

ДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ КАРТ ОБРАТНОГО ПРОСТРАНСТВА ЧАСТИЧНО РЕЛАКСИРОВАННЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР НЕКОМПЛАНАРНЫМ МНОГОВОЛНОВЫМ МЕТОДОМ.

А.Н. Ефанов¹, В.П. Кладько¹, И. С. Савельева²

¹ Институт физики полупроводников им. Лашкарева НАН Украины, Киев, пр. Науки 41, 03028

² Киевский национальный университет им. Тараса Шевченка
efa@hotmailbox.ru

Для исследования внутренней структуры кристаллического твердого тела методами рентгеноструктурного анализа простых кривых дифракционного отражения бывает недостаточно. Посему возникает необходимость в более информативных методах измерения, так называемых двумерных картах распределения интенсивности. Наиболее распространенный вид таких карт представляет собой совмещенное $\omega/2\theta$ и ω сканирование - так называемые карты обратного пространства. Анализ полученных картин очень часто производится просто эмпирическим методом

Для более качественного анализа необходимо моделирование подобных карт распределения интенсивностей. Однако существующие на сегодня методы основаны либо на кинематических моделях либо на не блестящих точностью уравнениях Такаги. Более развитая и точная плосковолновая динамическая теория имеет существенное ограничение - отсутствие информации о направлении дифрагированного луча.

В данной работе, наиболее точный на сегодняшний день алгоритм расчета дифракции [1] от слоистых структур [2], применен для построения карт обратного пространства.

Некомпланарная многоволновая дифракция рентгеновских лучей в слоистых структурах.

В [1] разработан алгоритм расчета некомпланарной многоволновой дифракции в параллельной пластинке, в [2] данный подход расширен на случай многослойной структуры. В данной работе предложен альтернативный [2] алгоритм расчета, схожий в ключевых моментах, однако выведенный независимо, справедливый не только для полностью напряженной структуры и не содержащий некоторых ошибок при интерпретации фазовых множителей.

Основные свойства предложенного метода:

- рассматриваются плоские волны;
- уравнение распространения и граничные условия рашаются без упрощений;
- любая геометрия (Брэгг, Лауэ, Брэгг-Лауэ);
- 3D моделирование в обратном пространстве и 1D в прямом
- весь возможный угловой диапазон;

- точный учет любой поляризации и информация о поляризации вышедших лучей;
- нет принципиальных ограничений на количество точек обратного пространства принимающих участие в дифракции
- все расчеты производятся для x,y,z компонент волновых векторов, векторов дифракции и полей

Решение дисперсионного уравнения.

Уравнение распространения для векторов напряженности электрического поля в периодической среде для N точек обратного пространства имеет вид:

$$(k_{h_n}^2 - 1)\vec{E}_{h_n} = (\vec{k}_{h_n} \cdot \vec{E}_{h_n})\vec{k}_{h_n} + \sum_{m=0}^{N-1} \chi_{h_n - h_m} \vec{E}_{h_m}, \quad (1)$$

где \vec{k}_{h_n} - вектор дифракции соответствующий вектору обратной решетки h_n (тут и далее все волновые вектора и вектора обратной решетки поделены на длину волнового вектора в вакууме K), \vec{E}_{h_n} - соответствующая напряженность электрического поля, $\chi_{h_n - h_m}$ - Фурье компоненты поляризуемости, рассчитываемая написанной в рамках данной работы программой с открытыми исходными кодами [3].

Для перехода к скалярным уравнениям представим все вектора в декартовых координатах:

$$\begin{aligned} \vec{k}_{h_n} &= (X_n - x)\vec{i} + (Y_n - y)\vec{j} + (Z_n - z)\vec{k} = \\ &= x_n\vec{i} + y_n\vec{j} + (Z_n - z)\vec{k} \\ \vec{E}_{h_n} &= E_n^x\vec{i} + E_n^y\vec{j} + E_n^z\vec{k}, \end{aligned}$$

где X_n, Y_n, Z_n - координаты точек обратного пространства, а x, y, z - координаты начал волновых векторов.

Тогда уравнение (1) примет вид (2):

$$\begin{pmatrix} (C-zI)^2 + B^2 - G^2 & -AB & -A(C-zI) \\ -AB & (C-zI)^2 + A^2 - G^2 & -B(C-zI) \\ -A(C-zI) & -B(C-zI) & A^2 + B^2 - G^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0$$

где матрицы размера $[N*N]$ $I = \{\delta_{nm}\}$,

$$A = \{\delta_{nm} \cdot x_n\}, B = \{\delta_{nm} \cdot y_n\}, C = \{\delta_{nm} \cdot Z_n\},$$

$X = \{\chi_{h_n - h_m}\}$, $G = (I + X)$, δ_{nm} - символ Кронекера. Матрицы E_x, E_y, E_z - вектор-столбцы размером $[1*N]$ напряженностей, типа:

$$E_x = (E_0^x, E_1^x, \dots, E_{N-1}^x)^T,$$

T - значит транспонированный.

Введя два вектор-столбца:

$$E_v = (C - zI)E_x - AE_z \text{ и}$$

$$E_w = (C - zI)E_y - BE_z$$

после преобразований сведем (2) к системе:

$$Q \cdot E_4 = z \cdot E_4, \quad (3)$$

$$E_z = -(I + X)^{-2} (AE_v + BE_w)$$

где $E_4 = (E_x, E_y, E_v, E_w)^T$, а матрица Q размером $[4N*4N]$ равна:

$$\begin{pmatrix} C & 0 & AG^2A - I & AG^2B \\ 0 & C & BG^2A & BG^2B - I \\ B^2 - G^2 & -AB & C & 0 \\ -AB & A^2 - G^2 & 0 & C \end{pmatrix} \quad (4)$$

Таким образом, первое уравнение в (3) является дисперсионным уравнением из которого можно найти вектора дифракции в среде, а в комбинации со вторым уравнением, еще и волновые поля соответствующие всем дифрагированным лучам (с точностью до неизвестного коэффициента c_j^m).

Однако для нахождения истинных значений амплитуд волн в слое необходимо применение граничных условий.

Граничные условия:

Граничные условия для электромагнитных волн в среде имеют вид:

$$E_t = const, \quad D_n = const, \quad (5)$$

$$H_t = const, \quad B_n = const$$

где n - нормальные компоненты, t - тангенциальные.

Для второго и третьего условия можно воспользоваться тем фактом, что:

$$\vec{D}_h = \vec{E}_h + \sum_{h'} \chi_{h-h'} \vec{E}_{h'}$$

$$\vec{H}_h = [\vec{k}_h \times \vec{E}_h].$$

Четвертое соотношение при магнитной проницаемости среды $\mu=1$ (что практически всегда справедливо для рентгеновских лучей[4]) сводится к первому [1].

Запишем волну в кристалле:

$$E^{x,y,z}(r) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i\vec{k}_{\perp n} \cdot \vec{r}_{\perp} + iZ_n t + iC_n} \sum_{j=0}^{4N-1} c_j E_{nj}^{x,y,z} e^{-iz_j t}$$

где константа интегрирования C_n , для непрерывности фазы между слоями, должна рав-

няться: $C_n = \vec{k}_{\perp n} \cdot \vec{r}_n - Z_n t$, t - толщина текущего слоя.

На границе между слоем (m) и (m-1) условия (5) в матричном виде будут иметь вид:

$$c_m E_m^x = c_{m-1} E_{m-1}^x F_{m-1} \quad (6)$$

$$c_m E_m^y = c_{m-1} E_{m-1}^y F_{m-1}$$

$$c_m (I + X_m) E_m^z = c_{m-1} (I + X_{m-1}) E_{m-1}^z F_{m-1}$$

$$c_m (E_m^{zy} - B_m E_m^z) = c_{m-1} (E_{m-1}^{zy} - B_{m-1} E_{m-1}^z) F_{m-1}$$

$$c_m (A_m E_m^z - E_m^{zx}) = c_{m-1} (A_{m-1} E_{m-1}^z - E_{m-1}^{zx}) F_{m-1}$$

где матрица $F_m = \{\delta_{ij} \exp(iz_j^m t^m)\}$,

$$c_m = \{\delta_{ij} \cdot c_j\} \text{ и } E_n^{zx,y} = \{z_j * E_n^{x,y}\}.$$

На верхней границе структуры, состоящей из M слоев (1 - верхний, M - подложка), условия (6) примут вид:

$$c_1 E_1^x = E_0^x + E_{up}^x \quad (7)$$

$$c_1 E_1^y = E_0^y + E_{up}^y$$

$$c_1 (I + X_1) E_1^z = E_0^z + E_{up}^z$$

$$c_1 (E_1^{zy} - B_1 E_1^z) = K^z (E_0^y - E_{up}^y) - B (E_0^z + E_{up}^z)$$

$$c_1 (A_1 E_1^z - E_1^{zx}) = K^z (E_{up}^x - E_0^x) + A (E_0^z + E_{up}^z).$$

И на нижней границе:

$$c_M E_M^x = E_{down}^x \varphi_M \quad (8)$$

$$c_M E_M^y = E_{down}^y \varphi_M$$

$$c_M (I + X_M) E_M^z = E_{up}^z \varphi_M$$

$$c_M (E_M^{zy} - B_M E_M^z) = (K^z E_{down}^y - B E_{down}^z) \varphi_M$$

$$c_M (A_M E_M^z - E_M^{zx}) = (A E_{down}^z - K^z E_{down}^x) \varphi_M.$$

В уравнениях (7) и (8) введены обозначения: $E_0^{x,y,z}$ - падающий на структуру луч,

$E_{up}^{x,y,z}$ - матрица дифрагированных вверх (Брег)

лучей, $E_{down}^{x,y,z}$ - матрица дифрагированных вниз

(Лауэ) лучей, φ_M - фаза вышедшей из структу-

ры волны, $K_z = \{-\delta_{ni} \sqrt{1 - (x_n^2 + y_n^2)}\}$.

Если из уравнений (7) и (8) исключить неизвестные дифрагированные волны, получим 4 уравнения:

$$c_1 (E_1^{zx} + K_z E_1^x + A_1 X_1 E_1^z) = 2K^z E_0^x$$

$$c_1 (E_1^{zy} + K_z E_1^y + B_1 X_1 E_1^z) = 2K^z E_0^y \quad (9)$$

$$c_M (E_M^{zx} - K_z E_M^x + A_M X_M E_M^z) F_M = 0$$

$$c_M (E_M^{zy} - K_z E_M^y + B_M X_M E_M^z) F_M = 0.$$

В более компактном виде (9) будет выглядеть так:

$$S_u c_1 = 2K^z E_0^{xy}, \quad (10)$$

$$S_d F_M c_M = 0.$$

Уравнения (6) можно представить в компактном виде (достаточно 4 уравнения из 5-ти):

$$S_{m+1} c_{m+1} = S_m F_m c_m \quad (11)$$

где матрицы S_m можно выбрать, например, так:

$$S_m = \begin{pmatrix} E_m^x \\ E_m^y \\ E_m^{zy} - B E_m^z \\ A E_m^z - E_m^{zx} \end{pmatrix} \quad (12)$$

Последовательно применяя формулу (11) для всех слоев получим рекуррентное соотношение:

$$c_M = (S_M)^{-1} S_{M-1} F_{M-1} (S_{M-1})^{-1} \dots (S_2)^{-1} S_1 F_1 c_1 \quad (13)$$

или компактнее:

$$c_M = S_\Sigma c_1.$$

При помощи уравнений (10) и (13) можно рассчитать c_1 и c_M . Далее из (7) и (8) можно найти дифрагированные лучи:

$$\begin{pmatrix} E_1^x \\ E_1^y \\ (I + X_1) E_1^z \end{pmatrix} \cdot c_1 = \begin{pmatrix} E_0^x \\ E_0^y \\ E_0^z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E_{up}^x \\ E_{up}^y \\ E_{up}^z \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$\begin{pmatrix} E_M^x \\ E_M^y \\ (I + X_M) E_M^z \end{pmatrix} \cdot F_M c_M = \begin{pmatrix} E_{down}^x \\ E_{down}^y \\ E_{down}^z \end{pmatrix} \cdot \varphi_M \quad (15)$$

Проблема данного решения заключается в том, что при больших толщинах слоев матрица F_n становится бесконечно большой для корней z_j с отрицательной мнимой частью [5]. Решение данной проблемы предложено в [6] и проанализировано в [7]. Применим данный подход.

Корректное решение для толстых слоев.

Отсортируем корни дисперсионного уравнения (3) z_j по уменьшению мнимой части (корней с положительной и отрицательными мнимыми частями одинаковое количество [6]) и разобьем матрицы S_m и F_m размера $[4N \times 4N]$ в (11) соответственно на матрицы размера $[2N \times 2N]$ и матрицу c_m $[4N \times 1]$ на две $[2N \times 1]$:

$$\begin{pmatrix} c_{m+1}^+ \\ c_{m+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_m^{11} & X_m^{12} \\ X_m^{21} & X_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_m^+ & 0 \\ 0 & F_m^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_m^+ \\ c_m^- \end{pmatrix} \quad (16)$$

Тогда можно записать, что:

$$\begin{pmatrix} c_{m+1}^+ \\ c_{m+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_m^{11} & M_m^{12} \\ M_m^{21} & M_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_m^+ \\ c_m^- \end{pmatrix} \quad (17)$$

где

$$M_m^{12} = X_m^{12} (X_m^{22})^{-1},$$

$$M_m^{11} = (X_m^{11} - M_m^{12} X_m^{21}) F_m^+,$$

$$M_m^{22} = (F_m^-)^{-1} (X_m^{22})^{-1},$$

$$M_m^{21} = -M_m^{22} X_m^{21} F_m^+.$$

Или так:

$$\begin{pmatrix} c_m^+ \\ c_m^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_m^{11} & W_m^{12} \\ W_m^{21} & W_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^+ \\ c_1^- \end{pmatrix} \quad (18)$$

где

$$W_{m+1}^{11} = -M_m^{11} (W_m^{12} M_m^{21} - I)^{-1} W_m^{11}, \quad (19)$$

$$W_{m+1}^{12} = M_m^{12} - M_m^{11} (W_m^{12} M_m^{21} - I)^{-1} W_m^{12} M_m^{22},$$

$$W_{m+1}^{21} = W_m^{21} - W_m^{22} M_m^{21} (W_m^{12} M_m^{21} - I)^{-1} W_m^{11},$$

$$W_{m+1}^{22} = W_m^{22} (I - M_m^{21} (W_m^{12} M_m^{21} - I)^{-1} W_m^{12}) M_m^{22}.$$

Применяя уравнения (19) последовательно для всех слоев начиная от поверхности (для первого слоя $W_1^{11} = W_1^{22} = I$ $W_1^{12} = W_1^{21} = 0$) и учитывая граничные условия (10) можно найти:

$$\begin{aligned} c_1^- &= S_1 c_1^+, \\ c_1^+ &= (S_u^+ + S_u^- S_1)^{-1} E_0, \end{aligned} \quad (19)$$

$$c_M^- = S_M c_M^+,$$

$$c_M^+ = (I - W_M^{12} S_M)^{-1} W_M^{11} c_1^+,$$

где

$$S_M = -(F_M^-)^{-1} (S_d^-)^{-1} S_d^+ F_M^+,$$

$$S_1 = W_m^{21} + W_m^{22} S_M (I - W_m^{12} S_M)^{-1} W_m^{11}.$$

Подставив полученные c_1 и c_M в уравнения (14) и (15) можно определить все компоненты дифрагированных лучей (нулевые элементы в матрицах $E_{up}^{x,y,z}$ и $E_{down}^{x,y,z}$ представляют собой соответственно отраженный и прошедший лучи).

Данный подход лишен проблем с толстыми слоями, поскольку матрица содержащая возрастающие экспоненты F_M^- везде фигурирует в инвертированном виде.

Моделирование карт обратного пространства.

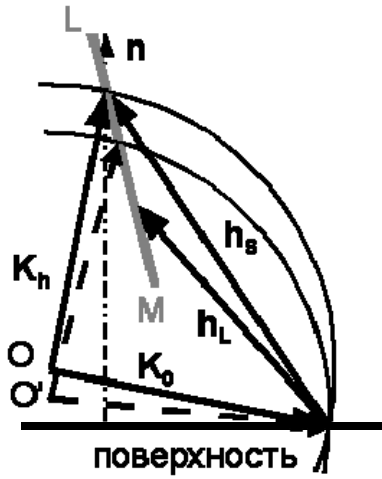


Рис.1. Ход лучей на поверхности структуры состоящей из слоев из двух различных материалов.

Приведенный выше метод рассчитывает все волны выходящие из кристалла без учета их направления. Поэтому для моделирования реального эксперимента с конечным детектором необходим дополнительный расчет направления дифрагированных лучей.

На рис. 1 представлена схема, поясняющая дифракцию лучей в многослойной структуре, состоящей из двух различных материалов.

Вектора \vec{K}_0 и \vec{K}_h - соответственно падающий и дифрагированный лучи, O и O' - точки начала падающего луча (центры окружностей с радиусами K) для сплошных и пунктирных линий соответственно, \vec{h}_S и \vec{h}_L - вектора обратной решетки подложки и слоя в воздухе, вдоль прямой LM наблюдается сателлитная структура картины дифракции. Если слои абсолютно напряжены, прямая LM будет параллельна нормали \vec{n} , если абсолютно релаксированы - параллельна вектору \vec{h}_S (тогда вектора \vec{h}_S и \vec{h}_L коллинеарны). На рис. 1 изображен случай частично релаксированных слоев.

Пусть координаты концов векторов \vec{h}_S (h_{xs}, h_{ys}, h'_{zs}) и \vec{h}_L (h_{xl}, h_{yl}, h'_{zl}) (h'_{zs} и h'_{zl} - пересчитанные для воздуха), начала и конца вектора \vec{K}_h (K_x, K_y, K_z) и (x_h, y_h, z_h). Тогда конец вектора \vec{K}_h будет находиться из условия нахождения этой точки на сфере с центром в точке O и радиусом K, а так же прямой LM:

$$\frac{x_h - h_{xs}}{h_{xl} - h_{xs}} = \frac{y_h - h_{ys}}{h_{yl} - h_{ys}} = \frac{z_h - h'_{zs}}{h'_{zl} - h'_{zs}} \quad (20)$$

$$(x_h - K_x)^2 + (y_h - K_y)^2 + (z_h - K_z)^2 = 1$$

Решениями этой системы будут два корня, из которых выбирается наиболее близкий к концу дифрагированного от подложки вектора. Таким образом можно найти направление вектора \vec{K}_h от структуры для данного угла падения.

Поскольку ω -скан для плосковолновой динамической теории представляет собой δ -

функцию (монохроматическая волна и никакой угловой расходимости), необходимо вводить некоторую аппаратную функцию - например Гамма-функцию, функцию Лоренца или просто прямоугольную щель. Для построения карты обратного пространства проводится анализ: попадает ли угол между проекцией дифрагированного луча в плоскость дифракции и положением детектора (однозначно определяется из условия связанного $\omega/2\theta$ сканирования) в аппаратную функцию. Если попадает - выводится рассчитана для данного угла падения интенсивность, если нет - ноль. На рис. 2 представлена экспериментальная карта для рефлекса 113 8-слойной сверхрешетки InGaAs/GaAs. На рис. 3 - промоделированная описанным выше методом полностью напряженная такая же структура.

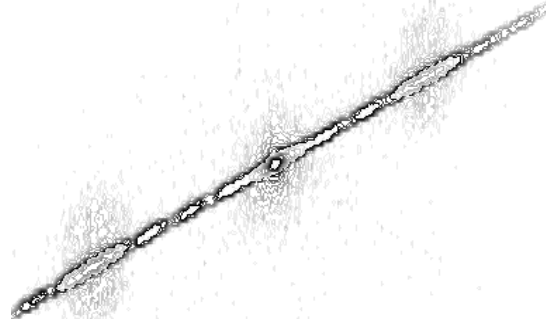


Рис. 2. Экспериментальная карта.



Рис. 3. Рассчитанная карта

Выводы.

Предложенный метод позволяет рассчитать карты обратного пространства от многослойных структур с произвольными напряжениями и локальными разориентациями в слоях.

Рассчитать карту обратного пространства предложенным методом можно и на базе любого плосковолнового подхода - просто надо спроектировать на плоскость дифракции все вектора в системе, однако правомерность такого подхода необходимо анализировать в каждом случае отдельно. Использование описанного выше трехмерного алгоритма моделирования дифракции избавляет от лишних операций и гарантирует правильность расчета для планарных структур.

Поскольку алгоритм расчета взаимодействия рентгеновских лучей с структурой является многолучевым, описанным в выше методом можно смоделировать карту обратного пространства в случае одновременной дифракции нескольких лучей. Однако данная задача выхо-

дит за рамки данных тезисов и, возможно, будет реализована в дальнейшем.

Учет влияния неидеальностей в плоскости структуры в данной модели пока невозможен.

[1] Stetsko Y.P., Chang S.-L. Acta Cryst A. 1997. V. 53. P. 28.

[2] Souvorov A., etc Phys. Rev. B 70, 224109, 2004

[3] <http://efa.hotbox.ru/hi.html>

[4] Authier A. Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. New York: Oxford Press, 2001. 661 p.

[5] Кон В.Г. ФТТ 1977. V. 19. № 12. С. 3567.

[6] Кон В.Г. Металлофизика. 1988. V. 10. № 2. С. 78.

[7] Stepanov S.A., Kondrashkina E.A., Kohler R., etc. Phys Rew B. 1998. V. 57. № 8. P. 4829.