2.60), на кожному інтерфейсі між шарами можна легко знайти інтенсивність дифрагованої всією структурою хвилі (для заданого кута падіння  $\theta$ ):

$$\Re_n(\theta) = \frac{1}{|b|} X(0, \theta) X^*(0, \theta). \quad (2.62)$$

де  $X^*(0, \theta)$  — комплексно-спряжене до  $X(0, \theta)$ .

У цьому підході не розглядаються окремо граничні умови на межі між шарами, а просто розв'язуються рівняння залежно від глибини. Тобто в межах одного шару структура не змінюється, тому на відміну від використання стандартних двовимірних рівнянь Такаґі (2.57) можна розрахувати дифракцію тільки на межі шару.

Використовують цей метод таким чином:

- розраховують дифракцію від напівнескінченної підкладки (2.61);
- за рекурентною формулою (2.60) розраховують дифракцію послідовно в кожному шарі аж до поверхні;
- знаходять дифраговану інтенсивність за формулою (2.62).

*Перевага* цього методу полягає у його швидкості, оскільки розрахунки виконують аналітично, і замість знаходження хвильових векторів вводять кутове відхилення  $\Delta\theta$  (див. п. 2.3.1). Крім того, відсутні обмеження на товщину шарів у структурі.

*Недоліки* методу: неможливість застосування для дуже малих кутів падіння (менше  $1^\circ$ ); неможливість врахування дзеркально відбитого променя; некоректне введення поляризаційного множника для  $\pi$ -поляризації; застосовність лише поблизу точного бреггівського кута; напівнескінченна підкладка; використання дуже спрощених рівнянь розповсюдження (відкинуті другі похідні полів) та спрощених граничних умов.

### 2.4.3. Алгоритм матриці проходження (ТМА)

Першим метод матриць Абеле для  $X$ -променів застосував Паррат [63], пізніше цей метод було вдосконалено кількома авторами. Зупинимось на інтерпретації цього методу Степановим [4, 64].

Розглянемо двохвильову дифракцію в шаруватих структурах та плоскополяризовану хвилю. Врахування поляризації відбувається так:



вважаємо, що поляризація променя впливає лише на інтенсивність взаємодії променя зі структурою, тому введемо поляризаційний множник  $C = 1$  для  $\sigma$ -поляризації (ТЕ хвиля в компланарному випадку) та  $C = \cos(2\theta_0)$  для  $\pi$ -поляризації (ТМ хвиля в компланарному випадку). Для проміжних випадків введемо відповідне значення. Домножимо фур'є-компоненти структурного фактора  $\chi_h$  та  $\chi_{\bar{h}}$  на цей фактор, тобто в усіх формулах фігуруватимуть добутки  $C\chi_h$  та  $C\chi_{\bar{h}}$ . Необхідно зазначити, що такий підхід застосовують в усіх описаних методах розрахунку дифракції  $X$ -променів, окрім методу Стецко [41], та алгоритмах, що базуються на цьому методі.

Метод ТМА (Transfer Matrix Algorithm) базується на розв'язку дисперсійного рівняння в кожному шарі (див. параграф 2.3) із відповідно знаходженням усіх векторів хвильових полів падаючої  $k_0^n$  та дифрагованої  $k_h^n$  хвиль ( $n = 1 \dots 4$ ). Розв'язавши хвильове рівняння в шарі з системи рівнянь розповсюдження (детально описано в розділі 2.2), можна знайти відношення амплітуд дифрагованих  $E_h$  хвиль до падаючих  $E_0$  хвиль:  $c^j = E_h/E_0$ . Далі враховуються спрощені граничні умови як для падаючих ( $E_n = E_{0n}$ ) так і для дифрагованих ( $E_n = c_n E_{0n}$ ) хвиль:

$$\sum_{n=1}^4 E_n = \text{const} \quad \sum_{n=1}^4 k_z E_n = \text{const}. \quad (2.63)$$

У матричній формі умова на границі поділу між шарами з номером  $j-1$  та  $j$  може бути записана у вигляді:

$$\mathbf{C}_{j-1} \Phi_{j-1} \mathbf{E}_{j-1} = \mathbf{C}_j \mathbf{E}_j, \quad (2.64)$$

де матриці  $\mathbf{C}_j$  та  $\mathbf{E}_j$  задані:

$$\mathbf{C}_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ k_{01z}^j & k_{02z}^j & k_{03z}^j & k_{04z}^j \\ c_1^j & c_2^j & c_3^j & c_4^j \\ k_{h1z}^j & k_{h2z}^j & k_{h3z}^j & k_{h4z}^j \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_j = \begin{pmatrix} E_{01}^j \\ E_{02}^j \\ E_{03}^j \\ E_{04}^j \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

матриця, що відповідає за поглинання та фазовий зсув  $j$ -м шаром:

$$\Phi_j = \begin{pmatrix} e^{-ik_{01z}^j t_j} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_{01z}^j t_j} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-ik_{01z}^j t_j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_{01z}^j t_j} \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Тут  $E_{0n}^j = E_{0n}(z = z_j)$  відповідають хвилям, що пройшли, виміряним на поверхні  $j$ -го шару, а  $t_j$  — товщина  $j$ -го шару.

Таким чином, для всієї структури можна записати рівняння

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0 &= \Phi_0^{-1} \mathbf{C}_0^{-1} \mathbf{C}_1 \Phi_1^{-1} \mathbf{C}_1^{-1} \mathbf{C}_2 \dots \Phi_{N-1}^{-1} \mathbf{C}_{N-1}^{-1} \mathbf{C}_N \Phi_1^{\text{sub}} \mathbf{E}_{\text{sub}} = \\ &= \mathbf{M} \mathbf{E}_{\text{sub}}, \end{aligned} \quad (2.67)$$

де матриці  $\mathbf{C}_0$  та  $\mathbf{E}_0$  задані:

$$\mathbf{C}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ K_{0z} & K_{Rz} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & K_{hz} & K_{hz} \end{pmatrix} \quad \mathbf{E}_0 = \begin{pmatrix} E_0 \\ E_R \\ E_h \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.68)$$

Індекс 0 — відповідає хвилі, що падає,  $R$  — дзеркально відбитій,  $h$  — дифрагованій. У матриці  $\mathbf{E}_{\text{sub}}$  для напівнескінченної підкладки відмінні від нуля тільки два з чотирьох елементів (ті, що відповідають хвилям, які зменшуються з глибиною [65]). Таким чином, у рівнянні (2.67) матриця  $\mathbf{M}$  повністю задана, а саме рівняння є системою 4-х лінійних рівнянь з чотирма невідомими:  $E_h$ ,  $E_R$ ,  $E_{\text{sub}1}$ ,  $E_{\text{sub}2}$ . Розв'язавши цю систему, можна знайти дифраговану всією структурою хвилю  $E_h$  та дзеркально відбиту  $E_R$ . Відповідно дифраговану та дзеркально відбиту інтенсивності можна зйти за формулами (амплітуда падаючої хвилі  $E_0 = 1$ ):

$$\mathfrak{R}_h = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \left| \frac{E_h}{E_0} \right|^2, \quad \mathfrak{R}_R = \left| \frac{E_R}{E_0} \right|^2. \quad (2.69)$$

Використовують метод таким чином:

- для кожного шару знаходять хвильові вектори  $\mathbf{k}_{0i}$ ,  $\mathbf{k}_{hi}$  та амплітудні коефіцієнти  $c_i$  (див. параграф 2.3); для підкладки залишають ті два корені, які спадають зі збільшенням товщини кристала (докладніше в п. 2.4.11 та в [65]).
- для кожного шару формують матриці  $\mathbf{C}$  та  $\Phi$ ;
- розв'язують систему чотирьох лінійних рівнянь (2.67) і знаходять невідомі  $E_h$ ,  $E_R$ ,  $E_{\text{sub}1}$ ,  $E_{\text{sub}2}$ ;
- за формулами (2.69) знаходять інтенсивності відбитого та дифрагованого променів.

*Недоліки* методу: не може бути застосований для товстих шарів, а для ковзних кутів падіння треба застосовувати з застереженнями (оптичний шлях у шарі повинен бути не дуже великим [66]). Застосовний лише для структур, у яких підкладку можна вважати напівнескінченною. При виводі використовують: спрощене рівняння поширення ( $\chi$  мале) та граничні умови (вектори  $\mathbf{D}$  та  $\mathbf{E}$  в середовищі колінеарні); не враховано багатохвильову дифракцію; некоректно враховано  $\pi$ -поляризацію; метод не можна застосувати для кутів падіння  $90^\circ$  та для  $\pi$ -поляризації  $45^\circ$ ; не може бути використаним дуже далеко від точного кута Вульфа-Брегга (при виведенні використано припущення про малу різницю між векторами  $\mathbf{k}_0$  та  $\mathbf{k}_n$ ).

*Переваги* цього методу: враховує всі хвилі в кристалі, тобто може бути використаним для розрахунку дзеркально відбитої хвилі  $E_R$ .

#### 2.4.4. Рекурентні співвідношення для дифрактометрії

При розгляді компланарної дифракції (всі хвилі лежать в одній площині з нормаллю до поверхні) далеко від критичних кутів, і умові, що дзеркально відбитий промінь не суттєвий, підхід, описаний у попередньому пункті можна значно спростити [4, 51]. Досягають цього відкиданням двох з чотирьох розв'язків дисперсійного рівняння, важливих тільки для дуже малих кутів падаючого або дифрагованого променів. Усі матриці мають розмірність  $2 \times 2$ , і їх можна подати у вигляді рекурентних співвідношень для дифракційної спроможності шарів  $R_j$ :

$$R_j = \frac{R_{j+1}(c_1^j - M_j c_2^j) + c_1^j c_2^j (M_j - 1)}{R_{j+1}(1 - M_j) + c_1^j M_j - c_2^j}, \quad (2.70)$$

де фазовий множник кожного шару

$$M_j = e^{-i(k_{0z1}^j - k_{0z2}^j)t_j}. \quad (2.71)$$

Для підкладки відбивну здатність визначають за формулою:

$$R_{\text{sub}} = R_{N+1} = c_n^{N+1}. \quad (2.72)$$

Для  $n = 1, 2$  обирають фізично коректний розв'язок (для якого хвиля затухає зі збільшенням глибини проникнення), див. п. 2.4.6.

Інтенсивність дифракції від усієї структури запишемо у вигляді:

$$R_{\text{sub}} = \frac{|\gamma h|}{\gamma_0} |R_0|^2. \quad (2.73)$$

Алгоритм застосування цього методу досить простий:

- розраховують хвильові вектори і коефіцієнти  $c_n$  у підкладці (див. параграф 2.3), далі за формулою (2.72) знаходять коефіцієнт дифракції від напівнескінченної підкладки;
- за рекурентною формулою (2.70) розраховують дифракцію по-спідовно в кожному шарі, визначаючи для кожного шару  $k_{0zn}$  та  $c_n$ , як описано в параграфі 2.3, аж до поверхні;
- знаходять дифраговану інтенсивність за формулою (2.73).

Тобто за формулою (2.70) можна досить легко рекурентним способом розрахувати дифрагований від усієї багат шарової структури промінь.

*Недоліки* методу такі самі, як і методу ТМА (п. 2.4.3), крім того, він враховує не всі розв'язки хвильового рівняння, зокрема, дзеркально відбиту хвилю, отже його не можна застосовувати для рефлексів з малим кутом входу чи виходу.

*Переваги*: метод досить швидкий та простий у реалізації. Використовує точно розраховані хвильові вектори, тому може бути використаний далеко від брегівського кута (відсутня лінійна апроксимація — див. п. 2.3.1).

### 2.4.5. Рекурентні співвідношення для рефлектотметрії

Необхідно зазначити, що подібним чином можна спростити підхід, описаний у п. 2.4.3, на випадок урахування тільки дзеркально відбитого променя (детальніше див. [4]).

### 2.4.6. Алгоритм рекурсивних матриць (РМА)

Один з найкращих на сьогодні алгоритмів розрахунку двохвильової дифракції в багат шарових структурах розроблено у 1998 році Степановим та ін. [66–69]. Цей метод базується на описаному в п. 2.4.3 ТМА, проте може бути застосованим для товстих шарів. Досягається

це за допомогою розробленого В.Г. Коном у [70] методу. Розглянемо основну ідею цього підходу.

При розв'язанні дисперсійного рівняння в геометрії Бреґга одна половина хвильових векторів має від'ємну уявну частину, а інша половина — додатну. Оскільки фазовий множник у структурі можна записати як  $e^{ik_z t}$  (товщина  $t$  збільшується в напрямку від'ємних значень  $z$ ), поглинання має вигляд  $e^{-\text{Im}(k_z)t}$ . Тобто хвилі з позитивною уявною частиною зменшуються зі збільшенням глибини, а з від'ємною — збільшуються. Саме корені з  $\text{Im}(k_h) < 0$  призводять до проблем при розрахунках товстих шарів у методах, описаних у пп. 2.4.3 та 2.4.4. Складності виникають, коли добуток  $-\text{Im}(k_z)t$  при збільшенні  $t$  стає значно більшим від одиниці. Необхідно зазначити, що ці проблеми не пов'язані з фізичними обмеженнями, а є лише недоліком чисельних розрахунків, зумовленим кінцевою точністю машинних обчислень (детальніше див. [66]).

Для уникнення описаних проблем корені відсортовують, наприклад, за зменшенням уявної частини, і всі матриці в методі ТМА (розміром  $4 \times 4$ ) розбивають на матриці  $2 \times 2$  так, щоб одна половина фазових матриць  $\Phi_j$ , визначених рівнянням (2.66), мала зростаючі з товщиною дійсні частини, а інша половина — спадаючі. Далі за допомогою деяких перетворень рівняння (2.64) та (2.67) зводять до набору рекурентних співвідношень, до яких всі діагональні матриці, що враховують фазові множники з від'ємною уявною частиною, входять в інвертованій формі.

Детальніше на цьому підході зупинимось у п. 2.4.11.

*Недоліки та переваги* цього методу такі самі, як методу ТМА (п. 2.4.3), окрім застосовності методу РМА для розрахунку дифракції в товстих шарах та для підкладки кінцевої товщини.

### 2.4.7. Багатохвильовий ТМА

Перший метод розрахунку багатохвильової дифракції [7] в багат шарових структурах з урахуванням ковзної геометрії запропонував у 1974 році Колледа [71]. Він увів поляризаційні множники для кожної хвилі і вказав, як їх приблизно визначати. У результаті було розроблено матричний формалізм, за основною ідеєю схожий на метод матриць Абеде з матрицями розміру  $4N \times 4N$ , де  $N$  — кількість хвиль. Однак Колледа в якості змінної ввів параметр  $k/K$  (до чого це призводить було показано в параграфі 2.3), крім того, для ковзної геометрії цей підхід був недостатньо точним [41].

У 1994 році Степанов [72] вдосконалив цей підхід, виправивши зазначені вище недоліки, і переформулював його для матриць розміром  $2 \cdot (N + N_s)$ , де  $N_s$  — кількість хвиль, для яких необхідно враховувати ковзну геометрію. Такий підхід дозволив значно збільшити швидкість розрахунків при великій кількості хвиль, оскільки можна враховувати ковзні хвилі тільки для тих відбиттів, для яких вони суттєво впливають на дифракцію.

Головний недолік методу Степанова — незастосовність для розрахунку дифракції в товстих шарах. Крім того, цей метод має проблеми з точним врахуванням поляризації. Щоб точно задати поляризаційні множники, необхідно знати напрямки дифрагованої хвилі, однак ці напрямки можна знайти, тільки розв'язавши всі рівняння, в яких коефіцієнтами є ті самі поляризаційні множники. Тому зазвичай їх розраховують наближено, потім, знайшовши напрямки дифрагованих хвиль, більш точно визначають множники і процедуру повторюють. Звичайно, це дуже повільний метод і тому для задач, в яких необхідно точне врахування поляризації, краще використовувати метод, описаний у п. 2.4.11.

Саме метод Степанова покладений в основу метода, описаного в наступному пункті. Для подолання проблем з товстими шарами використано запропонований у [70] підхід.

*Недоліки* методу такі самі, як і у двохвильовому ТМА (п. 2.4.3), та невдале врахування поляризації.

*Переваги:* це перший метод, який можна було використовувати для розрахунку багатохвильової дифракції в шаруватих структурах при одночасному впливі на дифракцію великої кількості вузлів оберненої ґратки, а також у ковзній геометрії.

### 2.4.8. Компланарна багатопроменева динамічна теорія

У цьому пункті викладено теорію багатопроменевої дифракції  $X$ -променів у шаруватих структурах [73]. В основу покладено роботи [7, 71], присвячені багатопроменевої дифракції в одношарових структурах, а також [65, 70, 72]. Роботи Кона і Степанова враховано і при розв'язанні проблем з товстими шарами [70], і у ковзній геометрії [66]. Деякі корисні думки щодо розв'язування дисперсійного рівняння записано з [50]. Крім того, для збільшення точності і розширення кутового діапазону хвильові вектори в середовищі знаходились чисельно [43].

Оскільки досить часто зустрічається компланарна багатопроменева дифракція  $X$ -променів [7], розглянуто було саме цей випадок. Разом з тим, розгляд дозволяє у декілька разів зменшити час обчислень, що особливо важливо у разі автоматизованого фітування спектрів.

У цьому пункті описано динамічну теорію взаємодії  $X$ -хвиль із речовиною для випадку, коли у формуванні дифракційної картини беруть участь одночасно декілька точок оберненої ґратки. Ця теорія відрізняється від розроблених раніше за такими позиціями:

- коректна інтерпретація експерименту у ковзній геометрії;
- розв'язано проблему нескінченно зростаючих у деякому кутовому діапазоні експонент (проблему товстих шарів [70]);
- для розв'язання дисперсійного рівняння введено змінну, використання якої дозволяє уникнути похибок, що виникають при розрахунку дифракції від великої кількості вузлів оберненої ґратки;
- зменшено розмір матриць, які описують граничні умови, чим збільшено швидкість розрахунку;
- розв'язок поширено на кутовий діапазон, далекий від точного положення Бреґга;
- задачу розв'язано з наступними спрощеннями: наближення плоских хвиль, що проходять крізь кристал, компланарна геометрія і наявність лише  $\sigma$ -поляризації випромінювання.

**Дисперсійне рівняння.** Перепишемо рівняння розповсюдження (2.15) у спрощеному вигляді [1]:

$$\frac{|k_h|^2 \mathbf{E}_h - K^2 \mathbf{E}_h}{K^2} \approx \sum_p \chi_{h-p} \mathbf{E}_p, \quad (2.74)$$

де  $K = \omega/c = 2\pi/\lambda$  — довжина хвильового вектора у вакуумі,  $k = nK$  — довжина хвильового вектора в середовищі з коефіцієнтом заломлення  $n \approx \sqrt{1 + \chi_0}$ .

Перейдемо до зведених координат:

$$\frac{k_h}{K} \rightarrow k_h, \quad \frac{h}{K} \rightarrow h, \quad (2.75)$$

де  $h$  — довжина вектора оберненої ґратки.

Якщо взяти до уваги, що насправді в кристалі може існувати нескінченна кількість хвильових полів, з яких  $N$  хвиль можуть виявитися досить сильними, то амплітуда хвилі в точці, яка описується радіус-вектором  $\mathbf{r}$ , дорівнюватиме

$$E(\mathbf{r}) = \sum_{h=0}^{N-1} E_h \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}).$$

Тоді рівняння (2.74) у компланарному випадку запишемо так:

$$(k_h^2 - n^2)E_h = \sum_{p \neq h} \chi_{h-p} E_p. \quad (2.76)$$

Розділивши (2.76) на амплітуду падаючої хвилі і записавши у матричному вигляді, одержимо

$$\Delta_E E = 0, \quad (2.77)$$

де

$$\Delta_E = \begin{pmatrix} k_0^2 - n^2 & -\chi_{0,-1} & -\chi_{0,-2} & \dots & -\chi_{0,-(N-1)} \\ -\chi_{1,0} & k_1^2 - n^2 & -\chi_{1,-2} & \dots & -\chi_{1,-(N-1)} \\ -\chi_{2,0} & -\chi_{2,-1} & k_2^2 - n^2 & \dots & -\chi_{2,-(N-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\chi_{N-1,0} & -\chi_{N-1,-1} & -\chi_{N-1,-2} & \dots & k_{N-1}^2 - n^2 \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

та

$$E = \begin{pmatrix} 1 \\ c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (2.79)$$

коефіцієнти  $c_i = E_h^i / E_0^i$ .

Відповідно дисперсійне рівняння у загальному випадку має вигляд:

$$\Delta_E = 0. \quad (2.80)$$

Шукати хвильові вектори у тій формі, в якій вони фігурують у  $\Delta_E$ , досить незручно: знайшовши їх довжину, необхідно окремо шукати напрямок. Тому скористаємося тим фактом, що при заломленні тангенціальна компонента хвильового вектора зберігає довжину, і введемо величину  $\varepsilon$ , яка характеризує різницю нормальних компонент хвильових векторів у середовищі  $k_h$  і у вакуумі  $K$  (рис. 2.10).



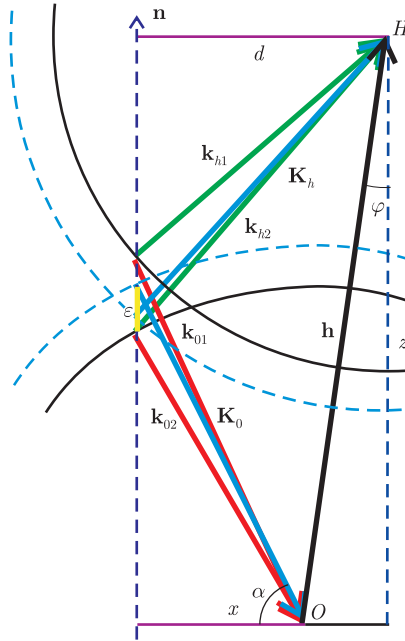


Рис. 2.10. Дисперсійна поверхня в двохвильовому випадку

Тоді  $\mathbf{k}_h$  запишеться як

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h} + K\varepsilon\mathbf{n}, \quad (2.81)$$

де  $\mathbf{h}$  — відповідний вектор дифракції,  $\mathbf{K}_0$  — хвильовий вектор падаючої хвилі,  $\mathbf{n}$  — вектор нормалі. Очевидно, що для нульового хвильового поля  $\mathbf{h} = 0$  і  $\mathbf{k}_0 = \mathbf{K}_0 + K\varepsilon\mathbf{n}$ .

Враховуючи введене позначення і прийняте раніше (2.75) нормування, одержуємо

$$\begin{aligned} k_h^2 &= (\mathbf{S}_0 + \mathbf{h} + \varepsilon\mathbf{n})(\mathbf{S}_0 + \mathbf{h} + \varepsilon\mathbf{n}) = \\ &= 1 + 2(\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{h}) + 2\varepsilon(\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{n}) + 2\varepsilon(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) + h^2 + \varepsilon^2, \end{aligned} \quad (2.82)$$

де  $\mathbf{S}_0$  — орт уздовж  $\mathbf{K}_0$ ,  $\mathbf{S}_0 \equiv \mathbf{K}_0/K$ . Очевидно, що

$$(\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{n}) = \cos(90^\circ + \alpha) = -\sin \alpha,$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{h}) &= h \cos(\alpha + 90^\circ - \varphi) = -h \sin(\alpha - \varphi), \\(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}) &= h \cdot \cos \varphi,\end{aligned}$$

де  $\alpha$  — кут між падаючим променем і поверхнею,  $\varphi$  — між вектором  $\mathbf{h}$  і нормаллю до поверхні.

Отже,

$$\begin{aligned}k_0^2 &= \varepsilon^2 + 1 - 2\varepsilon \sin \alpha, \\k_h^2 &= \varepsilon^2 + 1 + h^2 - 2\varepsilon \sin \alpha - 2h \sin(\alpha - \varphi) + 2\varepsilon h \cos \varphi.\end{aligned}$$

І шукані величини набувають вигляду

$$\begin{aligned}k_0^2 - n^2 &= \varepsilon^2 - 2\varepsilon \sin \alpha + (1 - n^2), \\k_h^2 - n^2 &= \varepsilon^2 + 2(h \cos \varphi - \sin \alpha)\varepsilon + (1 - n^2) + h(h - 2 \sin(\alpha - \varphi)).\end{aligned}$$

Тоді дисперсійне рівняння (2.80) записується так:

$$\begin{aligned}\Delta_E &= \varepsilon^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} -2 \sin \alpha & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2(h_1 \cos \varphi_1 - \sin \alpha) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 2(h_N \cos \varphi_N - \sin \alpha) \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} 1 - n^2 & -\chi_{0,-1} & \dots & -\chi_{0,-(N-1)} \\ -\chi_{1,0} & 1 - n^2 + h_1(h_1 - 2 \sin(\alpha - \varphi_1)) & \dots & -\chi_{1,-(N-1)} \\ -\chi_{2,0} & -\chi_{2,-1} & \dots & -\chi_{2,-(N-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\chi_{N-1,0} & -\chi_{N-1,-1} & \dots & 1 - n^2 + h_N(h_N - 2 \sin(\alpha - \varphi_N)) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.83)\end{aligned}$$

Або у відповідних позначеннях

$$\Delta_E = \varepsilon^2 I + \varepsilon A + B, \quad (2.84)$$

де  $I$  — одинична матриця,  $A$  і  $B$  — відповідні матриці з (2.83):

$$\begin{aligned}A &= \{\delta_{ij} 2(h_i \cos \varphi_i - \sin \alpha)\}, \\ B &= \begin{cases} i = j : & 1 - n^2 + h_i(h_i - 2 \sin(\alpha - \varphi_i)), \\ i \neq j : & -\chi_{i,-j}, \end{cases}\end{aligned}$$

причому  $h_0 \equiv 0$ ,  $\varphi_0 \equiv 0$ ,  $j, i = 0, \dots, N - 1$ ;  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера.

Підставляючи (2.84) в (2.77), маємо

$$\varepsilon^2 IE + \varepsilon AE = \varepsilon(\varepsilon IE + AE) = -BE \quad (2.85)$$

і, ввівши позначення

$$\varepsilon IE \equiv E_S, \quad (2.86)$$

перепишемо (2.85) у вигляді

$$\varepsilon(E_S + AE) = -BE. \quad (2.87)$$

Об'єднуючи рівняння (2.86) і (2.87), одержуємо

$$\begin{pmatrix} -B & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ D_S \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} A & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ D_S \end{pmatrix}. \quad (2.88)$$

Рівняння (2.88) є узагальненою проблемою власних значень  $\varepsilon$  і розв'язується за допомогою стандартних алгоритмів (наприклад, функціями, що входять у бібліотеки NAG або IMSL [55], або програмами, наведеними на [www.srcc.msu.su](http://www.srcc.msu.su)).

Розв'язками цього рівняння є  $2N$  власних значень  $\varepsilon$  і  $N \times 2N$  значень власних векторів, які є амплітудами хвиль усіх хвильових полів. Проте ці хвильові вектори необхідно нормувати, розділивши кожний з  $N$  стовпчиків на перше в стовпчику значення, яке відповідає падаючій хвилі і має дорівнювати одиниці. Далі необхідно визначити  $N \times 2N$  нормальних компонент хвильових векторів:

$$k_{hz} = \mathbf{k}_h \cdot (-\mathbf{n}) = \sin \alpha - \varepsilon - h_i \cos \varphi_i. \quad (2.89)$$

Таким чином, задача визначення хвильових полів у даній речовині розв'язана. Тепер знайдемо точні значення хвильових полів і поширимо цю задачу на структуру, що складається з  $M$  плоскопаралельних шарів, надгратку. Для цього необхідно записати граничні умови.

**Застосування граничних умов.** Граничними умовами для електромагнітних хвиль є неперервність тангенціальної (паралельної поверхні) компоненти електричного  $\mathbf{E}$  і магнітного  $\mathbf{H}$  полів. З цього одержимо умови на кожному інтерфейсі [1]:

$$\sum_{n=0}^{2N-1} c_n E_{0n} = \text{const}, \quad \sum_{n=0}^{2N-1} c_n k_{zn} E_{0n} = \text{const}, \quad (2.90)$$

де  $c_n$  — шукані коефіцієнти,  $k_{zn}$  — нормальні компоненти хвильових векторів.

Записавши умови (2.90) і врахувавши ослаблення внаслідок поглинання хвилі, що проходить через  $m$ -й шар, одержимо для інтерфейсу

$$S_m F_m E_m = S_{m+1} E_{m+1}, \quad (2.91)$$

тут  $E_m$  — вектор-стовпчик амплітуд напруженостей у  $m$ -му шарі,

$$S_m = \begin{pmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & \dots & c_{0,2N-1} \\ c_{1,0} & c_{1,1} & \dots & c_{1,2N-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{N-1,0} & c_{N-1,1} & \dots & c_{N-1,2N-1} \\ c_{0,0}k_{z0,0} & c_{0,1}k_{z0,1} & \dots & c_{0,2N-1}k_{z0,2N-1} \\ c_{1,0}k_{z1,0} & c_{1,1}k_{z1,1} & \dots & c_{1,2N-1}k_{z1,2N-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{N-1,0}k_{zN-1,0} & c_{N-1,1}k_{zN-1,1} & \dots & c_{N-1,2N-1}k_{zN-1,2N-1} \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

і

$$F_m = \delta_{ij} \exp(-ik_{0z}^j K t_m), \quad (2.93)$$

$t_m$  — товщина шару;  $k_{0z}^j$  —  $2N$  розв'язків дисперсійного рівняння (перший рядок матриці  $k_z$ ), що відповідають падаючій хвилі.

Для знаходження значень амплітуд хвиль у всій структурі необхідно розв'язати таке матричне рівняння:

$$E'_0 = S_0^{-1} S_1 F_1 S_1^{-1} S_2 F_2 \dots S_{M-1}^{-1} S_M \Phi_M^{(U)} E_M, \quad (2.94)$$

де  $M$  — кількість шарів (0 — відповідає повітрю,  $M$  — підкладці);  $\Phi_m^{(U,L)} = \delta_{ij} \exp(ik_{0z}^j K z_m^{(U,L)})$ ;  $z_m^{(U,L)}$  — глибина залягання верхньої ( $U$ ) і нижньої ( $L$ ) поверхонь  $m$ -го шару;  $E'_0$  — амплітуди напруженостей у повітрі;  $S_0$  — граничні умови на поверхні структури, які для випадку Бреґґа записуються так

$$S_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ K_{z0} & 0 & \dots & 0 & -K_{z0} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & K_{z1} & \dots & 0 & 0 & -K_{z1} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & K_{zN} & 0 & 0 & \dots & -K_{zN} \end{pmatrix}, \quad (2.95)$$

$$E'_0 = \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ E_R \\ E_1 \\ \dots \\ E_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (2.96)$$

де  $E_0$  — амплітуда падаючої хвилі (зазвичай, приймається рівною одиниці);  $E_R$  — відбита від поверхні хвиля;  $E_1, \dots, E_{N-1}$  — дифраговані хвилі;  $K_{z0} \equiv \gamma_0 = \sin \alpha$ ,  $K_{zh} \equiv -\gamma_h = \sqrt{1 - (\cos \alpha - h \sin \varphi)^2}$ .

Розв'язок рівняння (2.94) призводить до великих похибок у ковзній геометрії і у товстих шарах, оскільки матриця  $F_m$  містить рівну кількість зростаючих і спадаючих експонент (одна половина коренів дисперсійного рівняння має від'ємну уявну частину, а інша половина — додатну). Тому скористаємося підходом, запропонованим у роботі [70].

По-перше, відсортуємо корені дисперсійного рівняння за зменшенням уявної частини, тобто за першим рядком відповідних матриць  $C_n$  і  $k_z$ . По-друге, введемо ренормалізацію

$$E_m \equiv \Phi_m^L E_m, \quad (2.97)$$

де  $\Phi_m^L$  — фаза хвилі на нижній межі  $m$ -го шару.

Розглянемо матрицю

$$X_m = \begin{pmatrix} X^{tt} & X^{tr} \\ X^{rt} & X^{rr} \end{pmatrix} = S_{m-1}^{-1} S_m. \quad (2.98)$$

Тоді рівняння (2.91) можна записати у вигляді

$$E_m = X_{m+1} F_{m+1} E_{m+1}. \quad (2.99)$$

Враховуючи введене нами сортування коренів, перші  $N$  елементів матриці  $E_m$  відповідають падаючим хвилям, а інші  $N$  елементів — відбитим (або дифрагованим) хвилям, Тобто  $E_m = \begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix}$ , наприклад, для повітря  $T_0 = (E_0 \ 0 \ 0 \dots 0)$  і  $R_0 = (E_R \ E_1 \ E_2 \dots E_{N-1})$ . Тоді (2.99) виглядатиме так:

$$\begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{tt} & X^{tr} \\ X^{rt} & X^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_+ & 0 \\ 0 & F_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{m+1} \\ R_{m+1} \end{pmatrix}, \quad (2.100)$$

де  $F_+$  і  $F_-$  — діагональні матриці розміром  $N \times N$  вигляду (2.93), що містять зростаючі і спадаючі експоненти відповідно.

Далі введемо такі матриці:

$$\begin{aligned} M^{tt} &= (F_+)^{-1} (X^{tt})^{-1}, \\ M^{tr} &= -M^{tt} X^{tr} F, \\ M^{tr} &= X^{rt} (X^{tt})^{-1}, \end{aligned} \quad (2.101)$$

$$M^{rr} = (X^{rr} - M^{rt}X^{tr})F_-$$

і перепишемо (2.100) у вигляді

$$\begin{pmatrix} T_{m+1} \\ R_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{tt} & M^{tr} \\ M^{rt} & M^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_m \\ R_{m+1} \end{pmatrix}. \quad (2.102)$$

Ввівши матриці

$$\begin{aligned} W_m^{tt} &= A_m W_{m-1}^{tt}, \\ W_m^{tr} &= M_m^{tr} + A_m W_{m-1}^{tr} M_m^{rr}, \\ W_m^{rt} &= W_m^{rt} + B_m M_m^{rt} W_{m-1}^{tt}, \\ W_m^{rr} &= B_m M_m^{rr}, \\ A_m &= M_m^{tt} (1 - W_{m-1}^{tr} M_m^{rt})^{-1}, \\ B_m &= W_{m-1}^{rr} (1 - M_m^{rt} W_{m-1}^{rt})^{-1}, \end{aligned} \quad (2.103)$$

одержимо

$$\begin{pmatrix} T_m \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W^{tt} & W^{tr} \\ W^{rt} & W^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ R_m \end{pmatrix}. \quad (2.104)$$

Як наслідок, відбиття від кристала виражатиметься матричним рівнянням:

$$R_0 = W_M^{rt} T_0. \quad (2.105)$$

**Процедура розв'язання.** Для отримання інтенсивності дифрагованих на багатошаровій структурі  $X$ -хвиль необхідно виконати такі дії:

- із знайденої для попереднього шару матриці  $S_{m-1}$  знаходимо  $S_{m-1}^{-1}$  (для повітря  $S_0$  задана рівнянням (2.95));
- розв'язуємо дисперсійне рівняння (2.89), знаходимо матриці  $k_{hz}$  і  $c_n$  для  $m$ -го шару і сортуємо їх рядки за зменшенням уявної частини  $k_{hz}$ ;
- будуємо матрицю  $S_m$ ;
- знаходимо  $X_m = S_{m-1}^{-1} S_m$ ;
- будуємо матрицю  $F_-$  для перших  $N$  коренів і  $F_+^{-1}$  для решти;
- обчислюємо матриці  $M_m$ ;
- знаходимо рекурсивно  $W_m$ , причому для повітря  $W_0^{tt} = I$ ,  $W_0^{rr} = I$ ,  $W_0^{rt} = 0$ ,  $W_0^{tr} = 0$  і для першого шару  $W_1^{tt} = M_1^{tt}$ ,  $W_1^{tr} = M_1^{tr}$ ,  $W_1^{rt} = M_1^{rt}$ ,  $W_1^{rr} = M_1^{rr}$ ;

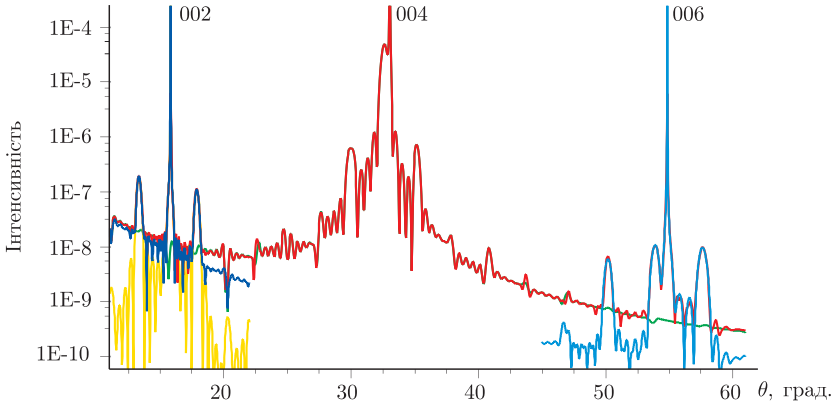


Рис. 2.11. Приклад ширококутової дифракції від надгратки (рефлекси зліва направо 002, 004, 006). Зелена крива — багатопроменева теорія з урахуванням відбитого променя, інші криві — звичайна двопроменева поблизу відповідного рефлексу

- знаходимо коефіцієнт дифракції від досліджуваної структури

$$R_0 = \begin{pmatrix} E_R \\ E_1 \\ E_2 \\ \dots \\ E_{N-1} \end{pmatrix} = W_N^{rt} \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix},$$

тобто  $E_R = W_N^{rt}[0][0]$ ,  $E_{hi} = W[i + 1][0]$ ;

- знаходимо інтенсивність  $\mathfrak{R} = (|\gamma_h|/\gamma_0)|R|^2$ ;
- виводимо залежність інтенсивності від кута падіння.

На рис. 2.11 зображено так звану ширококутну дифракцію  $X$ -променів на шаруватій структурі. У дифракції беруть участь чотири вузли оберненої ґратки: 000, 002, 004, 006.

### 2.4.9. Розрахунок некомпланарної багатохвильової дифракції в паралельній платівці

Найкращий на сьогоднішній день підхід для розв'язання задачі динамічної дифракції рентгенівських хвиль у кристалі запропонували в 1997 році Стецко і Чен [41, 74]. Хоча цей метод розраховує дифракцію

в паралельній платівці, а не в багатошаровій структурі, саме на ньому базується найкращий на сьогодні метод розрахунку багатохвильової дифракції в шаруватих структурах (див. п. 2.4.11). Метод Стецька базується на розкладі векторних рівнянь розповсюдження (2.10) на проєкції на вісі декартової системи координат. Таким чином, розв'язується задача для багатопроменевої дифракції з мінімальною кількістю допущень.

Цей метод дозволяє розрахувати дифракцію в паралельній платівці невеликої товщини. Насправді в статті вказано шлях застосування цього методу для товстих платівок, але він помилковий.

Саме цей метод покладено в основу розробленого оригінального алгоритму, який наведено у п. 2.4.11. Тому детальніший опис цього методу приведено у відповідному розділі.

*Переваги:* може бути застосований для довільних кутів та довільної геометрії (Брегга, Лауе); враховує довільну кількість хвиль; коректно враховує довільну поляризацію.

*Недоліки:* не може бути використаним для товстих шарів та для розрахунку дифракції в багатошарових структурах. Досить повільний, оскільки розраховує всі хвилі ( $4N$ , тобто для дво-променевої дифракції 8 хвиль).

Слід зазначити, що Катіча [75, 76] розвивав альтернативну методику моделювання багатохвильової дифракції: він запропонував модель, яка розглядає двоххвильову дифракцію в яку «внесено» вплив додаткових вузлів оберненої ґратки через додаткові доданки у виразі для поляризованості. Такий підхід базується на припущенні, що всі додаткові вузли впливають на дифракцію слабше, ніж основні два. Крім того, Катіча розробив формалізм тільки для симетричної дифракції. З огляду на всі зазначені припущення, цей підхід в монографії описано не буде.

#### 2.4.10. Розрахунок некомпланарної багатохвильової дифракції в багатошаровій структурі

Один з найкращих методів для розв'язання задачі багатопроменевої дифракції рентгенівських хвиль у багатошаровій структурі наведено Суворовим та іншими [77] у 2004 році. Цей метод виправляє недоліки методу Стецька [41] і дозволяє розраховувати шаруваті структури з довільною товщиною шарів. Досить схожий за основними принципами метод, який, однак, позбавлено деяких недоліків і розроблено паралельно з методом Суворова, наведено в наступному пункті.



До *недоліків* цього методу можна віднести його незастосовність для розв'язання задачі дифракції в частково релаксованій структурі або в структурі, деякі шари якої мають локальну розорієнтацію вектора оберненої ґратки. Крім того, у цьому алгоритмі є деякі помилки в урахуванні фазових множників, що робить метод незастосовним для аналізу тонких шарів (десятки нанометрів чи менше).

*Переваги* методу такі самі як і в методі, описаному в п. 2.4.11, за винятком перелічених вище недоліків.

### 2.4.11. Багатопрореневий некомпланарний RMA

У роботі [41] розроблено алгоритм розрахунку некомпланарної багатохвильової дифракції в паралельній пластинці, а в [77] цей підхід поширено на випадок багат шарової структури. Ми пропонуємо альтернативний алгоритм розрахунку [81], схожий у ключових моментах, проте виведений незалежно, справедливий не тільки для повністю напруженої структури і такий, що не містить у собі помилок при інтерпретації фазових множників.

Основні властивості запропонованого методу:

- розглядаються плоскі хвилі;
- рівняння розповсюдження і граничні умови розв'язуються без спрощень;
- будь-яка геометрія (Брегга, Лауе, Брегга–Лауе);
- 3D моделювання в зворотному просторі і 1D в прямому;
- весь можливий кутовий діапазон;
- точний розрахунок будь-якої поляризації і інформація про поляризацію променів, що дифрагували;
- немає принципів обмежень на кількість точок зворотного простору, що беруть участь у дифракції;
- немає обмежень на товщини шарів;
- всі розрахунки проводяться для  $x$ -,  $y$ -,  $z$ -компонент хвильових векторів, векторів дифракції і полів

**Розв'язок дисперсійного рівняння.** Рівняння розповсюдження для векторів напруженості електричного поля в періодичному середовищі для  $N$  точок зворотного простору (2.15) необхідно звести до

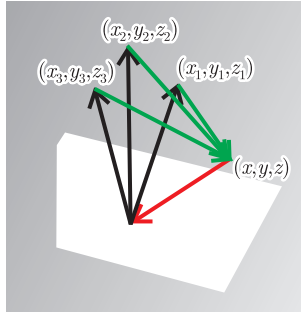


Рис. 2.12. Вектори дифракції (чорним), падаючий хвильовий вектор (червоним) та дифраговані хвильові вектори (зеленим). Поверхня зразка — білим

системи скалярних рівнянь. Для цього подамо всі вектори у декартовій системі координат:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{h_n} &= (X_n - x)\mathbf{i} + (Y_n - y)\mathbf{j} + (Z_n - z)\mathbf{k} = \\ &= x_n\mathbf{i} + y_n\mathbf{j} + (Z_n - z)\mathbf{k}, \end{aligned} \quad (2.106)$$

$$\mathbf{E}_{h_n} = E_n^x\mathbf{i} + E_n^y\mathbf{j} + E_n^z\mathbf{k},$$

де  $X_n, Y_n, Z_n$  — координати точок зворотного простору, а  $x, y, z$  — координати початків хвильових векторів (рис. 2.12).

Тоді рівняння (2.15) прийме вигляд:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}^2 + \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{A}\mathbf{B} & -\mathbf{A}\mathbf{H} \\ -\mathbf{A}\mathbf{B} & \mathbf{H}^2 + \mathbf{A}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{B}\mathbf{H} \\ -\mathbf{A}\mathbf{H} & -\mathbf{B}\mathbf{H} & \mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_x \\ \mathbf{E}_y \\ \mathbf{E}_z \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (2.107)$$

тут матриці розміром  $N \times N$ :  $\mathbf{I} = \{\delta_{nm}\}$ ,  $\mathbf{A} = \{\delta_{nm}x_n\}$ ,  $\mathbf{B} = \{\delta_{nm}y_n\}$ ,  $\mathbf{C} = \{\delta_{nm}Z_n\}$ ,  $\mathbf{X} = \{\chi_{h_n - h_m}\}$ ,  $\mathbf{G} = (\mathbf{I} + \mathbf{X})$  та  $\delta_{nm}$  — дельта-функція. Поляризованість  $\chi_{h_n - h_m}$  розраховувалась методом [82], детально описаним у п. 2.4.13. Матриці  $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$  — вектор-стовпчики розміром  $1 \times N$  напруженостей електричного поля, типу:  $\mathbf{E}_x = (E_0^x, E_1^x, \dots, E_{N-1}^x)^T$ , де  $T$  означає транспоноване.

Ввівши два вектор-стовпчики:  $\mathbf{E}_v = (\mathbf{C} - z\mathbf{I})\mathbf{E}_x - \mathbf{A}\mathbf{E}_z$  та  $\mathbf{E}_w = (\mathbf{C} - z\mathbf{I})\mathbf{E}_y - \mathbf{B}\mathbf{E}_z$ , після перетворення зведемо (2.107) до системи

$$\mathbf{Q}\mathbf{E}_4 = z\mathbf{E}_4, \quad (2.108)$$

$$\mathbf{E}_z = -(\mathbf{I} + \mathbf{X})^{-2}(\mathbf{A}\mathbf{E}_z + \mathbf{B}\mathbf{E}_w) \quad (2.109)$$

де  $\mathbf{E}_4 = (\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_v, \mathbf{E}_w)$ ; матриця  $\mathbf{Q}$  розміром  $4N \times 4N$  має вигляд:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{0} & \mathbf{A}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{A} - \mathbf{I} & \mathbf{A}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{B}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{A} & \mathbf{B}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{B} - \mathbf{I} \\ \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{A}\mathbf{B} & \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}\mathbf{B} & \mathbf{A}^2 - \mathbf{G}^2 & \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{pmatrix} \quad (2.110)$$

Таким чином, рівняння (2.108) є дисперсійним рівнянням, з якого можна знайти вектори дифракції в середовищі, а в комбінації з (2.109) ще і хвильові поля, що відповідають усім дифрагованим променям (з точністю до невідомого коефіцієнта  $c_j^m$ ).

На рис. 2.13 зображено частину розв'язку рівняння  $\det \mathbf{Q} = 0$ , тобто дисперсійну поверхню поблизу точки Лоренца.



Рис. 2.13. Частина дисперсійної поверхні GaAs 004

Проте для знаходження дійсних значень амплітуд хвиль у шарі необхідно застосувати граничні умови.

**Граничні умови.** Запишемо хвилю в кристалі:

$$E^{x,y,z}(r) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-ik_{\perp n} r_{\perp} + iZ_n t + iC_n} \sum_{j=0}^{4N-1} c_j E_{n_j}^{x,y,z} e^{-iz_j t}, \quad (2.111)$$

де стала інтегрування для безперервності фази між шарами має дорівнювати:  $C_n = k_{\perp n} r_n - Z_n t$ ,  $t$  – товщина поточного шару.

На межі шарів ( $m$ ) і ( $m-1$ ) умови (2.28, 2.29, 2.30) в матричному вигляді матимуть вигляд:

$$\mathbf{c}_m \mathbf{E}_m^x = \mathbf{c}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^x \mathbf{F}_{m-1},$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_m \mathbf{E}_m^y &= \mathbf{c}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^y \mathbf{F}_{m-1}, \\
\mathbf{c}_m (\mathbf{I} + \mathbf{X}_m) \mathbf{E}_m^z &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{I} + \mathbf{X}_m) \mathbf{E}_{m-1}^z \mathbf{F}_{m-1}, \\
\mathbf{c}_m (\mathbf{E}_m^{zy} - \mathbf{B}_m \mathbf{E}_m^z) &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{E}_{m-1}^{zy} - \mathbf{B}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^z) \mathbf{F}_{m-1}, \\
\mathbf{c}_m (\mathbf{A}_m \mathbf{E}_m^z - \mathbf{E}_m^{zx}) &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{A}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^z - \mathbf{E}_{m-1}^{zx}) \mathbf{F}_{m-1},
\end{aligned} \tag{2.112}$$

де матриці  $\mathbf{F}_m = \{\delta_{ij} \exp(iz_j^m t^m)\}$ ,  $\mathbf{c}_m = \{\delta_{ij} \cdot c_j\}$  і  $\mathbf{E}_m^{zx,zy} = \{z_j \cdot E_m^{x,y}\}$ .

На верхній межі структури, що складається з  $M$  шарів (1 — верхній,  $M$  — підкладка), умови (2.112) набувають вигляду:

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_1 \mathbf{E}_1^x &= \mathbf{E}_0^x + \mathbf{E}_{up}^x, \\
\mathbf{c}_1 \mathbf{E}_1^y &= \mathbf{E}_0^y + \mathbf{E}_{up}^y, \\
\mathbf{c}_1 (\mathbf{I} + \mathbf{X}_1) \mathbf{E}_1^z &= \mathbf{E}_0^z + \mathbf{E}_{up}^z, \\
\mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zy} - \mathbf{B}_1 \mathbf{E}_1^z) &= \mathbf{K}^z (\mathbf{E}_0^y - \mathbf{E}_{up}^y) - \mathbf{B} (\mathbf{E}_0^z + \mathbf{E}_{up}^z), \\
\mathbf{c}_1 (\mathbf{A}_1 \mathbf{E}_1^z - \mathbf{E}_1^{zx}) &= \mathbf{K}^z (\mathbf{E}_{up}^x - \mathbf{E}_0^x) + \mathbf{A} (\mathbf{E}_0^z + \mathbf{E}_{up}^z).
\end{aligned} \tag{2.113}$$

І на нижній границі:

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_M \mathbf{E}_M^x &= \mathbf{E}_{down}^x \phi_M, \\
\mathbf{c}_M \mathbf{E}_M^y &= \mathbf{E}_{down}^y \phi_M, \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{I} + \mathbf{X}_M) \mathbf{E}_M^z &= \mathbf{E}_{down}^z \phi_M, \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zy} - \mathbf{B}_M \mathbf{E}_M^z) &= (\mathbf{K}^z \mathbf{E}_{down}^y - \mathbf{B} E_{down}^z) \phi_M, \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{A}_M \mathbf{E}_M^z - \mathbf{E}_M^{zx}) &= (\mathbf{A} \mathbf{E}_{down}^z - \mathbf{K}^z \mathbf{E}_{down}^x) \phi_M.
\end{aligned} \tag{2.114}$$

У рівняннях (2.113) і (2.114) введені позначення: вектор-стовпчики:  $\mathbf{E}_0^{x,y,z}$  — падаючі на структуру промені (відмінний від 0 тільки перший елемент кожного вектора);  $\mathbf{E}_{up}^{x,y,z}$  — дифраговані вгору (Брегга) промені;  $\mathbf{E}_{down}^{x,y,z}$  — дифраговані вниз (Лауе) промені; діагональна матриця  $\phi_M$  — фаза хвилі, що вийшла зі структури,  $K_m^z = \{-\delta_{ni} \sqrt{1 - (x_n^2 + y_n^2)}\}$ .

Якщо з рівнянь (2.113) і (2.114) виключити невідомі дифраговані хвилі, одержимо 4 рівняння:

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zx} + \mathbf{K}_z \mathbf{E}_1^x + \mathbf{A}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{E}_1^z) &= 2\mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^x, \\
\mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zy} + \mathbf{K}_z \mathbf{E}_1^y + \mathbf{B}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{E}_1^z) &= 2\mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^y, \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zx} - \mathbf{K}_z \mathbf{E}_M^x + \mathbf{A}_M \mathbf{X}_M \mathbf{E}_M^z) \mathbf{F}_M &= 0, \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zy} - \mathbf{K}_z \mathbf{E}_M^y + \mathbf{B}_M \mathbf{X}_M \mathbf{E}_M^z) \mathbf{F}_M &= 0.
\end{aligned} \tag{2.115}$$

Або у більш компактному вигляді:

$$\mathbf{S}_u \mathbf{c}_1 = 2\mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^{xy}, \quad \mathbf{S}_d \mathbf{F}_M \mathbf{c}_M = 0. \tag{2.116}$$

Рівняння (2.112) теж можна подати в компактному вигляді (достатньо 4 рівняння з 5):

$$\mathbf{S}_{m+1}\mathbf{c}_{m+1} = \mathbf{S}_m\mathbf{F}_m\mathbf{c}_m, \quad (2.117)$$

де матриці  $\mathbf{S}_m$  можна вибрати, наприклад, так:

$$\mathbf{S}_m = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_m^x & & \\ & \mathbf{E}_m^y & \\ \mathbf{E}_m^{zy} - \mathbf{B}\mathbf{E}_m^z & & \\ \mathbf{A}\mathbf{E}_m^z - \mathbf{E}_m^{zx} & & \end{pmatrix}. \quad (2.118)$$

Послідовно застосовуючи формулу (2.117) для всіх шарів, одержуємо рекурентне співвідношення:

$$\mathbf{c}_M = (\mathbf{S}_M)^{-1}\mathbf{S}_{M-1}\mathbf{F}_{M-1}(\mathbf{S}_{M-1})^{-1} \dots (\mathbf{S}_2)^{-1}\mathbf{S}_1\mathbf{F}_1\mathbf{c}_1. \quad (2.119)$$

За допомогою рівнянь (2.116) і (2.119) можна розрахувати  $\mathbf{c}_1$  і  $\mathbf{c}_M$ . Далі з (2.113) і (2.114) знаходимо дифраговані промені зверху структури:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_1^x \\ \mathbf{E}_1^y \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_1)\mathbf{E}_1^z \end{pmatrix} \mathbf{c}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0^x \\ \mathbf{E}_0^y \\ \mathbf{E}_0^z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{up}^x \\ \mathbf{E}_{up}^y \\ \mathbf{E}_{up}^z \end{pmatrix} \quad (2.120)$$

та знизу:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_M^x \\ \mathbf{E}_M^y \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_M)\mathbf{E}_M^z \end{pmatrix} \mathbf{F}_M\mathbf{c}_M = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{down}^x \\ \mathbf{E}_{down}^y \\ \mathbf{E}_{down}^z \end{pmatrix} \phi_M. \quad (2.121)$$

Проблема даного розв'язку полягає в тому, що при великій товщині шарів матриця  $\mathbf{F}_n$  стає нескінченно великою для коренів  $z_j$  з від'ємною уявною частиною [65]. Вирішення даної проблеми запропоновано в [70] і проаналізовано в [66]. Застосуємо цей підхід.

**Коректний розв'язок для товстих шарів.** Перепишемо рівняння (2.117) у вигляді:

$$\mathbf{c}_{m+1} = (\mathbf{S}_{m+1})^{-1}\mathbf{S}_m\mathbf{F}_m\mathbf{c}_m. \quad (2.122)$$

Відсортуємо корені дисперсійного рівняння (2.108)  $z_j$  за зменшенням уявної частини (кількість коренів з додатними і від'ємними уявними частинами однакова [70]) та відповідно відсортуємо рядки в матрицях  $\mathbf{E}_x$ ,  $\mathbf{E}_y$ ,  $\mathbf{E}_z$  (кожен стовпчик з номером  $j$  відповідає власному значенню  $z_j$ ). Далі замість добутку матриць розміром

$4N \times 4N$   $(S_{m+1})^{-1}S_m$  введемо нові матриці  $\mathbf{X}_m^{11}$ ,  $\mathbf{X}_m^{12}$ ,  $\mathbf{X}_m^{21}$ ,  $\mathbf{X}_m^{22}$  розміром  $2N \times 2N$  таким чином, щоб

$$(\mathbf{S}_{m+1})^{-1}S_m = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_m^{11} & \mathbf{X}_m^{12} \\ \mathbf{X}_m^{21} & \mathbf{X}_m^{22} \end{pmatrix}, \quad (2.123)$$

а матрицю  $\mathbf{F}_m$  розміром  $4N \times 4N$  в (2.117) розіб'ємо відповідно на матриці розміром  $2N \times 2N$  і матрицю  $\mathbf{c}_m$   $4N \times 1$  на дві  $2N \times 1$ :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{m+1}^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_m^{11} & \mathbf{X}_m^{12} \\ \mathbf{X}_m^{21} & \mathbf{X}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_m^+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_m^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix}. \quad (2.124)$$

Тоді

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{m+1}^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_m^{11} & \mathbf{M}_m^{12} \\ \mathbf{M}_m^{21} & \mathbf{M}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix}, \quad (2.125)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_m^{12} &= \mathbf{X}_m^{12}(\mathbf{X}_m^{22})^{-1}, \\ \mathbf{M}_m^{11} &= (\mathbf{X}_m^{11} - \mathbf{M}_m^{12}\mathbf{X}_m^{21})\mathbf{F}_m^+, \\ \mathbf{M}_m^{22} &= (\mathbf{F}_m^-)^{-1}(\mathbf{X}_m^{22})^{-1}, \\ \mathbf{M}_m^{21} &= -\mathbf{M}_m^{22}\mathbf{X}_m^{21}\mathbf{F}_m^+, \end{aligned} \quad (2.126)$$

або

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_m^{11} & \mathbf{W}_m^{12} \\ \mathbf{W}_m^{21} & \mathbf{W}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix}, \quad (2.127)$$

де:

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{m+1}^{11} &= -\mathbf{M}_m^{11}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{11}, \\ \mathbf{W}_{m+1}^{12} &= \mathbf{M}_m^{12} - \mathbf{M}_m^{11}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{22}, \\ \mathbf{W}_{m+1}^{21} &= \mathbf{W}_m^{21} - \mathbf{W}_m^{22}\mathbf{M}_m^{21}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{11}, \\ \mathbf{W}_{m+1}^{22} &= \mathbf{W}_m^{22}(\mathbf{I} - \mathbf{M}_m^{21}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{12})\mathbf{M}_m^{22}. \end{aligned} \quad (2.128)$$

Застосовуючи рівняння (2.128) послідовно для всіх шарів, починаючи від поверхні (для першого шару  $\mathbf{W}_1^{11} = \mathbf{W}_1^{22} = \mathbf{I}$ ,  $\mathbf{W}_1^{12} = \mathbf{W}_1^{21} = 0$ ), і враховуючи граничні умови (2.116), можна знайти:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1^- &= \mathbf{S}_1\mathbf{c}_1^+, \\ \mathbf{c}_1^+ &= (\mathbf{S}_u^+ + \mathbf{S}_u^-\mathbf{S}_1)^{-1}\mathbf{E}_0, \\ \mathbf{c}_M^- &= \mathbf{S}_M\mathbf{c}_M^+, \\ \mathbf{c}_M^+ &= (\mathbf{I} - \mathbf{W}_M^{12}\mathbf{S}_M)^{-1}\mathbf{W}_M^{11}\mathbf{c}_1^+, \end{aligned} \quad (2.129)$$

де

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_M &= -(\mathbf{F}_M^-)^{-1}(\mathbf{S}_d^-)^{-1}\mathbf{S}_d^+\mathbf{F}_M^+, \\ \mathbf{S}_1 &= \mathbf{W}_M^{21} + \mathbf{W}_M^{22}\mathbf{S}_M(\mathbf{I} - \mathbf{W}_M^{12}\mathbf{S}_M)^{-1}\mathbf{W}_M^{11}.\end{aligned}\quad (2.130)$$

Підставивши одержані  $\mathbf{c}_1$  і  $\mathbf{c}_M$  в рівняння (2.120) і (2.121), можна визначити всі компоненти дифрагованих променів (нульові елементи в матрицях  $\mathbf{E}_{up}^{x,y,z}$  і  $\mathbf{E}_{dwn}^{x,y,z}$  є відповідно дзеркально відбитим променем та тим, що пройшов).

Даний підхід позбавлений проблем з товстими шарами, оскільки матриця, що містить зростаючі експоненти  $\mathbf{F}_M^-$ , скрізь фігурує в інвертованому вигляді.

**Процедура розв'язання.** Для отримання інтенсивності дифрагованих на багатошаровій структурі  $X$ -хвиль необхідно виконати такі дії:

1. задаючи кут падіння хвилі на структуру та її поляризацію, розраховуємо декартові координати початків хвильових векторів  $x$ ,  $y$ ,  $z$  та компоненти падаючої хвилі:  $E_0^x$ ,  $E_0^y$ ,  $E_0^z$ ;
2. розв'язуємо для приповерхневого шару ( $m = 1$ ) рівняння (2.108) і (2.109) та знаходимо власні значення  $z_j$  ( $j = 1 \dots 4$ ) та власні вектори  $\mathbf{E}_x$ ,  $\mathbf{E}_y$ ,  $\mathbf{E}_z$ ;
3. відсортуємо власні значення  $z_j$  за зменшенням уявної частини ( $\text{Im}(z_j)$ ) та відповідним чином власні вектори  $\mathbf{E}_x$ ,  $\mathbf{E}_y$ ,  $\mathbf{E}_z$  (кожен стовпчик  $p$  номером  $j$  відповідає власному значенню  $z_j$ );
4. будуємо матрицю  $\mathbf{S}_m$  (2.118) та  $\mathbf{F}_m$  і виділяємо з них матриці  $\mathbf{X}_m^{11}$ ,  $\mathbf{X}_m^{12}$ ,  $\mathbf{X}_m^{21}$ ,  $\mathbf{X}_m^{22}$  та  $\mathbf{F}_m^+$ ,  $\mathbf{F}_m^-$ ;
5. розраховуємо матриці  $\mathbf{M}_m^{11}$ ,  $\mathbf{M}_m^{12}$ ,  $\mathbf{M}_m^{21}$ ,  $\mathbf{M}_m^{22}$  за допомогою рівняння (2.126);
6. розраховуємо матрицю  $\mathbf{S}_u$  (перші два рівняння в (2.115));
7. вважаємо, що для першого шару матриці  $\mathbf{W}_1^{11} = \mathbf{W}_1^{22} = \mathbf{I}$  та  $\mathbf{W}_1^{12} = \mathbf{W}_1^{21} = 0$ ;
8. півторюємо пункти 2–5 для другого шару ( $m = 2$ );
9. розраховуємо матриці  $\mathbf{W}_m^{11}$ ,  $\mathbf{W}_m^{12}$ ,  $\mathbf{W}_m^{21}$ ,  $\mathbf{W}_m^{22}$  за допомогою рівняння (2.128);
10. півторюємо пункти 8–9 для всіх наступних шарів до підкладки ( $m = M$ );
11. розраховуємо матрицю  $\mathbf{S}_d$  для підкладки (другі два рівняння в (2.115));

12. розраховуємо матриці  $\mathbf{S}_1$  та  $\mathbf{S}_M$  з рівняння (2.130) та матриці  $\mathbf{c}_1^+$ ,  $\mathbf{c}_1^-$ ,  $\mathbf{c}_M^+$ ,  $\mathbf{c}_M^-$  з рівняння (2.129);
13. знаходимо з рівнянь (2.120) або (2.121) відповідно для геометрій Бреґга та Лауе дифраговані вгору хвилі:  $\mathbf{E}_{up}^x$ ,  $\mathbf{E}_{up}^y$ ,  $\mathbf{E}_{up}^z$  (нульовий елемент кожного вектор-стовпчика відповідає дзеркально відбитій хвилі, інші — дифрагованим) та дифраговані вниз хвилі:  $\mathbf{E}_{down}^x$ ,  $\mathbf{E}_{down}^y$ ,  $\mathbf{E}_{down}^z$  (нульовий елемент кожного вектор-стовпчика відповідає хвилі, що пройшла крізь структуру);
14. знаходимо інтенсивність

$$\mathfrak{R} = \frac{|\gamma h|}{\gamma_0} [(E_n^x)^2 + (E_n^y)^2 + (E_n^z)^2]$$

і виводимо залежність інтенсивності від кута падіння.

### 2.4.12. Метод Дарвіна

Досить цікавий метод розрахунку дифракції запропонував ще в 1914 році Дарвін [20, 21, 26]. Цей метод базується на сумуванні дифрагованих променів від окремих атомних площин з урахуванням взаємодії падаючого променя з дифрагованими. Таким чином, цей метод теж є динамічним розглядом дифракції, хоча він суттєво відрізняється від описаних вище методів.

У цьому пункті розглянуто інтерпретацію методу Дарвіна на випадок спотворених кристалів, виконану Прудниковим [78, 79]. У даній інтерпретації поле зміщень і поляризованість у кожній атомній площині задаються відповідно функціями:  $\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho})$  і  $\mathbf{f}(\boldsymbol{\rho})$  де  $\boldsymbol{\rho} = [\rho_x, \rho_y, 0]$  — позиційний вектор у розсіювальній атомній площині (вісь  $z$  перпендикулярна поверхні структури).

Дифрагована хвиля  $E_j^s(\mathbf{k}_{||})$  і хвиля, що пройшла,  $E_j^t(\mathbf{k}_{||})$  для  $j$ -ї атомної площини ( $\mathbf{k}_{||}$  — проекція дифрагованого хвильового вектора на площину  $xy$ :  $\mathbf{k}_{||} = [k_x, k_y, 0]$ ) можна представити у вигляді:

$$\begin{aligned} E_j^t(\mathbf{k}_{||}) &= e^{i\psi_j(\mathbf{k}_{||})} \left( \int G_{j-1}^t(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||}) E_{j-1}^t(\boldsymbol{\nu}_{||}) d\boldsymbol{\nu}_{||} + \right. \\ &\quad \left. + r_{j-1}^{-h} \int G_{j-1}^s(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||}) e^{i\psi_j(\boldsymbol{\nu}_{||})} E_j^s(\boldsymbol{\nu}_{||}) d\boldsymbol{\nu}_{||} \right), \\ E_j^s(\mathbf{k}_{||}) &= \int G_j^t(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||}) e^{i\psi_{j+1}(\boldsymbol{\nu}_{||})} E_{j+1}^s(\boldsymbol{\nu}_{||}) d\boldsymbol{\nu}_{||} + \\ &\quad + r_j^h \int G_j^s(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||}) E_j^t(\boldsymbol{\nu}_{||}) d\boldsymbol{\nu}_{||}, \end{aligned} \quad (2.131)$$



де введені такі позначення (тут і далі  $*$  означає згортку;  $FT$  і  $FT^{-1}$  — пряме і обернене фур'є-перетворення):

$$\begin{aligned} G_j^t(\mathbf{k}_{\parallel} - \boldsymbol{\nu}_{\parallel}) &= \delta(\mathbf{k}_{\parallel} - \boldsymbol{\nu}_{\parallel}) + G_j^f(\mathbf{k}_{\parallel} - \boldsymbol{\nu}_{\parallel})(t_j^0 - 1), \\ G_j^s(\mathbf{k}_{\parallel} - \boldsymbol{\nu}_{\parallel}) &= G_j^u(\mathbf{k}_{\parallel} - \boldsymbol{\nu}_{\parallel}) * G_j^f(\mathbf{k}_{\parallel} - \boldsymbol{\nu}_{\parallel}), \\ G_j^f &= FT(f(\boldsymbol{\rho})), \\ G_j^u &= FT(e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho})}), \end{aligned}$$

$\psi_j(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sqrt{k_0^2 - k_{\parallel}^2} d_j$  — середня відстань між атомними площинами;  $\mathbf{k}_0$  — хвильовий вектор падаючої хвилі;  $\mathbf{g}$  — вектор дифракції;  $\delta$  — дельта-функція;  $r_j^{h,-h}$ ,  $t_j^{0,h}$  — коефіцієнти відбиття і пропускання  $j$ -ї атомної площини.

Гранична умова на верхній межі:  $E_0^t(\mathbf{k}_{\parallel}) = E_{in}(\mathbf{k}_{\parallel})$  — амплітуда падаючого пучка, на нижній межі:  $E_N^s(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0$ .

Краса описаного алгоритму в тому, що він є чисто тривимірним як в прямому, так і в оберненому просторі і дозволяє динамічно розрахувати дифракцію від довільно спотворених структур та врахувати той факт, що падаюче на структуру випромінювання в реальному експерименті не є плоскою хвилею. Головний мінус описаного алгоритму — його низька швидкість.

**Модернізація для збільшення швидкості розрахунку.** Розрахунок дифракції для довільного деформаційного поля за описаним вище алгоритмом може бути виконаний тільки чисельно. Оскільки  $X$ -промені проникають у структуру на  $10^4$ – $10^5$  атомних шарів, розрахунок за наведеними формулами стає дуже довгим. Для прискорення необхідно для тих шарів багатошарової структури, в які не внесені латеральні спотворення (наприклад, підкладка), ввести коефіцієнти відбиття і пропускання цілого шару ( $R_n^{h,-h}$ ,  $T_n^{0,h}$ ), що складається з  $N_n$  атомних шарів сумарної товщини, замість розгляду відповідних коефіцієнтів для кожної атомної площини ( $r_j^{h,-h}$ ,  $t_j^{0,h}$ ) [80]:

$$\begin{aligned} T_n^0 &= \frac{1}{a_{11}^n}; & T_n^h &= a_{22}^n - \frac{a_{21}^n a_{12}^n}{a_{11}^n}, \\ R_n^h &= \frac{a_{21}^n}{a_{11}^n}; & R_n^{-h} &= -\frac{a_{12}^n}{a_{11}^n} \end{aligned} \quad (2.132)$$

і матриця

$$A^n = \frac{1}{x_+ - x_-} ((x_+ - x_-)B - x_+ x_- (x_+^{N_n-1} - x_-^{N_n-1})I),$$

де  $I$  — одинична матриця; компоненти матриці  $B$ :  $b_{11} = 1/t^0$ ,  $b_{22} = t^h - r^{-h}r^h/t^0$ ,  $b_{21} = r^h/t^0$ ,  $b_{12} = -r^{-h}/t^0$ .

Крім того, в цих шарах багато інтегралів в (2.131) беруться аналітично, що також у декілька разів збільшує швидкість розрахунку.

Для подальшого прискорення розрахунку можна структурні шари, в яких містяться дефекти, розбити на більш тонкі підшари, в яких можна вважати функції  $\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho})$  і  $f(\boldsymbol{\rho})$  постійними по осі  $z$ . Хоча цей крок і не позбавляє від необхідності брати згортки і Виконувати фур'є-перетворення, але це робиться один раз для цілого підшару, який може складатися з сотень атомних шарів.

Якщо нехтувати ефектами багатократного розсіяння між шарами структури, вираз (2.131) для дифрагованого структурою з  $N$  шарів променя набуде вигляду [79]:

$$E_0^r(\mathbf{k}_{||}) = \sum_{n=0}^{N-1} R_n^h \tau_n(\mathbf{k}_{||}) \int G_n^s(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||}) \tau_n(\boldsymbol{\nu}_{||}) E_{in}(\boldsymbol{\nu}_{||}) d\boldsymbol{\nu}_{||}, \quad (2.133)$$

$$\text{де } \tau_n = \prod_{p=1}^n T_{p-1}^h e^{i\psi_p(\mathbf{k}_{||})}.$$

Формула (2.133) є по суті кінематичним спрощенням формули (2.131). Проте при не дуже великій кількості шарів у даній структурі похибка від подібного спрощення буде дуже мала, оскільки в кожному окремому шарі дифракція розглядається динамічно (формули (2.132)). Результати моделювання кривих дифракційного відбиття підтверджують цей факт — різниця між точними розрахунками (із використанням теорії Лауе) і запропонованим укладається в товщину лінії.

**Моделювання.** З урахуванням описаного вище методу для прискорення розрахунку процедура моделювання виглядає так: спочатку багатопшарова структура розбивається на тонші підшари в тих місцях, де вводиться деформація, причому в межах підшару деформація постійна по осі  $z$ . Для тих шарів, у які латеральні деформації не вводяться (наприклад, підкладка), розраховуються коефіцієнти  $R_n^{h,-h}$  і  $T_n^{0,h}$ , а функція  $G_n^s(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||})$  розраховується аналітично. У підшарах з наявною латеральною деформацією розраховуються  $R_n^{h,-h}$  і  $T_n^{0,h}$  для середніх ґраток і  $G_n^s(\mathbf{k}_{||} - \boldsymbol{\nu}_{||})$  чисельно.

Оскільки функції  $\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho})$  і  $f(\boldsymbol{\rho})$  задаються довільно, це дає можливість задавати будь-які спотворення кристалічної ґратки. Можна ввести періодичну зміну латеральних деформацій, скорелювати деформації як в площині, так і по осі  $z$ . Також можна легко ввести випадкові деформації (наприклад, оператором *gandom*). Крім того, оскільки

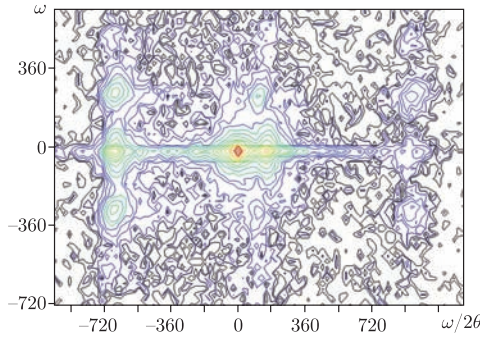


Рис. 2.14. Експериментальна карта оберненого простору поблизу вузла 004 GaAs підкладки для 17-періодної надґратки  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$

функція  $\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho})$  використовується у векторному вигляді, досить просто можна ввести деформації, направлені не лише вздовж осі  $z$ .

Оскільки в цьому методі ніяких обмежень ні на падаючу  $\mathbf{k}_0$ , ні на дифраговану  $\mathbf{k}$  хвилі не вводиться, то він може бути застосований як для плоскохвильового випадку, який є малоцікавим, так і для довільного виду хвиль, які беруть участь у дифракції. Разом з тим, оскільки метод є повністю тривимірним (як у прямому, так і в оберненому просторі), його можна застосовувати як для моделювання квантових дротів, так і для моделювання квантових точок.

Ще одна перевага розглянутого методу — можливість його використання для ширококутової дифракції [76].

**Результати моделювання.** На рис. 2.14 зображено експериментальну, а на рис. 2.15 — розрахункову карти оберненого простору поблизу вузла 004 GaAs підкладки для 17-періодної надґратки  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$  з квантовими дротами. Поки що говорити про хороший збіг рисунків, на жаль, не доводиться, проте підбором моделі квантових дротів у шарах можна буде добитись кращого. Крім того, при моделюванні необхідно ще врахувати кінцеву кутову апертуру детектора, що теж можна зробити.

Необхідно відзначити, що, як і у випадку аналізу кривих дифракції, для отримання точної інформації про досліджувану структуру треба застосовувати методи автофітування. Хоча в даному випадку для подібних розрахунків доведеться використовувати обчислювальні кластери або суперкомп'ютер.

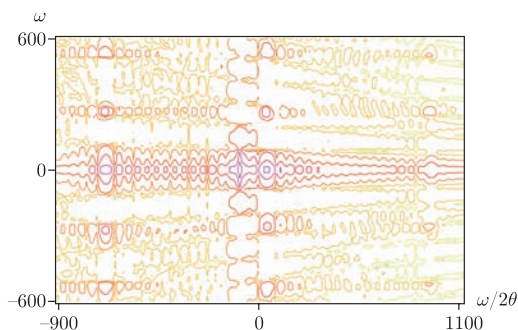


Рис. 2.15. Розрахункова карта оберненого простору поблизу вузла 004 GaAs підкладки для 17-періодної надгратки  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$

**Висновки.** Описаний підхід має такі переваги:

- у рамках єдиної моделі розраховується повна дифракція на неідеальній багат шаровій структурі;
- розглядаються багат шарові структури з довільними відхиленнями від ідеальності в трьох вимірах;
- розглядається дифракція довільних хвиль (не лише плоских, а й сферичних, циліндричних і т. ін.) на структурі;
- структурні шари, в яких спотворення кристалічної структури малі, можна розглядати в рамках класичної теорії Дарвіна.

Головний недолік запропонованого методу — мала швидкість розрахунку навіть при використанні описаних вище прийомів.

### 2.4.13. Розрахунок поляризованості

Для точного розв'язання рівняння розповсюдження (2.15) необхідно розрахувати фур'є-компоненти поляризованості  $\chi_{h-g}$ . Для двохвильового випадку величини  $\chi_h$ ,  $\chi_{-h}$  та  $\chi_0$  можна виписати з довідників або з відповідних програм, наприклад, ХОР 2.11 [83] або ХОН [84]. Це незручно, оскільки необхідно робити базу даних поляризованостей для різних рефлексів та матеріалів (навіть різні концентрації однієї з речовин у твердому розчині вимагають окремо розрахованих фур'є-компонент). Крім того, при розрахунках багатохвильової дифракції кількість різних фур'є-компонент для кожного матеріалу становить

$N^2 - N + 1$  і база даних поляризованостей стає дуже великою та незручною в користуванні.

Саме з цих причин виникла необхідність створити програму (а точніше бібліотеку) для розрахунку фур'є-компонент поляризованостей для довільних рефлексів та найбільш поширених структур. В основу програми покладено загальні принципи розрахунку поляризованості, описані в [10]. Поляризованість кристала можна розрахувати таким чином:

$$\chi_h = \frac{r_e \lambda^2}{\pi V} \sum_n (f + \Delta f' + i \Delta f'')_n \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_n), \quad (2.134)$$

де  $r_e$  — радіус електрона;  $V$  — об'єм кристалічної комірки;  $h$  — вектор оберненої ґратки;  $f$  — атомний фактор розсіювання;  $\Delta f'$  та  $\Delta f''$  — поправки на резонансне розсіювання та поглинання.

Для складних структур поляризованість розраховується на основі закону Веґарда. Поправки  $\Delta f'$ ,  $\Delta f''$ , а також усі необхідні для розрахунку  $f$  атомні сталі для різних елементів [85] запозичені з програми ХОР [83]. Оскільки всі поправки коректні навіть на краях поглинання різних матеріалів, розроблена бібліотека не має обмежень на область застосування за частотами випромінювання. Файли з описом взаємного розташування атомів у складених структурах запозичені з програми Степанова ХОН. На рис. 2.16 графічно зображено структуру розробленої бібліотеки.

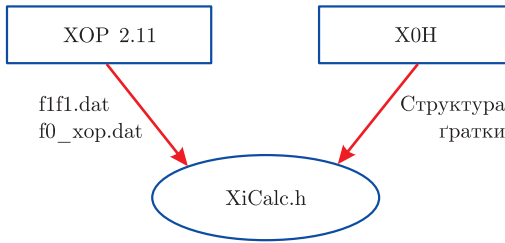


Рис. 2.16. Структура бібліотеки для розрахунку фур'є-компонент поляризованості

Цю бібліотеку, написану мовою C++, можна вільно завантажити з сайту <http://x-ray.net.ua> та використовувати на умовах ліцензії GPL.

## Розділ 3

# ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ ДИНАМІЧНОЇ ДИФРАКЦІЇ В ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ЗАДАЧАХ

У цьому розділі описані деякі можливі застосування наведених методів для інтерпретації експериментальних вимірювань.

### 3.1. Рефлектометрія

Описаний у п. 2.4.11 метод моделювання взаємодії рентгенівських хвиль з багат шаровими структурами можна застосувати для задач рентгенівської рефлектометрії. У рівнянні (2.120) перший член матриць-рядків  $E_{ur}^x, E_{ur}^y, E_{ur}^z$  відповідає саме дзеркально відбитому променю. Приклад моделювання таких вимірювань наведено на рис. 3.1.

Необхідно зазначити, що при розрахунках симетричної дифракції під малими кутами до поверхні зразка неврахування цього променя в деяких випадках призводить до хибних висновків відносно досліджуваної структури (див. рис. 2.11).

### 3.2. Ренінгерівське сканування

Розроблений у п. 2.4.11 метод можна використовувати також для моделювання ренінгерівського скану [86] від структури (рис. 3.2). Вико-

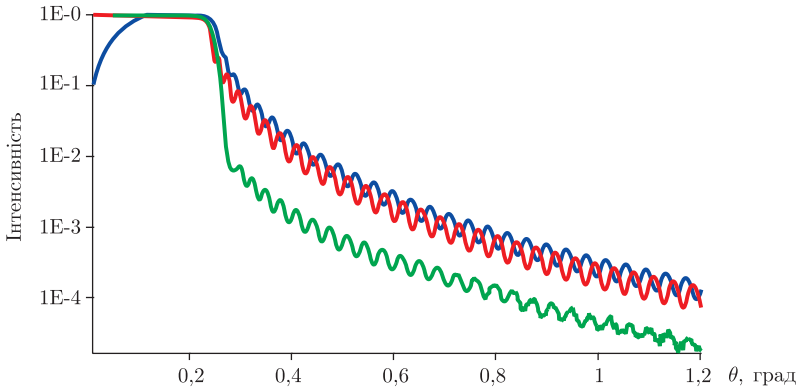


Рис. 3.1. Приклад кривої дзеркального відбиття від структури, яка складається з 110 нм шару  $\text{Si}_{0,75}\text{Ge}_{0,25}$  на Si підкладці. Зеленим кольором зображено експеримент, червоним — моделювання описаним методом, блакитним — моделювання комерційною програмою X'Pert Reflectivity

нувати таке сканування можна як обертаючи зразок відносно нормалі (як це найчастіше і роблять в експерименті), так і обертаючи зразок відносно вектора оберненої ґратки (це більш коректно). Однак моделювання обох обертань реалізується однаково легко в рамках запропонованого методу, оскільки всі величини в системі задані у векторній формі, а обертання вектора навколо довільного напрямку виконується досить просто [87].

### 3.3. Точне врахування та розрахунок довільної лінійної поляризації

У п. 2.4.11 розроблено методику моделювання дифракції  $X$ -променів у шаруватих структурах, яка оперує декартовими координатами задіяних у дифракції векторів. Серед цих векторів є напруженість електричного поля падаючої на кристал хвилі  $\mathbf{E}_0$  та напруженості дифрагованих та дзеркально відбитого променя  $\mathbf{E}_h$ . Декартові складові вектора падаючого променя задані в першій матриці після знака рівності в рівнянні (2.120) (див. с. 110), а складові променів, дифрагованих вгору та вниз, — відповідно в другій матриці після знака рівності в рівнянні (2.120) та в першій у рівнянні (2.121). Тобто можна задати декартові складові напруженості електричного поля (поляризацію) падаючої

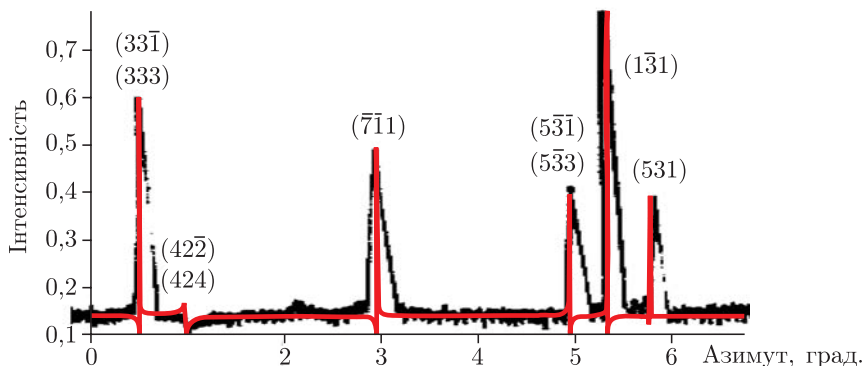


Рис. 3.2. Приклад реїнгерівського сканування від рефлексу 002 GaAs. Чорним кольором зображено експеримент з підписами рефлексів (рисунок відскановано з [7]), червоним — розрахунок

хвилі та отримати точну інформацію про поляризацію всіх дифрагованих променів.

Цей метод можна використовувати для точного аналізу нанорозмірних структур, але він потребує більш глибокого вивчення.

### 3.4. Перехідна область між шарами

Методи аналізу багатошарових структур, що широко застосовуються на сьогодні, за допомогою моделей з різкими межами між шарами, можуть давати недостовірні результати про структуру досліджуваного зразка. Очевидно, що при вирощуванні багатошарової структури окремі шари не можуть бути ідеальними, особливо це стосується їх складу. З фізичних міркувань зрозуміло, що при зростанні кристала на межах шарів буде перехідна область із деяким градієнтом концентрації речовин, з яких складаються ці шари. Тому необхідно при моделюванні багатошарових структур вводити перехідну область. Оскільки функціональна залежність градієнта концентрації на інтерфейсі невідома, підбирають її шляхом моделювання різних варіантів [88, 89].

Такий підхід не новий, багато авторів [90–92] і раніше вводили подібні градієнти для поліпшення збігу експериментальної і модельованої кривої. Проте це були або моделі з симетричним профілем [91], або змі-



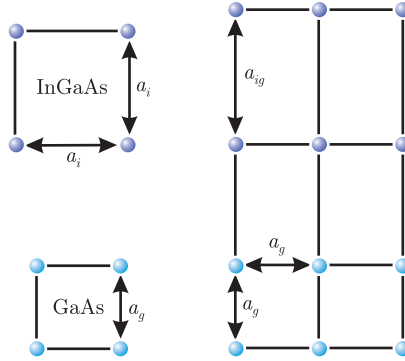


Рис. 3.3. Модель росту InGaAs плівки на GaAs підкладці. Зліва — релаксована ґратка, справа — напружений InGaAs

нювалася тільки глибина проникнення градієнта [90, 92] при незмінній формі. Крім того, в цих роботах не була відзначена зміна ефективних товщин шарів залежно від градієнта складу.

**Методика моделювання.** Будемо розглядати псевдоморфний ріст кристалів з кубічною симетрією. Величина параметра ґратки, паралельного поверхні, у цьому випадку залишається постійною і дорівнює відповідному параметру ненапруженої підкладки (це з великою точністю відповідає дійсності, оскільки деформація розтягування у більш товстому шарі на порядки менше, ніж у тонкому), а величина перпендикулярного параметра буде змінюватись залежно від складу [93]. Додатково вважатимемо, що вирощена структура повністю напружена (рис. 3.3) і

$$a_{ig} = a_i + 2(a_i - a_g) \frac{\nu}{1 - \nu},$$

де  $\nu$  — коефіцієнт Пуассона розтягнутого шару [8].

Зміна нормального параметра ґратки шарів ( $a_{ig}$ ) призводить до зміни вектора дифракції  $\mathbf{h}$ , оскільки

$$h = \frac{\sqrt{m_1^2 a_g^2 + m_2^2 a_{ig}^2 + m_3^2 a_{ig}^2}}{a_{ig} a_g},$$

де  $m_1, m_2, m_3$  — індекси Міллера відбивних площин. Таким чином, деформація структури впливає на просторове положення дифрагованого променя.

Криві дифракційного відбиття моделювалися для рефлексів 004 і 113 для випадку двох плоских хвиль методом [51], що цілком правомірно для планарної структури (п. 2.4.4). Для збільшення точності хвильові вектори знаходились чисельно (п. 2.3.2). Крім того, моделювання було проведено і за допомогою рівнянь Такаґі (п. 2.4.2), проте цей метод дав практично ті самі результати.

Експериментальні КДВ були взяті з роботи [94]. Дана структура складалася з товстої GaAs підкладки (близько 300 мкм, орієнтації [001]) з нанесеними за допомогою МПЕ 8 періодами  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  шарів. Технологічно задані товщини окремих шарів періоду становили відповідно 40 і 113 Å. При моделюванні ці шари розбивалися на значно тонші (близько 0,1 Å) підшари, параметри яких змінювалися відповідно до вибраної моделі градієнта складу. На перший погляд величина 0,1 Å, яка в десятки разів менша від параметра ґратки, здається нефізичною, проте рентгеноструктурний аналіз є інтегральним у латеральному напрямку (площа поверхні зразка, що бере участь у формуванні дифракції, може становити кілька  $\text{мм}^2$ ), тому можна вважати параметри структури такими, що змінюються безперервно за глибиною. Для збільшення швидкості розрахунку та частина зразка, склад якої залишався постійним, не розбивалася на підшари.

Основним параметром матеріалу, який впливає на дифракцію, є кристалічна будова речовини. Оскільки ми розглядаємо кубічну ґратку і деякий фіксований рефлекс, то єдиним параметром кристалічної будови матеріалу, який можемо змінювати при моделюванні, є відстань між атомами. При розгляді псевдоморфного росту кристала, латеральні параметри ґратки (що лежать у площині зростання) не змінюються при варіюванні складу вирощуваної плівки. Разом з тим, при використанні симетричного рефлексу вони не впливають на дифракцію. Відповідно залишається тільки один параметр ґратки, що відображає зміну складу — перпендикулярний до поверхні. Саме його ми будемо варіювати для подальшого моделювання структур з градієнтом складу. Окрім цього параметра, необхідно врахувати поляризованість, яка також залежить від матеріалу, на якому відбувається дифракція. Проте її вплив для незаборонених рефлексів дуже малий. У подальшому під зміною складу ми будемо розуміти зміну параметра ґратки, хоча при розрахунках описані нижче підходи рівною мірою застосовувалися і для поляризованості.

Були розглянуті чотири види градієнта на межі поділу шарів:

1. різкий (ідеальні шари);

2. лінійний;
3. квадратичний;
4. квадратично-гіперболічний.

Нижче буде показано, яким чином моделювався закон зміни параметрів матеріалу для кожного з цих випадків.

Моделювані КДВ порівнюються з експериментальними, одержаними від описаної вище 8-шарової структури.

**Різкий градієнт.** Це найпростіший випадок (синім на вставці на рис. 3.4 та 3.5), який зазвичай розглядають при моделюванні багат шарової структури. Використовуючи цю модель, можна визначити період структури (сумарну товщину  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As} + \text{GaAs}$  шарів), і з деякою точністю співвідношення товщин цих шарів. Проте при використанні цієї моделі практично неможливо підігнати інтенсивності піків сателітів на кривій гоїдання для узгодження з експериментом (рис. 3.4).

**Лінійний градієнт.** Досить просто задати градієнт, що змінюється за лінійним законом (блакитним на вставці на рис. 3.4). У цьому

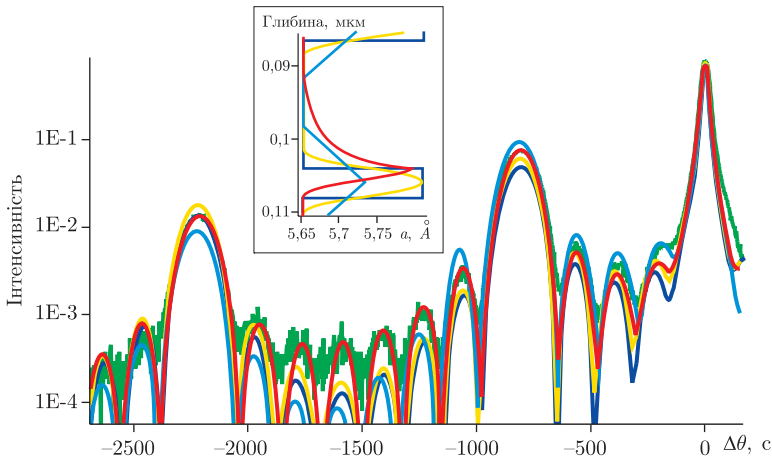


Рис. 3.4. Експериментальна (зеленим) і модельовані КДВ для рефлексу 113 від даної структури з: різким (синім), лінійним (блакитним), квадратичним (жовтим) і квадратично-гіперболічним (червоним) градієнтами на інтерфейсі між шарами (на вставці по осі  $x$  — нормальний параметр ґратки, по  $y$  — глибина залягання підшару)

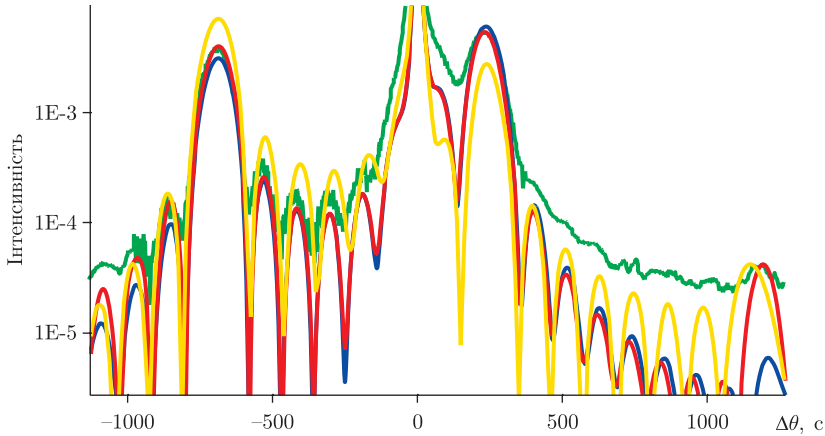


Рис. 3.5. Експериментальна (зеленим) і модельовані КДВ для рефлексу 004 від даної структури з: різким (синім), лінійним (жовтим) і квадратично-гіперболічним (червоним) градієнтами на інтерфейсі між шарами

випадку ми задавали глибину проникнення градієнта ( $e_t$  на рис. 3.6) в обидва шари і функціональну залежність градієнта складу, що відповідно зверху і знизу від межі поділу шарів виражалася формулами

$$a = \frac{1}{2}(a_0 + a_{-1}) + \frac{a_0 - a_{-1}}{2} \frac{x}{e_t},$$

$$a = \frac{1}{2}(a_0 + a_1) + \frac{a_0 - a_1}{2} \frac{t - x}{e_t},$$

де  $x$  — відстань від межі поділу;  $a$  — параметр ґратки;  $a_0$ ,  $a_{-1}$ ,  $a_1$  — відповідно параметри поточного, попереднього і подальшого шарів;  $t$  — товщина шару;  $e_t$  — глибина проникнення градієнта в шар.

Цікавий ефект можна відзначити для рефлексу 004 (рис. 3.5): перший сателіт КДВ з лінійним градієнтом (жовта крива) є зсунутим відносно інших модельних кривих — подібний ефект іноді спостерігається на експерименті.

Для досліджуваних структур подібний вид градієнта не дозволив отримати задовільного узгодження інтенсивностей піків сателітів (рис. 3.4 і рис. 3.5).

**Квадратичний градієнт.** Більш фізичною (з міркувань відсутності різких змін складу) видається квадратична модель градієнта складу на межах шарів (рис. 3.6). Його функціональна залежність за умови

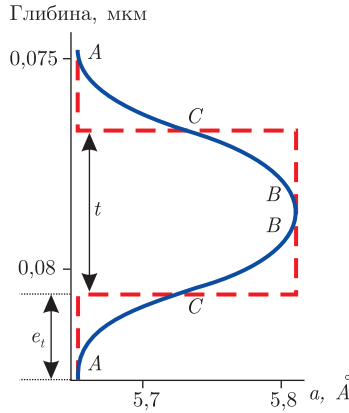


Рис. 3.6. Квадратичний градієнт (синя крива) та різкий (червона крива)

рівності нулю похідних в точках  $A$  і  $B$  і наявність перегину в точці  $C$  буде такою:

$$a = a_0 - \frac{a_0 - a_{-1}}{2} \frac{(x - e_t)^2}{e_t^2}, \quad a = a_0 - \frac{a_0 - a_1}{2} (x + e_t - t)^2 e_t^2,$$

знову таки вище і нижче межі поділу.

КДВ для даного виду градієнта показана жовтим на рис. 3.4 і 3.5.

**Квадратично-гіперболічний градієнт.** У процесі вирощування структури методом МПЕ, процес однакової взаємодифузії між різними шарами є маловірогідним. Особливо це буде помітно за відсутності пауз при вирощуванні різних шарів і різної адсорбційної здатності матеріалів, з яких складаються ці шари. У нашому випадку ( $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  з більш товстим  $\text{GaAs}$  шаром) можливий градієнт складу, показаний на рис. 3.7.

В області з великим параметром ґратки ( $\text{InGaAs}$  — внаслідок наявності  $\text{In}$ ) концентрація  $\text{In}$  зростає майже лінійно (замість лінійної використовується описана вище квадратична інтерполяція з метою усунення різких переходів), а в області з меншим параметром ґратки ( $\text{GaAs}$ ) концентрація  $\text{In}$  зменшується за гіперболою, що задана формулою

$$a = a_0 + ch - \frac{(c+1)h}{\frac{x}{ce_t} + 1},$$

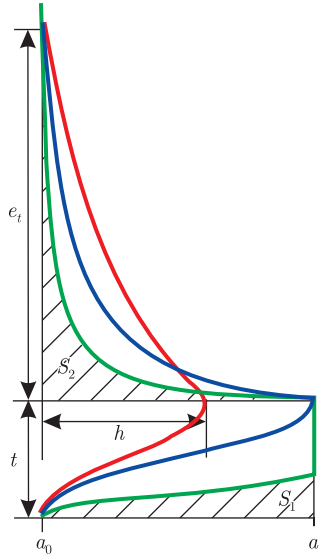


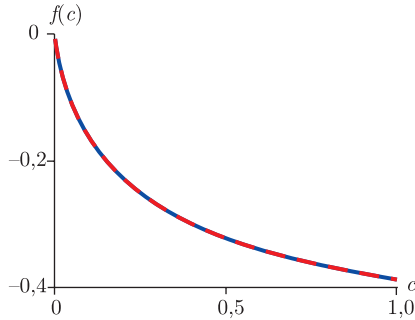
Рис. 3.7. Квадратично-гіперболічний градієнт. Зелена крива  $k = 80\%$ , синя  $k = 50\%$ , червона  $k = 30\%$

де  $h$  — максимальна різниця параметрів суміжних шарів (зазвичай  $h = a_0 - a_1$  — рис. 3.7);  $c$  — параметр кривизни гіперболи, що змінюється від 0 (велика кривизна) до 1 (майже пряма лінія).

Площа  $t(a_1 - a_0)$ , пропорційна кількості In в InGaAs шарі. Відповідна площа  $S_1$  (як параметр моделі задається співвідношення  $k = S_1 100\% / (t(a_1 - a_0))$ ) має дорівнювати площі  $S_2$  (рис. 3.8):

$$S_2 = \int_0^{et} \left( ch - \frac{(c+1)h}{\frac{x}{cet} + 1} \right) dx = (ch - c(c+1)h \ln \left| \frac{c+1}{c} \right|) e_t.$$

З цієї умови підбирається параметр  $c$ . Проте це рівняння виходить істотно нелінійним відносно  $c$ . Звичайно, можна розв'язувати його чисельно, але висока точність у даному випадку не є критичною, оскільки ми і так робимо значно істотніші припущення (наприклад, форма кривої, що обмежує площу  $S_1$ ). Виходячи з цього, можна апроксимувати функцію  $f(c) = c(1 - (c+1) \ln |(c+1)/c|)$  у діапазоні значень  $c$  від 0 до 1 так:  $f'(c) = 0,10661/(c+0,2443) - 0,46914$  (рис. 3.8). Підставивши

Рис. 3.8. Апроксимація функції  $f(c)$ 

що апроксимацію у вираз для  $S_2$ , легко знайти значення параметра  $c$ :

$$c = \frac{0,10661}{0,46914 - \frac{(1-k)t(a_1 - a_0)}{e_t h}} - 0,2443.$$

Як видно з рис. 3.4 і 3.5, подібна модель градієнта складу на межах шарів дозволяє отримати хорошу відповідність інтенсивностей піків експериментальної і змодельованої кривих.

**Обговорення.** Якщо для перших трьох форм градієнта за товщину шарів обирається напівширина, то у випадку гіперболічного градієнта цей параметр вимагає окремого обговорення. Дійсно, судячи з рис. 3.7, важко визначити, де саме вимірюється товщина InGaAs шару. На наш погляд, найбільш фізично правильним є обирати цей параметр виходячи з кількості речовини витраченої при створенні структури. Тобто при вирощуванні в структуру ввели таку кількість InGaAs, яка займає на рис. 3.7 площу рівну:  $(a_0 - a_1)t$ , де  $t$  — товщина шару, що фігурує в усіх наших моделях. Далі градієнт складу формується так, щоб ця площа залишалася постійною (як це робиться, описано вище).

Відзначимо, що якщо для перших трьох моделей товщини шарів  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  при моделюванні КДВ бралися рівними 38,5/163 Å відповідно, то для останнього випадку ця товщина була 39,5/162 Å. Тобто, розподілені за деяким об'ємом атоми In дають менший внесок в дифракцію, ніж локалізовані у вузькому шарі. Це означає, що при визначенні складу вирощених структур методом X-променевого структурного аналізу шляхом підгонки промодельованої кривої гойдання

до експериментальної, використовуючи припущення про різкість перехідної межі між шарами, можна зробити помилкові висновки щодо кількості вищого матеріалу. Таким чином неправильно буде визначено будову багатошарової структури.

**Висновки.** З аналізу проведених розрахунків можна зробити наступні висновки:

- введення різної форми градієнта складу на межах шарів не впливає на визначення періоду структури, проте впливає на визначення співвідношення товщини шарів  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$ ;
- підбравши інтенсивності експериментальних і модельованих сателітів, можна отримати інформацію про градієнт концентрації в структурі;
- для однозначного визначення форми перехідної області між шарами необхідно спільно аналізувати КДВ від симетричних і несиметричних рефлексів або побудувати двовимірну карту розподілу інтенсивностей;
- для деяких типів градієнта між шарами сателітна структура втрачає свою періодичність.

Незважаючи на позитивні здобутки, які можна отримати шляхом введення різних перехідних областей між шарами, треба відзначити і недоліки запропонованого підходу. Справа в тому, що на різній глибині та між шарами з різних матеріалів можуть існувати перехідні області, різні як за формою зміни концентрації, так і за глибиною проникнення в шари. Тому некоректно задавати однакою перехідну область для всієї структури. При такому моделюванні неможливо отримати повний збіг модельної та експериментальної КДВ. Крім того, однозначність подібного розгляду вимагає подальшого аналізу.

У параграфі 3.5 буде показано, як вдосконалити метод аналізу перехідних областей у багатошарових структурах.

### 3.5. Автофітування кривих

Урахування градієнта складу на межі шарів дозволяє отримати хорошу відповідність між інтенсивностями основних сателітів промодельованої та експериментальної кривих поблизу точного кута Бреґґа підкладки. Однак досягти збігу товщинних осциляцій всієї структури та далеко від піка підкладки таким чином не вдається. Пов'язано це з



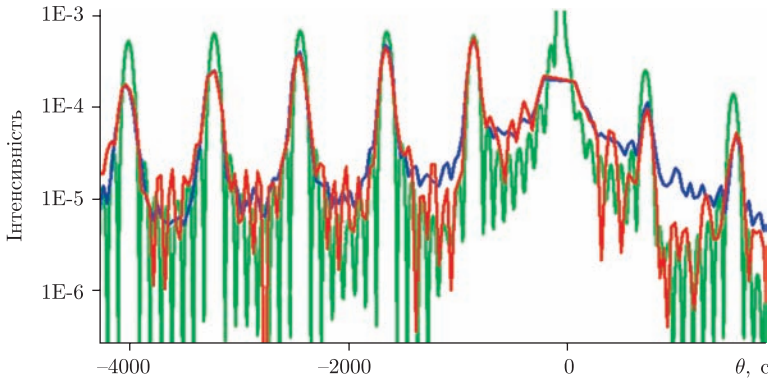


Рис. 3.9. Автофітована КДВ: експериментальна — синім, модельована з різкими межами — зеленим, автофітована — червоним

тим, що всі періоди надгратки вважаються однаковими, але насправді ця умова майже ніколи точно не виконується. З цієї причини необхідно розраховувати параметри кожного шару окремо, що майже неможливо зробити вручну. Саме тому для успішного розв'язання оберненої задачі, якою є рентгеноструктурний аналіз, необхідно використовувати методи підгонки (автофітування). У цій роботі використано генетичний алгоритм Вормінгтона [95] (рис. 3.9).

На жаль застосований алгоритм дуже повільний, тому підгонку виконано за малою кількістю параметрів (товщиною, нормальним параметром ґратки та фактором Дебая–Валлера кожного шару (рис. 3.10), а оскільки структура складалась із GaAs підкладки з вісьмома періодами InGaAs/GaAs, то сумарна кількість параметрів становила близько 50. Для кращого збігу фітованої кривої з експериментальною необхідно розбити кожен шар на підшари, і тоді можна отримати точну інформацію про структуру за товщиною. Проте при такому підході на порядок збільшується кількість параметрів, за якими проводиться підгонка, і відповідний час, необхідний для виконання цього фітування.

Зазначимо, що для автоматичного визначення параметрів структури необхідно виключити вплив вимірювального приладу, тобто зробити деконволюцію між експериментально виміряною кривою та кривою, що відповідає апаратній функції дифрактометра. Однак визначення апаратної функції приладу є досить складною задачею, яка потребує окремого розгляду.

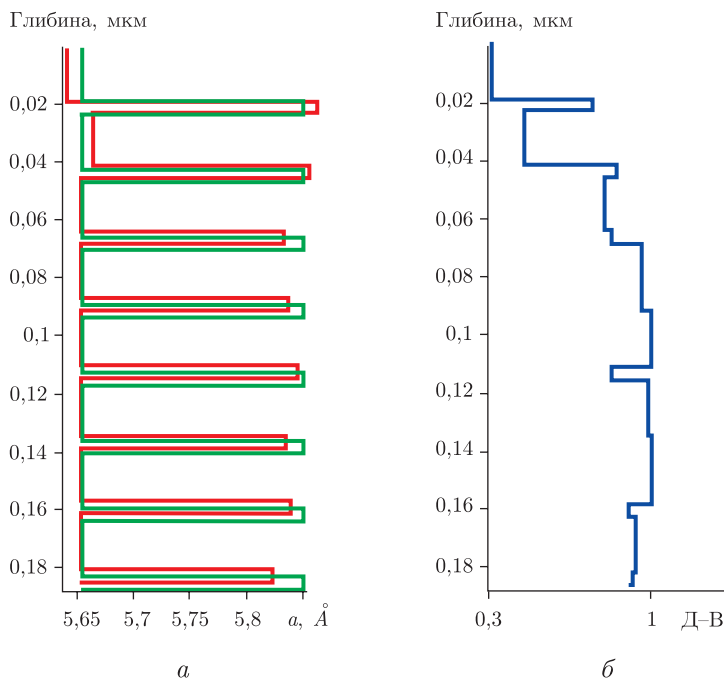


Рис. 3.10. Автофітування. *a* — розподіл параметра ґратки за глибиною: початковий зображено зеленим, після підгонки — червоним; *b* — фактор Дебая–Валлера після фітування (до фітування було 0,9 для всіх шарів)

Ще одна проблема, яку потрібно буде вирішувати, — однозначність результатів. Річ у тому, що при визначенні параметрів структури за одним лише скануванням не завжди можна отримати однозначну інформацію про досліджуваний об'єкт. Для збільшення точності та однозначності необхідно робити підгонку одночасно для декількох рефлексів та рефлектометричних кривих [96–99]. Також необхідно паралельно застосовувати азимутально-залежне сканування, тому що інакше можна отримати хибну інформацію про структуру (див. параграф 3.6). Таким чином з аналізу лише однієї КДВ майже неможливо однозначно визначити параметри структури вздовж одного напрямку, не кажучи вже про параметри дефектів в окремих шарах.

### 3.6. Вплив анізотропії полів деформації в багат шарових структурах (InGa)As/GaAs на дифракцію рентгенівських променів

Зі зменшенням характерних розмірів об'єктів у сучасній електроніці все жорсткіші вимоги ставляться до точності вимірювання їх параметрів. У зв'язку з цим необхідно переглядати деякі загальноприйняті методи вимірювання на предмет їх точності. Одним з чинників, який може призвести до помилкових висновків про структуру, є анізотропія деформацій. Якщо з якихось причин кристалу енергетично вигідно деформувати свою ґратку так, щоб напруження в різних напрямках були різними, то для правильного визначення структури необхідно проводити вимірювання в різних напрямках [100].

Вплив розорієнтації підкладки на криві дифракційного відбиття розглянуто в підручниках з рентгеноструктурного аналізу [8], проте при вирощуванні багат шарової структури на такій підкладці зазвичай виникають додаткові розорієнтації в окремих шарах [45]. Для мінімізації деформаційної енергії у шарах, що складаються з матеріалів з різними параметрами ґратки, їх кристалічна ґратки може анізотропно спотворюватися [101].

У зв'язку із подібними деформаціями структури для коректного визначення її параметрів необхідно проводити азимутальне сканування зразка. Окрім того, подібне сканування дає додаткову інформацію про структуру, а саме, параметри анізотропних деформацій.

Асиметричне спотворення ґратки призводить до зсуву бреггівського піку в залежності від азимутальної орієнтації зразка. Це може призводити до помилок при інтерпретації кривих, оскільки вони можуть бути інтерпретовані як композиційні коливання або нахили площин у релаксаційних механізмах. Тому коректне визначення параметрів розорієнтованих псевдоморфних зразків має базуватися на припущенні про асиметричні спотворення деформованих елементарних комірок.

Ще одним джерелом інформації про досліджувані зразки є амплітуди піків сателітів на КДВ [88]. Метод, детально описаний у параграфі 3.4, був застосований і для інтерпретації цих експериментів.

Пропонується модель, яка дозволяє розрахувати дифракційний профіль псевдоморфних багат шарових структур, вирощених на довільно орієнтованій підкладці. Зосередимо також увагу на деяких гео-

метричних аспектах, пов'язаних з вивченням дифракції рентгенівсько-го випромінювання на розорієнтованих підкладках.

**Експериментальна методика.** Досліджувані зразки були виро-щені на GaAs підкладці з орієнтацією 001 за допомогою МПЕ і скла-далися з 17 періодів  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$  шарів з товщиною 33/189 Å відповідно. Додаткову інформацію про ці шари можна знайти у [94].

Рентгенівські КДВ вимірювались в діапазоні  $3^\circ$  поблизу точного кута Вульфа–Брегга для рефлексу 004 у  $\omega/2\theta$  режимі на двокристал-ьному спектрометрі (GaAs (001) монохроматор Cu  $K\alpha$  випромінюва-ння). КДВ вимірювались для азимутальних кутів  $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ, 180^\circ, 225^\circ, 270^\circ, 315^\circ$  за відношенням до напрямку [110]. Усю інфор-мацію про структури одержано порівнянням експериментальних і мо-дельованих КДВ.

**Азимутально-залежне моделювання КДВ.** Для моделю-вання КДВ використовувався плоскохвильовий рекурентний метод (п. 2.4.4), цілком адекватний для планарних структур, а також розв'язок рівнянь Такагі (п. 2.4.2). Обидва методи дали ідентичні результа-ти. Для підвищення точності хвильові вектори знаходилися чисельно (п. 2.3.2). Зміна азимутального кута моделювалася за допомогою зміни кутів розорієнтації  $\text{InGaAs}$  шарів і всієї структури в цілому за гармо-нічним законом.

Окрім описаних вище підходів, результати перевірено за допомогою чистого тривимірного моделювання, описаного у п. 2.4.11. Результати моделювання повністю збіглися з описаними вище двовимірними під-ходами.

На рис. 3.11 показано дві пари експериментальних і змодельованих КДВ для азимутальних кутів  $90^\circ$  і  $270^\circ$ . Відстань між піками сате-літів різна для різних азимутальних кутів. Це зумовлено наявністю розорієнтації підкладки, яка в нашому випадку становила близько 40 кутових хвилин. Відзначимо, що ця розорієнтація зберігається і у всіх вироцених шарах.

Проте можна бачити, що нульовий пік теж зсунутий, і для поясне-ння цього факту зроблено припущення, що вектор дифракції деяких шарів нахилений щодо вектора дифракції підкладки. Оскільки  $\text{InGaAs}$  має більшу сталу ґратки, ніж  $\text{GaAs}$ , то цілком закономірно, що за на-явності анізотропії в структурі, що викликана розорієнтацією вектора дифракції підкладки щодо поверхні, можуть виникнути деформації, направлені на збільшення латерального параметра ґратки для  $\text{InGaAs}$  шарів (рис. 3.12).

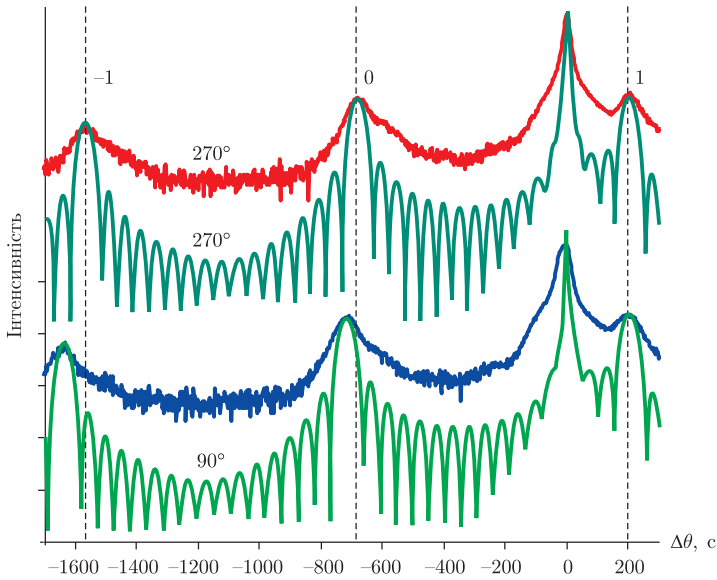


Рис. 3.11. Експериментальні (червоним та синім) і модельовані (зеленим і салатовим) КДВ для азимутальних кутів  $90^\circ$  (2 верхні криві) і  $270^\circ$  (2 нижні криві)

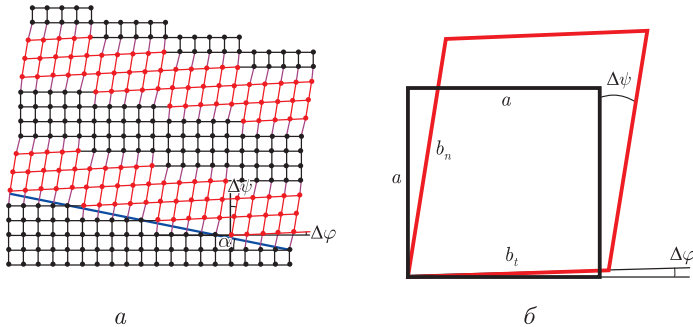


Рис. 3.12. Модель деформації кристалічної ґратки  $\text{In}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$  зразка з розорієнтацією. Чорним зображено атоми GaAs, червоним — атоми InGaAs:  $a$  — вся багатопшарова структура;  $b$  — елементарна комірка. Тут  $\alpha$  — кут розорієнтації підкладки;  $a$  — параметр ґратки GaAs;  $b_n$  і  $b_t$  — нормальні і тангенціальні параметри ґратки напруженого InGaAs;  $\Delta\psi$  і  $\Delta\phi$  — нормальні і тангенціальні кути розорієнтації атомних площин InGaAs

На рис. 3.12, *a* зображено модель спотвореної описаним вище чинном кристалічної ґратки, а на рис. 3.12, *б* — спотворену елементарну комірку InGaAs і неспотворену комірку GaAs. Оскільки параметр ґратки для InGaAs  $b_t$  більший, ніж  $a$  для GaAs, подібна деформація стає енергетично вигідною [101]. Окремо зазначимо, що подібна деформація не супроводжується утворенням дислокацій, отже, збільшення енергії внаслідок їх появи не відбувається.

Для доказу цієї моделі деформації було проведено порівняння модельованих КДВ з експериментальними. Дуже хороший збіг положення піків сателітів спостерігався для всього діапазону азимутальних кутів, що підтверджує описану модель.

З аналізу КДВ для відбиття 004 було визначено, що кут розорієнтації всієї структури  $\alpha = 40$  кутових хвилин, а локальний кут розорієнтації InGaAs шарів  $\Delta\phi = 145$  кутових секунд в напрямі [011]. Що ж стосується вимірювання кута  $\Delta\psi$  — це дещо складніше завдання, оскільки на дифракцію від площин типу 001 він не впливає. Для вимірювання кута  $\Delta\psi$  необхідний аналіз КДВ для несиметричних рефлексів. На жаль, експериментальні криві для 224 і 113 рефлексів були недостатньо якісними, проте з цих вимірювань можна стверджувати, що кут  $\Delta\psi \approx 1^\circ$ .

**Перехідна область між шарами.** Додаткову інформацію про досліджувану структуру можна одержати, порівнюючи інтенсивності змодельованих і експериментальних КДВ. З цього порівняння можна з'ясувати вигляд і параметри перехідної області між шарами з різного матеріалу.

Методику моделювання перехідної області між шарами детально описано в параграфі 3.4, а тут просто використано для демонстрації її можливостей (рис. 3.13).

Спроби моделювати КДВ при лінійному або квадратичному градієнті концентрації In та при однаковій глибині проникнення градієнта в обидва шари, що контактують, не дало задовільного результату. Тому була вибрана модель зміни параметрів представлена на вставці в рис. 3.13. У цій моделі вважається, що концентрація In, який абсорбуються на поверхні гірше, ніж Ga, збільшується поступово в InGaAs шарі, а надлишок In опиняється в GaAs шарі, де його концентрація падає за гіперболічним законом.

Як видно з рис. 3.13 таким чином досягається хороша відповідність інтенсивностей основних піків, проте між ними інтенсивність експериментальної кривої значно вище ніж у модельованій. Це пояснюється дисперсією товщини шарів в різних періодах структури [102].

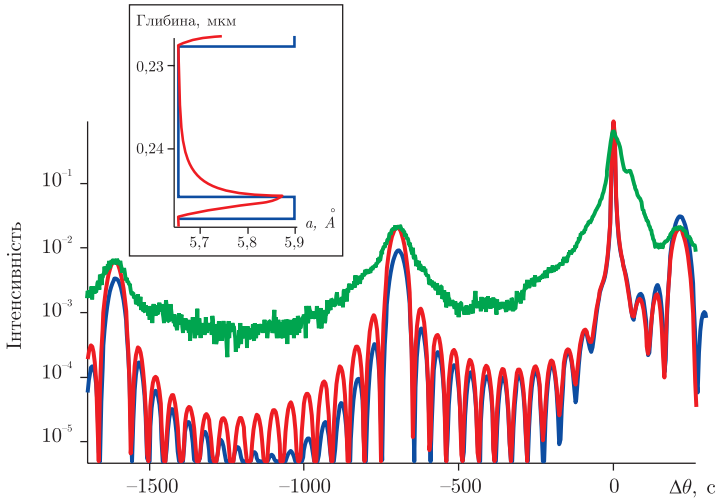


Рис. 3.13. Експериментальна (чорним) КДВ для рефлексу 400, КДВ для моделі з різким градієнтом (сірим, штрихами) і КДВ з гіперболічним градієнтом на інтерфейсі між шарами (чорним, штрихом). На вставці параметри ґраток в ангстремах по осі  $x$  і глибина підшару в мкм по осі  $y$ : чорним зображено гіперболічний, сірим — різкий градієнт

**Висновки.** З аналізу приведених результатів можна зробити такі висновки:

- неврахування анізотропного характеру деформації при визначенні параметрів досліджуваних структур призводить до помилкових висновків щодо структури досліджуваних зразків і навіть фізики їх вирощування;
- азимутальні залежності КДВ дозволяють визначити параметри анізотропної деформації кристалічної ґратки, яка спостерігається навіть для дуже малих кутів розорієнтації структури (менше ніж  $1^\circ$ );
- аналізуючи в комплексі КДВ, для симетричних і асиметричних рефлексів можна визначити всі параметри спотвореної комірки кристалічної ґратки;
- підгонкою інтенсивностей піків на що модельованій КДВ під експериментальні можна визначити параметри інтерфейсу між різними шарами.

### 3.7. Азимутальні залежності дифракції як новий метод аналізу

Аналіз структур за допомогою рентгенівських променів зазвичай проводять таким чином: змінюють кут падіння випромінювання на зразок або кут, під яким дифрагуване випромінювання реєструється, і вимірюють інтенсивність дифрагованого пучка. Одним із варіантів зміни геометрії падіння променя на зразок є обертання зразка навколо нормалі до його поверхні — так зване азимутальне сканування. Такий тип вимірювання дозволяє легко знаходити анізотропні деформації структури (наприклад, розорієнтацію атомних площин відносно поверхні) [103]. Крім того, для асиметричних рефлексів цей метод дає змогу отримати інформацію про зразок навіть при малій кутовій роздільній здатності дифрактометра за кутами обертання зразка (рис. 3.14).

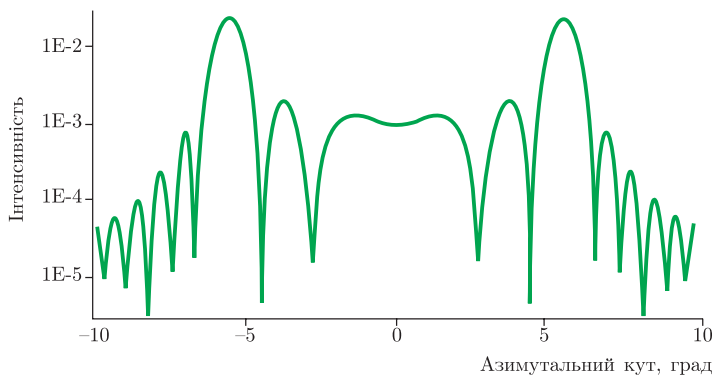


Рис. 3.14. Азимутальне сканування InGaAs/GaAs надґратки поблизу рефлексу 113

Окрім простих азимутальних сканів можна використовувати комбінацію таких сканів зі звичайним  $\omega/2\theta$ -скануванням (рис. 3.15).

На рис. 3.16 зображено теоретично розраховану та експериментально виміряну азимутальні карти (див. рис. 1.43, б).

Здавалося б, для чого потрібні такі ускладнення? Під час аналізу вимірянних результатів може виникнути неоднозначність інтерпретації отриманих КДВ, пов'язана з азимутальною анізотропією властивостей вимірюваного зразка. На рис. 3.17 зображено дві КДВ від 8-шарової  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  (8 нм/40 нм) надґратки: одна крива для нормальної, а інша — для структури, в якій InGaAs шари мають розоріє-



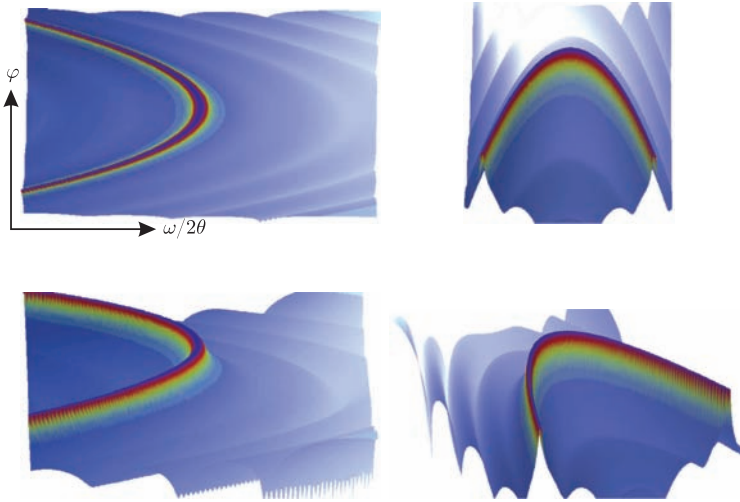
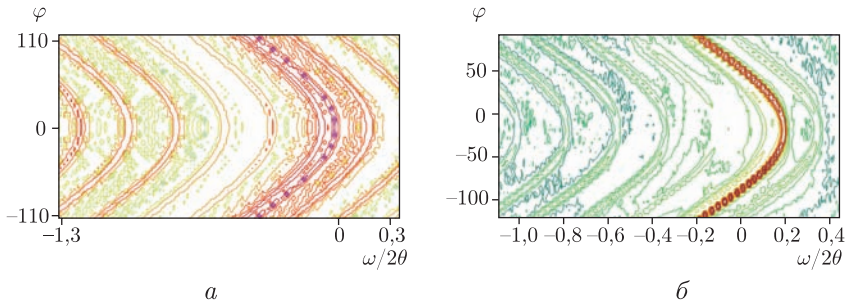


Рис. 3.15. Азимутальні карти від InGaAs/GaAs надґратки поблизу рефлексу 113

Рис. 3.16. Азимутальні карти рефлексу 113 від 8-шарової InGaAs/GaAs (8 нм/40 нм) надґратки: *a* — теоретично розрахований, *b* — експериментальний

тацію. Як бачимо, ці криві майже однакові. Однак на азимутальній карті відразу можна побачити різницю і навіть виміряти розорієнтацію (рис. 3.18).

Ще одне використання азимутальних карт — для аналізу багатохвильової дифракції. На рис. 3.19 зображено випадок 6-хвильової дифракції від GaAs кристала. Основний (квазізаборонений) рефлекс 002 і ще чотири:  $204\ 404\ 40\bar{2}\ 20\bar{2}$ .

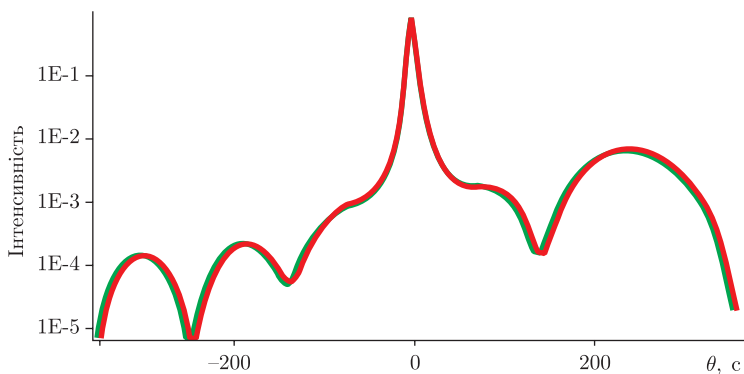


Рис. 3.17. КДВ рефлексу 004 від 8-шарової InGaAs/GaAs (8 нм/40 нм) надґратки. Зеленим зображено з розорієнтацією InGaAs шарів, червоним — без розорієнтації

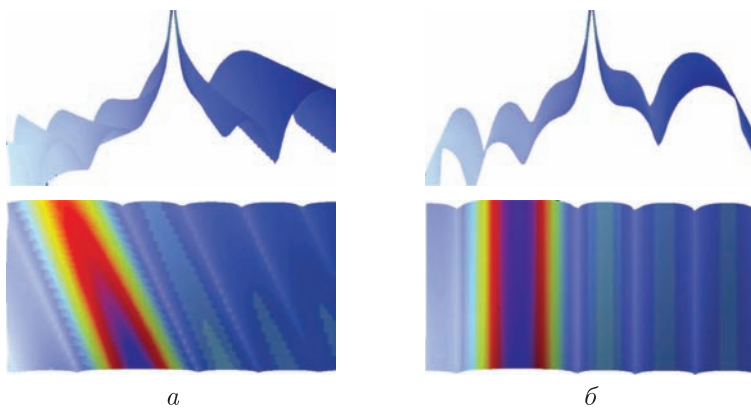


Рис. 3.18. Азимутальні карти рефлексу 004 від 8-шарвої InGaAs/GaAs (8 нм/40 нм) надґратки: *a* — з розорієнтацією, *б* — без розорієнтації

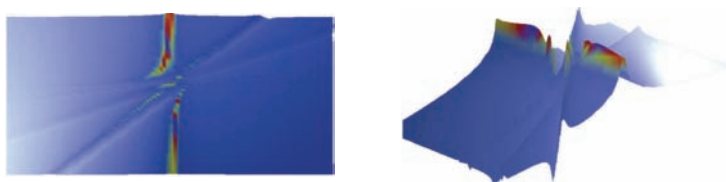


Рис. 3.19. Азимутальні карти рефлексів  $000\ 002\ 204\ 404\ 40\bar{2}\ 20\bar{2}$  від GaAs кристала

Зрозуміло, що подібні вимірювання багатохвильової дифракції можна проводити і для багатопарових структур для більш точного визначення їх параметрів. На конференції ХТОР 2006 було представлено експериментальну роботу, в якій досліджувались саме багатохвильові ефекти в шаруватих структурах. Ці ефекти було легко пояснено і промодельовано за допомогою розроблених методів [103].

### 3.8. Розрахунок карт оберненого простору

Для однозначного визначення параметрів внутрішньої структури кристалічних структур методами  $X$ -променевого аналізу простих кривих дифракційного відбиття буває недостатньо. Тому виникає необхідність у більш інформативних методах вимірювання, так званих двовимірних картах розподілу інтенсивності. Найбільш поширений вид таких карт є суміщені  $\omega/2\theta$ - і  $\omega$ -сканування — так звані карти оберненого простору (рис. 1.41). Аналіз одержаних картин дуже часто проводиться просто емпіричним методом за аналогією з вже відомими з літератури результатами.

Для більш якісного аналізу необхідне моделювання подібних карт розподілу інтенсивностей. Проте існуючі на сьогодні методи засновані або на кінематичній теорії, або на рівняннях Такаґі, тобто методах з недостатньою точністю. Плоскохвильова динамічна теорія є більш точною і широко застосовною, але має істотне обмеження — відсутність інформації про напрямок дифрагованого променя.

У цьому параграфі найбільш точний на сьогодні алгоритм розрахунку дифракції від шаруватих структур, описаний у п. 2.4.11, застосовано для побудови карт оберненого простору.

#### 3.8.1. Карты для надґраток, що складаються з шарів двох типів

Метод, описаний у п. 2.4.11, розраховує всі хвилі, що виходять з кристала, без урахування їх напрямку. Тому для моделювання реального експерименту з кінцевим детектором необхідний додатковий розрахунок напрямку дифрагованих променів.

На рис. 3.20 зображено схему, яка пояснює дифракцію променів у багатопаровій структурі, що складається з двох різних матеріалів.

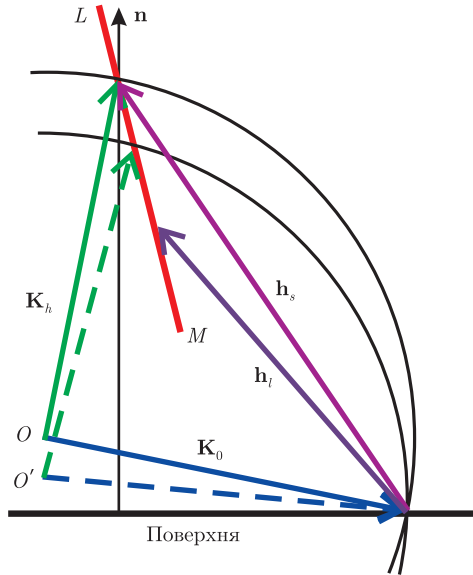


Рис. 3.20. Хід променів на поверхні структури, що складається з шарів з двох різних матеріалів

Вектори  $\mathbf{K}_0$  і  $\mathbf{K}_h$  — відповідно падаючий і дифрагований промені;  $O$  і  $O'$  — точки початку падаючого променя (центри кіл з радіусами  $K$ ) для суцільних і штрихових ліній;  $\mathbf{h}_S$  і  $\mathbf{h}_L$  — вектори оберненої ґратки підкладки і шару в повітрі; вздовж прямої  $LM$  спостерігається сателітна структура дифракції. Якщо шари абсолютно напружені, то пряма  $LM$  паралельна нормалі  $\mathbf{n}$ , якщо абсолютно релаксовані — паралельна вектору  $\mathbf{h}_S$  (тоді вектори  $\mathbf{h}_S$  і  $\mathbf{h}_L$  колінеарні). На рис. 3.20 зображений випадок частково релаксованих шарів.

Нехай координати кінців векторів  $\mathbf{h}_S$  ( $h_{xs}, h_{ys}, h'_{zs}$ ) і  $\mathbf{h}_L$  ( $h_{xl}, h_{yl}, h'_{zl}$ ) ( $h'_{zs}$  і  $h'_{zl}$  — перераховані для повітря), початку і кінця вектора  $\mathbf{K}_h$  ( $K_x, K_y, K_z$ ) і  $(x_h, y_h, z_h)$ , тоді кінець вектора  $\mathbf{K}_h$  можна знайти з умови його знаходження на сфері з центром у точці  $O$  і радіусом  $K$ :

$$(x_h - K_x)^2 + (y_h - K_y)^2 + (z_h - K_z)^2 = 1 \quad (3.1)$$

і водночас на прямій  $LM$ :

$$\frac{x_h - h_{xs}}{h_{xl} - h_{xs}} = \frac{y_h - h_{ys}}{h_{yl} - h_{ys}} = \frac{z_h - h'_{zs}}{h'_{zl} - h'_{zs}}. \quad (3.2)$$

Розв'язками цієї системи будуть два корені, з яких вибирається ближчий до кінця дифрагованого від підкладки вектора. Таким чином, можна знайти напрямок вектора  $\mathbf{K}_h$  від структури для даного кута падіння.

Оскільки  $\omega$ -скан для плоскохвильової динамічної теорії є дельта-функцією (монохроматична хвиля і ніякої кутової розбіжності), необхідно ввести деяку апаратну функцію детектора — наприклад гамма-функцію, функцію Лоренца або просто прямокутну щілину. Для побудови карти оберненого простору проводиться аналіз: чи потрапляє кут між проекцією дифрагованого променя в площину дифракції і положенням детектора (однозначно визначається з умови зв'язаного  $\omega/2\theta$ -сканування) в апаратну функцію. Якщо потрапляє, то виводиться розрахована для даного кута падіння інтенсивність (для щілини детектора, для більш складного цю інтенсивність ще треба помножити на відповідну функцію), якщо ні, то нуль. На рис. 3.21, *б* зображено експериментальну карту для рефлексу 113 8-шарової надгратки InGaAs/GaAs. На рис. 3.21, *а* — змодельовану описаним вище методом повністю напружену таку ж структуру.

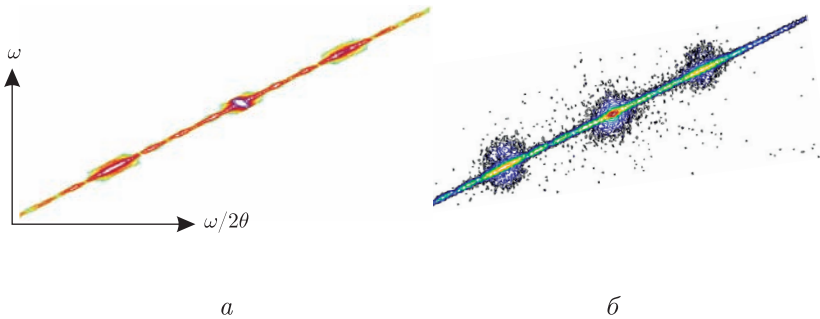


Рис. 3.21. Карта рефлексу 113 від 8-періодної надгратки  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}/\text{GaAs}$  ( $40/113 \text{ \AA}$ ) на GaAs підкладці: *а* — модель, *б* — експеримент

**Висновки.** Запропонований метод дозволяє розраховувати карти оберненого простору від багат шарових структур з довільною релаксацією і локальною розорієнтацією в шарах.

Розрахувати карту оберненого простору запропонованим методом можна і на базі будь-якого іншого плоскохвильового підходу — треба лише спроектувати на площину дифракції всі вектори в системі,

проте правомірність такого підходу необхідно аналізувати у кожному випадку окремо. Використання описаного вище тривимірного алгоритму моделювання дифракції позбавляє від зайвих операцій і гарантує правильність розрахунку для планарних структур.

### 3.8.2. Карти для довільних надґраток

Існує інший метод побудови карт на базі описаного вище алгоритму розрахунку багатопрменевої дифракції: оскільки в розрахунках інформація про поляризацію падаючого променя задається тільки на останній стадії (2.120), можна розрахувати амплітуди дифрагованих променів  $\sigma$ - і  $\pi$ -поляризації, побудувавши дві площини, перпендикулярні цим амплітудам. Лінія їх перетину буде напрямком вектора  $\mathbf{K}_h$  (рис. 3.22). Хоча цей метод більш універсальний і вже випробуваний, проте він ще потребує додаткового аналізу.

За такої побудови карт оберненого простору також виникає проблема з моделюванням  $\omega$ -сканування. Більш правильний метод, ніж описаний у попередньому пункті, — врахування кутової розбіжності падаючого променя. Для цього розраховується дифракція від декількох напрямків падаючої хвилі, і з урахуванням напрямку кожної дифрагованої хвилі та просторової функції детектора, дифраговані хвилі підсумовуються. Однак такий метод є дуже повільним.

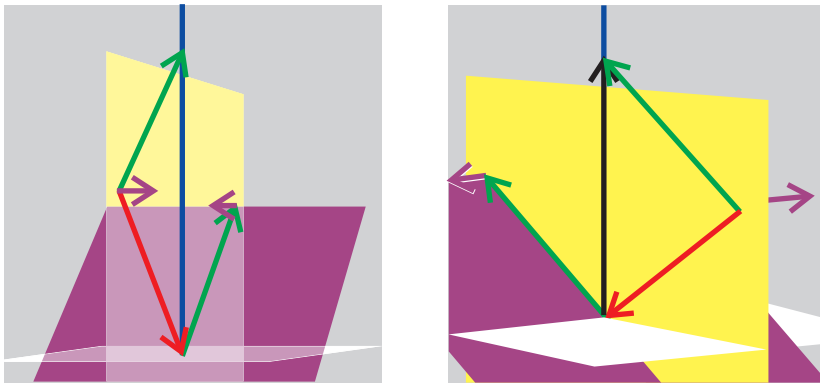


Рис. 3.22. Хід променів та площини. Жовтим зображено площину, перпендикулярну вектору  $\mathbf{E}_\sigma$ , фіолетовим — перпендикулярну  $\mathbf{E}_\pi$ ; білим — площину зразка. Червоним зображено падаючий промінь, зеленим — дифрагований

Оскільки алгоритм розрахунку взаємодії  $X$ -променів зі структурою є багатопроменевим, описаним вище методом можна змоделювати карту оберненого простору в разі одночасної дифракції кількох променів.

Урахування впливу неідеальностей у площині структури в цій моделі поки що не можливе.

## Розділ 4

# ДОСЛІДЖЕННЯ НАПРУЖЕНЬ І КОМПОЗИЦІЙНОГО СКЛАДУ В ПСЕВДОМОРФНИХ І РЕЛАКСОВАНИХ СТРУКТУРАХ

### 4.1. Вступ

Багато науковців для дослідження структурної якості та стабільності гетеросистем використовують рентгенодифракційні методи [8, 39, 104–106]. У цьому розділі ми обговоримо деякі можливості аналізу деформаційного стану та композиції в простих (одношарових) епітаксійних структурах і надгратках дифракційними методами. Основне питання, на яке ми намагатимеся відповісти: які рентгенодифракційні методи можуть бути використані для отримання інформації про розподіл напружень і взаємодифузії?

### 4.2. Використання двокристалльних кривих відбиття

Двокристалльна дифрактометрія є основним методом структурного дослідження гетеросистем. При цьому дифракційні криві відбиття вимірюються в інтегральному режимі з широко відкритим вікном детектора, при якому майже вся дифрагована інтенсивність фіксується



детектором. В оберненому просторі область спостереження є смугою, перпендикулярною до хвильового вектора дифрагованої хвилі  $k_h$ . Використання двокристалльної дифрактометрії виправдане перш за все для псевдоморфних нерелаксованих структур з когерентними гетерограницями. Для них інтенсивність у площині розсіяння розподілена вздовж нормалі до поверхні кристала, і смуга спостереження перетинає її лише в невеликій області, обумовленій кінцевою шириною відбиття монохроматора, тому кутова роздільна здатність на двокристалльних кривих нічим не відрізняється від роздільної здатності відповідного трикристалльного сканування (див. далі). У багатьох випадках параметри епітаксіальних структур визначаються безпосередньо з двокристалльних кривих відбиття, виміряних у симетричній брегтівській геометрії. Якщо крива відбиття містить дифракційні піки, що чітко фіксуються, від окремих шарів, то їх кутове положення визначається середньою міжплощинною відстанню  $d_i$ . З кутової відстані  $\Delta\theta$  між піками шару і підкладки визначається відносна різниця в міжплощинних відстанях  $i$ -го шару і підкладки:

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{d_i - d_0}{d_0} = -\frac{\Delta\theta}{\operatorname{tg} \theta}, \quad (4.1)$$

$d_i$  і  $d_0$  — відстані між кристалографічними площинами, паралельними поверхні. Для структур кубічної сингонії  $(\Delta d/d)_\perp$  пов'язане з відносною різницею параметрів ґратки  $\Delta a/a$  співвідношенням

$$\left(\frac{\Delta d}{d}\right)_\perp = \frac{\Delta a}{a}(1 + p). \quad (4.2)$$

Тут  $p$  — деформаційний множник, що виражається через пружні сталі (для орієнтації нормалі до поверхні  $\langle 001 \rangle$   $p = 2c_{12}/c_{11}$ ). Для епітаксіальних структур гексагональної сингонії, вирощених на поверхні  $(0001)$ :

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta c}{c} + p\frac{\Delta a}{a}, \quad (4.3)$$

де  $p = 2c_{13}/c_{33}$  ( $c$  і  $a$  — параметри гексагональної елементарної комірки). Оскільки матеріал (склад) підкладки, як правило, відомий точно, то з одержаної різниці параметрів ґратки визначається склад шару. При використанні виразів (4.2), (4.3) важливо впевнитися, що епітаксіальні шари мають когерентні межі, тобто система не релаксована. Релаксація пружних деформацій (в основному напружень невідповідності і термічних напружень) може відбуватися за допомогою різних

механізмів [107], основним з яких є виникнення сітки дислокацій невідповідності. При цьому разом з нормальною  $(\Delta d/d)_\perp$  з'являється тангенційна невідповідність  $(\Delta d/d)_\parallel$ . (Для нерелаксованих систем віддалей між площинами, перпендикулярних до гетерограниць, однакова для всіх шарів та підкладки.) На кривих дифракційного відбиття релаксація виявляється в кутовому зсуві дифракційних піків і їх розширенні порівняно з пружнодеформованою системою. Проте з кутового положення піків симетричних бреггівських відбиттів не можна зробити визначити, чи знаходиться шар у пружнонапруженому або релаксованому стані, якщо його склад наперед невідомий. Розширення піків теж не завжди можна помітити, особливо якщо власна кутова напівширина піка, що визначається товщиною шару, значно більше дарвінівської напівширини [2]. Таким чином, симетрична бреггівська геометрія в більшості випадків не дозволяє зафіксувати релаксацію пружних напружень в епітаксійній системі і визначити її ступінь. Для визначення релаксації методом двокристальної дифрактометрії використовують асиметричні бреггівські рефлекси. Їх застосування базується на тому, що дисторсія елементарної комірки ґратки епітаксійного шару внаслідок напружень невідповідності (для кубічної сингонії перетворення кубічної комірки в тетрагональну, так звана тетрагональна дисторсія) призводить до розвороту нахилених до поверхні кристалографічних площин на когерентних гетерограницях. Вимірювання кривих відбиття в двох геометріях — з ковзним кутом падіння ( $|\gamma_h| > \gamma_0$ ) і ковзним кутом відбиття ( $|\gamma_h| < \gamma_0$ ) — дозволяє визначити як різницю  $\Delta\theta$  бреггівських кутів, так і кут розвороту відповідних площин  $\delta\varphi$ . У першому випадку ці величини складаються за абсолютною величиною (піки розташовані далі один від одного), у другому — віднімаються (піки ближче один до одного). Значення  $\Delta\theta$  і  $\delta\varphi$  визначаються відповідно, як півсума і піврізниця кутових відстаней між піками на цих кривих. Релаксація веде до зменшення кута розвороту при повному знятті пружних напружень  $\delta\varphi = 0$ . З цих величин визначаються як нормальна  $(\Delta d/d)_\perp$ , так і латеральна  $(\Delta d/d)_\parallel$  невідповідності міжплощинних відстаней:

$$\Delta\varphi = - \left[ \left( \frac{\Delta d}{d} \right)_\perp - \left( \frac{\Delta d}{d} \right)_\parallel \right] \sin\varphi \cos\varphi, \quad (4.4)$$

$$\Delta\theta = - \left[ \left( \frac{\Delta d}{d} \right)_\perp - \left( \frac{\Delta d}{d} \right)_\parallel \sin^2 2\theta \right] \operatorname{tg}\theta, \quad (4.5)$$

де  $\varphi$  — кут між відбиваючими площинами і поверхнею,  $\varphi < 0$  при ковзному падінні і  $\varphi > 0$  при ковзному відбитті.

### 4.3. Використання трикристальної дифрактометрії

Загально визнаною технікою для вимірювання розподілу напружень в епітаксійних структурах є високороздільна  $X$ -променева дифрактометрія [17, 108]. Цей експериментальний метод дозволяє будувати карти оберненого простору (КОП), які зображають розподіл розсіяної зразком інтенсивності як функцію координат в оберненому просторі. Розподіл інтенсивності, дифрагованої шаром (підкладкою) позначатимемо в подальшому як вузол оберненої ґратки (ВОГ) шару (підкладки). ВОГ містить корисну інформацію особливо для недосконалих гетероструктур. Ця інформація може бути отримана завдяки тому факту, що різні структурні недосконалості впливають на ВОГ досконалого епітаксійного шару різними шляхами. Двовимірне зображення розподілу інтенсивності в площині розсіяння для епітаксійних структур розглядається звичайно в ортогональних осях  $q_z$  і  $q_x$ , паралельних відповідно нормалі до поверхні гетероструктури і самій поверхні.

$$q_z = k(\sin \alpha_i + \sin \alpha_f), \quad (4.6)$$

$$q_x = k(\cos \alpha_f - \cos \alpha_i), \quad (4.7)$$

де  $\alpha_i, \alpha_f$  — відповідно кути падіння на поверхню кристала і відбиття. Початком системи координат вибирається зазвичай найближчий вузол оберненої ґратки підкладки. Використовується й інша система осей ( $q_h$  і  $q_\perp$ ), паралельно і перпендикулярно до вектора оберненої ґратки відповідного відбиття. Реєстрована інтенсивність стає функцією двох кутових параметрів — кута падіння  $\alpha$  і кута відбиття  $2\theta$ . У цьому випадку координати  $q_h$  і  $q_\perp$  пов'язані з кутами  $\alpha$  і  $\theta$  ( $\theta$  — кут Бреґа) співвідношеннями

$$q_h = k2\theta \cos \theta \quad (4.8)$$

і

$$q_\perp = k(2\alpha - 2\theta) \sin \theta. \quad (4.9)$$

Розподіл в оберненому просторі відбувається за допомогою вимірювання так званих мод сканування (трикристальних кривих). При  $\omega/2\theta$ -скануванні ми маємо переріз площини розсіяння (і отже, розподіл інтенсивності у напрямку дифракційного вектора  $\mathbf{Q}$ ), при  $\omega$ -скануванні — перпендикулярно до  $\mathbf{Q}$ , для  $2\theta$ -моди — вздовж сфери Евальда перпендикулярно до хвильового вектора  $\mathbf{k}_h$  відбитої хвилі.

При дослідженні епітаксійних структур трикристальна дифрактометрія використовується: 1) для виділення і дослідження дифузного розсіяння; 2) визначення ступеня релаксації; 3) для вивчення дефектної структури (дислокаційної) релаксованих шарів. Дифузне розсіяння в гетероструктурах обумовлене, в основному, шорсткістю інтерфейсів. Його інтенсивність на двокристалних кривих відбиття може помітно ускладнити процедуру підгонки експериментальних і розрахункових залежностей, тому використання кривих  $\omega/2\theta$ -моди сканування, де внесок дифузного розсіяння мінімальний, дозволяє надійніше визначати параметри епітаксійних структур. Основним із застосувань трикристальної геометрії є визначення релаксації епітаксійних структур. Воно засноване на тому, що інтенсивність когерентного розсіяння від нерелаксованих повністю напружених епітаксійних гетероструктур розподілена в напрямку, паралельному нормалі до поверхні. У цьому напрямку розташовані додаткові вузли — центри відбиття від окремих шарів, товщинні осциляції, а також сателіти для надгратки. Релаксація фіксується на картах розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки, що відповідають асиметричним бреггівським відбиттям, для яких вектор дифракції становить кут  $\varphi$  з нормаллю  $\mathbf{n}$ . Для повністю релаксованої структури вузли — центри відбиття окремих шарів — повинні лежати вздовж вектора дифракції. При частковій релаксації вони займають деяке проміжне положення. Таким чином, якщо центри на розподілі інтенсивності, що відповідають двом сусіднім шарам або шару і підкладці, розташовані на нормалі, то між ними не відбулося релаксації і гетерограниця когерентна, якщо ні, то це вказує на релаксацію. Релаксація буде повною, якщо вузли лежать на напрямі вектора оберненої ґратки  $\mathbf{H}$ . Приклад дифракції для релаксованої структури наведено на рис. 4.1. Тут зображено розподіл інтенсивності дифракції навколо вузла оберненої ґратки 113 епітаксійної системи  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}(001)\text{Si}$ . Видно, що центр відбиття від шару SiGe розташований у проміжному положенні між напрямом  $\mathbf{H} = \langle 113 \rangle$  і нормаллю  $\mathbf{n} = \langle 001 \rangle$  щодо вузла Si, з чого виходить, що він релаксований не повністю і знаходиться в стані розтягання. Ступінь релаксації між сусідніми шарами визначається з різниці координат  $q_h$  і  $q_\perp$  їх центрів відбиття. За (4.8), (4.9) з цих величин знаходяться різниці відповідних кутів  $\Delta\alpha$  і  $\Delta 2\theta$ , з яких із використанням (4.4) і (4.5) обчислюються значення нормальної  $(\Delta d/d)_\perp$  і латеральної  $(\Delta d/d)_\parallel$  невідповідностей між площинних відстаней двох сусідніх шарів. Рівність нулю латеральної невідповідності однозначно вказує на відсутність релаксації між двома шарами і когерентність гетерограниці між ними. Проте рівність  $(\Delta d/d)$

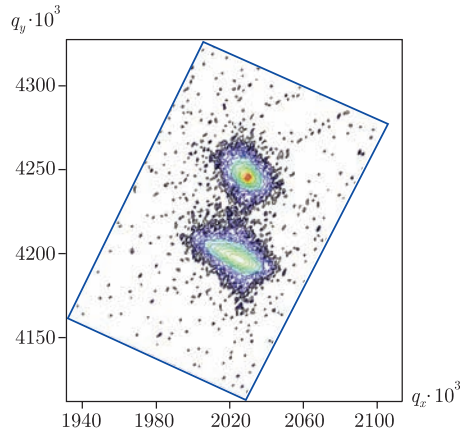


Рис. 4.1. Розподіл інтенсивності навколо вузла оберненої ґратки (113) асиметричного бреггівського відбиття для епітаксійної структури  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}(001)\text{Si}$ .  $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання

і  $(\Delta d/d)_{\parallel}$  зовсім не означає відсутності напружень у двох сусідніх шарах, оскільки не виключає їх загальної релаксації як цілого щодо нижчих шарів або підкладки. Що стосується (повної) релаксації шару, то вона повинна відноситися до параметрів ґратки шару у вільному стані і визначатися щодо підкладки (центри відбиття шару і підкладки лежать на напрямі  $(\Delta d/d) = (\Delta d/d)_{\parallel}$ , де  $\Delta d$  відраховується щодо підкладки). Відзначимо, що дані міркування відносяться до структур з кубічною сингонією з орієнтацією високої симетрії або гексагональної, для якої для всіх шарів зберігається співвідношення щільної упаковки  $c/a = 1,633$ . Результат релаксації напружень на КОП гетероструктур може бути симульований за лінією релаксації. Зупинимося на цьому моменті більш детально. Напрямок лінії релаксації задається кутом  $\alpha$ , який можна розрахувати аналітично. Цей кут залежить від орієнтації поверхні і пружних властивостей шару, приймаючи до уваги умови Бреґга. Знаючи напрям лінії релаксації, можна визначити обидва параметри: напруження (параметр релаксації) і параметр ґратки ненапруженої епітаксійної структури з КОП, використовуючи асиметричні бреггівські рефлекси. На рис. 4.2 показані вузли оберненої ґратки для повністю релаксованого германію на підкладці кремнію. Падаючий та дифрагований промені лежать у площині дифракції, яка визначається кристалграфічними напрямками  $[001]$  і  $[110]$ . Два малих півкола (Ла-

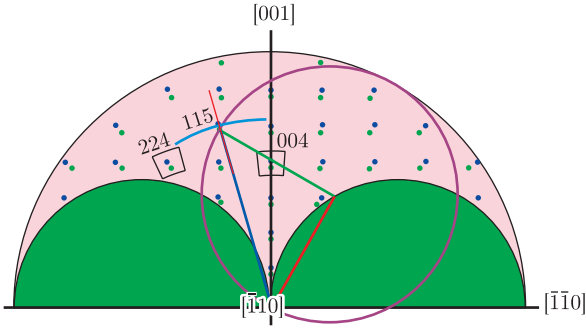


Рис. 4.2. Схематичне зображення точок оберненого простору для повністю релаксованої структури

ує зони радіусом  $1/\lambda$ , де  $\lambda$  — довжина хвилі) та велике з радіусом  $2/\lambda$  вказують межі можливих дифракційних вимірювань у геометрії Бреґга. Побудова сфери Евальда дана для 115 рефлексу при високому значенні кута падіння на кристал. Бреґгівські умови будуть виконуватись коли дифракційний вектор  $\mathbf{Q}$  буде рівний вектору оберненої ґратки. Дифрактометричний кут  $\omega$  — кут між напрямком падаючого променя  $k_{inc}$  і поверхнею зразка, а кут  $2\theta$  — між падаючим і дифрагованим  $k_{dif}$  променями. Тут же позначені три можливі режими сканування і їх напрямки в оберненому просторі. Для спрощення вважатимемо, що монохроматичний промінь не має горизонтальної і вертикальної розбіжностей і набір інтенсивності відбувається лише в області оберненого простору дельта-подібної форми, де хвильовий вектор дифрагованого променя перетинає сферу Евальда. Таким чином, в ідеальному випадку дифрактометр здійснює набір інтенсивності при поперечному перетині оберненого простору вздовж круга з центром у точці (000), якщо обертається лише зразок ( $\omega$ -сканування). Якщо переміщається лише детектор при фіксованому положенні зразка, то сканування та набір інтенсивності відбуваються вздовж сфери Евальда ( $2\theta$  — сканування), і, нарешті, якщо детектор переміщується з швидкістю вдвічі більшою, ніж зразок, при їх одночасному переміщенні, то напрямком сканування є радіальним відносно точки (000), тобто направлений вздовж дифракційного вектора ( $\omega/2\theta$  — сканування). Найчастіше картографування оберненого простору використовуює перший і третій варіанти сканування. Детальніше механізм вимірювання карт оберненого простору описано в першому розділі книги.

Для аналізу деформаційного стану оберемо області навколо вузлів (004) та (224), які позначені виділеними областями на рис. 4.2. Підкладку вважаємо ненапруженою, і тому з відносного положення максимумів підкладки і шару на цих двох вимірнях КОП можемо отримати значення параметрів ґратки в напрямку росту і паралельно поверхні без використання пружних сталей. Довжина проєкції на площину кристала точки оберненої ґратки шару в напрямку [110] є обернено пропорційною до параметра ґратки в площині. Якщо, наприклад, шар SiGe, який має параметр ґратки більший, ніж кремнієва підкладка, вирощений псевдоморфно, тобто тетрагонально деформований, то він має ту саму сталу ґратки в площині, що й підкладка (рис. 4.3). Точки оберненої ґратки на асиметричних КОП (113), (224) знаходяться під відповідними точками оберненої ґратки для кремнію.

В іншому екстремальному випадку, коли шар SiGe є повністю релаксований і кубічний, асиметричні площини шару і підкладки будуть паралельними. Тому точки оберненого простору шару будуть знаходитись нижче ТОП для підкладки на одній лінії вздовж напрямку [hkl]. При цьому частково релаксований шар буде знаходитись між цими крайніми положеннями. На асиметричних картах (hhl) кут між

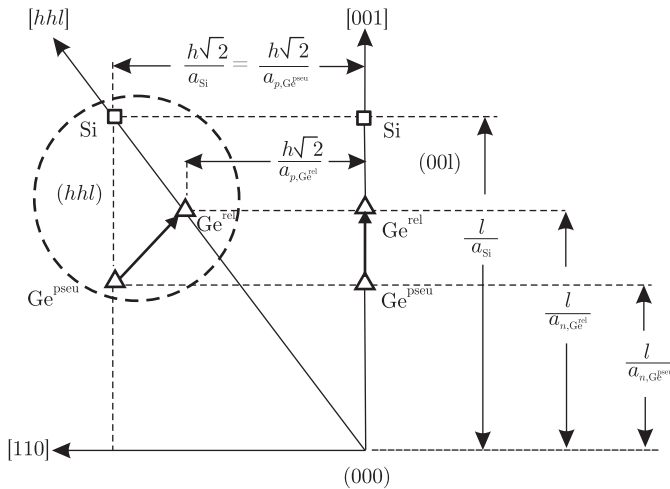


Рис. 4.3. Схематичне зображення зв'язку між віддальми в оберненому просторі і сталими ґратки

напрямок, що описує часткову релаксацію шару, і напрямком росту  $[001]$  визначається так:

$$\alpha = \arctg\left(C_{11} \frac{\operatorname{tg}(\omega - \varphi)}{2C_{12}}\right). \quad (4.10)$$

Позначимо кути  $\omega/2\theta$  і  $\omega$  як  $\Omega$  та  $\Lambda$ . Ці два кути повністю описують положення вузлів оберненої ґратки в оберненому просторі. Підкладка може бути використана як внутрішній стандарт, і значення кутів  $\Omega_S$  і  $\Lambda_S$  для ненапруженої підкладки може бути отримано з простих геометричних та бреггівських умов. Тоді кути для шару  $\Omega_L$  і  $\Lambda_L$ , які визначають відносне положення точки оберненого простору для шару з точкою підкладки, можна записати [109]:

$$\Omega_L = \Omega_S + \Delta\Omega_L - \Delta\Omega_S + \omega_L - \omega_S - \theta_L + \theta_S - \Omega_{tilt}; \quad (4.11)$$

$$\Lambda_L = \Lambda_S + \Delta\Lambda_L - \Delta\Lambda_S, \quad (4.12)$$

де  $\Delta\Omega_L$ ,  $\Delta\Omega_S$ ,  $\Delta\Lambda_L$ ,  $\Delta\Lambda_S$  описують кутові віддалі точок оберненого простору шару і підкладки від центра вимірювання КОП в  $\omega$  і  $\omega/2\theta$  напрямках.  $\Omega_{tilt}$  — різниця між положеннями точок оберненого простору підкладки і шару в  $\omega$ -скані для симетричних карт (рис. 4.4). З кутового положення піка шару на асиметричних КОП можна отрима-

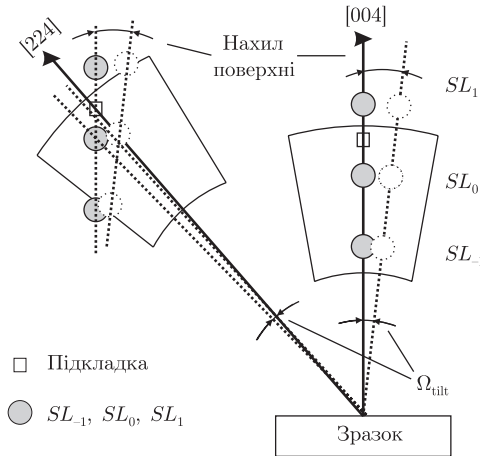


Рис. 4.4. Відносне положення вузлів оберненої ґратки для симетричних та асиметричних рефлексів



ти компоненти вектора оберненої ґратки шару вздовж  $b_z$  і перпендикулярно до напрямку росту  $b_x$ :

$$b_z = 2K \sin(\Lambda_L) \cos(\Omega_L), \quad (4.13)$$

$$b_x = 2K \sin(\Lambda_L) \sin(\Omega_L), \quad (4.14)$$

де  $K = 1/\lambda$  — абсолютне значення хвильового вектора у вакуумі. Для напрямку росту [001] і асиметричного рефлексу 224 компоненти вектора оберненої ґратки будуть залежати від параметра ґратки шару в площині  $a_p$  і в напрямку роста  $a_n$ .

$$b_z = \frac{4}{a_n}, \quad (4.15)$$

$$b_x = \frac{2\sqrt{2}}{a_p}. \quad (4.16)$$

Очевидно, що використання рефлексу 224 для аналізу напружень у площині дозволить у два рази підвищити точність, ніж при використанні 115 рефлексу, тому що кут  $\Omega = \omega - \theta$  вдвічі більший для рефлексу 224.

Принципи для аналізу напруженого стану, описані для простого випадку — одного шару на ненапруженій підкладці, можна розширити для більш складних шаруватих структур і надґраток.

### 4.3.1. Напружені шари надґраток: нахили площин, тераси, мозаїчний розподіл

У загальному випадку середній параметр ґратки  $\text{H}\Gamma$  структури відізняється від підкладки а також від параметра проміжного буферного шару. В оберненій ґратці кожна точка підкладки супроводжується точкою буферного шару і відповідних точок напружених шарів  $\text{H}\Gamma$ . Відносне положення точок залежить від періоду  $\text{H}\Gamma$  та напружень у напрямку росту і перпендикулярно.

Авторами [110] досліджувались ефекти утворення терас у  $\text{H}\Gamma$   $\text{GaAsSb}/\text{GaAs}$ . На рис. 4.5 схематично зображено процес утворення терас в  $\text{H}\Gamma$ , де  $\alpha$  — кут між напрямком латеральних модуляцій і нормаллю до кристалографічних площин. Це показує, що напрямок модуляцій не паралельний до площин ґратки. Крім того,  $\text{H}\Gamma$  може бути нахилена до підкладки, як показано на рис. 4.5. Це допускає, що шар  $\text{GaAsSb}$  може бути напруженим порівняно з ґраткою  $\text{GaAs}$ , вони вздовж терас мають однаковий міжфазний крок (когерентний ріст).

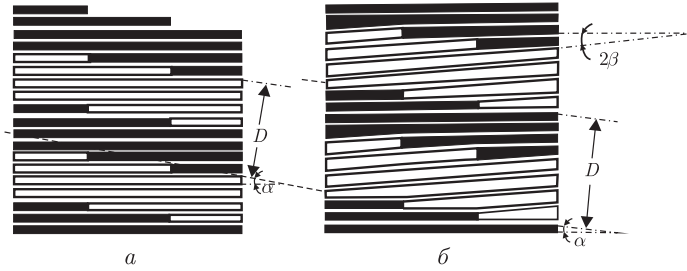


Рис. 4.5. Схема утворення терас у НГ: а — без нахилу; б — з додатковим нахилом відносно підкладки

На рис. 4.5 показаний другий кут  $2\beta$ , який показує середній нахил повної НГ (епітаксійного шару) до підкладки. Значення  $\beta$  можна записати так:

$$\beta \approx \frac{\alpha(a_{x1} - a_0)}{a_0} \approx \alpha \left( 1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) \frac{\Delta a}{a_0}. \quad (4.17)$$

де  $a_0$  і  $a_{x1}$  — параметри ґратки в сусідніх кроках вздовж тераси;  $\Delta a$  — різниця параметрів ґраток потрійної і бінарної сполук у шарах.  $a_{x1}$  має вигляд:

$$a_{x1} \simeq a_x + \frac{2C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \Delta a. \quad (4.18)$$

Таким чином, значення  $a_{x1}$  можна розрахувати з коефіцієнтів Пуассона для кубічної комірки, які стиснуті вздовж двох країв. З рівності  $C_{11} = 2C_{12}$ , яка є наближено справедливою для структури цинкової обманки для кута нахилу повністю когерентної системи впливає:

$$\beta = 2\alpha\epsilon. \quad (4.19)$$

де  $\epsilon = \Delta a/a_0$  — напруження невідповідності.

Ця модель описує механізм нахилу в режимі малих деформацій, тобто за відсутності процесу формування дислокацій невідповідності в шарах.

Наступний результат був пояснений В. Голим [111, 112] — це ефект деформацій, терас і мозаїчного розширення вузлів оберненого простору (рис. 4.6) для напружених шарів НГ структури в напрямку росту [001]. На рис. 4.6 зображено лише точки оберненого простору (004), (224) і ( $\bar{2}\bar{2}$ 4). Положення нульового піка напруженої НГ позначено (0), тобто його положення залежить лише від нормальних і латеральних

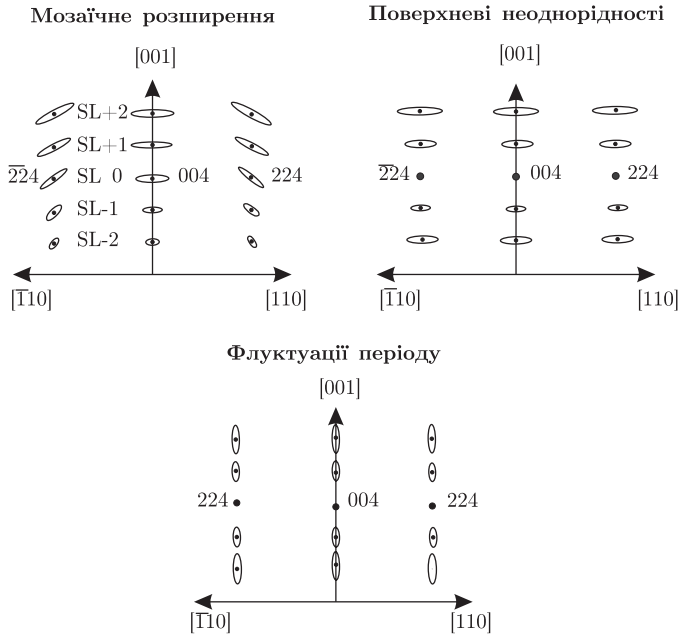


Рис. 4.6. Схематичне зображення впливу мозаїчного розширення, терас і неоднорідностей інтерфейсу в ненапружених шарах НГ

деформацій відносно напрямку росту. Положення наступних сателітів визначається періодом НГ в напрямку росту. В системі без жодних нахилів площин ці сателіти будуть вибудовуватись точно вздовж напрямку росту. Картина для асиметричних рефлексів схожа на симетричну. Якщо виникають тераси, то НГ піки будуть обертатись навколо нульового сателіта на кут  $\alpha$ , а сателіт нульового порядку буде повернутий відносно початку координат (000) на кут  $\beta$ , як зазначалося вище. Далі покажемо схематично вплив мозаїчності, флуктуацій періоду, поверхневих неоднорідностей і випадкових деформацій на форму вузлів оберненої ґратки.

Ефект мозаїчності призводить до симетричного розмиття вузлів оберненої ґратки (рис. 4.6) і викликає додаткове розширення, пов'язане з формою блоків, вздовж  $\omega/2\theta$ -напрямку та його нахил відносно ефекту мозаїки блоків в напрямку  $\omega$ -сканування. Для асиметричних вузлів видовження будуть відбуватись у напрямку  $\omega$ -повороту, більш далекі від (000) вузла сателіти будуть більше розширеними. Для по-

верхневих неоднорідностей листи контурів не будуть нахиленими відносно осі росту. З ростом порядку сателітів їх розширення перпендикулярно осі росту зростає, при цьому нульовий сателіт залишається незмінним (непотвореним).

Флуктуації періоду  $НГ$  виявляються у розширенні сателітних піків  $НГ$  вздовж напрямку росту, залишаючи при цьому незмінними сателіти нульового порядку.

### 4.3.2. Градієнтні епітаксійні шари

Градієнти напружень, так само як і хімічний склад, призводять до зміни міжплощинної віддалі в шарах. Якщо ці варіації виникають всередині розсіювального об'єму, то вони виявляють себе характером розширення  $ТОГ$  шару. Як зазначалося, для симетричних рефлексів видимим є лише параметр ґратки, перпендикулярний до поверхні. При цьому розширення вузла оберненої ґратки ( $ВОГ$ ) виникає лише вздовж нормалі до поверхні, як для градієнта напружень, так і для градієнта складу. Однак напрямок розширення значно відрізняється для цих двох градієнтів в асиметричних рефлексах (рис. 4.7). Якщо хімічний склад постійний, то градієнт напружень призводить до розширення  $ВОГ$  вздовж лінії релаксації. І навпаки, градієнт складу в шарах при постійній деформації, розширює  $ВОГ$  вздовж лінії, направленої до  $ТОГ$  підкладки (рис. 4.7, б).

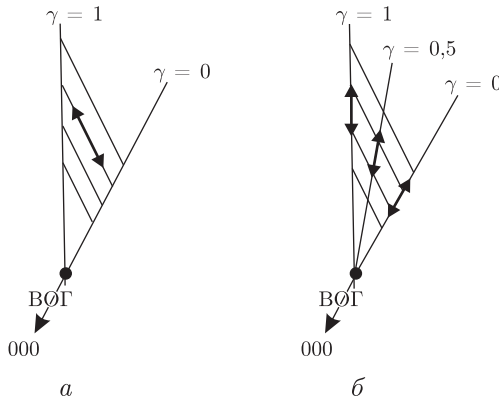


Рис. 4.7. Схематичне зображення розширень в оберненому просторі для різних градієнтів в епітаксійних шарах: а — склад постійний, змінюється деформація; б — склад змінюється, деформація постійна

### 4.3.3. Термічні напруження

Від'ємне значення параметра систематично спостерігалось на гетероструктурах типу А2В6. Таке значення релаксаційного параметра виявляється на КОП для асиметричних рефлексів, для ВОГ шару в забороненій звичай області оберненого простору. Цей випадок проілюстровано на рис. 4.8. Тут наведено КОП для рефлексу 113 від зразка ZnSe/CdZnSe/ZnSe/GaAs. На рисунку добре видно ВОГ шару CdZnSe, буферного шару ZnSe і ВОГ для підкладки GaAs. Один з шарів ZnSe знаходиться поза межами сектора деформації, зображеного на наступному рисунку. Таке положення не можна пояснити розорієнтованим ростом шару, як було показано при аналізі КОП для симетричних рефлексів. Положення вузла оберненої ґратки шару ZnSe на рис. 4.8 вказує на незвичайний стан деформації шару, викликаний великою різницею в термічних коефіцієнтах розширення між шарами і підкладкою, що могло б перевищувати спостережувані термопружні деформації завдяки низькій температурі росту для ZnSe. На рис. 4.9 зображено вплив термонапружень на вузол оберненої ґратки епітаксійного шару на кубічній підкладці. При температурах росту значно вищих, ніж температура вимірювання, шар був осаджений на підкладку. Це допускає повну релаксацію при температурах, реальних для наших експериментальних зразків, тому що товщина шару є значно більшою від теоретично визначеної критичної товщини. Таким чином, ВОГ ша-

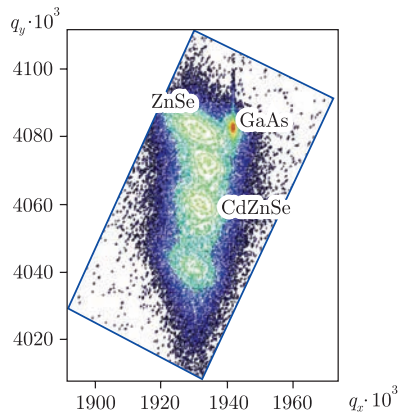


Рис. 4.8. КОП для рефлексу 113 в системі ZnSe/CdZnSe/GaAs

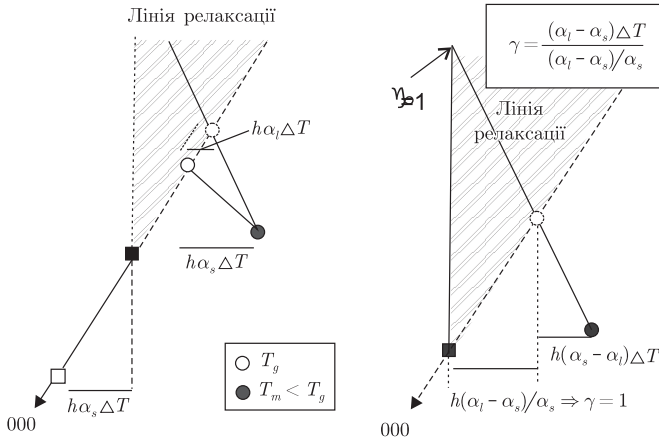


Рис. 4.9. Схематичне зображення термічних напружень в оберненому просторі і їх розрахунку в епітаксійних шарах

ру розташований на лінії, що пов'язує ВОГ підкладки з початком координат в оберненому просторі (за нормаллю до площин ґратки). При подальшому охолодженні епітаксійної структури від температури росту до вимірювання (кімнатна температура) підкладка залишається кубічною структурою. Це можна описати в оберненому просторі як зсув ВОГ від нормалі до цих площин назустріч більшим нецілим індексам Міллера. Цей зсув показаний на рис. 4.9 стрілками від ВОГ підкладки квадратами (заповненими і порожніми). Порівняно з підкладкою, матеріал шару мав менший коефіцієнт термічного розширення. Тому вільно вирощений шар може узгоджуватись при меншому значенні різниці температур. Якщо латеральні термічні напруження в гетероструктурі будуть довільно викликані термічним розширенням підкладки, то шар може бути латерально стиснутим при охолодженні.

Це призведе до його розширення в напрямку перпендикулярному інтерфейсу. Термоіндуковані напруження можуть описати зсув віртуального ВОГ шару (штрихові кола) за лінією релаксації в такий спосіб, що віддаль  $\Delta h$  між ВОГ шару при температурі росту і вимірювань є однаковою з віддаллю для підкладки. Ця віддаль  $\Delta h$  задається виразом  $h\alpha_s\Delta T$ , де  $\alpha_s$  — термічний коефіцієнт розширення матеріалу підкладки. Це призводить до зсуву ВОГ шару в область оберненого простору, який описується від'ємним значенням параметра релаксації. Базуючись на цих міркуваннях, можна записати формулу для дефор-

маційного параметра при різниці температур. Довжина  $\Delta h$  між ВОГ підкладки при кімнатній температурі і віртуальним ВОГ шару дорівнює  $h(a_l - a_s)/a_s$ , де стала ґратки є дійсною при температурі вимірювання. Ця довжина відповідає різниці в деформаційному параметрі. З іншого боку, різниця в  $h$  між віртуальним ВОГ шару і ВОГ шару при температурі вимірювання може бути отримана з рис. 4.9. Це запишеться виразом  $h \cdot (\alpha_s - \alpha_L) \Delta T$ . Тоді значення деформаційного параметра можна записати так:

$$\gamma = - \frac{(\alpha_s - \alpha_L) \Delta T}{\frac{a_L - a_s}{a_s}}. \quad (4.20)$$

Коректність цієї моделі була протестована на системі ZnSe/GaAs(100) [113].

## 4.4. Вимірювання тонких змін деформації в гетероструктурах за допомогою карт оберненого простору

У цьому параграфі проаналізуємо застосування карт оберненого простору для вимірювання тонких змін деформацій у гетероструктурах, зосереджуючи увагу на аналізі напружень у некубічних кристалах. Особливу увагу приділено збільшенню точності техніки картографування порівняно з вимірюванням звичайних дифракційних профілів. Можливості картографічного аналізу напружень ілюструються вибраними прикладами як епітаксійно вирощених структур, для яких справедливий закон Вегарда, так і імплантованих структур з невідомими невідповідностями між параметрами ґратки пошкодженого шару і кристалічної матриці.

### 4.4.1. Вступ

Точні дані про атомну концентрацію і напруження в ґратці критично важливі для сучасних мікроелектронних і оптоелектронних пристроїв, які будуються на майже досконалих тонких плівках структур. Ця інформація прихована в просторовому розподілі міжплощинної періодичності ( $d$ -періодичності) і може бути розшифрована за допомогою високороздільної рентгенівської дифрактометрії. У цьому методі кутковий розподіл дифракційної інтенсивності вимірюється з точністю до

кількох кутових секунд поблизу бреггівського рефлексу  $hkl$ . При фітуванні вимірюваних дифракційних профілів до розрахункових із використанням динамічної [114, 115] або розширеної кінематичної [116, 117] теорії можна відновити залежність від глибини профіля  $d$ , розташованого вздовж дифракційного вектора,  $\mathbf{Q} = hkl$ . Повну інформацію щодо змінених параметрів ґратки можна загалом отримати з аналізу дифракційних профілів цілого ряду асиметричних рефлексів (відбиттів, що відчують нахил векторів  $\mathbf{Q}$  до кристалічної поверхні). У разі гетероструктури, що складається з тонкої плівки і підкладки, аналіз напружень дуже простий (як мінімум, у кубічних кристалах) і може здійснюватись при вимірюванні кутової відстані між дифракційними піками плівки і підкладки [118]. Проте точність вимірювань кривих гойдання за допомогою ДКС або вимірюваннями профілю дифракції за допомогою тривісної дифрактометрії погіршується для тонших плівок внаслідок розширення піків. Ці методи також дозволяють отримати результати при частковому перекритті між піками плівки і підкладки [119]. Цей ефект часто спостерігається при використанні асиметричних відбиттів, оскільки кут нахилу між дифракційними площинами підкладки і шару призводить до зменшення кутової відстані між дифракційними піками у випадку великокутового падіння [8]. Для майже повністю напружених структур це може навіть призводити до неправильного значення параметра ґратки в площині. Як правило, точність звичайних вимірювань обмежена значенням  $\Delta d/d = 10^{-4}$ . Останнім часом картографія оберненого простору (КОП) застосовується для збільшення точності і розширення області використання високороздільної дифрактометрії [120]. Техніка КОП активно використовувалась [121, 122] для вимірювань напружень у шаруватих кубічних структурах. Доведено її дієздатність, головним чином для розрізнення між причинами дифракційного розширення піків, таких як, наприклад, мозаїчна структура, градієнти напружень і дифузне розсіяння. Продемонструємо переваги техніки КОП, що з'являються внаслідок збільшення точності до  $\Delta d/d \sim 10^{-5}$  для контролю тонких змін напружень на ранніх стадіях процесів релаксації. Метод визначення рівня напружень з КОП не залежить від хімічного складу плівки і вільний від ефектів перекриття КДВ, згаданих вище. Інформацію про повністю напружений стан гетероструктури можна одержати за відсутності інформації щодо внутрішніх невідповідностей об'єму, які, можливо, не відомі, як, наприклад, в імплантованих зразках. Викладення матеріалу зосереджено на вимірюванні тонких змін напружень у некубічних кристалах, які використовуються в сучасній мікро- та оптоелектроніці.



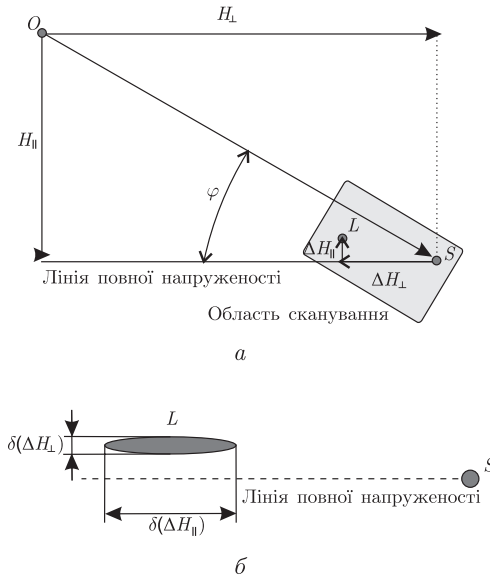


Рис. 4.10. *a* — переріз оберненого простору площиною розсіяння вузла підкладки  $S$ . Відповідний вузол шару позначений  $L$ ; *b* — збільшена частина області карти навколо ЛПД

#### 4.4.2. Теоретичні основи

ВРХД забезпечує точні значення параметрів ґратки плівки, значення залежності від ступеня напружень  $0 \leq S_i \leq 1$ , і початкові невідповідності  $m_i$  між релаксованим параметром ґратки плівки і підкладки [123]. Число різних параметрів ( $i = x, y, z$ ) невідповідності залежить від кристалічної симетрії. Наприклад, у кубічних кристалах є лише один параметр невідповідності:  $m_x = m_y = m_z$ . Повністю напружений стан гетероструктури відповідає  $S_i = 1$ , тоді як повністю релаксований стан відповідає  $S_i = 0$ . КОП засновані на двовимірних дифракційних вимірюваннях у площині розсіяння: вздовж дифракційного вектора  $\mathbf{Q}$  і в перпендикулярному напрямі. Відповідно техніка КОП дозволяє отримати, з єдиної карти, отриманої для асиметричного відбиття [124], обидві, як у площині (одна компонента на карті), так і в іншому напрямку зміни параметра ґратки. Принцип аналізу напружень зображено на рис. 4.10, на якому показано поперечний розріз оберненого простору площиною розсіяння. Тут вектор оберненої ґра-

тки  $\mathbf{H} = hkl$  сполучає початок координат оберненого простору  $O$  і вузол  $S$  підкладки. Вузол шару  $H$  позначений  $L$ . Різниця  $\Delta H = L - S$  має дві компоненти:  $\Delta H_{\perp}$  — перпендикулярну до інтерфейсу і  $\Delta H_{\parallel}$  — паралельну до інтерфейсу. Деформацію ґратки шару щодо підкладки зображено вектором  $\mathbf{u}$  (не показано на рис. 4.10), співвідношення між вектором  $\mathbf{u}$  (в реальному просторі) і вектором  $\Delta \mathbf{H}$  (в оберненому просторі) задається виразом [125]:

$$\Delta \mathbf{H} = -\text{grad}(\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}) = -\text{grad}(H_{\perp} u_{\perp} + H_{\parallel} u_{\parallel}). \quad (4.21)$$

З незсувнимим напруженнями типу  $\partial u_{\perp} / \partial x_{\parallel}$  або  $\partial u_{\parallel} / \partial x_{\perp}$  (див. нижче) у площині  $(\Delta a/a)_{\parallel}$  і  $(\Delta a/a)_{\perp}$ , зміни в параметрах ґратки можуть бути записані, як  $(\Delta a/a)_{\parallel} = \partial u_{\parallel} / \partial x_{\perp}$  і  $(\Delta a/a)_{\perp} = \partial u_{\perp} / \partial x_{\parallel}$ , що дає

$$\Delta H_{\parallel} = -\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} H_{\parallel}; \quad (4.22)$$

$$\Delta H_{\perp} = -\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} H_{\perp}. \quad (4.23)$$

Співвідношення (4.22), (4.23) забезпечують окреме визначення  $(\Delta a/a)_{\parallel}$  і  $(\Delta a/a)_{\perp}$  за допомогою вимірювання проєкцій  $\Delta H_{\parallel}$  і  $\Delta H_{\perp}$  на карті. У повністю напруженому стані  $\Delta a/a = 0$  і точки оберненої ґратки  $S$  і  $L$  сполучені прямою лінією — лінією повної деформації (ЛПД), паралельною нормалі до поверхні  $\mathbf{n}$ . Фактично ця лінія — кристалічний СТР, якщо компоненти напружень зсуву не значні. Кут  $\varphi$  між цією лінією і вектором  $\mathbf{H}$  задається простим співвідношенням:

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{H} \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{H}|} \quad (4.24)$$

чи

$$\text{tg } \varphi = \frac{H_{\parallel}}{H_{\perp}}. \quad (4.25)$$

Покращена точність КОП при визначенні важливої компоненти зміни параметра ґратки  $(\Delta a/a)_{\parallel}$  пояснена на рис. 4.10, б, на якому приведена збільшена область КОП. Як зазначалося, головний чинник, що обмежує точність вимірювання, — розширення дифракційного піку шару внаслідок його малої товщини. Проте в оберненому просторі смужка  $L$  розтягнута уздовж нормалі до інтерфейсу і тому не впливає на вимірювання параметра  $\Delta H_{\parallel}$ , який згідно (4.22)–(4.23) визначає зміни параметра ґратки в площині. Це є основою неперевершеної точності

визначення напружень з КОП, який обмежений тільки інструментально. Крім того, вимірювання звичайних дифракційних профілів проводиться так, що перетворення в оберненому просторі відбуваються вздовж вектора  $\mathbf{H}$ . Тому довжина смужки  $L \delta(\Delta H)_\perp$  завжди сприятиме ширині дифракційного піка, знижуючи точність вимірювання. У загальному випадку напруження зсуву типу  $\partial u_\perp/\partial x_\parallel$  або  $\partial u_\parallel/\partial x_\perp$ , що виникають у шарі, можна подати, виходячи з рівняння (4.21):

$$\Delta H_\parallel = -\frac{\partial u_\perp}{\partial x_\parallel} - \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\parallel H_\parallel, \quad (4.26)$$

$$\Delta H_\perp = -\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp - \frac{\partial u_\parallel}{\partial x_\perp} H_\parallel. \quad (4.27)$$

У випадку використання для вимірювань КОП симетричного відбиття  $\varphi = 0$ , вектор  $\mathbf{H}$  оберненої ґратки не має ніяких компонентів у площині інтерфейсу ( $H_\parallel = 0$ ). Визначення величин  $\Delta H_\perp$  і  $\Delta H_\parallel$  з даних КОП безпосередньо призводить до значення  $\partial u_\perp/\partial x_\parallel$  і  $\partial u_\parallel/\partial x_\perp$  (перші члени в рівняннях (4.26) і (4.27)). Для асиметричних відбиттів  $\varphi \neq 0$  вектор оберненої ґратки  $\mathbf{H}$  містить обидві компоненти  $\Delta H_\perp$  і  $\Delta H_\parallel$ . Усі члени в рівняннях (4.26) і (4.27) впливають на вимірювану різницю  $\Delta H$  на карті. Тому комбінація КОП, узята для симетричного і асиметричного відбиттів, дозволить визначити також  $(\Delta a/a)_\parallel$  і  $\partial u_\parallel/\partial x_\perp$  компоненти. Використовуючи цей метод, можна визначити комплексні зміни параметра ґратки, вибираючи відповідні відбиття для  $X$ -променів. Співвідношення між змінами в параметрах ґратки, невідповідностях і рівнях напружень можна одержати вирішенням відповідної проблеми пружності. У деяких випадках можна знайти величини  $m_i$  і  $S_i$  навіть у системах з невідомими невідповідностями, тобто в системах, для яких не виконується правило Вегарда. Це стандартна ситуація в імплантованих кристалах, тонкий приповерхневий шар яких є структурно модифікованим пошкодженнями при імплантації. Приклад застосування КОП для аналізу напружень у таких системах можна знайти в [126]. Для гетероструктур, утворених з ізоморфно заміщених компонент (для яких виконується правило Вегарда), аналіз напружень за допомогою КОП можна спростити. Зосередимо увагу на аналізі напружень у некубічних структурах, зокрема, тих, що належать гексагональній і ромбоєдричній групам, які можна описати гексагональним оточенням. Дифракційні високороздільні вимірювання в некубічних кристалах [127] швидко розвиваються, що стимулюється зростаючим інтересом до гексагональних і ромбоєдричних кристалів

(GaN, SiC, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, LiNbO<sub>3</sub>, і т.ін.) для потреб мікро- та оптоелектроніки. Розглянемо практично важливий випадок епітаксійного росту тонких плівок  $A_xB_{1-x}$  на плоскоорієнтованих підкладках (матеріал  $B$ ). Обидві компоненти, як  $A$ , так і  $B$  мають гексагональні ґратки, що різняться тільки параметрами  $a$  і  $c$ , причому  $\xi_a = (a_b - a_a)/a_a$  і  $\xi_c = (c_b - c_a)/c_a$ . Тому невідповідності між параметрами ґратки плівки і підкладки вглядатимуть так:

$$m_a = x\xi_a \quad (4.28)$$

і

$$m_c = x\xi_c, \quad (4.29)$$

де  $x$  — вміст компоненти  $A$  у сполуці  $A_xB_{1-x}$ . Симетрія в межах плоских провідників призводить до рівності  $S_x = S_y = S$  і до рівності компонент напружень:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = -Sx\xi_a. \quad (4.30)$$

Тому

$$\frac{\Delta a}{a} = x\xi_a(1 - S). \quad (4.31)$$

На вільній типовій поверхні нормальна компонента стиску  $\sigma_{zz}$  має бути нульовою. Припускаючи, що тиск не змінюється з глибиною шару, одержуємо:

$$\sigma_{zz} = C_{13}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + C_{33}\varepsilon_{zz} = 0, \quad (4.32)$$

де  $C_{ij}$  — пружні сталі жорсткості ( $C_{13} = C_{xxzz}$ ,  $C_{33} = C_{zzzz}$ ). Підставляючи (4.30) в рівняння (4.32), отримуємо

$$\varepsilon_{zz} = K\varepsilon_{xx}, \quad (4.33)$$

де

$$K = 2\frac{C_{13}}{C_{33}}. \quad (4.34)$$

Використовуючи рівняння (4.28), (4.29) і (4.33), модифікований параметр ґратки  $c$  у шарі щодо підкладки можна виразити:

$$\frac{\Delta c}{c} = x(\xi_c + KS\xi_a). \quad (4.35)$$

Рівняння (4.31) і (4.35) разом з співвідношенням (4.22–4.23) дають:

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{\Delta H_{\parallel}}{\Delta H_{\perp}} = \frac{\frac{\Delta a}{a} H_{\parallel}}{\frac{\Delta c}{c} H_{\perp}} = \operatorname{tg} \varphi \frac{\xi_a(1 - S)}{\xi_c + KS\xi_a}, \quad (4.36)$$



двовимірні розподіли дифракційної інтенсивності будують за допомогою  $\omega/2\theta$ -сканування, яке виконується при різних положеннях  $\omega$  зразка. В оберненому просторі  $\omega/2\theta$  переміщення відбуваються вздовж вектора  $\mathbf{H}$  (вісь  $q_{\parallel}$ ), а  $\omega$  — у перпендикулярному напрямку (вісь  $q_{\perp}$ ). Співвідношення між значеннями  $q_{\parallel}$ ,  $q_{\perp}$ ,  $(\Delta H_{\perp})$  і  $(\Delta H_{\parallel})$  очевидні з рис. 4.11:

$$\Delta H_{\parallel} = q_{\parallel} \sin \varphi - q_{\perp} \cos \varphi, \quad (4.42)$$

$$\Delta H_{\perp} = q_{\parallel} \cos \varphi - q_{\perp} \sin \varphi. \quad (4.43)$$

У цьому представленні, нахил лінії між  $S$  і  $L$  заданий іншим кутом:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{q_{\perp}}{q_{\parallel}} = \operatorname{tg}(\varphi - \beta). \quad (4.44)$$

Використовуючи рівняння (4.36), можна виразити нахил  $\operatorname{tg} \alpha$  через невідповідності ґраток і ступінь напружень:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\xi_c - \xi_a(1 - S) + \xi_a K S}{\xi_c + \xi_a(1 - S) \operatorname{tg}^2 \varphi + \xi_a K S} \operatorname{tg} \varphi. \quad (4.45)$$

У цій координатній системі ЛПД ( $S = 1$ ) перетинає горизонтальну вісь  $q_{\parallel}$  під кутом:

$$\operatorname{tg} \alpha_s = \operatorname{tg} \varphi, \quad (4.46)$$

$$\alpha_s = \varphi. \quad (4.47)$$

Для повністю релаксованої гетероструктури ( $S = 0$ )

$$\operatorname{tg} \alpha_r = \frac{\xi_c - \xi_a}{\xi_c + \xi_a \operatorname{tg}^2 \varphi} \operatorname{tg} \varphi. \quad (4.48)$$

Вирази (4.45)–(4.48) збігаються з тими, які були одержані прямим обчисленням в оберненому просторі [128]. У кубічних структурах ( $\xi_a = \xi_c$ ) рівняння (4.45) мають вигляд:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{(1 + K)S}{1 + K S + (1 - S) \operatorname{tg}^2 \varphi} \operatorname{tg} \varphi. \quad (4.49)$$

де  $K = 2C_{12}/C_{11}$ . Співвідношення (4.46) і (4.48) мають вигляд:

$$\alpha_s = \varphi, \quad (4.50)$$

$$\alpha_r = 0 \quad (4.51)$$

відповідно. Результати (4.50) і (4.51) були також використані в [129].

## 4.5. Вимірювання КОП у гетероструктурах

У цьому параграфі наведено приклади, які демонструють можливість ЛПД підходу для вимірювання тонких змін деформацій у шаруватих структурах. Вимірювання виконано на дифрактометрі «X'Pert PRO MRD». Вимірювання зразків з низькою структурною досконалістю здійснено з використанням вузької щілини перед детектором (замість кристала-аналізатора) задля збільшення кількості імпульсів в потоці.

### 4.5.1. Кубічні гетероструктури

У першому прикладі розглянемо гетероструктури кубічної симетрії, зокрема, методику дослідження структурної анізотропії в InGaAs/GaAs(001) структурах з ланцюгами квантових точок. ВРРД — неруйнуючий метод для дослідження періодичних нанорозмірних структур подібних до квантових точок (КТ) або квантових дротів (КД), синтезованих з використанням моди росту за Странскі-Крастановим у системах з високою невідповідністю параметрів [130–132]. Ця техніка дозволяє оцінити як технологічні параметри (товщину шару, склад), так і структурні (деформації в шарах і степінь впорядкування КТ або КД у вертикальних і латеральних напрямках) [18, 133–135]. Проте, не дивлячись на велику кількість експериментальних і теоретичних досліджень, постає багато питань щодо інтерпретації даних, одержаних від впорядкованих структур з КТ або КД. Зокрема, розщеплення когерентних сателітів надґраткових структур спостерігалось у [130, 131]. Цей ефект був пояснений існуванням двох просторово відокремлених структурних областей, що виникали завдяки латеральним композиційним модуляціям (ЛКМ) у короткоперіодних надґратках [130], або наявністю двох надґраток (НГ) із дещо різними періодами [134]. Однак детальний механізм розщеплення сателітів відсутній. У [136] показано, як при застосуванні компланарних вимірювань КОП навколо симетричних 004 і несиметричних 224, 113 точок оберненого простору, пояснити розщеплення як когерентних сателітів, так і піків дифузного розсіяння від КТ у багатошарових структурах InGaAs/GaAs.

Ланцюги InGaAs/GaAs КТ вирощено молекулярно-променевою епітаксією на напівізолюючій GaAs(100) підкладці з кутом розорієнтації до поверхні, меншим, ніж  $0,1^\circ$ , із використанням процедури, подібної до описаної в [137]. Після росту 0,5 мкм GaAs буферного шару при  $580^\circ\text{C}$ , температуру зменшено до  $540^\circ\text{C}$  для росту багатошарових (17-періодних) точкових структур до певних товщин шарів (7,6 моно-

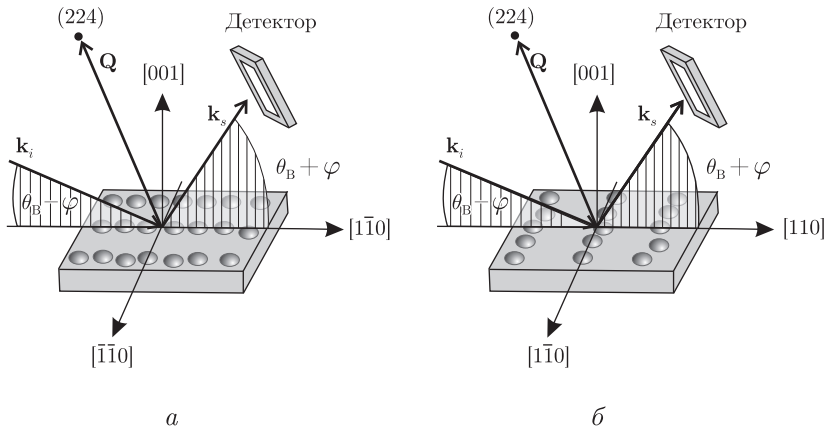


Рис. 4.12. Компланарна геометрія дифракції. Дифракційна площина паралельна (а) і перпендикулярна (б) до напрямку ланцюгів КТ.  $\varphi$  — кут між поверхнею та площинами дифракції;  $\theta_B$  — кут Бреґга;  $\mathbf{k}_i$  і  $\mathbf{k}_s$  — падаючий та дифрагований промені відповідно;  $\mathbf{Q}$  — вектор дифракції. Площина розсіяння (заштрихована область) перпендикулярна до поверхні зразка

шарів (МШ)  $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/60$  МШ GaAs). Радіальні скани отримано на високороздільному дифрактометрі «X'Pert PRO MRD XL» з бартелівським чотирикристальним монохроматором Ge(220) і випромінюванням  $\text{CuK}_\alpha$ . Трикристальний аналізатор Ge(220) з кутовою розбіжністю 12 кут.с використовувався для вимірювання КОП. Експериментальні дані одержано для різних азимутних напрямків: площини розсіяння були  $(1\bar{1}0)$  і  $(110)$ , тобто перпендикулярно ( $\Phi = 90^\circ$ ) і паралельно ( $\Phi = 0$ ) напрямку ланцюгів КТ відповідно (рис. 4.12). Використано симетричні 004 та несиметричні 113 і 224 дифракційні геометрії.

На рис. 4.13 зображено радіальні скани поблизу 004 брегтівського піка при  $\Phi = 0$  і  $90^\circ$  разом з моделюванням, за умови тетрагонального спотворення системи шарів. Ці дифракційні профілі містять арсенідгалієвий пік підкладки, середній НГ пік нульового порядку  $SL_0$  і ряд послідовних піків сателітів  $SL_{n\pm}$ , які з'являються завдяки інтерференції між шарами GaAs і InGaAs. Піки НГ показують систематичне розщеплення для обох азимутальних напрямків. Зазначимо, що нами не спостерігалась відсутність непарних сателітних піків, як було повідомлено в [130].

Для одержання інформації щодо структурних параметрів закритих InGaAs КТ, ми вимірювали КОП. КТ дають дифузне розсіяння



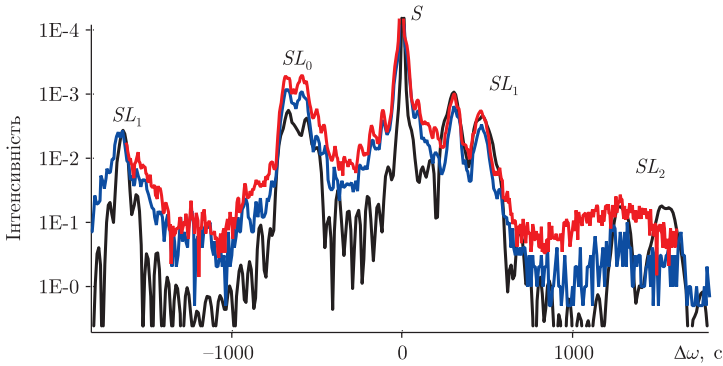


Рис. 4.13. ВРРД радіальні скани навколо 004 бреггівського піка при  $\Phi = 0^\circ$  (червона крива) та  $\Phi = 90^\circ$  (синя крива) разом із симульованими сканами (чорна крива) з використанням динамічної теорії

поблизу когерентних сателітів  $\text{Hg}$ . На рис. 4.14 зображено типові КОП, зроблені біля 224 піка для двох взаємно перпендикулярних напрямків, на яких видно сателітні піки як у вертикальній, так і в латеральній структурах. Ці карти, а також карти, отримані для несиметричного 113 відбиття, вказують на те, що  $\text{Hg}$  є повністю напруженою відносно підкладки і арсенід-галієвого буферного шару. Окрім того, вимірювання 004, 224 і 113 КОП для  $\Phi = 90^\circ$  підтвердили розщеплення сателітів  $\text{Hg}$ . Латеральні сателіти дифузного розсіяння від InGaAs КТ спостерігалися як поблизу  $SL_0$ , так і поблизу піків високих порядків. Вимірювання КОП проводились поблизу 004 і 224 відбиттів. Як очікувалось, на карті від вихідного зразка (рис. 4.14, а), спостерігається дуже вузький розподіл інтенсивності, сконцентрованої навколо ЛПД з нульовим нахилом  $\beta = 0$  (див. рівняння (4.41)).

Періодична модуляція інтенсивності уздовж нормалі до поверхні добре спостерігається на перерізах експериментальних карт, що представляють вертикальну періодичність  $\text{Hg}$  (рис. 4.13). Можна побачити, що існують дві системи послідовних сателітів  $\text{Hg}$  у радіальних сканах. Ці системи спостерігалися на КОП для 004, 113, 224 відбиттів. Два вертикальні періоди  $\text{Hg}$  оцінено з радіальних сканів і рівні  $L_1 = 19,7 \pm 0,1$  нм та  $L_2 = 19,02 \pm 0,08$  нм. На противагу [138], виконані моделювання вказують, що бічні композиційні модуляції, які з'являються завдяки наявності ланцюгів КТ, не можуть пояснити спостережуване розщеплення як для  $[110]$ , так і  $[\bar{1}\bar{1}0]$  напрямків. Гратча-

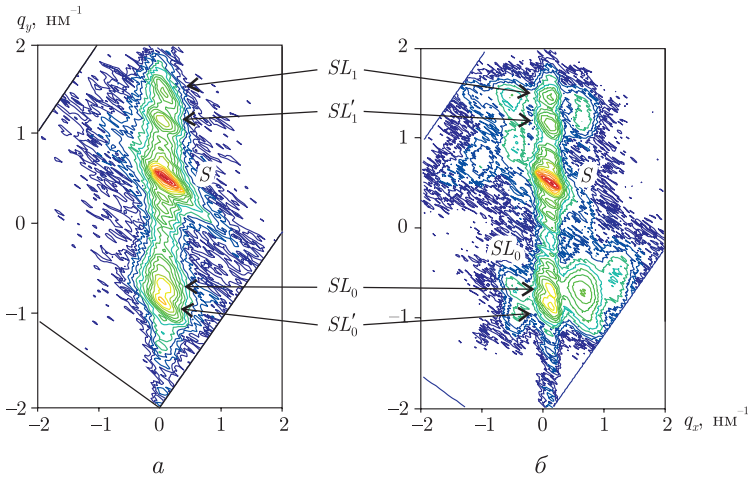


Рис. 4.14. 224 КОП, виміряні для InGaAs/GaAs зразка з ланцюгами КТ при  $\Phi = 90^\circ$  (а) і  $\Phi = 0^\circ$  (б).  $S$  — пік від підкладки,  $SL_0, SL_1, SL'_0, SL'_1$  — когерентні сателіти для двох  $\text{H}\Gamma$  структур

сті спотворення також не пояснюють цілком це явище, оскільки в [89] зазначено, що цей ефект — азимутально-залежний. Розщеплення вертикальних сателітів  $\text{H}\Gamma$  найбільше вказує на те, що в структурі  $\text{H}\Gamma$  існують два дискретні періоди [139]. Це доведено моделюванням, наведеним на рис. 4.13 (штрихова лінія).  $\text{H}\Gamma$  період сформований тільки товщиною змочувального шару і арсенід-галієвого шару. Кореляція позицій точок дає малий внесок в утворення послідовної  $\text{H}\Gamma$  структури, але досить значний у перерозподіл пружних полів деформацій. Тому наявність двох різних періодів  $\text{H}\Gamma$ , що відповідають вертикальному і похилому вибудовуванню КТ, викликана тільки зміною товщини змочувального шару в цих періодах.

Розсіяна інтенсивність за межами СТР сконцентрована в так званих смугах резонансного дифузного розсіяння (рис. 4.14, а, штрихпунктирна лінія). Особливі властивості цих смуг визначені ступенем вертикального і латерального впорядкування КТ. Якщо площина розсіяння перпендикулярна до напрямку  $[1\bar{1}0]$  (рис. 4.14, а), то смуги можна зобразити як дві системи бічних сателітів, одна з яких нахилена щодо нормалі до напрямку зростання  $[001]$ . Щоб пояснити спостережувану картину, приведено розподіл КТ у прямому просторі і його перетворення Фур'є (рис. 4.15).

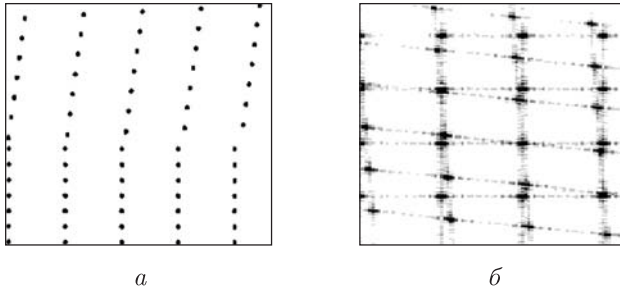


Рис. 4.15. Кореляція між центрами розсіяння в прямому просторі (а) і сателітної структурою в оберненому (б) для строго вертикального і нахиленого наслідування центрів розсіяння

Тільки аналіз даних КОП надає інформацію про наявність закритих ланцюгів КТ і їх нахил у структурі. Використання добре відомого співвідношення періодичності в реальному і оберненому просторах  $\Delta\theta = 2\pi/\Delta L$  дає можливість визначити період латеральних модуляцій складу  $L_{LCM} = 82,3$  нм. Звернемо увагу на значну різницю між КОП поблизу 224 вузла для взаємно перпендикулярних кристалографічних напрямків (рис. 4.14). Якщо дифракційна площина перпендикулярна до ланцюгів КТ, то бічні сателіти ясно спостерігаються (рис. 4.14, а), тоді як для паралельного ланцюгам КТ розташування площини дифракції видно лише значне дифузне розсіяння (рис. 4.14, б). Це відбувається завдяки слабкій кореляції позицій КТ у ланцюгах або великій дисперсії розмірів КТ. Вертикальна ширина бічних сателітів залежить від вертикальної кореляції позицій ланцюгів КТ. Використовуючи техніку, описану в [134], вертикальну довжину кореляції можна легко оцінити. Для цього зразка вона дорівнює до 200–250 нм.

Порівняння інтенсивності різних порядків сателітів і експериментальних КОП дозволяє оцінити середнє квадратичне відхилення величини ЛМС. У нашому випадку  $LCM = 5$  нм. Ми спостерігали дві системи вертикальних сателітів на КОП для 004, 113, 224 відбиттів і для будь-якої азимутальної орієнтації зразка. Це пояснено наявністю двох незалежних періодів у структурі НГ зі значеннями  $L_1 = 19,7 \pm 0,1$  нм і  $L_2 = 19,02 \pm 0,08$  нм. Було показано, що два незалежні періоди НГ виникають завдяки різниці в товщині змочувальних шарів, що утворюють просторово відокремлені структурні області з різним знаком вибудовування КТ у напрямку зростання. Коли дифракційна площина перпендикулярна до  $[1\bar{1}0]$  напрямку, дві системи бічних сателітів

спостерігаються на КОП для всіх відбиттів. Одна з систем паралельна поверхні, а інша нахилена під кутом  $30,0^\circ \pm 2,5^\circ$ .

#### 4.5.2. Вплив латеральних модуляцій складу на зародження і впорядкування масиву квантових острівців у багат шарових періодичних структурах InGaAs/GaAs

Дослідженням механізмів формування і властивостей In(Ga)As КТ, як уже зазначалося, присвячено велику кількість робіт у зв'язку з перспективами їх застосування в нових пристроях опти- і наноелектроніки, наприклад [132, 140–142]. Одержані експериментальні і теоретичні дані дозволяють феноменологічно пояснити механізм початкової стадії переходу від пошарового зростання плівки до утворення тривимірних 3D-острівців. Проте в літературі часто вказується на значну залежність 2D–3D-переходу від різних чинників, що впливають на процес формування InGaAs самоорганізованих КТ, таких, наприклад, як температура росту, швидкість осадження, компонентний склад, орієнтація підкладки і її розорієнтація [131, 143–145]. Для розуміння механізмів релаксації пружних деформацій у напружених гетероструктурах особливо важливими є дослідження структурних змін у шарах гетероструктури поблизу областей інтерфейсу, де утворюються КТ. Нещодавно доведено ефективність X-променевих методів дослідження структурних змін у низькорозмірних напівпровідникових структурах при релаксації пружних деформацій, таких як інтерфейсні неоднорідності, кореляційна довжина локального структурного розупорядкування, структура КТ. Ці передумови не мають зараз задовільного експериментального підтвердження і стимулюють проведення подальших детальних досліджень механізмів впорядкування ансамблів напівпровідникових нанокластерів шляхом модифікації поверхневих надструктур. У цьому розділі розглядається застосування двовимірних карт розподілу дифрагованого X-випромінювання в оберненому просторі для дослідження впливу латеральних модуляцій складу і вмісту індію в багат шарових напружених InGaAs/GaAs структурах на просторове впорядкування КТ. Наші дані показують, що за певних умов зростання в цих гетероструктурах можуть формуватися однорозмірні масиви модуляції складу (товщини), які необхідно розглядати при аналізі початкового етапу формування квантових точок і ниток без використання шаблонної підкладки.

Досліджувалися 8-періодні  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$  структури, вирощені на напівізолюваній підкладці  $\text{GaAs}(100)$  методом МПЕ. Буферний шар арсеніду галію товщиною 0,5 мкм вирощувався при температурі підкладки 580 °С. Потім температуру підкладки зменшували до 540 °С для вирощування багатопарових надгратчастих структур  $8 \times (14\text{ML}(\text{In}, \text{Ga})\text{As}/40\text{ML} \text{GaAs})$ . Номінальна концентрація індію в  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  шарі становила 0,20, 0,25, 0,28, 0,30 і 0,35. Вимірювання кривих дифракційного відбиття (КДВ) проводилося на високороздільному дифрактометрі «X'Pert PRO MRD XL». Для побудови карт оберненого простору використано трикристальний аналізатор  $\text{Ge}(220)$  з кутовою розбіжністю 12 кут. с. Для всіх зразків вимірювалися карти оберненого простору в симетричній 004 і асиметричній 113, 224 і 404 дифракційній геометрії (ковзні кути падіння). КДВ і карти оберненого простору знімалися для різних азимутальних напрямків: площина дифракції — (110) і  $(1\bar{1}0)$  для 004, 113 і 224 геометрії, тоді як для 404 — (100). Кут розорієнтації підкладки  $\text{GaAs}$  у досліджуваних структурах не перевищував 0,35°.

Структурні зміни в  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  структурах при формуванні  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  шарів із різною концентрацією індію визначають їх електронні властивості і відповідно їх спектри випромінювання. Аналіз даних сканувальної атомно-силової мікроскопії (рис. 4.16) зразка з  $x = 0,28$  дозволяє констатувати, що на початковому етапі  $2D$ – $3D$  переходів формуються два типи квантових структур:  $3D$ -острівці, збагачені індієм, і  $2D$ -острівці з меншою концентрацією  $\text{In}$ , що характеризуються малою висотою і порівняно великими латеральними розмірами

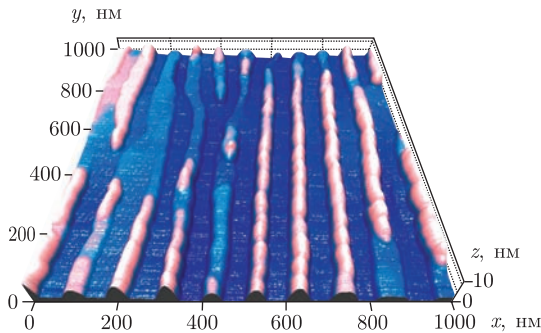


Рис. 4.16. АСМ зображення фрагмента поверхні структури  $\text{In}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}/\text{GaAs}$ . Поле сканування —  $5 \times 5$  мкм

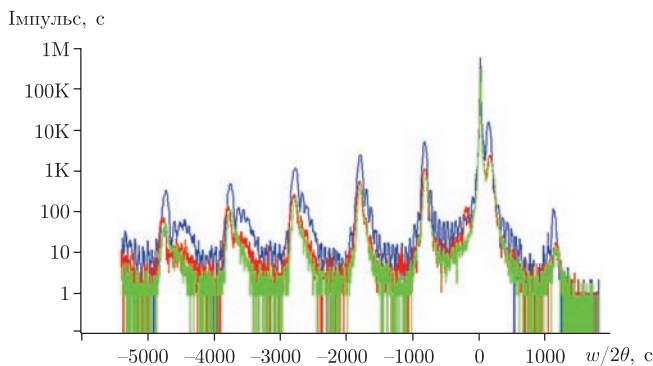


Рис. 4.17. КДВ для структури InGaAs/GaAs

(близькими до форми  $2D$ -пластинок). Останні можна розглядати як прекурсори для зародження великих  $3D$  острівців.

На рис. 4.17 наведено окремі трикристалльні скани для багатошарових структур з різним вмістом індію. Аналіз цих КДВ свідчить про те, що багатошарова структура має хорошу кристалічну якість, а межа поділу між бар'єрними шарами GaAs і КЯ  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  із вмістом індію 0,20–0,25 чітка і когерентна. Подальше підвищення концентрації індію в твердому розчині призводить до виникнення дифузного фону, який дещо замиває «швидкі» товщинні осциляції. Це, вірогідно, пов'язано з впливом деформаційних полів, викликаних латеральними модуляціями складу. Проте відповіді на це питання виявилось можливим тільки при використанні аналізу карт розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки, які дають можливість відокремити вплив латеральних модуляцій складу і недосконалості інтерфейсу.

На рис. 4.18 показані виміряні 113 КОП для зразків із вмістом індію 0,20, 0,28 і 0,35. Виміряні карти показують гострі піки при  $Q_x = 0$ , які позначені  $SL_0$ , і  $SL_{\pm n}$ . Горизонтальна ширина цих максимумів визначається роздільною здатністю дифрактометра і являє собою когерентний розподіл розсіяної інтенсивності. Когерентно розсіяна хвиля залежить тільки від латерально усередненої структури зразка. Проте слід зазначити, що на картах, одержаних у напрямку площини дифракції (110), відмічено розширення цих максимумів, а також смуг інтенсивності розташованих між ними.

Це свідчить про латеральні розвороти ґратки уздовж певних напрямків. Ці розвороти, найімовірніше, є результатом латеральних мо-

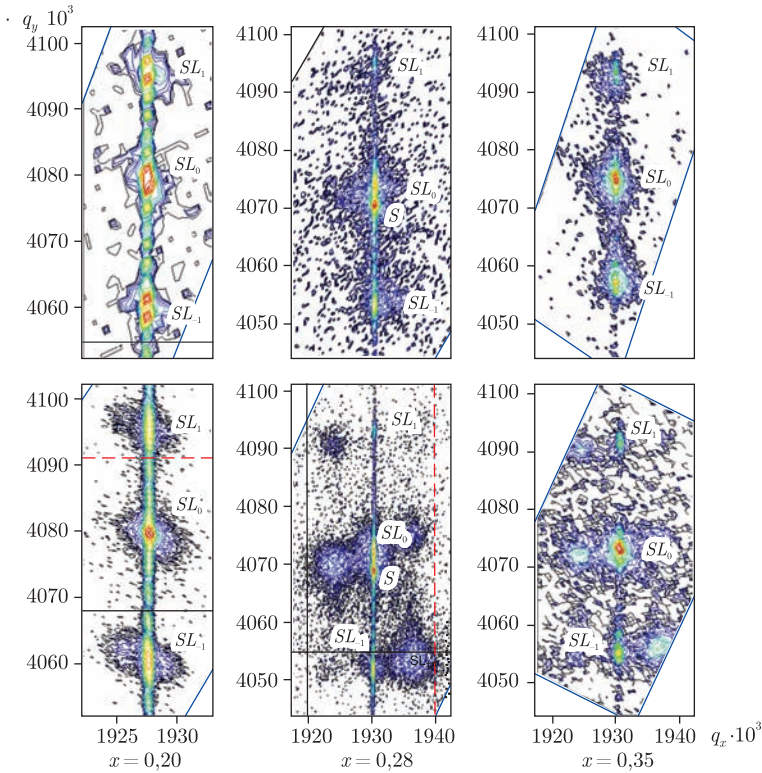


Рис. 4.18. Карти розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі біля вузла 113 для площини дифракції (110) (верхній ряд) і (110) (нижній ряд) для структури  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

дуляцій складу вздовж напрямку [110]. Таким чином, їх формування починається вже при вмісті індію в КЯ приблизно 0,25. Піки, відмічені як  $S$  відповідають дифракції від підкладки, а  $SL_n$  —  $n$ -й пік сателіта латерально усередненої  $\text{H}\Gamma$ . Відстань між сателітами дорівнює  $2\pi/D$  ( $D$  — період  $\text{H}\Gamma$ ), а відстань між  $SL_0$  і піком підкладки пропорційна відносній різниці вертикального параметра ґратки підкладки і середнього параметра  $\text{H}\Gamma$ .

Самоорганізовані квантові точки породжують дифузне розсіяння  $X$ -променів, яке супроводжує когерентну дифракцію. Дифузне розсіяння зумовлено різницею в розсіювальних факторах  $\text{InAs}$  та  $\text{GaAs}$  і

поля пружної деформації в матриці GaAs навколишньої точки. У разі  $X$ -променевого відбиття тільки перший механізм дає внесок. Якщо вектор дифракції близький до вектора  $\mathbf{h}$  оберненої ґратки, то розсіяна інтенсивність чутлива до  $h$ -ї фур'є-компоненти поляризованості  $\chi(r)$  кристала. У цьому випадку дифузне розсіяння переважно викликане полем деформації як за межами, так і всередині точки. Інформація щодо структури точок міститься тільки в дифузно розсіяній інтенсивності, яка супроводжує когерентну інтенсивність [146].

Розподіл розсіяної інтенсивності в  $Q_x$  напрямі визначений латеральним розташуванням точок, а для дифракції  $X$ -променів — полями деформації всередині і за межами точок. Цей розподіл точок даватиме латеральні сателіти інтенсивності в положеннях  $Q_x = 2\pi p/L$  ( $L = \langle l \rangle$  — середня точкова відстань,  $p$  — ціле число). Відстань між латеральними сателітам інтенсивності дорівнює  $2\pi/L$ , а їх ширина пропорційна дисперсії розподілу відстані. Форма латеральних сателітів не залежить від вертикальної кореляції точок. Оскільки об'єм спотвореної області навколо точки набагато більший, ніж точка безпосередньо, то внесок поля деформації навколо точок у дифузно розсіяну інтенсивність сконцентрований переважно у безпосередній близькості  $SL_0$ .

Тому на розподіл інтенсивності далеко від  $SL_0$  впливає переважно центр розсіяння, тобто стан деформації ґратки точки. Завдяки цьому, можна визначити напруження в точках з розподілу інтенсивності в цій області [39, 147, 148]. Інформація щодо острівців міститься в дифузних піках, які супроводжують когерентні сателіти. На картах, одержаних в асиметричній дифракції (рис. 4.18), дифузні піки виявляють явну асиметрію щодо осі  $Q_z$ . Біля  $SL_0$  (тобто, для малої величини вектора дифракції  $|\Delta q|$ ) дифузне розсіяння визначене переважно полем деформації і розсіянням ґратки далеко від точки. Максимум дифузної інтенсивності навколо  $SL_0$  зміщений у додатному  $Q_x$  напрямі, тобто у напрямку більшого значення  $h_x$ , яке відповідає деформації стиску ґратки кристала GaAs між точками. Дифузні піки навколо  $SL_1$  зміщені у від'ємному  $Q_x$  напрямку до менших значень  $h_x$ . Тому ця частина смуг дифузного розсіяння одержана від розтягнутих областей ґратки, тобто від об'ємів точок. Середню величину деформації в площині в точках, середню латеральну відстань між точками і його статистичну дисперсію наведено в табл. 1.

На рис. 4.19 зображено проєкції дифузних піків  $SL_0$  сателіта на  $Q_x$  вісь для відбиття 113 у зразках із вмістом індію 0,20, 0,28 і 0,35. Латеральні максимуми виникають тільки при площині розсіяння  $(1\bar{1}0)$ . При цьому спостерігається лише один латеральний максимум, а інші



Таблиця 1. Параметри зразків, отримані з рентгенівських вимірювань

Параметри /склад	$D$ , нм	$\varepsilon_{\text{GaAs}}$	$\varepsilon_{\text{InGaAs}}$	$L$ , нм	$\sigma$ , нм
0,20	$21,7 \pm 0,2$	—	—	—	—
0,25	$21,9 \pm 0,3$	—	—	—	—
0,28	$22,2 \pm 0,6$	-0,0003	0,0034	$62 \pm 2$	$15 \pm 6$
0,3	$22,4 \pm 0,1$	-0,00025	0,004	$55 \pm 2$	$17 \pm 7$
0,35	$22,9 \pm 0,7$	0,00036	0,0044	$51 \pm 2$	$18 \pm 7$

пригнічені внаслідок великої дисперсії у відстанях між точками. У разі симетричної дифракції також виникають латеральні максимуми, не дивлячись на мале значення проекції когерентної довжини падаючих  $X$ -променів порівняно з асиметричною дифракційною геометрією. Коли площина розсіяння становитиме  $(110)$ , дифузні максимуми будуть відсутні практично для всіх зразків.

Аналогічні максимуми для площини розсіяння  $(\bar{1}\bar{1}0)$  також видно в  $Q_x$  проекції  $SL_1$  сателіта (рис. 4.20). На рисунках можна побачити, що положення латеральних сателітів ідентичні навколо 113 і 224 вузлів оберненої ґратки. З положень сателітів знаходимо середню відстань між точками (див. табл.1) у зразках зі складом індію 0,28 і 0,35, які

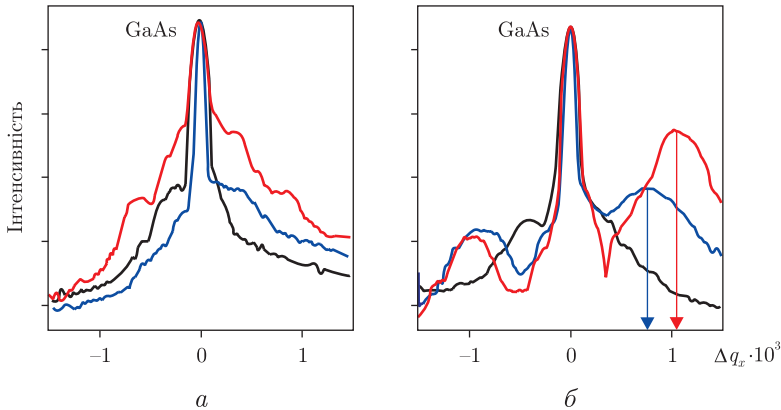


Рис. 4.19. Проекція перетину піків дифузного розсіяння поблизу сателіта  $SL_0$  на вісь  $q_x$ , одержана КОП навколо вузла 113 для площини дифракції  $(110)$  (а) і  $(\bar{1}\bar{1}0)$  (б) для структури InGaAs/GaAs. Чорна крива —  $x = 0,20$ , синя —  $x = 0,28$ , червона —  $x = 0,35$

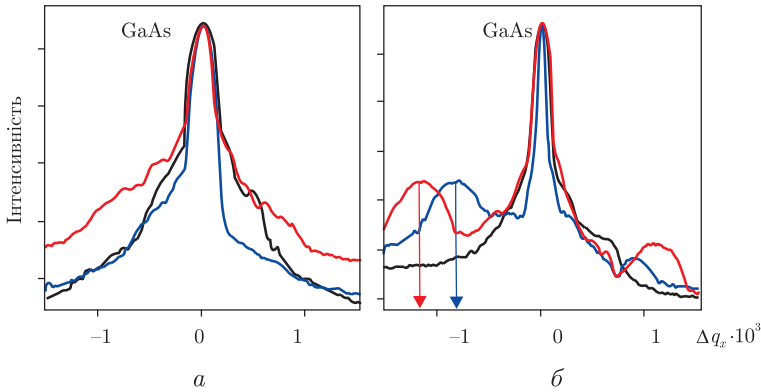


Рис. 4.20. Проекція перетину піків дифузного розсіяння поблизу сателіта  $SL_1$  на вісь  $q_x$ , одержана КОП навколо вузла 113 для площини дифракції (110) (а) і ( $\bar{1}\bar{1}0$ ) (б) для структури InGaAs/GaAs. Чорна крива —  $x = 0,20$ , синя —  $x = 0,28$ , червона —  $x = 0,35$

узгоджуються в межах експериментальної точності з даними АСМ. У вимірних картах зразків із вмістом індію 0,20–0,25 явно виражених бічних максимумів поблизу  $SL_0$  дифузного максимуму не виявлено, і тому латеральне розділення точок не можна визначити.

Наявність яскраво вираженої асиметрії в появі дифузних піків наводить на думку, що ці латеральні сателіти зумовлені модуляціями складу в певному кристалографічному напрямі. Внаслідок модуляцій точки, утворені на збагачених індієм лініях, мають більшу впорядкованість у перпендикулярному напрямку вздовж  $[110]$ , ніж вздовж ліній модуляції складу  $[\bar{1}\bar{1}0]$ .

З ширини сателітів  $\delta Q_x = (\sigma Q_x^2)/L$  оцінено середньоквадратичну дисперсію  $\sigma$  точкових відстаней. Значення  $L/\sigma = 3 \pm 1$  для зразків зі складом 0,30–0,35 свідчить про те, що положення точок є корельованими аж до сусіда третього порядку, тобто існує тільки ближній порядок точок. На КОП (рис. 4.18) чітко виявляється система впорядкованих надграткових сателітів декількох порядків з тонкою структурою. Вертикальний порядок точок у шарах НГ впливає на ширину дифузних максимумів у напрямку  $Q_z$  (тобто у напрямку росту). Як можна спостерігати, ця ширина не залежить від порядку сателіта, і вона така ж, як і ширина когерентних максимумів (вимірювання для  $Q_x = 0$ ). Когерентні ширини в наших вимірюваннях приблизно дорівнюють  $2\pi/(ND)$ . З цих вимірювань оцінено вертикальну довжину

кореляції  $\xi_{\text{сорт}}/(ND) > 0,65$  і зроблено висновок, що більше половини точок вертикально впорядковані.

Дані з аналізу експериментальних КДВ свідчать, що багатошарова структура має хорошу кристалічну якість, а межа розділу між бар'єрними шарами GaAs і КЯ  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  із вмістом індію 0,20–0,25 чітка і когерентна. Подальше підвищення концентрації індію в твердому розчині призводить до виникнення латеральних модуляцій складу з подальшим зародженням (вздовж цих модуляцій) тривимірних утворень у вигляді острівців. При цьому формування латеральних модуляцій складу відбувається в строго визначених кристалографічних напрямках [110], і зумовлене анізотропією в розподілі пружних постійних і поверхневих зв'язків для напрямків [110] і  $[1\bar{1}0]$  у структурі цинкової обманки. Ці модуляції складу і задають латеральне впорядкування острівців, що зароджуються в певних напрямках, у нашому випадку — вздовж [110] з періодичністю латеральних модуляцій. В інших кристалографічних напрямках  $[1\bar{1}0]$  це впорядкування відбувається при дещо менших концентраціях індію, про що свідчать і карти розподілу дифузної інтенсивності в оберненому просторі.

#### 4.5.3. Рентгенодифрактометричні дослідження деформаційного стану гетероструктур InGaAsSbN/GaAs з квантовими ямами

Останнім часом зріс інтерес до довгохвильових лазерних діодів (1,3–1,55 мкм) завдяки можливості виробництва нових оптоелектронних приладів (квантово-розмірних лазерів, фотодетекторів та ін.) [149]. У багатьох роботах [150–152] зазначено, що хорошою основою для отримання таких діодів є вирощені молекулярно-променевою епітаксією багатошарові структури з квантовими ямами (КЯ) типу InGaAs, серед яких особливо перспективний InGaAsN/GaAs. Проте через велику межу розчинності цих матеріалів залишаються поки труднощі при отриманні випромінювання на довжинах хвиль, більших, ніж 1,3 мкм. До того ж величезні труднощі викликає отримання сполук InGaAsN і GaNAs хорошої якості. Їх структурна досконалість швидко погіршується зі збільшенням вмісту азоту (N), який призводить до швидкого збільшення локальної деформації і кластеризації в деформованих шарах [153]. Для поліпшення структурних характеристик КЯ в процесі зростання використовують Sb у якості поверхнево-активної речовини [154]. Зазначимо, що в плівках напівпровідникових сполук III–V відбувається спонтанна поперечна модуляція складу, яка призводить до

сильних змін оптоелектричних властивостей напівпровідникових матеріалів. Серед спонтанно впорядкованих наноструктур, характерних для сполук InGaAs, за високої концентрації азоту і індію виділимо як утворення неоднорідностей складу за індієм і азотом, так і утворення періодичних структур плоских доменів [155]. У таких системах сусідні домени розрізняються сталою кристалічної ґратки і структурою поверхні, а отже, доменні межі є джерелами далекодіючих полів пружних деформацій.

Ці чинники ускладнюють, а інколи роблять неможливою інтерпретацію і аналіз рентгенівських дифракційних спектрів, одержаних від цих структур. У багатьох роботах [156–159] досліджувалися речовини такого типу. Так при дослідженні комплексної лазерної структури InGaAs/GaAs ([115]) автори спостерігали незвичайний дифракційний ефект осцилювального розподілу дифрагованої інтенсивності в оберненому просторі, відомий як «wiggles». Подібний ефект також спостерігався і для інших структур (SiGe, AlGaAs), як багатопарових, так і однопарових. Проте спроби інтерпретувати ці спектри і одержати достовірні структурні параметри не були успішними.

Описані вище структурні особливості напівпровідникових матеріалів і їх вплив на дифракцію рентгенівських променів призводять до необхідності застосування комплексу різноманітних високороздільних методів для досліджень. Проте навіть не зважаючи на це, проблема пояснення дифракції від таких структур все ще далека від завершення. Тому метою цього пункту є пояснення даного ефекту за результатами власних досліджень впливу анізотропії деформаційних полів і латерального розподілу компонент у КЯ і прилеглих до неї шарів на дифракційні спектри і двовимірні карти розподілу інтенсивності в оберненому просторі. Схему багатопарової структури з описаною КЯ зображено на рис. 4.21. Товщина КЯ — 6 нм,  $x = 0,22$  (In). Товщина шару значно менша за критичну товщину утворення дислокацій невідповідності.

Відомо, що легування азотом (N) у трикомпонентному  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  призводить не лише до локальних структурних змін при заміщенні As, а й до можливих змін локальної структури навколо домішок In. Додавання атомів In у GaAs збільшує сталу ґратки і заборонену зону, тоді як впровадження атомів N в GaAs зменшує і сталу ґратки, і заборонену зону [160, 161]. Крім того, введення In і N може збільшити деформації стиснення і розтягування в тонких плівках  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ , обложених на GaAs. Тому, можливо, що морфологія гетерограніці поділу активно впливає на формування фізичних властивостей такої багато-

Покриваючий шар GaAs 40 нм
Шар $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ 50 нм
Шар GaAs 40 нм
<b>Квантова яма <math>\text{InGaAs}(\text{N})\text{Sb}</math> 6 нм</b>
Шар GaAs 100 нм
Шар $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ 50 нм
Підкладка n-GaAs (100) + буферний шар GaAs

Рис. 4.21. Схематичне зображення досліджуваних зразків

шарової структури. При цьому, хоча додавання N у InGaAs зменшує невідповідність ґраток між InGaAsN і GaAs, можливий так званий 3D-ріст (острівцевий) шару InGaAsN [154].

З метою вивчення як деформацій, так і розорієнтацій у лазерних структурах одержано двовимірні карти розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки як симетричних 400, так і асиметричних 113 і 224. Карти оберненого простору для вузла 400 показали коливальний розподіл інтенсивності вздовж нормалі до поверхні структури, відомий в літературі як «змійка» (wiggles) (рис. 4.22).

Азимутальні дослідження розподілу інтенсивності для цього вузла показали наявність цієї змійки для різних кристалографічних напрямків. Проте в азимутальному напрямку [110] такий розподіл виявився дуже широким на  $\omega$ -скані, одержаному для піка підкладки. В деяких зразках він має дуже велику напівширину (рис. 4.23). Причому інколи виразно спостерігається кілька максимумів, що свідчить про наявність у структурі кількох розорієнтованих областей (блочна структура), що відповідають шарам арсеніду галію.

Аналіз карт розподілу інтенсивності в оберненому просторі призводить до наступної моделі деформації і розорієнтації в цих структурах. Наявність змійки в усьому інтервалі азимутальних кутів свідчить про те, що розорієнтації не мають яскраво вираженого одного напрямку, тобто мають різну кристалографічну прив'язку.

Відомо, що під час епітаксійного осадження InGaAs-GaAs шарів процес формування латеральних модуляцій складу істотно змінює характер розподілу пружних деформацій порівняно з плоскими шарами.

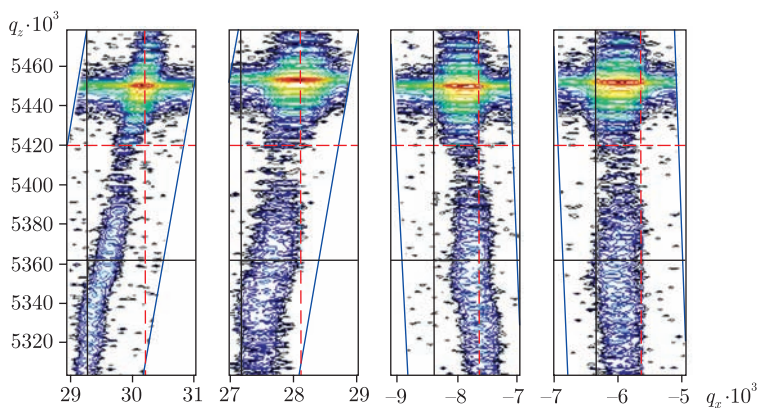


Рис. 4.22. Карти розподілу інтенсивності навколо вузла 004 для структури InGaAsN для різних азимутальних напрямків відносно  $[110]$ : 0; 90; 180 і 270°

При цьому реалізується анізотропний характер розподілу деформацій відносно кристалографічних напрямків типу  $\langle 011 \rangle$ , що зумовлює анізотропію структурних параметрів (наприклад, пониження структурної симетрії), яка спостерігається в планарних гетероструктурах. За наявності напружень композиція сполуки варіюється вздовж напрямку хвилястості, оскільки більші атоми прагнуть об'єднатись у кластери, коли ґратка розширена, а менші — коли стиснута.

Симетрія періодичних структур плоских доменів (модуляції складу) визначається як симетрією тензора поверхневих натягів, так і симетрією об'ємних пружних модулів підкладки. Головні осі тензорів поверхневих натягів GaAs і InAs —  $[1\bar{1}0]$  і  $[110]$ , а об'ємні пружні властивості матеріалів визначені напрямками осей найлегшого стиску  $[100]$  і  $[010]$ . Таким чином, існує перехід від орієнтації пружних доменів при субмоношаровому покритті в напрямку  $[1\bar{1}0]$  (див. [162, 163]) до орієнтації в напрямку  $[100]$  і  $[010]$  при покритті 1,0–1,5 МШ. Цей перехід можна бути інтерпретувати як результат росту внеску розузгодження параметрів ґратки в полі пружних напружень порівняно з внеском, обумовленим стрибком тензора поверхневих натягів на границі двох фаз. Таке зростання пов'язане зі збільшенням об'єму осадженого InAs. Тобто відбувається плавне закручування кристалографічних площин ґратки від напрямку  $[1\bar{1}0]$  до напрямку  $[100]$  у ближчих до поверхні квантової ями областях, яке зумовлене наявністю областей із різним складом. Те, що ці перетворення відбуваються в ямі і ближніх інтер-

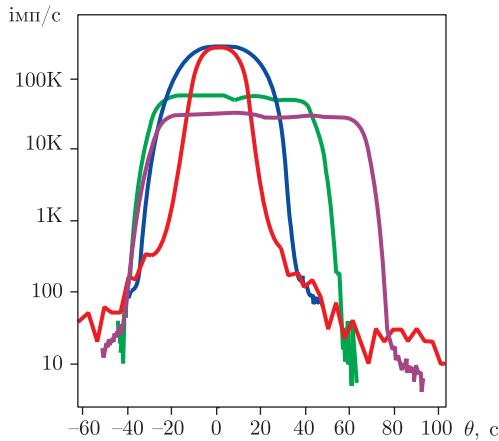


Рис. 4.23. Поперечні скани поблизу вузла 004 шарів GaAs для структур InGaAsN

фейсах, підтверджує поведінка розподілу інтенсивності на асиметричних рефлексах (рис. 4.24).

Ефект змійки не спостерігається ні для 224, ні для 113 рефлексів. Чисельні розрахунки також підтвердили, що область ями не впливає на асиметричну дифракцію, тобто в основному вона визначається захисним шаром.

Оскільки домени не спостерігаються в структурах зі складом індію 0,2, можна зробити висновок про те, що стимулятором цих формувань є значення концентрації атомів In. Підтвердженням цьому є результати експериментів, одержані на багатошарових структурах InGaAs/GaAs із вмістом індію приблизно 0,25–0,28, у яких спостерігалось латеральне впорядкування (латеральні модуляції складу) [142]. Структурна анізотропія впливає на дифракцію рентгенівських променів, що дозволяє використовувати високороздільну X-променеву дифрактометрію для дослідження анізотропії пружних деформацій.

Вивчення структур з когерентно напруженою InGaAs(N) одиночною квантовою ямою методами ВРХД доводить, що введення сурми призводить до поліпшення меж розділу в гетеропереході навіть у потенційних ямах, що містять азот, вирощених при відносно високих температурах. Проте, це не може запобігти утворенню розширених дефектів, які видно на картах ВРХД як коливання інтерференції у напрямку нормалі до (100) поверхні, відоме як змійка. Змійка спосте-

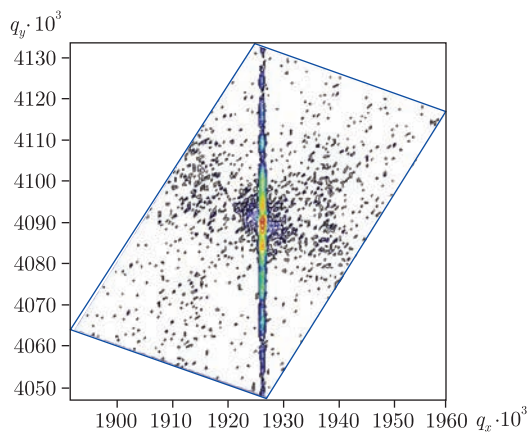


Рис. 4.24. Карта розподілу інтенсивності навколо вузла 113 для структур InGaAsSbN

рігається у всіх досліджуваних структурах, і припускається, що вона зумовлена дією двох чинників: симетрії власного тензора зовнішнього напруження і симетрії пружного модуля матеріалу підкладки, який призводить до зміни нахилів кристалографічних площин з глибиною як у потенційній ямі, так і в межах бар'єрного шару. Останнє призводить до формування анізотропного характеру розподілу деформацій, а також розорієнтацій ґратки в багатошаровій структурі, що викликає орторомбічні відхилення від тетрагональної псевдоморфної деформації, характерної для гетеросистеми з плоскими шарами.

#### 4.5.4. Гексагональні гетероструктури

У цьому пункті показано можливості  $X$ -дифрактометричного дослідження і порівняння структурної досконалості GaN шарів, вирощених на підкладці (0001) сафіру. Наведено результати досліджень гетероструктур (ГС) на основі нітриду галію AlGa<sub>x</sub>N/GaN, які були вирощені методом хімічного осадження при низькому тиску із газової фази металорганічних сполук (метод MOVPE) на підкладках Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> з орієнтацією (0001). Дослідження проводились на зразках, що являли собою ГС AlGa<sub>x</sub>N/GaN на підкладках різної товщини 300 мкм і 4 мм.

Методами тривісної дифрактометрії і шляхом побудови карт розподілу інтенсивності навколо вузлів в оберненому просторі дослі-



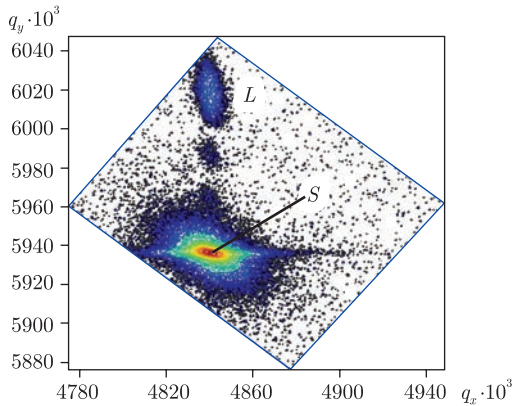


Рис. 4.25. КОП для структури AlGaIn поблизу вузла  $\bar{1}\bar{1}24$

джувалась структурна досконалість експериментальних зразків. Застосовані експериментальні схеми дозволяли отримувати два перерізи вузлів оберненої ґратки: перпендикулярно ( $\omega$ -сканування) і паралельно ( $\omega/2\theta$ -сканування) вектору дифракції. Вимірювались рефлекси 0004 (симетричний) і 10 $\bar{1}$ 2,  $\bar{1}\bar{1}24$  (асиметричні) для двох напрямків відносно вектора дифракції  $\mathbf{Q}$ . Всі вимірювання виконано на X-променевому дифрактометрі «PANalytical X'Pert MRD». Використання асиметричної брегівської геометрії дозволяє поєднати властивості симетричних брегг- і лауе-дифракцій. Оскільки трикристальна дифрактометрія дозволяє відокремити ефекти, пов'язані зі зміною міжплощинної віддалі і розворотом атомних площин, то аналіз розподілу інтенсивності в системі осей координат ( $q_H$ ,  $q_\alpha$ ), направлених відповідно паралельно і перпендикулярно вектору  $\mathbf{H}$ , дає змогу визначати кожний із внесків окремо [164]. Розглянемо застосування КОП для аналізу гексагональних структур GaN/Al $_x$ Ga $_{1-x}$ N/(001)GaN/Al $_2$ O $_3$ , вирощених методом MOCVD. КОП отримано поблизу 0002, 0004 та  $\bar{1}\bar{1}24$  GaN рефлексів. Карту, зображену на рис. 4.25, знято для гетероструктури, утвореної з 80 нм товстого шару Al $_x$ Ga $_{1-x}$ N ( $x = 0,1$ ) і шару GaN товщиною 2,5 мкм. Останній був вирощений на сапфірі і слугував еталонною підкладкою у рентгенівських вимірюваннях. Гетероструктура була покрита захисним шаром GaN товщиною 114 нм. Точка  $S$  на рис. 4.25 вказує на дифракційний пік від підкладки GaN. Розподіл дифракційної інтенсивності зверху від  $S$  належить шару Al $_x$ Ga $_{1-x}$ N

і сконцентровано навколо точки  $L$  оберненої ґратки. Ширший розподіл інтенсивностей порівняно з рис. 4.1 зумовлено зазначеною вище заміною кристалічного аналізатора на вузьку щілину для збільшення статистики рахунку у випадку GaN-базових структур. Проте ми можемо однозначно провести лінію  $SL$  через центри контурів рівної інтенсивності. Нахил лінії  $SL$  (суцільна лінія на рис. 4.11) у нашому випадку згідно рівняння (4.36) відповідає ЛПД, тобто  $\beta = 0$ . Це підтверджує повністю напружений стан тонкого шару  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  і дозволяє в подальших дослідженнях оцінювати індуковані деформаційними полями напруження в структурах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  з квантовими ямами [128].

#### 4.5.5. Дислокаційна структура GaN шарів за даними $X$ -променевих вимірювань тензора мікродисторсії

Найбільш поширеним типом порушень в епітаксійних гетеросистемах GaN є сітки дислокацій невідповідності. Як правило, ці системи прямолінійних дислокацій, розташованих паралельно гетерограниці в декількох характерних напрямках. Крайові компоненти векторів Бюргерса цих дислокацій призводять до зсуву перпендикулярних до поверхні атомних площин півки відносно площин підкладки, появи тангенційної невідповідності міжплощинних віддалей і часткового або повного зняття напружень у системі півка-підкладка. Очевидно, вплив дислокаційних сіток на дифракцію має зводитись до двох основних чинників: по-перше, появи відмінних від нуля тангенційних компонент зміщень центра відбиття  $\mathbf{Q}$  і, по-друге, до розширення дифракційних максимумів.

Використання як симетричної, так і асиметричної  $X$ -променевої дифракції лише в геометрії Бреґга вимагає додаткового моделювання співвідношення внесків мікророзорієнтацій, мікродеформацій і розмірного ефекту (через мікрозерна) в експериментально виміряне розширення дифракційних кривих, що ускладнює аналіз дефектної структури [165]. Крім того, мозаїчна модель, що зазвичай використовується, не розглядає структурні дефекти і пов'язану з ними деформацію в самих мікрозернах.

Недавно у [166] запропоновано новий підхід до характеристики структурної досконалості сильно розузгоджених епітаксійних шарів, заснований на  $X$ -променевому вимірюванні компонент тензора мікродисторсії  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ . У гексагональному GaN тензор мікродисторсії скла-

дається лише з п'яти незалежних компонент. Щоб виокремити впливи на розширення дифракційних кривих через компоненти тензора  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  і розміри мікрозерен паралельно ( $\tau_x$ ) і перпендикулярно поверхні ( $\tau_z$ ), разом з бреггівською відбивною геометрією використовувались вимірювання дифрагованої інтенсивності в симетричній геометрії Лауе (проходження). Бреггівська трикристальна  $\omega$ -крива містить інформацію про  $\varepsilon_{zx}$  і  $\tau_x$ ,  $(\omega/2\theta)$ -крива — про  $\varepsilon_{zz}$  і  $\tau_x$ . У геометрії Лауе із  $\omega$ -кривою отримують  $\varepsilon_{xz}$  і  $\tau_z$ , а із  $(\omega/2\theta)$ -кривою —  $\varepsilon_{xx}$  і  $\tau_x$ . Таким чином, застосування двох мод сканування в двох симетричних геометріях дифракції дозволило виміряти кожному із компонентів тензора мікродисторсії без додаткових припущень про їх співвідношення в вимірюваних напівширинах, що підвищило однозначність трактування результатів. Компонента  $\varepsilon_{xy}$ , пов'язана з мікродисторсіями в площині шару, отримувалась із вимірювань рефлексів типу (1011) аналогічно [167]. При аналізі дислокаційної структури шарів використано зв'язок компонент  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  з геометрією і типом дислокацій у GaN [168].

X-дифракційні вимірювання проводились як на двокристальному, так і трикристальному дифрактометрі (ТКД) у симетричних геометріях Брегга (0002, 0004 і 1011 рефлекси,  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ) і Лауе (1010 і 2020,  $\text{MoK}_{\alpha 1}$ ), а також асиметричної геометрії Брегга (1124). На ТКД вимірювались напівширини ( $\Delta\Omega$ ) на половині максимуму (НШНМ) інтенсивності кривих  $\omega$ - і  $(\omega/2\theta)$ -сканування. Для всіх зразків спостерігались такі особливості вимірювань напівширин: а)  $\Delta\Omega_{\omega} \gg \Delta\Omega_{\omega-2\theta}$ , б)  $\Delta\Omega^{0002} > \Delta\Omega^{0004}$ , в)  $\Delta\Omega_{\omega-2\theta} \sim \text{tg } \theta$ , г)  $\Delta\Omega^{1124} < \Delta\Omega^{0002}$ , д)  $\Delta\Omega^{0002} > \Delta\Omega^{1010}$ . Аналіз НШНМ за [166] показав, що разом із розмірним ефектом розширення  $\omega$ -кривих визначається двома компонентами. Перша пов'язана з кутовим розворотом мікрозерен. Друга зумовлена дефектами в самих мікрозернах, в основному — проростаючими вертикальними гвинтовими і крайовими дислокаціями. Для розрахованих із експериментальних напівширин компонент  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  характерні такі загальні закономірності: а)  $\langle \varepsilon_{zx} \rangle > \langle \varepsilon_{xz} \rangle$ , тобто мікророзорієнтації площин, паралельних поверхні, більша, ніж перпендикулярних до неї і б)  $\langle \varepsilon_{xx} \rangle > \langle \varepsilon_{zz} \rangle$ , що відповідає вищому рівню мікрореформації площин, перпендикулярних поверхні, порівняно з паралельними поверхні площинами. Значна відмінність між компонентами для товстого GaN, вирошеного на сапфірі, і для тонкого GaN шарів пов'язана з різним рівнем їх структурної досконалості. Дефектна структура всіх досліджуваних шарів характерна наявністю в них великої кількості вертикальних гвинтових і крайових (на 2 порядки більше) дислокацій. Знайдено, що щільність вертикальних гвинтових дислокацій знижується

в товстому GaN шарі в 4 рази порівняно з тонким шаром GaN ( $0,75$  і  $2,70 \cdot 10^8$  см<sup>2</sup>, відповідно). Щільність вертикальних крайових дислокацій у товстому шарі на GaN підкладці нижче в 4 рази, ніж при рості товстого шару безпосередньо на сапфірі ( $1,13$  і  $4,87 \cdot 10^{10}$  см<sup>2</sup>, відповідно). Близькість значень щільності вертикальних крайових дислокацій, отриманих із  $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$  і  $\langle \varepsilon_{xy} \rangle$  свідчить про переважне розташування цих дислокацій в об'ємі мікрозерен. Екстремально низьке значення напівширини  $\omega$  — ТКД кривої в геометрії Лауе (62 кут. с) для товстого GaN шару на GaN підкладці дає підстави вважати його монокристалічним із незначною кількістю мікроструктурних областей.

Побудова двовимірного розподілу поблизу вузла асиметричного бреггівського рефлексу у вигляді контурів рівної інтенсивності дозволяє безпосередньо зафіксувати положення центрів відбиття шарів у площині розсіяння і визначити координати  $q_H$  і  $q_\alpha$  кожного з них. У разі когерентної межі між плівкою і підкладкою відповідні вузли оберненої ґратки, як вже було сказано вище (див.рис. 4.25), лежать на напрямі нормалі до поверхні, що проходить через вузол  $H_0$ . При повній компенсації напружень ( $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xx}$ )  $q_\alpha = 0$ , і точки  $H_1$  і  $H_0$  лежать уздовж вектора дифракції (осі  $q_H$ ) (рис. 4.26). У загальному випадку часткової релаксації вузол плівки повинен розташовуватися в гострокутному секторі, утвореному векторами дифракції і нормалі до поверхні, що проходять через вузол  $H_0$  (рис. 4.27).

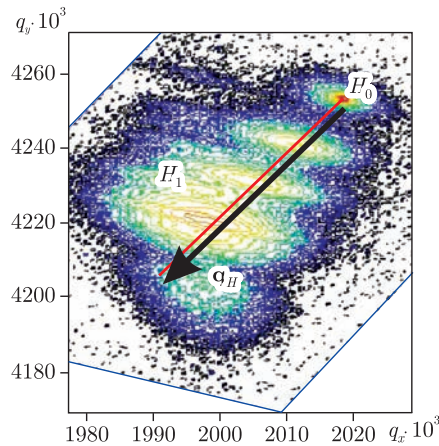


Рис. 4.26. КОП для структури AlGaIn/GaN поблизу вузла  $\bar{1}\bar{1}02$

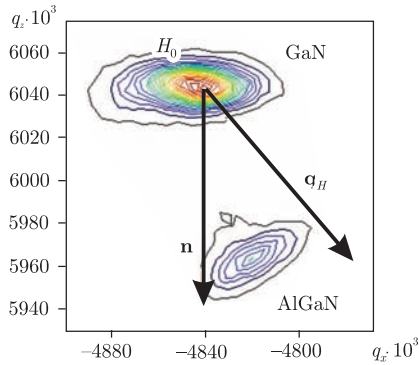


Рис. 4.27. КОП для частково релаксованої структури

Проте за деяких обставин точка  $H_1$  може виходити за межі цього сектора. По-перше, при нерівності нулю недіагональних компонент тензора дисторсії, тобто за наявності зсувних деформацій і розворотів. По-друге, в результаті дії термічних напружень, зокрема, коли різниця коефіцієнтів теплового розширення плівки і підкладки  $\Delta\alpha = \alpha_1 - \alpha_0$  має той же знак, що і  $\Delta a = a_1 - a_0$ . По-третє, до можливих нестандартних зсувів центра відбиття можуть призводити дефекти пакування.

Численні експерименти довели, що дислокаційні сітки, локалізовані на гетерограниці, викликають розтяг дифракційної картини (вузла оберненої ґратки) в напрямку, перпендикулярному вектору оберненої ґратки (рис. 4.28), незалежно від напрямку останнього [124, 169].

Піки  $\omega$ -сканування від шарів розширені і мають форму, подібну до розподілу Гаусса, а розподіл інтенсивності навколо вузлів — форму еліпсів, витягнутих перпендикулярно до  $\mathbf{Q}$ . При цьому розширення дифракційних ліній уздовж  $\mathbf{Q}$  набагато менше, що пояснюється як загальною властивістю дислокаційних ансамблів (дислокації призводять, в основному, до розворотів кристалічних площин), так і тенденцією до утворення згустків однойменних дислокацій в упорядкованій сітці. Якщо вплив дислокаційних сіток ще укладається в рамки описаної вище блокової моделі, то для структур з проростаючими дислокаціями перші ж роботи з використанням комбінації декількох геометрій дифракції (симетричної і асиметричної за Бреггом, бреггівської і лауевської дифракції) показали, що розорієнтаційне і деформаційне розширення можуть не співпадати для різних геометрій відбиття [166, 170, 171].

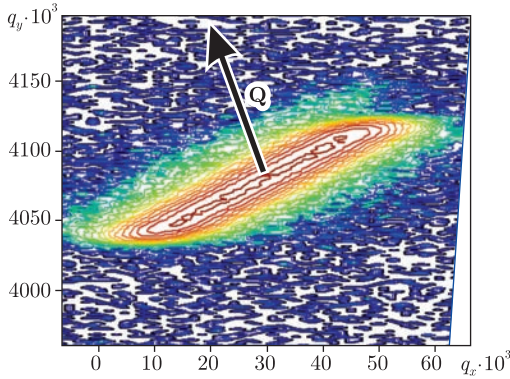


Рис. 4.28. КОП для структури AlGaIn/GaN/AlN поблизу вузла 10I4 шару GaN

Тому в [172, 173] запропоновано більш загальний підхід до аналізу розширень і дислокаційної структури епітаксійних шарів. Епітаксійні шари характеризуються компонентами тензора середньої дисторсії  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  і їх середньоквадратичними відхиленнями  $\varepsilon_{ij}$  (компонентами мікродисторсії). Значення  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  описують зміну параметрів середньої елементарної комірки щодо монокристала тієї ж орієнтації. В оберненому просторі вони визначають положення вузла оберненої ґратки.

Компоненти мікродисторсії  $\varepsilon_{ij}$  викликані локальними полями зсувів навколо структурних дефектів. Діагональні компоненти означають локальні зміни  $\Delta c/c$  і  $\Delta a/a$  міжплощинних відстаней, недіагональні — розвороти локальних областей і деформацію зсуву. Мікродисторсія зумовлює розширення розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки:

$$\delta H_i = \sum \delta_{ji} H_j. \quad (4.52)$$

Зв'язок між  $\delta H$  і кутовою шириною трикристалних кривих залежить від моди сканування:  $w = \delta H/H$  для  $\omega$ - і  $w = \delta H/k \cdot \cos \theta$  для  $\omega/2\theta$ -кривих. Для симетричних рефлексів, де  $H = H_z, H_x$  або  $H_y$  (напрямок  $z$  паралельний до нормалі  $\mathbf{n}$ , осі  $x$  і  $y$  лежать у площині поверхні), напівширина кожного сканування ( $\omega$  і  $\omega/2\theta$ ) пов'язана тільки з однією компонентою  $\varepsilon_{ij}$ .

При аналізі враховується додаткове розширення рефлексів внаслідок обмежених розмірів областей когерентного розсіяння згідно  $\delta H_i = 1/\langle \tau_i \rangle$ . Для відокремлення внесків мікродисторсії і розмірного ефекту вимірюються два порядки відбиття в кожній геометрії і

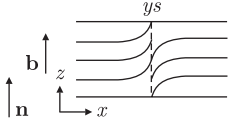
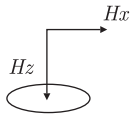
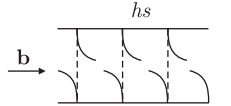
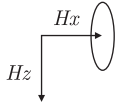
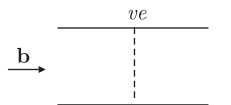
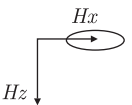
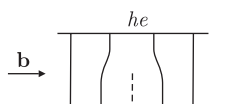
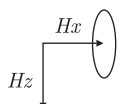
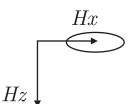
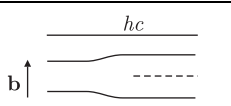
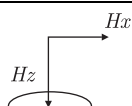
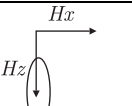
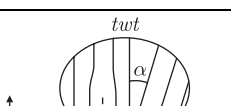
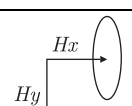
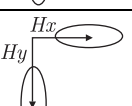
використовується різна залежність їх від бреггівського кута. Для високосиметричних орієнтацій кристала площини, паралельні поверхні, ізотропні, напрямки  $x$  і  $y$  рівнозначні, і кількість незалежних компонент  $\varepsilon_{ij}$  зменшується до п'яти. З вимірювань у трьох симетричних геометріях (Брегга, Лауе і ковзній) знаходять всі п'ять компонент  $\varepsilon_{ij}$  і розміри когерентних областей у напрямку нормальному до інтерфейсу ( $\tau_z$ ) і паралельному ( $\tau_x$ ). У симетричній бреггівській геометрії ( $H||z$ ) визначаються  $\varepsilon_{zz}$  і  $\varepsilon_{zx}$ , у симетричній лауе-дифракції ( $H||x$ ,  $\mathbf{n}$  лежить у площині дифракції) —  $\varepsilon_{xx}$  і  $\varepsilon_{xz}$ , у ковзній геометрії ( $H||y$ ,  $\mathbf{n}$  перпендикулярний до площини дифракції) —  $\varepsilon_{xx}$  і  $\varepsilon_{xy}$ .

Компоненти тензора мікродисторсії можна пов'язати з певними системами дислокацій в епітаксійному шарі. Згідно з [167] для ансамблів прямолінійних дислокацій розподіл інтенсивності дифракції навколо вузлів оберненої ґратки має форму дисків, перпендикулярних до лінії дислокації, а ширина гауссівського розподілу в них визначається добутком  $(\mathbf{H} \cdot \mathbf{b})$ , де  $\mathbf{b}$  — вектор Бюргерса дислокацій. Схема зв'язку між різними прямолінійними сімействами дислокацій, компонентами мікродисторсії і формою розширення вузлів оберненої ґратки зображено у табл. 2.

З таблиці видно, що паралельні інтерфейсу крайові дислокації дають внесок у  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{zz}$ ,  $\varepsilon_{xz}$ ,  $\varepsilon_{zx}$ ; паралельні інтерфейсу гвинтові дислокації — в  $\varepsilon_{xy}$  і  $\varepsilon_{xz}$ . Крайові дислокації, перпендикулярні інтерфейсу, призводять до розширень у симетричній лауе- і ковзній геометрії (компоненти  $\varepsilon_{xx}$  та  $\varepsilon_{xy}$ ) і ніяк не позначаються на симетричних бреггівських відбиттях. Крім того, вертикальні гвинтові дислокації викликають тільки розширення  $\omega$ -моди в симетричній бреггівській геометрії і не фіксуються в інших симетричних сканах. Оскільки ковзна геометрія дифракції має малу глибиною проникнення випромінювання, то її можна замінити вимірюванням ряду некомпланарних рефлексів (наприклад, типу  $(00\bar{1}l)$  для гексагональних структур) від дифрагуючих площин, що утворюють великі кути з поверхнею (нормаль  $\mathbf{n}$  не лежить у площині розсіяння) [174]. При цьому в більшості робіт граничні значення напівширини двокристалних піків таких відбиттів пов'язуються лише з так званим крученням (twist), тобто компонентою  $\varepsilon_{xy}$ .

Зазначені властивості призводять до розширення вузлів оберненої ґратки GaN-шарів у напрямку паралельному поверхні, причому це спостерігається для рефлексів різної геометрії. Звідси випливає висновок про існування в шарах АЗ-нітридів переважної щільності, ~~що~~ проростають перпендикулярно до гетерограниці дислокацій гвинтово-

Таблиця 2. Зв'язок між розподілом інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки, компонентами тензора мікродисторсій і типом дислокацій

Прямий простір	$e_{ij}$	Обернений простір	
		$\theta$ -скан	$\theta/2\theta$ -скан
	$e_{zx}$		
	$e_{xx}$		
	$e_{xx}$		
	$e_{xx}$ $e_{xx}$		
	$e_{zx}$ $e_{zz}$		
	$e_{xy}$ $e_{xx}$		

го і крайового типів (див. табл. 2). Тоді щільність перших визначається з різниці квадратів двох недіагональних компонент  $\varepsilon_{zx}$  і  $\varepsilon_{xz}$  за формулою  $\langle \delta\varepsilon_{ij} \rangle^2 = 0,8b^2\rho$ , а густина других — з різниці діагональних компонент  $\varepsilon_{xx}$  і  $\varepsilon_{zz}$  за формулою  $\langle \delta\varepsilon_{ii} \rangle^2 = K(5b^2\rho/(16\pi^2))|\ln(2\cdot 10^{-7})\rho|$ . Використовуючи компоненти  $\varepsilon_{xx}$  і  $\varepsilon_{xy}$  (перша визначається з вимірювань у лауе-геометрії, друга — з ковзної дифракції), можна відокремити внески від крайових дислокацій, хаотично розподілених у шарі, і тих, що утворюють малокутові межі, і визначити щільність обох.



Основним джерелом розширення  $X$ -променевих рефлексів в епітаксійних системах із дислокаційними сітками є розорієнтації когерентних областей, а внесок, зумовлений зменшенням розмірів цих областей при лінійній щільності сіток до  $10^5 \text{ см}^{-1}$ , значно менший. Крім того, плоска конфігурація сіток не повинна викликати помітних змін когерентних розмірів у нормальному до гетерограниці напрямку. Все це в сукупності призводить до висновку, що домінуючим впливом дислокаційних сіток є розширення дифракції перпендикулярно вектору оберненої ґратки незалежно від геометрії вимірювання.

Процедура аналізу частково релаксованих структур дає змогу отримати значну кількість інформації. Типовий розподіл інтенсивності в оберненому просторі для частково релаксованих структур наведено на рис. 4.29, з якого макроскопічний нахил може бути отриманий з 004 відбиттів, тому що поверхнева нормаль спрямована вздовж [001]. Ці карти також дають параметр ґратки вздовж напрямку [001] порівняно з підкладкою. Відбиття 115 містять компоненти параметра ґратки в площині. Оскільки нахил площин і перпендикулярна деформація відомі, то останні можна отримати [9]. Так, на цій стадії макроскопічний нахил, враховуючи два ортогональних внески, параметри ґратки — нормальні в поверхневій площині — можна отримати прямим способом, тоді як мікроскопічний нахил і латеральні довжини кореляції відрізняються менше. Останній пункт розглянемо детальніше. В ідеальному випадку карта оберненого простору повинна моделюватися, проте ми застосуємо прагматичніший підхід. Мікроскопічний нахил для областей зразка з однаковими параметрами ґратки перпендикулярний до радіального напрямку, тоді як кожна в площині довжина кореляції перпендикулярна нормалі до поверхні (рис. 4.29). Тому, вимірюючи КОП інтенсивності розсіяння від кристалічних площин, розташованих вздовж нормалі до поверхні, ці різні компоненти можуть бути відокремлені. Потрібно пам'ятати, однак, що мозаїчні блоки, які вносять вклад у довжини кореляції, через їх скінченний латеральний розмір, також впливають на дифракцію через їх розширення для певних орієнтацій. Повна форма кривих стає досить складним спотворенням у двох вимірах. Розглядаючи розширення через мікроскопічний нахил і кінцеві розміри, можна розділити ці два ефекти.

З діаграми на рис. 4.29 видно, що існують два внески в ширину профілю, а саме, мікроскопічний, нахил і латеральні довжини кореляції. Через ефект змазування і скручування, описана вище форма вузла буде приблизно еліптичною відносно осі, яка є проміжною між цими двома крайніми випадками. Згідно з простими тригонометричними ви-

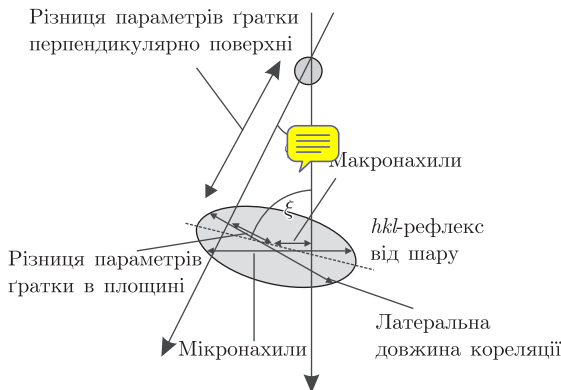


Рис. 4.29. Схема розподілу інтенсивності в оберненому просторі для гетероструктури з частковою релаксацією

разами (рис. 4.30), відношенням цих двох внесків можна задати

$$\frac{L_1}{L_2} = \frac{\cos \xi}{\cos(\phi + \xi)}. \quad (4.53)$$

а вимірне розширення  $L_3$  в термінах  $L_1$  задається так:

$$\frac{L_3}{L_1} = \frac{\sin \phi}{\cos \xi}. \quad (4.54)$$

Отже, із цих співвідношень індивідуальні внески  $L_1$ , і  $L_2$  можна отримати в  $\omega$ -шкалі. Кут  $\xi$  є кутом між лінією, що проходить через вісь еліпса профілю шару, і радіальним напрямком до джерела (рис. 4.30). ~~Похилання латеральної довжини кореляції є простим  $(\Delta S_g)$ , де:~~

$$\Delta\omega_{L1} = L_1(\cos \phi + \sin \phi \operatorname{tg} \theta) \quad (4.55)$$

і

$$\Delta(2\omega)_{L1} = \frac{L_1 \sin \phi}{\cos \theta}. \quad (4.56)$$

Тут мікроскопічні нахили записуються у вигляді

$$\Delta\omega_L \approx L_2. \quad (4.57)$$

Таким чином, отримання двовимірного розподілу інтенсивності для асиметричної брегівської дифракції дозволяє отримати таку інформацію про епітаксійні шари: 1) при вимірюваннях на одному рефлексі

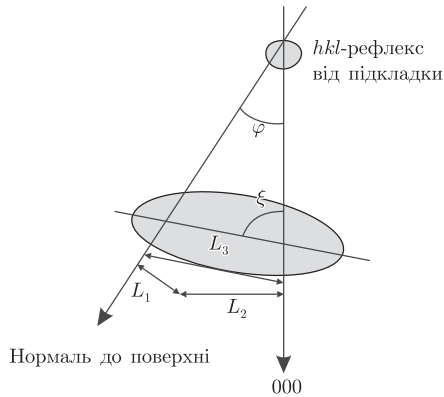


Рис. 4.30. Схема, яка показує можливість визначення параметрів структури з характеристик розподілу інтенсивності в оберненому просторі

визначати одночасно як нормальну ( $\varepsilon_{zz}$ ), так і тангенційну ( $\varepsilon_{xx}$ ) компоненти різниці міжплощинних віддалей від окремих шарів в кристалі; 2) розподіл інтенсивності в нормальному до  $\mathbf{Q}$  напрямку має гауссівську форму, хоча і з більш повільним зменшенням інтенсивності на хвостах  $1/q^{3,5-4,0}$ , у той час як вздовж вектора оберненої ґратки інтенсивність зменшується за квадратичним законом  $1/q^2$ . Сітки дислокацій, локалізовані на гетерограниці, зумовлюють появу ненульових компонент середньої дисторсії і розширення дифракції за нормаллю до вектора оберненої ґратки незалежно від напрямку останнього. Нахилені проростаючі дислокації призводять до розширення рефлексів як в поперечному, так і поздовжньому до  $\mathbf{Q}$  напрямках, причому перше з них помітно більше. Дефекти типу виділень призводять до появи розмитого навколо вузла оберненої ґратки дифузного розсіяння при збереженні (у тій чи іншій мірі) вузькоспрямованого вздовж нормалі до поверхні когерентного розсіяння (рис. 4.31).

Така різна чутливість до дефектів для двох взаємоперпендикулярних розподілів пояснюється кількома причинами. По-перше, суттєвою є геометрична будова плоских гетероструктур, для яких усі початкові параметри (товщина, склад, деформація) змінюються за нормаллю до поверхні і, вочевидь, можуть зумовити сильну зміну в розподілі інтенсивності в напрямку  $\mathbf{Q}$  (у бреггівській геометрії). У перпендикулярному ж напрямку на розподіл впливають лише дефекти. По-друге, як показано вище, характер дислокаційних структур в епітаксійних

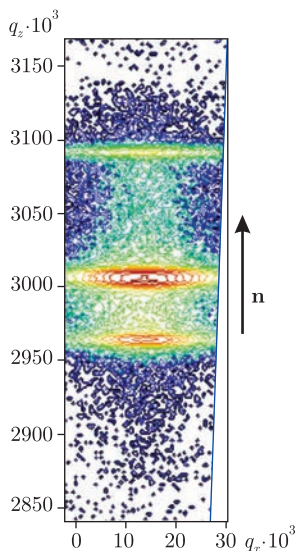


Рис. 4.31. КОП для структури AlGaIn/GaN/AlN поблизу вузла 0004

шарах такий, що вони помітно впливають на розподіл дифрагованої інтенсивності за нормаллю до  $\mathbf{Q}$ . По-третє, має значення характер падіння інтенсивності при віддаленні від вузла в двох напрямках. Інтенсивність дифузного розсіяння, як відомо з [173, 175–177], зменшується як  $1/q^1$   $1/q^3$  (з урахуванням вертикальної розбіжності) однаково в усіх напрямках, а дислокації отримуємо швидкі гауссівські зміни перпендикулярно до  $\mathbf{Q}$  і більш повільні квадратичні вздовж нього.

Розширений пік гауссівської форми вказує на наявність дислокацій. Однак за однією лише  $\omega$ -кривою не можна визначити, чи маємо справу з сітковою дислокаційною невідповідністю, чи з проростаючими дислокаціями. Щоб розділити ці випадки, необхідно, як зазначено вище, проаналізувати кутову ширину вздовж вектора дифракції. Якщо йдеться про товсті шари (1  $\mu\text{m}$  і більше), то розширення вздовж  $\mathbf{Q}$  порівняно з розрахунковою шириною динамічного розсіяння свідчить про наявність у шарі проростаючих дислокацій. Складніше з тонкими шарами, де ширина піка у поздовжньому напрямку визначається його малою товщиною, і на цьому фоні додаткове розширення, пов'язане з дислокаціями, може бути непомітним. У цьому випадку потрібний додатковий аналіз величини  $w$  із переходом до більш високих порядків

відбиття, для яких внесок деформаційного розширення, пов'язаного з дислокаціям, зростає.

Загалом можливо розширення дифракційного піка вздовж  $Q$  і за рахунок дислокаційних сіток великої густини ( $> 10^5 \text{ см}^{-1}$ ), однак у цьому випадку напівширина  $w$  повинна мати не тангенційну, а секансну залежність від бреггівського кута. Розщеплення одного максимуму на  $\omega$ -кривій на декілька свідчить про утворення в епітаксійному шарі структури з великих блоків і малокутовими границями.

**Структури з невідомими невідповідностями ґратки.** Ця ситуація часто виникає в імплантованих кристалах, товщина пошкодженого шару яких приблизно дорівнює довжині гальмівного пробігу іонів, який розташований на поверхні кристала (підкладки), в яку імплантовані частки не проникають. Невідповідності  $m_i$  між параметрами ґратки шару і підкладки, викликані дефектами імплантації — невідомі величини. Взагалі це справедливе для співвідношень між значеннями  $m_i$  і є серйозним ускладненням порівняно з системами, для яких виконується правило Вегарда і всі невідповідності пропорційні до концентрації впровадженої компоненти (див. рівняння (4.28-4.29)). Для дослідження цієї ускладненої ситуації вибрали кубічні кристали галійгадолінієвого гранату (GGG), які широко використовуються в оптичних пристроях комунікації. Іони He з різними енергіями імплантували через поліровану поверхню підкладки GGG з дозою  $2 \cdot 10^{16}$  іон/см<sup>-2</sup> для формування приповерхневого хвилеводного шару. Глибина проникнення іонів і відповідно товщина пошкодженого шару складала близько 1 мкм. Після імплантації деякі із зразків відпалювались протягом 30 хв при високих температурах. Деформація ґратки впливає на показник заломлення хвилеводного шару, тому аналіз напружень дуже важливий для функціонування пристроїв. Попередні дослідження [178] показали, що імплантація індукує швидкі і великі зміни параметра ґратки аж до  $(\Delta a/a)_y \sim 0,007$ , і тому глибинний профіль  $(\Delta a/a)_z$  можна легко отримати з звичайних дифракційних профілів вимірювань симетричних 444 і 888 відбиттів. Проблема полягає у визначенні змін параметра ґратки в площині,  $(\Delta a/a)_x$ , який визначає стан напружень шаруватої структури.

Традиційні детальні вимірювання [126] дифракційних профілів (асиметричні 880 відбиття), а також профілів дифракції в геометрії ковзного падіння, взятих для атомних площин, перпендикулярних до кристалічної поверхні, не зможуть забезпечити кількісний аналіз напружень через відсутність достатньої точності. Щоб одержати необхідну інформацію, виконуються детальні вимірювання КОП із зосере-

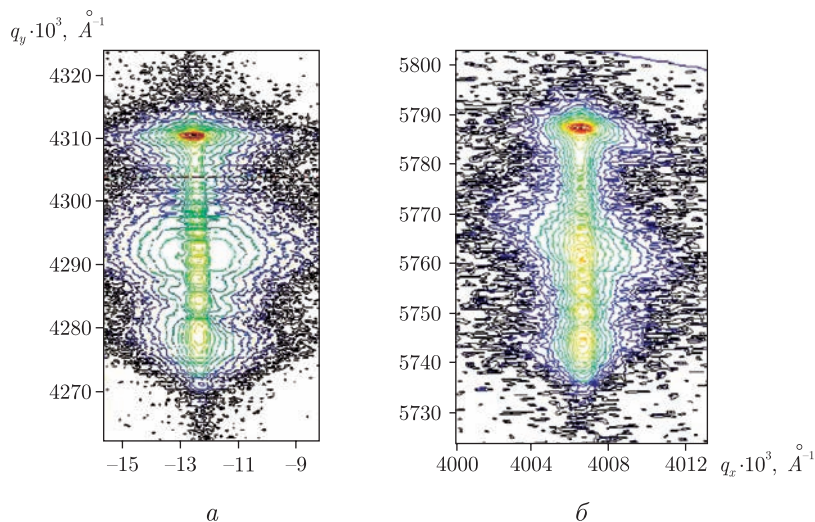


Рис. 4.32. КОП для структури GGG поблизу вузлів: *a* — 444; *б* — 880

дженням на можливих відхиленнях лінії  $SL$  від ЛПД (рис. 4.32, *a*). Імплантовані шари GGG можна цілком охарактеризувати двома незалежними параметрами невідповідності ( $m_x$  і  $m_z$ ) і двома незалежними рівнями напружень ( $S_x$  і  $S_z$ ). Для того, щоб визначити ці параметри необхідно детально проаналізувати всі зміни параметра ґратки, зокрема компоненту напружень зсуву. У нашій системі деформацію зсуву можна визначити через комбінацію КОП, взятих для симетричного 444 і асиметричного 880 відбиттів. З поправкою на деформацію зсуву можна визначити модифікації параметрів ґратки в площині з карт оберненого простору.

Розподіл інтенсивностей у площині границі є дуже вузьким (близько до теоретичної ширини), отже, можна досягнути точності  $2 \cdot 10^{-5}$  у визначенні  $(\Delta a/a)_x$  та  $(\Delta a/a)_z$ . Наголосимо, що перпендикулярно до інтерфейсу просторовий розподіл імплантованих пошкоджень і, відповідно, розподіл змін  $(\Delta a/a)_y$ , сильно неоднорідний (див. [178] і рис. 4.32, *a*). Не зважаючи на це, параметр ґратки в площині в імплантованому шарі точно відповідає такому ж у кристалічній матриці (рис. 4.32, *б*). Ці дані використовувалися для того, щоб отримати набір невідповідностей  $m_i$  і рівня напружень  $S_i$  в імплантованих зразках. Такий підхід вимагає розширеної аналітичної роботи, заснованої на

загальному вирішенні проблеми пружності [126]. Відповідно точність визначення напружень у площині залишається дуже високою.

#### 4.5.6. Висновок

Можливості вимірювань КОП тонких модифікацій напружень у тонкоплівкових структурах було проаналізовано із зосередженням на некубічних кристалічних симетриях. Показано, що КОП забезпечує визначення напружень із дуже високою точністю  $\Delta a/a \sim 10^{-5}$ , що значно вище, ніж обумовлена вимірюванням дифракційних профілів. Останній є нижчим, ніж кутова відстань між піками підкладки та шару, виміряних поблизу асиметричного відбиття, впливають обидві проєкції  $\Delta H_{\parallel}$  і  $\Delta H_{\perp}$  вектора оберненої ґратки  $\mathbf{H}$ . Тому невизначеність  $\mathbf{H}$  (через малу товщину шару) не дозволяє визначити зміни параметрів ґратки в площині з достатньою точністю. Техніка КОП вільна від цієї перешкоди завдяки її здатності вимірювати  $\mathbf{H}_{\parallel}$  і  $\mathbf{H}_{\perp}$  окремо. Наведені приклади експериментальних карт добре ілюструють цей факт, оскільки вони завжди показують вузький розподіл інтенсивностей уздовж інтерфейсу плівка–підкладка незалежно від можливих модифікацій у перпендикулярному напрямку. Ключова проблема — двовимірне вимірювання дифракційної інтенсивності вздовж дифракційного вектора  $\mathbf{H}$  і в перпендикулярному напрямку. Варто підкреслити, що така мода вимірювання може бути зрозумілою не тільки з використанням трикристалльної дифрактометрії, а й у деяких випадках із використанням вузької щілини перед детектором замість кристала-аналізатора. Для кубічних і гексагональних гетероструктур одержано аналітичні вирази, що пов'язують рівень напружень із нахилом подібного до витягнутого розподілу інтенсивності на карті  $X$ -променевої дифракції, аналогічно з нахилом ЛПД. Показано, що аналіз напружень можна виконувати за відсутності кількісних даних про склад плівки. Повністю напружений стан можна встановити навіть для систем з невідомими невідповідностями, такими як, наприклад, імплантовані структури. В останньому випадку детальний аналіз потребує повного вирішення проблеми пружності для отримання початкової невідповідності і рівня напружень із певних експериментальних модифікацій параметрів ґратки. Показано, що в загальному випадку (некубічна симетрія або наявність зовнішнього кута розорієнтації) компоненти тензора напружень зсуву необхідно приймати до уваги. Вимірювання КОП показали, що аналіз напружень з їх допомогою, заснований на понятті ЛПД, є досить точним для визначення малих змін напружень порядку  $10^{-5}$ .

## Заклучна частина

X-променеви́й аналі́з є одним з найважливіших методів вивчення структур, що використовуються в сучасній мікро- та оптоелектроніці. Такі структури зазвичай характеризуються високим ступенем структурної якості і малими розмірами активних елементів. На відміну від скануючої та атомно-силової мікроскопії X-променеви́й аналі́з можна застосовувати для вивчення внутрішньої структури. А оскільки довжина хвилі співмірна з віддалю між атомами, X-промені найкраще пристосовані для аналізу нанорозмірних структур. У той же час X-променеви́й аналі́з є зазвичай інтегральним, тому можливо також його використання для отримання інформації відразу про структуру досить великих зразків (міліметри). На відміну від електронів чи нейтронів X-промені не руйнують структуру і зазвичай не іонізують її. Крім того, X-променеви́й аналі́з не потребує додаткової обробки досліджуваного зразка.

Існує два шляхи аналізу структур за допомогою X-променів: розв'язок прямої або оберненої задачі. Перший варіант дозволяє отримати деякі важливі параметри структури, однак є недостатньо точним. Другий варіант включає моделювання дифракції і порівняння з експериментально виміряною картиною. Цей метод дозволяє визначити дуже багато параметрів структури з великою точністю. Однак він потребує використання точних розрахунків дифракції і є досить повільним. В монографії було розглянуто обидва методи.

Оскільки дифракцію дуже зручно розглядати в оберненому просторі, виконання експериментів неможливо без досконального розуміння цього поняття і зв'язку оберненого простору з явищем дифракції. Саме тому першу частину книги присвячено розгляду експериментальних методів вимірювання в оберненому просторі.

Оскільки на сьогодні найбільш точною є динамічна теорія дифракції (побудована на базі рівнянь Максвела), саме цій теорії було присвячено більшу частину книги. Було розглянуто основні формули цієї



теорії, можливі спрощення і методи розв'язку основних рівнянь. Окрім того було розглянуто найбільш поширені методи розрахунку, в рамках динамічної теорії, дифракції від багат шарових структур.

Для збільшення точності вимірювання параметрів структури можливо застосування багатохвильової дифракції — коли дифракція відбувається одночасно на декількох наборах атомних площин. Цей метод було розвинуто для аналізу багат шарових структур і представлено кілька алгоритмів розрахунку дифракції в цьому випадку.

Окрему увагу було приділено практичним застосуванням розроблених алгоритмів. Було продемонстровано можливість їх використання для аналізу інтерфейсу між шарами і анізотропних деформацій в структурі. Також наведено рекомендації для розв'язку оберненої задачі за допомогою автоматизованого фітування.

Останній розділ книги було присвячено методам розв'язку прямої задачі. Було показано, як можна визначити безпосередньо з експерименту такі параметри шарів, як склад, напруження, структурна досконалість, параметри впорядкованої надструктури (наприклад квантових точок чи дротів). Ці методи дуже корисні для первинного аналізу структури, що досліджується, оскільки дозволяють швидко отримати деякі параметри структури.

Автори висловлюють подяку за фінансову підтримку Президії НАН України.

## Список літератури

1. *Authier A.* Dynamical theory of X-ray diffraction. — New York: Oxford Press, 2001. — 661 p.
2. *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика. — Москва: Наука, 1982. — 392 с.
3. *Джеймс Р.* Оптические принципы диффракции рентгеновских лучей. — Москва: Изд-во иностр. лит., 1950. — 573 с.
4. *Holy V., Pietsch U., Baumbach T.* High-resolution X-ray scattering from thin films and multilayers. — Berlin: Springer, 1999. — 255 p.
5. *Афанасьев А.М., Александров П.Ф., Имамов П.М.* Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. — Москва: Наука, 1989. — 152 с.
6. *Иверонова В.И., Ревкевич Г.П.* Теория рассеяния рентгеновских лучей. — Москва: МГУ, 1978. — 277 с.
7. *Чжан Ш.-Л.* Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. — Москва: Мир, 1987. — 335 с.
8. *Боуэн Д.К., Таннер Б.К.* Высокора разрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. — С.-П.: Наука, 2002. — 275 с.
9. *Fewster P.F.* X-ray scattering from semiconductors. — London: Imperial College Press, 2003. — 300 p.
10. *Batterman B., Cole H.* Dynamical diffraction of X-rays by perfect crystals // Rev. Modern Phys. — 1964. — 1, N 3. — P. 681–717.
11. *Сиротин Ю.И., Шаскольская М.А.* Основы кристаллографии. — Москва: Наука, 1979. — 361 с.
12. *Шаскольская М.П.* Кристаллография. — Москва: Высш. шк., 1976. — 390 с.
13. *Vokiy A.* Diffraction. — Oxford Press, 2001. — 661 p.
14. *XViz* <http://x-ray.net.ua/xviz.html>. — Accessible region in 3D reciprocal space for Bragg and Laue geometries.

15. *Yefanov O., Kladko V., Slobodyan M., Polischuk Y.* X<sub>2</sub>Vis: an educational open-source program for demonstration of reciprocal-space construction and diffraction principles // *J. Appl. Cryst.* — 2008. — **41**. — P. 647–652.
16. *Yefanov O.* Accessible reciprocal-space region for non-coplanar Bragg and Laue geometries // *J. Appl. Cryst.* — 2008. — **41**. — P. 110–114.
17. *Schmidbauer M.* X-ray diffuse scattering from self-organized mesoscopic semiconductor structures. — Berlin, Heidelberg, New-York: Springer-Verlag, 2006. — 202 p.
18. *Stangl J., Holy V., Bauer G.* Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures // *Rev. Modern Phys.* — 2004. — **76**. — P. 725–783.
19. *Каули Дж.* Физика дифракции. — Москва: Мир, 1979. — 432 с.
20. *Darwin C.G.* The theory of X-ray reflection // *Phil. Mag.* — 1914. — **27**. — P. 315–333; P. 675–690.
21. *Darwin C.G.* The reflection of X-rays from imperfect crystals // *Phil. Mag.* — 1922. — **43**. — P. 800–829.
22. *Ewald P.P.* Zur Begründung der Kristalloptik. I. Röntgenstrahlen // *Ann. Phys.* — 1916. — **49**. — S. 1–38; S. 117–143.
23. *Ewald P.P.* Zur Begründung der Kristalloptik. III. Röntgenstrahlen // *Ann. Phys.* — 1917. — **54**. — S. 519–556.
24. *Ewald P.P.* Zur Begründung der Kristalloptik. IV. Röntgenstrahlen // *Ann. Phys.* — 1917. — **54**. — S. 557–597.
25. *von Laue M.* Die dynamische Theorie der Röntgenstrahl Interferenzen in neuer Form // *Ergeb. Exakt. Naturwiss.* — 1931. — **10**. — S. 133–158.
26. *von Laue M.* Röntgenstrahl interferenzen, 3rd ed. — Frankfurt auf Main: Akademische Verlagsgesellschaft, 1960. — 476 s.
27. *Zachariasen W.H.* Theory of X-ray diffraction in crystals. — New York: John Wiley, 1945. — 255 p.
28. *James R.W.* The dynamical theory of X-ray diffraction // *Solid State Phys.* — 1963. — **15**. — P. 53–220.
29. *Authier A.* Ewald waves in theory and experiment (dynamical theory of X-ray diffraction) // *A.S.R.D.F.* — 1970. — **3**. — P. 1–51.
30. *Borrmann G.* Die Absorption von Röntgenstrahlen in Fall der Interferenz // *Z. Phys.* — 1950. — **127**. — S. 297–323.
31. *Borrmann G.* Der kleinste Absorption Koeffizient interferierender Röntgenstrahlung // *Z. Krist.* — 1954. — **106**. — P. 109–121.
32. *Borrmann G.* Röntgenwellenfelder, “Beit. Phys. Chem. 20 Jahrhunderts”, Vieweg und Sohn // Braunschweig. — 1959. — P. 262–282.

33. *Kato N.* Integrated intensities of the diffracted and transmitted  $X$ -rays due to ideally perfect crystal // *J. Phys. Soc. Jap.* — 1955. — **10**. — P. 46–55.
34. *Kato N., Lang A.R.* A study of Pendellosung fringes in  $X$ -ray diffraction // *Acta Cryst.* — 1959. — **12**. — P. 787–794.
35. *Kato N.* The energy flow of  $X$ -rays in an ideally perfect crystal: comparison between theory and experiments // *Acta Cryst.* — 1960. — **13**. — P. 349–356.
36. *Kato N.* A theoretical study of Pendellosung fringes. // *Acta Cryst.* — 1961. — **14**. — P. 526–532; P. 627–636.
37. *Kato N.* Spherical-wave theory of dynamical  $X$ -ray diffraction for absorbing perfect crystals. // *J. App. Phys.* — 1968. — **39**. — P. 2225–2230; P. 2231–2237.
38. *Pietch U., Holy V., Baumbach T.* High-resolution  $X$ -ray scattering from thin films to lateral nanostructures. — New York: Springer, 2004. — 409 p.
39. *Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Григор'єв Д.О., Прокопенко І.В.* Рентгенооптичні ефекти в багатшарових періодичних квантових структурах. — Київ: Наук. думка, 2006. — 288 с.
40. *Penning P., Polder D.* Anomalous transmission of  $X$ -rays in elastically deformed crystals // *Philips Res. Report.* — 1961. — **16**. — P. 419–440.
41. *Stetsko Y. P., Chang S.-L.* An algorithm for solving multiple-wave dynamical  $X$ -ray diffraction equations // *Acta Cryst. A.* — 1997. — **53**. — P. 28–34.
42. *J. Als-Nielsen, D. McMorrow* Elements of Modern  $X$ -Ray Physics. — New York: Wiley, 2001. — 318 p.
43. *Ефанов А.Н., Кладько В.П.* Решение дисперсионного уравнения в явном виде для случая двух сильных волн // *Металлофизика и новейшие технологии.* — 2006. — **28**. — С. 231–248.
44. *Zaus R.* An improved deviation parameter for the simulation of dynamical  $X$ -ray diffraction on epitaxial heterostructures // *J. Appl. Cryst.* — 1993. — **26**. — P. 801–811.
45. *Sanz-Hervas A., Aguilar M. et al.* Observation of non-trigonal lattice distortion in pseudomorphic InGaAs/GaAs superlattices grown on misoriented (111)B GaAs // *J. Appl. Phys.* — 1997. — **82**. — P. 3297–3305.
46. *Fukamachi T., Negishi R., Kawamura T.* The dispersion surface of  $X$ -rays very near the absorption edge // *Acta Cryst. A.* — 1995. — **41**. — P. 253–258.
47. *Fukamachi T., Negishi R., Zhou S., Yoshizawa M., Kawamura T.* Extinction effect and Borrmann effect of resonant dynamical scattering in the Bragg case // *Acta Cryst. A.* — 2002. — **58**. — P. 552–558.

48. *Zhangcheng X., Changlin G., Zongyan Z., Fukamachi T., Negishi R.* The relationship between the Poynting vector and the dispersion surface in the Bragg case // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 1997. — **9**, N 18. — P. 275–278.
49. <http://www.nr.com/>. — Numerical Recipes in C.
50. *Huang H.-R., Dudley M.* A universal computation method for two-beam dynamical X-ray diffraction // *Acta Cryst. A.* — 2003. — **59**. — P. 163–167.
51. *Bartels W. J., Hornsrta J., Lobeek D.J.W.* X-ray diffraction of multilayers and superlattices // *Acta Cryst. A.* — 1986. — **42**. — P. 539–545.
52. [www.mahtworld.com](http://www.mahtworld.com). — Solving of quartic equation.
53. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. — Москва: Наука, 1973. — 832 с.
54. *Jenkins M. A., Traub J. F.* Zeros of a complex polynomial // *Commun. the ACM.* — 1972. — **15**, Issue 2. — P. 97–99.
55. <http://www.vni.com>. — IMSL Numerical Library.
56. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. — Москва: Наука, 1973. — 721 с.
57. *Abeles F.* Sur la Propagation des Ondes Electromagnetiques dans les Milieux Stratifies // *Ann. de Physique.* — 1948. — **3**. — P. 504–520.
58. *Abeles F.* Recherches sur la Propagation des Ondes Electromagnetiques Sinusoidales dans les Milieux Stratifies. Application aux Couches Minces // *Ann. de Physique.* — 1950. — **5**. — P. 596–640; P. 706–782.
59. *Takagi S.* Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion // *Acta Cryst.* — 1962. — **15**. — P. 1311–1312.
60. *Takagi S.* A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal // *J. Phys. Soc. Jpan.* — 1969. — **26**. — P. 1239–1253.
61. *Taupin D.* Theorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux deformes // *Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr.* — 1964. — **87**. — P. 469–511.
62. *Taupin D.* Prevision de quelques images de dislocations par transmission des rayons X (cas de Laue symetnque) // *Acta Cryst.* — 1967. — **23**. — P. 5–35.
63. *Parratt L.G.* Surface studies of solids by total reflection of X-rays // *Phys. Rev. B.* — 1954. — **95**. — P. 359–369.
64. *Stepanov S.A.* Method of transfer matrices and dynamical thick-crystal approximation in surface X-ray diffraction by multilayer structures // *Cryst. Rep.* — 1994. — **39**, N 2. — P. 182–187.
65. *Kohn V. G.* On the theory of the Bragg reflection in the case of multiple X-ray diffraction // *Phys. Stat. Sol. (a).* — 1979. — **54**. — P. 375–384.

66. *Stepanov S. A., Kondrashkina E. A., Kohler R., Novikov D.V., Materlik G., Durbin S.M.* Dynamical X-ray diffraction of multilayers and superlattices: recursion matrix extension to grazing angles // *Phys. Rev. B.* — 1998. — **57**, N 8. — P. 4829–4841.
67. *Stepanov S.A., Pietsch U. and Baumbach G.T.* A matrix approach to X-ray grazing incidence diffraction in multilayers // *Z. Physik B.* — 1995. — **96**. — P. 341–347.
68. *Stepanov S.A., Koehler R.* Real-structure effects in the dynamical theory of grazing incidence X-ray diffraction // *J. Appl. Phys.* — 1994. — **76**. — P. 7809–7815.
69. *Stepanov S.A., Koehler R.* A dynamical theory of extremely asymmetric X-ray diffraction taking account of normal lattice strain // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 1994. — **27**. — P. 1923–1928.
70. *Kohn V.G.* A theory of multiple Bragg diffraction of X-rays in multilayer crystal systems // *J. Moscow Phys. Soc.* — 1977. — **1**. — P. 425–434.
71. *Colella R.* Multiple diffraction of X-rays and the phase problem. Computational procedures and comparison with experiment // *Acta Cryst. A.* — 1974. — **30**. — P. 413–423.
72. *Stepanov S.A., Ulyanenko A.P.* A new algorithm for computation of X-ray multiple Bragg diffraction // *Acta Cryst. A.* — 1994. — **50**. — P. 579–585.
73. *Єфанов О.М., Кладько В.П., Мачулін В.Ф.* Компланарна багатопроменева динамічна теорія дифракції X-променів в шаруватих структурах // *УФЖ.* — 2006. — **51**, № 9. — С. 894–900.
74. *Stetsko Y. P., Chang S.-L.* Dynamical calculation of crystal truncation rod for surfaces and interfaces using a Cartesian coordinate transformation technique // *Acta Cryst. A.* — 1999. — **57**. — P. 677–682.
75. *Caticha A.* Diffraction of x rays at the far tails of the Bragg peaks // *Phys. Rev. B.* — 1993. — **47**, N 1. — P. 76–83.
76. *Caticha A.* Diffraction of X rays at the far tails of the Bragg peaks. II. Darwin dynamical theory // *Phys. Rev. B.* — 1994. — **49**, N 1. — P. 33–38.
77. *Souvorov A., Ishikawa T., Nikulin A.Y., Stetsko Yu.P., Chang S.-L., Zaumseil P.* X-ray multiple diffraction from crystalline multilayers: application to a 90° Bragg reflection // *Phys. Rev. B.* — 2004. — **70**, 224109. — 9 p.
78. *Prudnikov I.R.* Darwin's approach to X-ray dynamical diffraction in distorted crystals // *Acta Cryst. A.* — 1998. — **54**. — P. 1034–1036.
79. *Prudnikov I.R.* X-ray diffraction in distorted crystals and imperfect multilayered structures. A theoretical approach based on recursion equations // *Phys. Stat. Sol. B.* — 2000. — **217**. — P. 725–735.

80. *Yashiro W., Takahashi T.* X-ray diffraction from an atomic plane // *Acta Cryst. A.* — 2000. — **56**. — P. 163–167.
81. *Ефанов А.Н., Кладько В.П., Савельева И.С.* Динамический расчет карт обратного пространства частично релаксированных многослойных структур некомпланарным многоволновым методом // *Материалы сем. в В. Новгороде.* — 2006. — С. 148–152.
82. <http://x-ray.net.ua/downloads/software/hi.rar>. — Програма для розрахунку структурного фактора.
83. <http://www.esrf.fr/computing/scientific/xop2.1>. — X-Ray Oriented Program (XOP).
84. <http://sergey.gmca.aps.anl.gov/>. — X-Ray Server.
85. *Ibers J.A., Hamilton W.C.* International tables for crystallography. — Birmingham: Kynoch, England, 1974. — Vol. 4. — 366 p.
86. *Renninger M.* Mess: gen zur Rontgenstrahl-Optik des Idealkristalls. 1. Bestatigung der Darwin-Ewald-Prins-Kohler-Kurve // *Acta Cryst.* — 1955. — **8**. — P. 597–606.
87. *Казанова Г.* Векторная алгебра. — Москва: Мир, 1979. — 120 с.
88. *Ефанов А.Н., Кладько В.П.* Моделирование дифракции рентгеновских лучей от многослойной структуры с различным градиентом состава на границах слоев // *Металлофизика и новейшие технологии.* — 2006. — **28**, № 5. — С. 619–629.
89. *Yefanov O., Kladko V., Gudymenko O., Strelchuk V., Mazur Yu., Wang Z.M., Salamo J.* Fields of deformation anisotropy exploration in multilayered (In,Ga)As/GaAs structures by high-resolution X-ray scattering // *Phys. Status Sol. (a).* — 2006. — **203**, Issue 1. — P. 154–157.
90. *Yashar P., Pillai M.R., Mirecki-Millunchick J., Barnett S.A.* X-ray diffraction measurement of segregation-induced interface broadening in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  superlattices // *J. Appl. Phys.* — 1998. — **83**, N 4. — P. 2010–2013.
91. *Peng C.S., Pavelescu E.-M., Jouhti T., Konttinen J., Fodchuk I.M., Kyslovsky Y., Pessa M.* Suppression of interfacial atomic diffusion in  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$  heterostructures grown by molecular-beam epitaxy // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — **80**, N 25. — P. 4720–4722.
92. *Boudet N., Eymery J., Magnea N.* X-ray diffraction study of the lattice distortions induced by a fractional monolayer: ZnTe embedded in vicinal CdTe (001) // *Phys. Rev.* — 1997. — **55**, N 23. — P. 15804–15812.
93. *Тхорик Ю.А., Хазан Л.С.* Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. — Киев: Наукова думка, 1983. — 304 с.

94. *Стрельчук В.В., Кладько В.П., Валах М.Я., Мачулін В.Ф. і ін.* Дослідження самоіндукованих квантових точок в InGaAs/GaAs багатопшарових структурах // Наносистеми, наноматеріали і нанотехнології. — 2003. — **1**. — С. 309–327.
95. *Wormington M., Panaccione C., Matney K.M., Bowen K.* Characterization of structures from X-ray scattering data using genetic algorithms // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. — 1999. — **357**. — P. 2827–2848.
96. *Ломов А.А., Чуев М.А., Ганин Г.В.* Параметры многослойной гетероструктуры по результатам совместного анализа кривых дифракционного отражения от разных кристаллографических плоскостей // Письма в ЖТФ. — 2004. — **30**, № 10. — С. 89–95.
97. *Афанасьев А.М., Чуев М.А., Имамов Р.М., Ломов А.А.* Структурные характеристики квантовой ямы InGaAs по рентгенодифракционным данным // Кристаллография. — 2001. — **46**, № 5. — С. 781–790.
98. *Ломов А.А., Сутырин А.Г. и др.* Параметры многослойной гетероструктуры по результатам совместного анализа КДО от разных кристаллографических плоскостей // Кристаллография. — 2005. — **50**, № 4. — С. 583–594.
99. *Евстигнеев С.В., Имамов Р.М. и др.* Исследование квантовых ям методом рентгеновской дифрактометрии // ФТП. — 2000. — **34**, № 6. — С. 719–725.
100. *Ефанов А.Н., Кладько В.П., Гудыменко А.И., Стрельчук В.В., Мазур Ю.И., Wang Z.M., Salato J.* Влияние анизотропии полей деформации в многослойных структурах (InGa)As/GaAs на спектры отражения рентгеновских лучей // Металлофизика и новейшие технологии. — 2006. — **28**, № 4. — С. 441–448.
101. *Fleming R.M., McWhan D.B., Grossard A.C., Wiegmann W., Logan R.A. et al.* X-ray diffraction study of interdiffusion and growth in GaAs/AlAs multilayers // J. Appl. Phys. — 1980. — **51**. — P. 357–363.
102. *Fewster P.* Superlattices in X-ray and neutron dynamical diffraction theory and applications. — New York: Plenum Press, 1996. — 351 p.
103. *Ефанов А.Н., Кладько В.П., Слободян Н.В., Мачулін В.Ф., Стрельчук В.В.* Новый подход для анализа анизотропных деформаций в многослойных структурах // Материалы сем. в В. Новгороде. — 2006. — С. 233.
104. *Бушув В.А., Кютт Р.Н., Хапачев Ю.П.* Физические принципы рентгенодифрактометрического определения параметров реальной структуры многослойных эпитаксиальных пленок. — Нальчик: КБГУ, 1996.
105. *Pietsch U., Holy V., Baumbach T.* High-resolution X-ray scattering from thin films to lateral nanostructures. — New York: Springer, 2004. — 408 p.



106. Молоджин В.Б., Низкова А.И., Шпак А.В., Мачулин В.Ф., Кладько В.П., Прокопенко И.В., Кютт Р.Н., Кисловский Е.Н., Олховский С.И., Первак Е.Б., Фодчук И.М., Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов. — Київ: Академперіодика, 2005. — 364 с.
107. Pfeiffer J.-U. Charakterisierung des Relaxationsverhaltens von  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(001)$  Schichten mittels Röntgentopographie / Dissertation Zur Erlangung des akademischen Grades doctor rerum naturalium. — Berlin: University, 2001. — 101 с.
108. Пунегов В.И. Теория рассеяния рентгеновских лучей на латеральных структурах. — Сыктывкар: ИИИ, 2007. — 100 с.
109. Koppensteiner E., Bauer G., Kubbel H., Kasper E. Investigation of strain-symmetrized and pseudomorphic  $\text{Si}_m\text{Ge}_n$  superlattices by X-ray reciprocal space mapping // J. Appl. Phys. — 1994. — **76**. — P. 3489.
110. Neumann D.A., Zabel H., Morkoc H. Terracing in strained-layer superlattices // J. Appl. Phys. — 1988. — **64**. — P. 3024.
111. Holy V., Kubena J., Ochlidal I., Ploog K. X-ray diffractometry of small defects in layered systems // Superlattices and Microstructures. — 1992. — **12**. — P. 25.
112. Holy V., Kubena J., Abramof E., Lichka K., Koppensteiner E. X-ray double and triple crystal diffractometry of mosaic structure in heteroepitaxial layers // J. Appl. Phys. — 1993. — **74**. — P. 1736.
113. Heinke H., Einfeldt S., Kuhn-Heinrich B., Plachl G., Moller M.O., Landwehr G. Application of the model of the relaxation line in reciprocal space to II-VI heterostructures // J. Phys. D. — 1995. — **28**. — P. A104.
114. Bartels W.J., Hornstra J., Lobeek D.J. X-ray diffraction of multilayers and superlattices // Acta Cryst. A. — 1986. — **42**. — P. 539.
115. Fewster P.E. X-ray diffraction from low-dimensional structures // Semic. Sci. Technol. — 1993. — **8**. — P. 1915.
116. Zolotoyabko E. Extended kinematic approach to the simulation of high-resolution X-ray diffraction spectra. Application to structures with strained amorphous layers // J. Appl. Cryst. — 1998. — **31**. — P. 241.
117. Zolotoyabko E., Finkelstein Yu., Blumina M. X-ray diffraction in quantum-well structures // Phys. B. — 1996. — **221**. — P. 487.
118. Bartels W.J., Nijman W. X-ray double-crystal diffractometry of  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  epitaxial layers // J. Cryst. Growth. — 1978. — **44**. — P. 518.
119. Fewster P.E. Composition and lattice-mismatch measurement of thin semiconductor layers by X-ray diffraction // J. Appl. Phys. — 1987. — **62**. — P. 4154.

120. *Nesterets Ya.I., Punegov V.I.* The statistical kinematical theory of  $X$ -ray diffraction as applied to reciprocal space mapping // *Acta Cryst. A.* — 2000. — **56**. — P. 540.
121. *Kaganer V.M., Koller R., Schmidbauer M., Opitz R., Jenicher B.*  $X$ -ray diffraction peaks due to misfit dislocations in heteroepitaxial structures // *Phys. Rev. B.* — 1997. — **55**. — P. 1793.
122. *Heinke H., Moller M., Hommel D., Landwehr G.* Relaxation and mosaicity profiles in epitaxial layers studied by high resolution  $X$ -ray diffraction // *J. Cryst. Growth.* — 1994. — **135**. — P. 41.
123. *Zolotoyabko E., Goldner A., Komem Y.* Thickness effect in the atomic ordering of strained  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  layers // *Phys. Rev. B.* — 1999. — **60**. — P. 11014.
124. *Van der Sluis P.* Determination of strain in epitaxial semiconductor layers by high-resolution  $X$ -ray diffraction // *J. Phys. D.* — 1993. — **26**. — P. A188.
125. *Takagi S.* Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion // *Acta Cryst.* — 1962. — **15**. — P. 1311.
126. *Shilo D., Lakin E., Zolotoyabko E.* Comprehensive strain analysis in thin films based on high-resolution  $X$ -ray diffraction: Application to implanted  $\text{LiNbO}_3$  // *Phys. Rev. B.* — 2001. — **63**, 205420.
127. *Schuster M., Gervais P., Jobst B., Hosler W., Averbek R., Ibert A.* Determination of the chemical composition of distorted  $\text{InGaN}/\text{GaN}$  heterostructures from  $X$ -ray diffraction data // *J. Phys. D.* — 1999. — **32**. — P. A56.
128. *Berkowicz E., Gershoni D., Bachir G., Lakin E., Shilo D., Zolotoyabko E., Abare A., Denbaars S.* Measured and calculated radiative lifetime and optical absorption of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  quantum structures // *Phys. Rev. B.* — 2000. — **61**. — P. 10994.
129. *Roichman Y., Berner A., Brener R., Shilo D., Zolotoyabko E., Osten J.* Co silicide formation on epitaxial  $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y/\text{Si}$  (001) layers // *J. Appl. Phys.* — 2000. — **87**. — P. 3306.
130. *Stokes D.W., Forrest R.L., Li J.H., Moss S.C., Noshko B.Z., Bennett B.R., Whitman L.J., Goldenberg M.* Lateral composition modulation in  $\text{InGaAs}/\text{GaSb}$  superlattices // *J. Appl. Phys.* — 2003. — **93**. — P. 311.
131. *Krost A., Heinrichsdor F., Bimberg D., Darhuber A., Bauer G.* High-resolution  $X$ -ray diffraction of self-organized  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$  quantum dot structures // *Appl. Phys. Lett.* — 1996. — **68**. — P. 785.
132. *Strelchuk V.V., Kladko V.P., Yefanov O.M., Kolomys O.F., Gudymenko O.I., Valakh M.Ya., Mazur Yu., Wang Zh., Salamo G.* Anisotropy

- of elastic deformations in multilayer (In, Ga)As/GaAs structures with quantum wires: X-ray diffractometry study // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. — 2005. — **8**. — P. 36
133. *Grigoriev D., Schmidbauer M., Schaefer P., Besedin S., Mazur Yu.I., Wang Z.M., Salamo G.J., Koehler R.* Three-dimensional self-ordering in an InGaAs/GaAs multilayered quantum dot structure investigated by X-ray diffraction // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2005. — **38**. — P. A154
134. *Krost A., Heinrichsdorff F., Bimberg D., Blasing J., Darhuber A., Bauer G.* X-ray analysis of self-organized InAs/InGaAs quantum dot structure // Cryst. Res. Technol. — 1999. — **34**. — P. 89
135. *Schmidbauer M., Seydmohamadi Sh., Grigoriev D., Wang Zh.M., Masur Yu.I., Schafer P., Hanke M., Koehler R., Salamo G.J.* Controlling planar and vertical ordering in three-dimensional (In,Ga)As quantum dot lattices by surface orientation // Phys. Rev. Lett. — 2006. — **96**, 066108.
136. *Kladko V.P., Slobodian M.V., Strelchuk V.V., Yefanov O.M., Machulin V.F., Mazur Yu.I., Wang Zh., Salamo G.J.* Structural anisotropy of InGaAs/GaAs(100) quantum dot chains structures // Phys. Stat. Sol. A. — 2007. — **204**. — P. 2567
137. *Schmidbauer M., Wang Zh.M., Mazur Yu.I., Lytvyn P.M., Salamo G.J., Grigoriev D., Schafer P., Kohler R., Hanke M.* Initial stages of chain formation in a single layer of (In,Ga)As quantum dots grown on GaAs (100) // Appl. Phys. Lett. — 2007. — **91**, 093110.
138. *Srinivasan T., Singh S.N., Tiwari U., Sharma R.K., Muralidharan R., Sridhara Rao R.V., Balamuralikrishnan R., Muraliedharan K.* Structural and photoluminescence characteristics of molecular beam epitaxy-grown vertically aligned In<sub>0.33</sub>Ga<sub>0.67</sub>As quantum dots // J. Cryst. Growth. — 2005. — **280**. — P. 378
139. *Mogilyanski D., Gartstein E.* Characterization of the islands nucleation in LPOMVPE grown InGaAs/GaAs multilayer in the near substrate/interfacial regions // J. Cryst. Growth. — 2002. — **234**. — P. 646
140. *Mano T., Nutzel R., Hamhuis G.J., Eijkemans T.J., Wolter J.H.* Effect of annealing on formation of self-assembled (In,Ga)As quantum wires on GaAs (100) // J. Appl. Phys. — 2002. — **92**. — P. 4043
141. *Springholz G., Holy V., Pinczolits M., Bauer G.* Self-organized growth of three-dimensional quantum-dot crystals with fcc-like stacking and a tunable lattice constant // Science. — 1998. — **282**. — P. 734
142. *Mazur Yu.I., Wang Z.M., Salamo G.J., Strelchuk V.V., Kladko V.P., Machulin V.F., Valakh M.Ya., Manasreh M.O.* Investigation of indium distribution in InGaAs/GaAs quantum dot stacks using high-resolution

- X-ray diffraction and Raman scattering // *J. Appl. Phys.* — 2006. — **99**, 023517. — 10 p.
143. *MPal D., Towe E., Chen S.* Structural characterization of InAs/GaAs quantum dot nanostructures // *Appl. Phys. Lett.* — 2001. — **78**. — P. 4133–
144. *Krost A., Heinrichsdorff F., Binberg D., Blasing J., Darchuber A., Bauer G.* X-ray analysis of self-organized InAs/InGaAs quantum dot structure // *Cryst. Res. Technol.* — 1999. — **34**. — P. 89–
145. *Grigoriev D., Hanke M., Schmidbauer M., Schafer P., Kononov O., Koehler R.* Grazing incidence X-ray diffraction at free-standing nanoscale islands: fine structure of diffuse scattering // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 2003. — **36**. — P. A225–
146. *Kladko V.P., Strelcuk V.V., Kolomyts A.F., Slobodian M.V., Mazur Yu.I., Wang Zh.M., Kunets Vas.P., Salamo G.J.* Microstructural aspects of nucleation and growth of (In,Ga)As-GaAs(001) islands with low indium content // *Journal of Electronic Materials.* — 2007. — **36**. — P. 1555–
147. *Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Гудименко О.Й., Корчовий А.А., Стрельчук В.В., Прокопенко І.В.* Рентгенодифракційні дослідження структурних 2D-3D структурних переходів в нанорозмірних багатоварштованих періодических структурах // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології.* — 2003. — **1**. — С. 447–
148. *Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Молоджин В.Б., Первак Е.В., Корчовий А.А., Ефанов А.Н., Козутюк П.П., Скакунова Е.В.* Влияние упорядочения в периодических структурах с квантовыми точками на характер брэгговской дифракции // *Материаловедение и новейшие технологии.* — 2004. — **26**. — С. 1255–
149. *Ustinov V.M., Zhukov A.E.* GaAs-based long-wavelength lasers // *Semicond. Sci. Technol.* — 2000. — **15**. — P. R41–R44
150. *Sprutle S.G., Larson M.C., Eampler W., Colden C.W., Petersen H.E., Harris J.S.* Nitrogen incorporation in group III-nitride-arsenide materials grown by elemental source molecular beam epitaxy // *J. Cryst. Growth.* — 2001. — **227**. — P. 506–
151. *Pessa M., Peng C.S., Jouhti T., Pavelescu E.-M., Li W., Karirinne S., Liu H., Okhotnikov O.* Long-wavelength nitride lasers on GaAs // *Microel. Eng.* — 2003. — **69**. — P. 195–
152. *Kondow M., Kitatani T.* Molecular beam epitaxy of GaN and GaInNAs // *Semicond. Sci. Technol.* — 2002. — **17**. — P. 746–
153. *Chauveau J.-M., Trampert A., Pinaults M.-A., Tournie E., Du K., Ploog K.H.* Correlations between structural and optical properties of Ga-

- nNAs quantum wells grown by MBE // J. Cryst. Growth. — 2003. — **251**. — P. 383-390.
154. Borkovska L., Yefanov O., Gudymenko O., Johnson S., Kladko V., Korsunskaya N., Kryshchak T., Sadofyev Yu., Zhang Y.-H. Effect of growth temperature on the luminescent and structural properties of InGaAsSbN/GaAs quantum wells for 1.3  $\mu\text{m}$  telecom application // Thin Sol. Films. — 2006. — **515**. — P. 786-790.
155. Ledentsov N.N., Ustinov V.M., Shchukin V.A., Kopiev P.S., Alferov Zh.I., Bimberg D. Quantum dot heterostructures: fabrication, properties, lasers (review) // Semiconductors. — 1998. — **32**. — P. 343-350.
156. Евстигнеев С.В., Имамов Р.М., Ломов А.А., Садофьев Ю.Г., Хабаров Ю.В., Чувев М.А. Исследование квантовых ям  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  методами низкотемпературной фотолюминесценции и рентгеновской дифрактометрии // ФТП. — 2000. — **34**. — С. 719-724.
157. Afanas'ev A.M., Chuev M.A., Imamov R.M., Lomov A.A. Structural characteristics of multicomponent GaAs-In $_x$ Ga $_{1-x}$ As system from double-crystal X-ray diffractometry data // Cryst. Rep. — 2000. — **45**. — P. 655-660.
158. Thinh N.Q., Buyanova I.A., Chen W.M., Xin H.P., Tu C.W. Formation of nonradiative defects in molecular beam epitaxial GaN $_x$ As $_{1-x}$  studied by optically detected magnetic resonance // Appl. Phys. Lett. — 2001. — **79**. — P. 3089-3091.
159. Borkovska L., Korsunskaya N., Kladko V., Kryshchak T., Kushnirenko V., Slobodyan M., Yefanov O., Venger Y., Johnson S., Sadofyev Y., Zhang Y.-H. Investigation of defect structure of InGaAsSb/GaAs quantum wells // Material Science and Engineering. — 2007. — **27**. — P. 66-70. цитирования.
160. Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys // J. Appl. Phys. — 2001. — **89**. — P. 5815-5848.
161. Harmand J.C., Ungaro G., Largeau L., Le Roux G. Comparison of nitrogen incorporation in molecular-beam epitaxy of GaAsN, GaAsN and GaAsSbN // Appl. Phys. Lett. — 2000. — **77**. — P. 2482-2484.
162. Келли А., Гровс Г. Рентгенография и дефекты в кристаллах. — Москва: Мир, 1974. — 300 с.
163. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. — Москва: Наука, 1974. — 300 с.
164. Ратников В.В., Кютт Р.Н., Шубина Т.В. Рентгеновское измерение тензора микродисторсии и анализ на его основе дислокационной структуры толстых слоев GaN, полученных методом хлоридной газофазной эпитаксии // ФТП. — 2000. — **42**. — С. 2140-2145.

165. Sun Y.J., Brandt O., Liu T.Y., Trampert A., Ploog K.H., Blasing J., Krost A. Determination of the azimuthal orientational spread of GaN by X-ray diffraction // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — **81**. — P. 4928.
166. Кютт Р.Н., Ратников В.В., Мосина Г.Н., Щеглов М.П. Структурное совершенство эпитаксиальных слоев GaN по данным рентгеновской дифракции // *ФТТ.* — 1999. — **41**. — С. 30.
167. Srikant V., Speck J.S., Clarke D.R. High-resolution X-ray diffraction of self-organized InGaAs/GaAs quantum dot structures // *J. Appl. Phys.* — 1997. — **82**. — P. 4286.
168. Кладько В.П., Чорненький С.В., Наумов А.В., Комаров А.В., Тасанов М., Свешников Ю.Н., Витусевич С.В., Беллев А.Е. Структурные дефекты на гетерограницах и фотолуминесцентные свойства эпитаксиальных слоев GaN, AlGaIn выращенных на сапфире // *ФТП.* — 2006. — **40**. — С. 1087.
169. Jain S.C., Willander M., Narayan J., Van Overstraeten R. III - nitrides: growth, characterization, and properties // *J. Appl. Phys.* — 2000. — **87**. — P. 965-1006.
170. Heying B., Wu X.H., Keller S., Li Y., Kopolnek D., Keller B.P., Den Baars S.P., Speck J.S. Role of threading dislocation structure on the X-ray diffraction peak width of epitaxial GaN films // *Appl. Phys. Lett.* — 1996. — **68**. — P. 643.
171. Chierchia R., Brottcher T., Heinke H., Einfeldt S., Figge S., Hommel D. Microstructure of heteroepitaxial GaN revealed by X-ray diffraction // *J. Appl. Phys.* — 2003. — **93**. — P. 8918.
172. Ratnikov V., Kyutt R., Shubina T., Pashkova T., Valcheva E., Monemar B. Bragg and Laue X-ray diffraction study of dislocations in thick hydride vapor phase epitaxy GaN films // *J. Appl. Phys.* — 2000. — **88**. — P. 6252.
173. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. — Москва: Наука, 1967.
174. Ratnikov V.V., Kyutt R.N., Shubina T.V., Pashkova T., Monemar B. Determination of microdistortion components and their application to structural characterization of HVPE GaN epitaxial layers // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 2001. — **34**. — P. A30.
175. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. — Киев: Наукова думка, 1988. — 196 с.
176. Кривоглаз М.А. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах. — Киев: Наукова думка, 1984. — 288 с.

177. *Dederichs P.* Dynamical diffraction theory by  $\delta$ -potential methods // *Solid State Phys.* — 1972. — **27**. — P. 135-167.
178. *Avrachami Y., Zolotoyabko E.* Structural modifications in He-implanted waveguide layers of  $\text{LiNbO}_3$  // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B.* — 1996. — **120**. — P. 84-87.

# Зміст

Передмова . . . . .	5
Умовні позначення . . . . .	7
Вступ . . . . .	8
<b>Розділ 1. Обернений простір . . . . .</b>	<b>11</b>
1.1. Побудова оберненого простору . . . . .	12
1.1.1. Кубічна ґратка . . . . .	15
1.1.2. Тетрагональна ґратка . . . . .	15
1.1.3. Триклинна ґратка . . . . .	16
1.2. Зв'язок дифракції з оберненим простором . . . . .	18
1.2.1. Кратні рефлекси . . . . .	21
1.2.2. Ґратки алмазу та сфалериту. Заборонені рефлекси	23
1.2.3. Багатохвильова дифракція . . . . .	25
1.3. Область доступності в оберненому просторі . . . . .	28
1.4. Експериментальні геометрії дифракції . . . . .	38
1.4.1. $\omega/2\theta$ -сканування . . . . .	41
1.4.2. $\omega$ -сканування . . . . .	42
1.4.3. $2\theta$ -сканування . . . . .	44
1.4.4. $\omega/N\theta$ -сканування . . . . .	44
1.4.5. Карти оберненого простору та позиційно-чутливі	
детектори . . . . .	45
1.4.6. Інші варіанти сканування . . . . .	49
1.5. Формування оберненого простору за допомогою фур'є-	
перетворення . . . . .	50
1.6. Обернений простір для двошарових структур . . . . .	51
<b>Розділ 2. Динамічна теорія дифракції для багатошарових</b>	
<b>структур . . . . .</b>	<b>57</b>
2.1. Динамічна теорія дифракції: класифікація та історична	
довідка . . . . .	57
2.2. Виведення головних формул динамічної теорії дифракції	58
2.2.1. Рівняння розповсюдження . . . . .	59
2.2.2. Граничні умови . . . . .	62



2.3.	Розв'язок дисперсійного рівняння . . . . .	64
2.3.1.	Розрахунок хвильових векторів . . . . .	65
2.3.2.	Чисельний та наближений аналітичний розв'язки у двоххвильовому випадку . . . . .	66
2.3.3.	Точний аналітичний розв'язок у двоххвильовому випадку . . . . .	81
2.3.4.	Чисельний розв'язок у три- та чотирьоххвильовому випадках . . . . .	82
2.4.	Методи розрахунку динамічної дифракції від багатопарових структур . . . . .	86
2.4.1.	Метод матриць Абеле . . . . .	87
2.4.2.	Одновимірні рівняння Такагі . . . . .	87
2.4.3.	Алгоритм матриці проходження (ТМА) . . . . .	89
2.4.4.	Рекурентні співвідношення для дифрактометрії . . . . .	92
2.4.5.	Рекурентні співвідношення для рефлектометрії . . . . .	93
2.4.6.	Алгоритм рекурсивних матриць (РМА) . . . . .	93
2.4.7.	Багатохвильовий ТМА . . . . .	94
2.4.8.	Компланарна багатопроменева динамічна теорія . . . . .	95
2.4.9.	Розрахунок некопланарної багатохвильової дифракції в паралельній платівці . . . . .	104
2.4.10.	Розрахунок некопланарної багатохвильової дифракції в багатопаровій структурі . . . . .	105
2.4.11.	Багатопроменевий некопланарний РМА . . . . .	106
2.4.12.	Метод Дарвіна . . . . .	113
2.4.13.	Розрахунок поляризованості . . . . .	117
<b>Розділ 3. Застосування методів динамічної дифракції</b>		
<b>в експериментальних задачах . . . . .</b>		
3.1.	Рефлектометрия . . . . .	119
3.2.	Ренінгерівське сканування . . . . .	119
3.3.	Точне врахування та розрахунок довільної лінійної по- ляризації . . . . .	120
3.4.	Перехідна область між шарами . . . . .	121
3.5.	Автофітування кривих . . . . .	129
3.6.	Вплив анізотропії полів деформації в багатопарових структурах (InGa)As/GaAs на дифра- кцію рентгенівських променів . . . . .	132
3.7.	Азимутальні залежності дифракції як новий метод аналізу . . . . .	137

3.8. Розрахунок карт оберненого простору . . . . .	140
3.8.1. Карты для надґраток, що складаються з шарів двох типів . . . . .	140
3.8.2. Карты для довільних надґраток . . . . .	143
<b>Розділ 4. Дослідження напружень і композиційного складу в псевдоморфних і релаксованих структурах .</b>	<b>145</b>
4.1. Вступ . . . . .	145
4.2. Використання двокристальних кривих відбиття . . . . .	145
4.3. Використання трикристальної дифрактометрії . . . . .	148
4.3.1. Напружені шари надґраток: нахили площин, тераси, мозаїчний розподіл . . . . .	154
4.3.2. Градієнтні епітаксійні шари . . . . .	157
4.3.3. Термічні напруження . . . . .	158
4.4. Вимірювання тонких змін деформації в гетероструктурах за допомогою карт оберненого простору . . . . .	160
4.4.1. Вступ . . . . .	160
4.4.2. Теоретичні основи . . . . .	162
4.5. Вимірювання КОП у гетероструктурах . . . . .	168
4.5.1. Кубічні гетероструктури . . . . .	168
4.5.2. Вплив латеральних модуляцій складу на зародження і впорядкування масиву квантових острівців у багат шарових періодичних структурах InGaAs/GaAs . . . . .	173
4.5.3. Рентгенодифрактометричні дослідження деформаційного стану гетероструктур InGaAsSbN/GaAs з квантовими ямами . . . . .	180
4.5.4. Гексагональні гетероструктури . . . . .	185
4.5.5. Дислокаційна структура GaN шарів за даними X- променевих вимірювань тензора мікродисторсії . . . . .	187
4.5.6. Висновок . . . . .	200
Заклучна частина . . . . .	201
Список літератури . . . . .	203

Наукове видання

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

Єфанов Олександр Миколайович  
Кладько Василь Петрович  
Мачулін Володимир Федорович  
Молодкін Вадим Борисович

ДИНАМІЧНА ДИФРАКЦІЯ  
Х-ПРОМЕНІВ  
У БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ

Київ, Науково-виробниче підприємство  
«Видавництво “Наукова думка” НАН України», 2008

Художнє оформлення ??????????

Художній редактор ??????????

Технічний редактор ??????????

Комп'ютерна верстка *В.М. Бойко, Г.В. Попович*

Підп. до друку ??,??,2008. Формат 60×90/16. Папір офс. № 1. Гарн. Computer  
Modern. Друк. офс. Ум. друк. арк. ??,??. Обл.-вид. арк. ??. Наклад ????  
прим. Зам. № ????

НВП «Видавництво “Наукова думка” НАН України»  
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до Державного реєстру  
серія ДК № 2440 від 15.03.2006 р.  
01601, Київ 1, вул. Терещенківська, 3

♣♣♣ПП «Видавництво “Фенікс”»  
03680, Київ 680, вул. Шутова, 13<sup>Г</sup> ♣♣♣