

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ
ИМ. В.Е. ЛАШКАРЕВА

ЕФАНОВ Александр Николаевич

УДК: 539.26, 548.73, 548.736.64

**ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ
В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ**

01.04.07 - физика твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание научной степени
кандидата физико-математических наук

Киев-2006

Диссертацией является рукопись
Работа выполнена в Институте физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева
Национальной академии наук Украины

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
Кладъко Василий Петрович,
Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАНУ (г. Киев), заведующий отделом

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор,
Репецкий Станислав Петрович,
Киевский Национальный Университет имени
Тараса Шевченко, профессор кафедры физики
функциональных материалов

доктор физико-математических наук, профессор,
Фодчук Игорь Михайлович,
Черновицкий Национальный Университет
им. Ю.Федьковича, профессор кафедры физики
твердого тела

Ведущее учреждение: Институт металлофизики им. Г.В.Курдюмова
НАНУ (г. Киев), отдел теории твердого тела

Захист состоится 15 грудня 2006 р. в 14¹⁵ на заседании спеціалізованого ученого
совета К 26.199.01 при Інституті фізики полупровідників ім. В.Е. Лашкарева
НАН України по адресі: 03028, г. Київ, пр. Науки, 41.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики полупроводников им. В. Е. Лашкарева НАНУ (г. Киев пр. Науки, 45) и на сайте отдела дифракционных исследований структуры полупроводников <http://www.x-ray.net.ua>.

Автореферат разослан 14 ноября 2006 г.

Ученый секретарь
Специализированного ученого совета К 26.199.01
кандидат физико-математических наук

О.Б. Охрименко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия (ВРРД) применяется для исследования внутренней структуры полупроводниковых кристаллов. В последнее время достаточно часто возникает необходимость исследования объектов субмикронного масштаба - сверхрешеток, структур с квантовыми точками и проводами. Поэтому, методы высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии для решения подобных задач должны обеспечивать субмикронную разрешающую способность по объекту, а также достаточную точность определения параметров таких структур. Данная работа посвящена развитию теории методов ВРРД на основе динамической теории дифракции рентгеновских лучей. Основное внимание уделено использованию многолучевой дифракции в многослойных структурах в компланарной геометрии, а так же для асимметричного брэгговского и скользящего отражений от кристалла.

Однозначная интерпретация рентгеновских дифракционных спектров многослойных полупроводниковых структур имеет существенные ограничения даже для идеальных слоев при использовании либо кинематической, либо двохволновой динамической моделей дифракции. Вместе с тем, анализ литературы свидетельствует о том, что влияние соседних узлов обратной решетки на дифракционную картину может быть существенным при далеких угловых отклонениях от точного положения брэгговского угла (случай короткопериодной сверхрешетки (СР) или слоев с большим несоответствием параметров решеток). Еще одной важной проблемой является неоднозначность определения компонентного состава на границах интерфейса в многокомпонентных квантовых слоях СР и влияние анизотропии деформационных полей на кривые дифракционного отражения (КДО).

Ограниченностю применения существующих теорий для описания дифракции в многослойных структурах связана также с отсутствием соответствующих алгоритмов расчета дифракции в этих структурах с учетом многих волн, а также частичной релаксации системы и локальной разориентации вектора обратной решетки. Кроме того, для повышения однозначности результатов рентгено-структурного анализа необходимо использование карт обратного пространства, а их интерпретация требует соответствующих расчетов (моделирования этих карт).

Проведенные исследования показывают, что неучет перечисленных факторов может привести к неверной трактовке дифракционных эффектов, и соответственно, структуры нанокристаллических объектов. Поэтому, разработка теоретических основ дифракции в многослойных планарных структурах и методик их анализа является актуальной и в то же время не простой на практике задачей.

Связь работы с научными программами, планами, темами.

Диссертационная работа отвечает основным направлениям научной деятельности Института физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины и выполнена в соответствии с темами: № 0103U000380, № 0197U008669, № 0103U006315. Роль автора в исполнении научно-исследовательских работ заключалась в разработке и программной реализации теоретических моделей, получении экспериментальных спектров и исследовании структурных свойств наноразмерных эпитаксиальных слоев, квантовых проводов и точек.

Цель и задание исследования.

Цель диссертационной работы заключалась в развитии теоретических основ динамической дифракции рентгеновских лучей в многослойных структурах в разных геометриях, а также в исследовании деформационных и композиционных свойств, для оптимизации физико-технологических условий получения многослойных напряженных структур с квантовыми ямами и точками, с заранее заданными свойствами.

Для достижения поставленной цели решались следующие **научные задания**:

1. Уточнение и расширение теоретических основ динамической дифракции X-лучей в многослойных структурах для случая влияния на дифракцию нескольких узлов обратной решетки. Эта модель должна учитывать взаимодействие излучения, дифрагированного разными узлами решетки, в том числе и зеркально отраженного.

2. Создание методологии, алгоритмов и программного обеспечения для высокоразрешающей дифрактометрической количественной диагностики многослойных полупроводниковых структур.

3. Проведение комплекса высокоразрешающих дифрактометрических исследований структурных и деформационных свойств многослойных структур на основе InGaAs/GaAs в зависимости от условий роста.

4. Установление взаимосвязи между экспериментальными картинами дифракции X-лучей и численным расчетом с использованием разработанных теоретических подходов и технологическими и деформационными параметрами эпитаксиальных пленок.

5. Определение влияния анизотропных искажений кристаллической решетки и переходной области между слоями на рентгеновские измерения параметров структур.

Объект исследования: многослойные сверхрешеточные структуры InGaAs/GaAs и SiGe/Si с различным содержанием индия и германия, структуры с единичными квантовыми ямами (InGaAs/AlGaAs/GaAs) и структуры с квантовыми точками и проводами.

Предмет исследования: двух- и N-волновая динамическая дифракция в слоистых структурах в разных геометриях эксперимента при брэгговской дифракции; взаимодиффузия компонент на границах слоев и релаксация напряжений на интерфейсах; геометрические параметры слоев.

Методы исследования: комплекс экспериментальных и расчетных методов, который включает в себя высокоразрешающую рентгеновскую дифрактометрию; методы компьютерного моделирования спектров дифракции и отражения, а также двумерных карт распределения интенсивности.

Научная новизна полученных результатов.

Главное отличие данной работы от аналогичных предыдущих исследований заключается в полном количественном учете динамических эффектов при дифракции в многослойных структурах. **Впервые** получены такие научные результаты:

- из первых принципов создана теоретическая модель динамической N-волновой дифракции в многослойных структурах, адекватная для слоев произвольной толщины; в частности, учтены эффекты отражения и дифракции при малых углах падения и выхода, и при углах падения 45° и 90° . Найдено точное направление

дифрагированного в кристалле луча. Показано, что преимущества предложенного решения наиболее четко проявляются при анализе экспериментальных КДО вдалеке от брэгговского положение, то есть дают возможность точного анализа структур, которые состоят из материалов, значительно отличающихся параметрами решетки, а также при использовании сильно асимметричной геометрии дифракции;

- проанализирована дисперсионная поверхность (как действительная, так и мнимая ее часть) для геометрий Брэгга и Лауэ для 2-х, 3-х, 4-х и N -волнового случая. Установлено, что дисперсионная поверхность для поглощающих кристаллов в геометрии Брэгга кардинально отличается от случая Лауэ. Показано, что лишь в случае действительного дисперсионного уравнения можно говорить о диаметре дисперсионной поверхности в случае Брэгга - тогда исчезает как поглощение, так и асимметрия дисперсионной поверхности, и появляется область полного отражения;
- на основе разработанной теоретической модели дифракции предложена методика контроля структуры и деформации напряженных и частично релаксированных слоев, которая заключается в измерениях азимутальных зависимостей КДО;
- выяснена роль формы градиента распределения компонентного состава на границах раздела в многослойных InGaAs/GaAs структурах на КДО в случае дифракции Брэгга. В частности установлено, что наиболее адекватно кривые отражения описываются при введении гиперболического закона изменения градиента состава на границе слоев. Продемонстрировано, что толщина слоя может быть неверно определена при использовании допущения о резком изменении состава на границе между слоями.

Практическое значение полученных результатов.

Методы численного расчета и процедуру фильтрации можно использовать для определения характеристик многослойных структур в частности профилей деформации, композиционных профилей, геометрических параметров. Полученные результаты позволяют оптимизировать физико-технологические условия роста и обработки сложных многослойных систем и тонких пленок для создания приборов на их основе. Описанные в работе теоретические модели и методические подходы могут быть использованные в спецкурсах по физике твердого тела рентгеноструктурному анализу, компьютерной физике.

Личный вклад соискателя.

В опубликованных трудах [1 – 21], личный вклад диссертанта заключается в создании теоретических моделей и экспериментальных измерениях спектров отражения и карт обратного пространства, расчете параметров деформации в слоях СР структур и профилей распределения компонентов в областях интерфейсов. Также, во всех работах диссертант принимал активное участие в анализе и интерпретации результатов исследований и написании статей.

Апробация результатов диссертации.

Основные результаты изложенных в диссертационной работе исследований докладывались и обсуждались на научных конференциях: II Украинская научная конференция по физике полупроводников - УНКФН-II (Черновцы-Вижница, Украина, 20-24.09.2004); X International Conference on Physics and Technology of Thin Films - ICPTTF-X (Ivano-Frankivsk, Ukraine, 16-21.05.2005); European Materials Conference

- E-MRS 2005 Fall Meeting (Warsaw, Poland, 5-9.09.2005); V национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучения, нейтронов и электронов для исследование материалов РСНЭ-НАНО-2005 (Россия, Москва 14-19.11.05); 3-й Международный научный семинар "Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)"(Россия, В.Новгород 23-26.05.06); 8th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (X-TOP 2006) (Baden-Baden/Karlsruhe, Germany, 19-22.09.06).

Публикации.

По материалам диссертации опубликованы 21 научная работа, из которых 9 статей, 3 материала и 9 тезисов докладов на научных конференциях. Список публикаций приведен в конце авторефера.

Структура и объем диссертации.

Диссертационная работа состоит из вступления, литературного обзора по теме исследований (раздел 1), четырех оригинальных разделов, выводов, одного приложения и списка цитируемой литературы из 104 наименований. Основной текст диссертации изложен на 115 страницах. Диссертация содержит 37 рисунков и 3 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **вступлении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, ее связь с научными программами и темами, сформулированы цель и задание работы, ее научную новизну, практическое значение полученных результатов, приведены данные о личном вкладе диссертанта, а также сведения об апробации работы и публикациях.

В **разделе 1** представлен обзор методов моделирования дифракции рентгеновских лучей в многослойных структурах на основе динамической теории. Рассмотрены такие алгоритмы, как: метод матриц Абеле, одномерные уравнения Такаги [1], ТМА [2], рекуррентные соотношения Бартелса [3], РМА [4], многолучевой ТМА [5], 3-х мерный многолучевой алгоритм Стецька для однородной пластинки [6] и алгоритм Суворова для многослойных структур [7]. Приведен анализ основных характеристик этих методов, указаны их недостатки и преимущества. Все описанные в рамках диссертационной работы методы были реализовано программно. Отдельный подраздел посвящен общепринятым методам учета направлений векторов дифракции. Кроме этого, в разделе 1 приведена небольшая историческая справка о динамической теории дифракции.

В **разделе 2** из уравнений Максвелла выведены основные формулы динамической теории дифракции. Без упрощений выведено в общем виде уравнение распространения плоских монохроматических рентгеновских волн в кристаллической среде (при условии отсутствия зарядов и $\mu = 1$, что правомерно для X-лучей), которое для каждой блоховской волны принимает вид:

$$\frac{(k_h^2 - K^2)}{K^2} \mathbf{E}_h = \frac{(\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{E}_h) \mathbf{k}_h}{K^2} + \sum_{g \neq h}^N \chi_{h-g} \mathbf{E}_g \quad (1)$$

где \mathbf{E} — напряженность электрического поля \mathbf{k}_h и \mathbf{K} — волновые векторы соответственно в кристалле и вакууме ($K = 1/\lambda$) χ_{h-g} — Фурье компоненты поляризуемости N — количество точек обратного пространства, которые принимают участие в дифракции.

В этом же разделе введено понятие дисперсионного уравнения для многолучевого случая и приведен общий вид граничных условий между слоями и на поверхностях структуры:

$$\mathbf{E}_t = \text{const} \quad \mathbf{D}_n = \text{const} \quad \mathbf{H} = \text{const} \quad (2)$$

Кроме точных выражений приведены общеупотребимые приблизительные с указаниями, какие допущения используются при их выводении. Эти предположения следующие: малая величина поляризуемости, поляризационный фактор для P_i -поляризации $C = \cos(2\theta_0)$, коллинеарность в кристалле векторов \mathbf{E} и \mathbf{D} ,... Здесь и далее основные уравнения с такими предположениями будем называть упрощенными.

Раздел 3 посвящен решению дисперсионного уравнения в компланарных двух-, трех- и четырех-волновых случаях. Приведен алгоритм численного расчета методом Лагерра дисперсионной поверхности для этих случаев. Для двух-волнового случая предложено приближенное аналитическое решение (квадратное уравнение) и точное аналитическое решение (уравнение четвертой степени) методом Феррари.

Дисперсионное уравнение можно получить из требования нетривиальности решения системы, которая составлена из N уравнений распространения (1), то есть $\det \Delta_E = 0$. Для двух-волнового случая ($N = 2$) в упрощенной форме оно имеет вид:

$$(k_0^2 - (1 + \chi_0)K^2)(k_h^2 - (1 + \chi_0)K^2) = C^2 K^4 \chi_{barh} \chi_h \quad (3)$$

где $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$, а \mathbf{h} - вектор дифракции.

Это уравнение четвертой степени, и его решением являются две пересекающиеся сферы с центрами в точках О и Н (начало и конец вектора \mathbf{h}) и радиусом $k = nK$, где n — коэффициент преломления среды (рис. 1).

Наиболее интересные эффекты (динамические) наблюдаются вблизи точки пересечения сфер Евальда (так называемая точка Лорентца). Однако именно эта область в геометрии Брегга в большинстве книжек по рентгеноструктурному анализу приведенная не совсем верно (рис. 2 а), в действительности для поглощающего кристалла она выглядит как показано на рис. 2 б).

В таблице 1 приведены различные предельные случаи дифракции по Бреггу.

Для решения дисперсионного уравнения (3) необходимо сделать замену переменных, чтобы осталась лишь одна неизвестная, учитывая, что переменные k_h и k_0 связаны (подпись под уравнением (3)). Этого можно достичь двумя путями: разложить волновые векторы на декартовы координаты x и y и учесть что координата x известна, поскольку она сохраняется при преломлении луча; или, опять же, учитывая непрерывность тангенциальной составляющей падающего волнового вектора, ввести новую переменную ϵ : $\mathbf{k}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h} + K\epsilon\mathbf{n}$, где \mathbf{n} — внешняя нормаль кристалла. Для двух-волнового случая оба подхода эквивалентны, но для случая трех

и более сильных волн первый подход может дать ошибочные результаты (рис. 3), в то время как второй можно использовать почти для произвольной количества волн (рис. 2 б). Связано это с конечной точностью расчетов на ЭВМ, и даже для трехволнового случая при использовании вещественных чисел типа *long double* могут возникнуть проблемы.

В обзоре литературы показано, как обычно решается проблема поиска волновых векторов — в линейном приближении вводится угловое отклонение от точного Брэгговского угла $\Delta\theta$. Такой приближенный метод можно использовать лишь в диапазоне около одного градуса от брэгговского угла. Таким образом можно рассчитывать КДО для сверхрешеток, которые состоят из материалов с близкими параметрами решетки, но не для скользящей геометрии. Однако для сверхрешеток с очень разными постоянными решетки, такой приближенный подход уже нельзя применять. Связано это с тем, что углы Вульфа-брегга для разных слоев сильно отличаются: например для полностью напряженного InAs слоя на GaAs подкладке углы отличаются почти на 5 градусов. На рис. 4 изображена именно такая ситуация. Как видим, даже вблизи точного угла Брэгга приближенный подход дает совсем другую картину. То есть, анализируя экспериментальные результаты с помощью таких методов, можно сделать ошибочные выводы относительно структуры образца.

В разделе 4 приведены два оригинальных метода расчета многолучевой дифракции в многослойных структурах. Первый метод позволяет рассчитать наиболее распространенный случай компланарной многолучевой дифракции в образцах с произвольными толщинами слоев. Однако выведен этот метод из общеприменимого приближенного уравнения распространения и с учетом приблизительных предельных условий.

Второй метод более точный и оригинальный. Он базируется на описанном в [6] наилучшем на сегодняшний день алгоритме расчета некомпланарной многолучевой дифракции в параллельной пластинке, но может быть применен для многослойной структуры со слоями произвольной толщины. Необходимо отметить, что в работе [7] описан подобный к нижеприведенному подход, но предложенный нами в работе алгоритм выведен независимо и применим для слоев произвольной толщины, в том числе тонких (т.е. не содержит ошибок при интерпретации фазовых множителей).

Основные характеристики предложенного метода:

рассматриваются плоские волны; уравнение распространения и граничные условия решаются без упрощений; любая геометрия (Брэгг, Лауз Брэгг-Лауз); 3D моделирование в обратном пространстве и 1D в прямом; неограниченный угловой диапазон; точный расчет любой поляризации, а также информация о поляризации дифрагированных лучей; нет принципиальных ограничений на количество точек обратного пространства, принимающих участие в дифракции; нет ограничений на толщины слоев; все расчеты производятся для x,y,z компонент волновых векторов, векторов дифракции и полей.

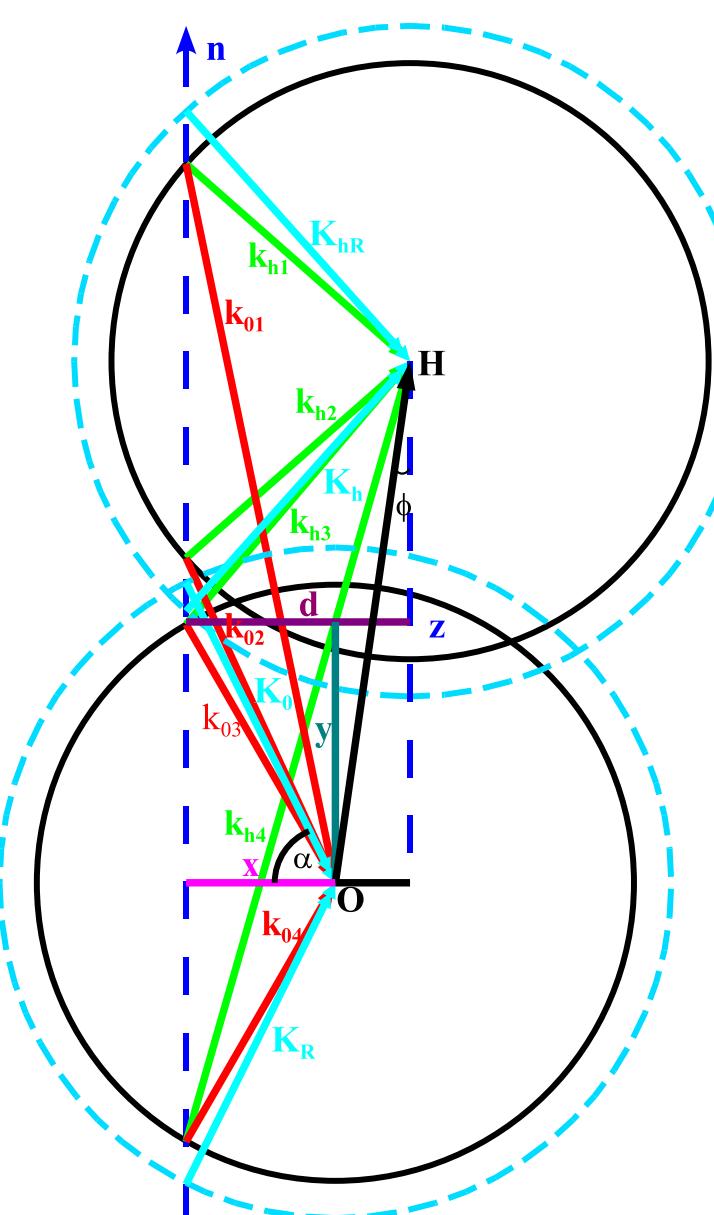


Рис. 1. Дисперсионная кривая (2 волны).

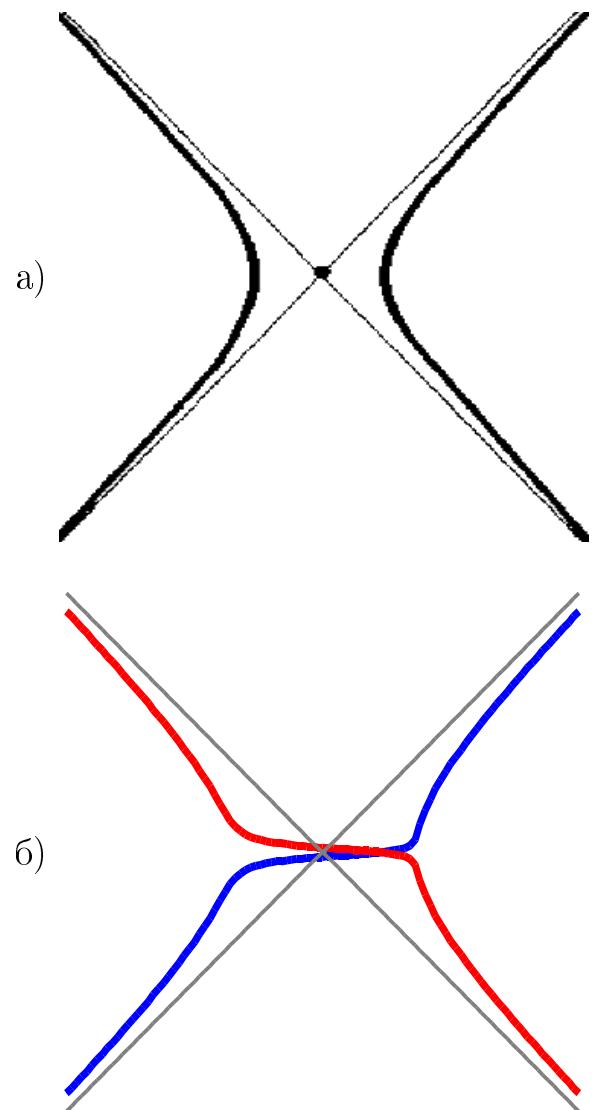


Рис. 2. Дисперсионная кривая для симметричной геометрии Брэгга: а) типичная кривая, которая приводится в книгах (этот рисунок из книги [8]); б) точно рассчитанная.

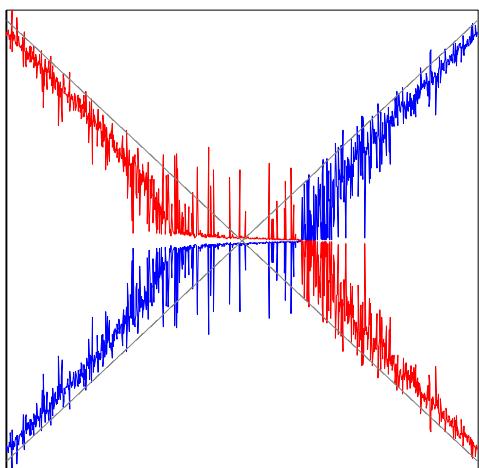


Рис. 3. Решение для 4-х волн в декартовых координатах.

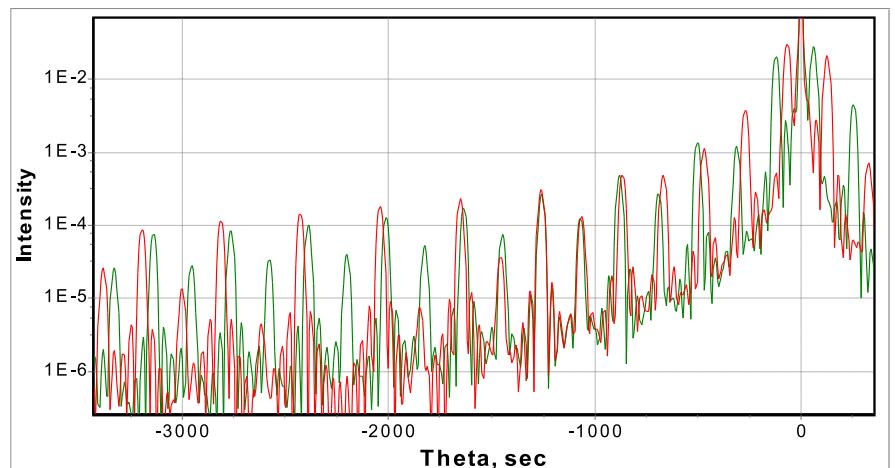
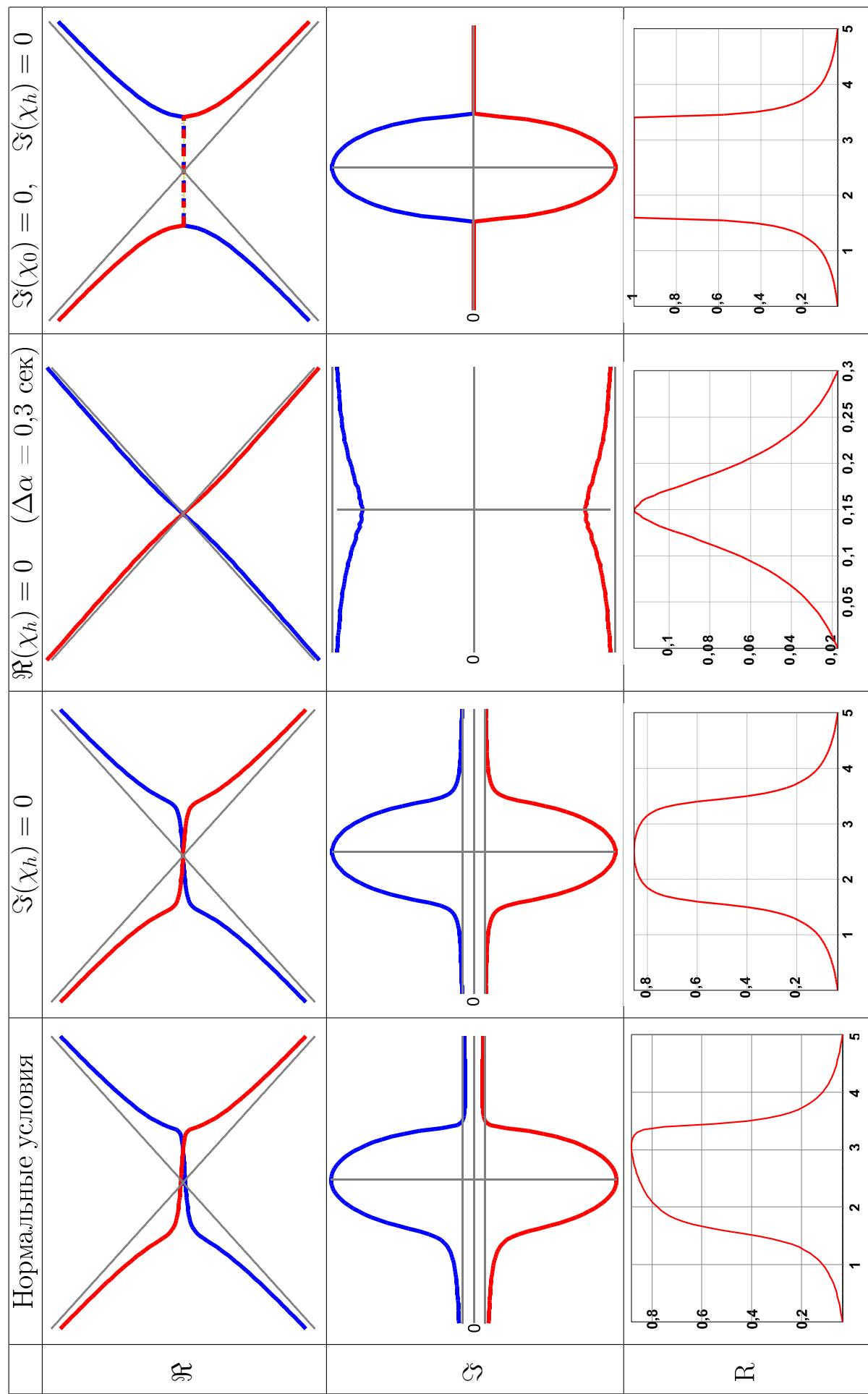


Рис. 4. Сверхрешетка InAs/GaAs (5 пар слоев по 50 нм каждый) на GaAs подкладке.

Таблица 1. Дисперсионная кривая в геометрии Брэлла.



Решение дисперсионного уравнения.

Уравнение распространения для векторов напряженности электрического поля в периодической среде (1) необходимо свести к системе скалярных уравнений. Для этого представим все векторы в декартовых координатах:

$$\begin{aligned}\mathbf{k}_{h_n} &= (X_n - x)\mathbf{i} + (Y_n - y)\mathbf{j} + (Z_n - z)\mathbf{k} = x_n\mathbf{i} + y_n\mathbf{j} + (Z_n - z)\mathbf{k}, \\ \mathbf{E}_{h_n} &= E_n^x\mathbf{i} + E_n^y\mathbf{j} + E_n^z\mathbf{k},\end{aligned}\quad (4)$$

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

Тогда уравнение (1) примет вид:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}^2 + \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{AB} & -\mathbf{AH} \\ -\mathbf{AB} & \mathbf{H}^2 + \mathbf{A}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{BH} \\ -\mathbf{AH} & -\mathbf{BH} & \mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_x \\ \mathbf{E}_y \\ \mathbf{E}_z \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (5)$$

где матрицы размера $[N^*N]$ $\mathbf{I} = \{\delta_{nm}\}$, $\mathbf{A} = \{\delta_{nm}x_n\}$, $\mathbf{B} = \{\delta_{nm}y_n\}$, $\mathbf{C} = \{\delta_{nm}Z_n\}$, $\mathbf{X} = \{\chi_{h_n-h_m}\}$, $\mathbf{G} = (\mathbf{I} + \mathbf{X})$ и δ_{nm} - дельта функция. Поляризуемость $\chi_{h_n-h_m}$ рассчитывалась разработанным в рамках данной работы методом, описание которого можно найти на сайте <http://x-ray.net.ua>. Матрицы $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$ - вектор-столбцы размером $[1 \times N]$ напряженностей электрического поля вида: $\mathbf{E}_x = (E_0^x, E_1^x, \dots, E_{N-1}^x)^T$, где T означает транспонирование.

Введя два вектор-столбца: $\mathbf{E}_v = (\mathbf{C} - z\mathbf{I})\mathbf{E}_x - \mathbf{AE}_z$ и $\mathbf{E}_w = (\mathbf{C} - z\mathbf{I})\mathbf{E}_y - \mathbf{BE}_z$ после преобразования сведем (5) к системе:

$$\mathbf{QE}_4 = z\mathbf{E}_4, \quad (6)$$

$$\mathbf{E}_z = -(\mathbf{I} + \mathbf{X})^{-2}(\mathbf{AE}_z + \mathbf{BE}_w) \quad (7)$$

где $\mathbf{E}_4 = (\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_v, \mathbf{E}_w)$ и матрица \mathbf{Q} размером $[4N \times 4N]$ е:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{0} & \mathbf{AG}^{-2}\mathbf{A} - \mathbf{I} & \mathbf{AG}^{-2}\mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{BG}^{-2}\mathbf{A} & \mathbf{BG}^{-2}\mathbf{B} - \mathbf{I} \\ \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{AB} & \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{AB} & \mathbf{A}^2 - \mathbf{G}^2 & \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Таким образом, выражение (6) является дисперсионным уравнением, из которого можно найти векторы дифракции в среде, а в комбинации с (7), еще и волновые поля, которые отвечают всем дифрагированным лучам (с точностью до неизвестного коэффициента c_j^m).

Однако, для нахождения точных значений амплитуд волн в слое необходимо применить граничные условия.

Граничные условия

Запишем волну в кристалле:

$$E^{x,y,z}(r) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i\vec{k}_{\perp n}\vec{r}_{\perp} + iZ_n t + iC_n} \sum_{j=0}^{4N-1} c_j E_{nj}^{x,y,z} e^{-iz_j t} \quad (9)$$

где константа интегрирования, для непрерывности фазы между слоями, равна: $C_n = \vec{k}_{botn} \vec{r}_n - Z_n t$, t - толщина текущего слоя.

На границе между слоем (m) и $(m-1)$ условия (2) в матричной форме будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_m \mathbf{E}_m^x &= \mathbf{c}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^x \mathbf{F}_{m-1} & \mathbf{c}_m \mathbf{E}_m^y &= \mathbf{c}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^y \mathbf{F}_{m-1} \\ \mathbf{c}_m (\mathbf{I} + \mathbf{X}_m) \mathbf{E}_m^z &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{I} + \mathbf{X}_m) \mathbf{E}_{m-1}^z \mathbf{F}_{m-1} & (10) \\ \mathbf{c}_m (\mathbf{E}_m^{zy} - \mathbf{B}_m \mathbf{E}_m^z) &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{E}_{m-1}^{zy} - \mathbf{B}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^z) \mathbf{F}_{m-1} \\ \mathbf{c}_m (\mathbf{A}_m \mathbf{E}_m^z - \mathbf{E}_m^{zx}) &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{A}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^z - \mathbf{E}_{m-1}^{zx}) \mathbf{F}_{m-1} \end{aligned}$$

где матрицы $F_m = \{\delta_{ij} \exp(iz_j^m t^m)\}$, $c_m = \{\delta_{ij} \cdot c_j\}$ и $E_n^{zx,y} = \{z_j * E_n^{x,y}\}$.

На верхней и нижней поверхностях структуры, состоящей из M слоев (1 - верхний M - подложка), условия (10) выглядят схожим образом (по $5N$ с каждой стороны структуры). Если из этих $10N$ уравнений исключить неизвестные дифрагированные вверх лучи $E_{up}^{x,y,z}$ и дифрагированные вниз лучи $E_{down}^{x,y,z}$ и ввести переменную $K_m^z = \{-\delta_{ni} \sqrt{1 - (x_n^2 + y_n^2)}\}$ и вектор-столбец $E_0^{x,y,z}$ — падающие на структуру лучи (отличный от 0 только первый элемент каждого вектора), получим $4N$ уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zx} + \mathbf{K}_z \mathbf{E}_1^x + \mathbf{A}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{E}_1^z) &= 2 \mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^x \\ \mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zy} + \mathbf{K}_z \mathbf{E}_1^y + \mathbf{B}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{E}_1^z) &= 2 \mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^y \\ \mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zx} - \mathbf{K}_z \mathbf{E}_M^x + \mathbf{A}_M \mathbf{X}_M \mathbf{E}_M^z) \mathbf{F}_M &= 0 \\ \mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zy} - \mathbf{K}_z \mathbf{E}_M^y + \mathbf{B}_M \mathbf{X}_M \mathbf{E}_M^z) \mathbf{F}_M &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

или в более компактном виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_u \mathbf{c}_1 &= 2 \mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^{xy}, \\ \mathbf{S}_d \mathbf{F}_M \mathbf{c}_M &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (12)$$

Уравнение (10) тоже можно представить в компактном виде (достаточно 4-х уравнений из 5-ти):

$$\mathbf{S}_{m+1} \mathbf{c}_{m+1} = \mathbf{S}_m \mathbf{F}_m \mathbf{c}_m, \quad (13)$$

где матрицы S_m можно выбрать, например, так:

$$S_m = \begin{pmatrix} E_m^x \\ E_m^y \\ E_m^{zy} - BE_m^z \\ AE_m^z - E_m^{zx} \end{pmatrix} \quad (14)$$

Последовательно применяя формулу (13) для всех слоев получим рекуррентное соотношение:

$$\mathbf{c}_M = (\mathbf{S}_M)^{-1} \mathbf{S}_{M-1} \mathbf{F}_{M-1} (\mathbf{S}_{M-1})^{-1} \cdot \dots \cdot (\mathbf{S}_2)^{-1} \mathbf{S}_1 \mathbf{F}_1 \mathbf{c}_1. \quad (15)$$

С помощью уравнений (12) и (15) можно рассчитать c_1 и c_M . Дальше, из условий на верхней и нижней границах структуры, можно найти дифрагированные лучи сверху и снизу структуры:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_1^x \\ \mathbf{E}_1^y \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_1) \mathbf{E}_1^z \end{pmatrix} \mathbf{c}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0^x \\ \mathbf{E}_0^y \\ \mathbf{E}_{up}^z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{up}^x \\ \mathbf{E}_{up}^y \\ \mathbf{E}_{up}^z \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{E}_M^x \\ \mathbf{E}_M^y \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_M) \mathbf{E}_M^z \end{pmatrix} \mathbf{F}_M \mathbf{c}_M = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{dwn}^x \\ \mathbf{E}_{dwn}^y \\ \mathbf{E}_{dwn}^z \end{pmatrix} \phi_M, \quad (16)$$

где диагональная матрица φ_M - фаза вышедшей из структуры волны.

Проблема данного решения заключается в том, что, при большой толщине слоев, матрица F_n становится бесконечно большой для корней z_j с негативной мнимой частью [9]. Решение данной проблемы предложено в [10] и проанализировано в [4]. Применим этот подход.

Корректное решение для толстых слоев.

Отсортируем корни дисперсионного уравнения (6) z_j по уменьшению мнимой части (корней с позитивными и негативными мнимыми частями одинаковое количество [10]) и разобьем матрицы S_m и F_m размера $[4N^*4N]$ в уравнении (13) соответственно на матрицы размера $[2N^*2N]$, а матрицу c_m $[4N^*1]$ на две $[2N^*1]$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{m+1}^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_m^{11} & \mathbf{X}_m^{12} \\ \mathbf{X}_m^{21} & \mathbf{X}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_m^+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_m^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix}, \quad (17)$$

Тогда можно записать, что:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{m+1}^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_m^{11} & \mathbf{M}_m^{12} \\ \mathbf{M}_m^{21} & \mathbf{M}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix}, \text{ або } \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_m^{11} & \mathbf{W}_m^{12} \\ \mathbf{W}_m^{21} & \mathbf{W}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_m^{12} &= \mathbf{X}_m^{12}(\mathbf{X}_m^{22})^{-1} & \mathbf{W}_{m+1}^{11} &= -\mathbf{M}_m^{11}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{11} \\ \mathbf{M}_m^{11} &= (\mathbf{X}_m^{11} - \mathbf{M}_m^{12}\mathbf{X}_m^{21})\mathbf{F}_m^+ & \mathbf{W}_{m+1}^{12} &= \mathbf{M}_m^{12} - \mathbf{M}_m^{11}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{22} \\ \mathbf{M}_m^{22} &= (\mathbf{F}_m^-)^{-1}(\mathbf{X}_m^{22})^{-1} & \mathbf{W}_{m+1}^{21} &= \mathbf{W}_m^{21} - \mathbf{W}_m^{22}\mathbf{M}_m^{21}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{11} \\ \mathbf{M}_m^{21} &= -\mathbf{M}_m^{22}\mathbf{X}_m^{21}\mathbf{F}_m^+ & \mathbf{W}_{m+1}^{22} &= \mathbf{W}_m^{22}(\mathbf{I} - \mathbf{M}_m^{21}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{12})\mathbf{M}_m^{22} \end{aligned} \quad (19)$$

Применяя уравнение (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 (12), можно найти:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1^- &= \mathbf{S}_1 c_1^+ & \mathbf{c}_1^+ &= (\mathbf{S}_u^+ + \mathbf{S}_u^- \mathbf{S}_1)^{-1} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{c}_M^- &= \mathbf{S}_M c_M^+ & \mathbf{c}_M^+ &= (\mathbf{I} - \mathbf{W}_M^{12} \mathbf{S}_M)^{-1} \mathbf{W}_M^{11} \mathbf{c}_1^+ \end{aligned} \quad (20)$$

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 уравнение (16) можно определить все компоненты дифрагированных лучей (нулевые элементы в матрицах $E_{up}^{x,y,z}$ и $E_{dwn}^{x,y,z}$ описывают соответственно зеркально отраженный и прошедший сквозь всю структуру лучи).

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

Примеры использования описанного подхода показаны на рис. 5 и рис. 6.

Раздел 5 посвящен применению различных методик моделирования динамической дифракции рентгеновских лучей в многослойных структурах. Приведено применение описанного выше метода для моделирование зеркально-отраженного луча (в уравнении (16) первый член в строках матриц $E_{up}^x, E_{up}^y, E_{up}^z$), для точного учета поляризации падающего и дифрагированных лучей (в уравнении (16) в явном виде присутствуют декартовы координаты всех полей), для моделирования Ренингеровского сканирования (поскольку все векторы в системе записаны в явной декартовой форме, можно задать все точки обратного пространства принимающие участие в дифракции, и вращать образец). Также описана разработанная в рамках работы open-source программа для расчета поляризуемости составных кристаллов (детальное описание и саму программу с необходимыми файлами данных можно найти на сайте <http://www.x-ray.net.ua>).

Еще одно применение описанных в работе методик моделирования – анализ переходной области между слоями в сверхрешетках. В работе представлена методика моделирования различных переходных областей между слоями, состоящими из различных материалов. Проанализирован резкий, линейный, квадратичный и квадратично-гиперболический градиент состава (вставка на рис. 7). Показано влияние этих градиентов на кривую дифракционного отражения (рис. 7). Основные выводы этой главы следующие: введение различной формы градиента состава на границах слоев не влияет на определение периода структуры, однако влияет на определение соотношения толщин слоев $In_0.2Ga_0.8As/GaAs$; благодаря градиенту концентрации можно получить хорошее согласие интенсивностей экспериментальных и моделируемых сателлитных пиков; для однозначного выяснения формы переходной области между слоями необходимо совместно анализировать КДО симметричных и несимметричных рефлексов или построить двумерную карту распределения интенсивности; для некоторых типов градиента между слоями сателлитная структура теряет свою периодичность.

Необходимо, однако, отметить, что введение одинакового градиента между слоями по всей структуре не может точно отобразить реальную картину, поэтому для более точного анализа многослойных структур необходимо использовать достаточно распространенный метод решения обратной задачи — автофитирование [11]. В диссертации есть отдельный параграф, посвященный этой проблеме.

Следующее применение описанных методик моделирования — анализ анизотропных деформаций в планарных структурах. Для проведения такого анализа производится измерение КДО для различных азимутальных положений образца (рис. 8) и, сравнивая экспериментальные и моделированные КДО, можно получить информацию о анизотропных деформациях (рис. 9). Такое искажение структуры связано с наличием разориентации между атомными плоскостями подложки и ее поверхностью.

Еще одно применение описанной выше 3D методики моделирования — азимутально-зависимые измерения. Пример теоретически рассчитанной и экспериментально измеренной азимутальной карты показано на рис. 10.

Разработанный метод дает полную информацию о дифрагированном луче, что можно использовать для моделирования карт обратного пространства. На рис. 11

изображен пример такого моделирования.

В конце работы приведены **выводы**.

В дополнении представлена информация о разработанной в рамках диссертационной работы программы для моделирования динамической дифракции X-лучей.

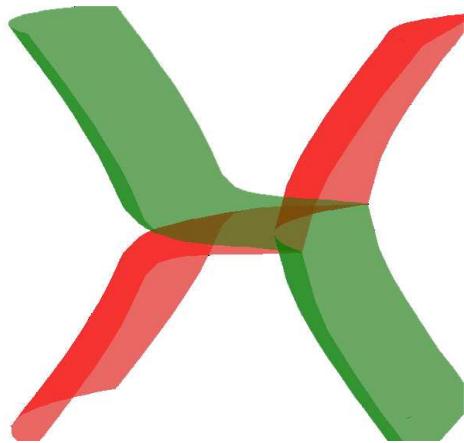


Рис. 5. Часть дисперсионной поверхности GaAs 004.

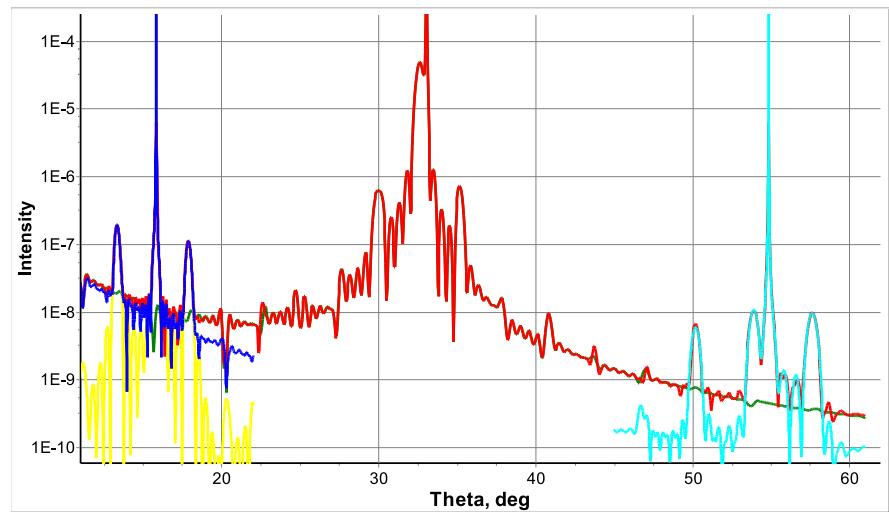


Рис. 6. Широкоугольная дифракция на InGaAs/GaAs сверхрешетке (красным), 002 – синим (желтым - без зеркального отражения), 004 – зеленым, 006 – голубым.

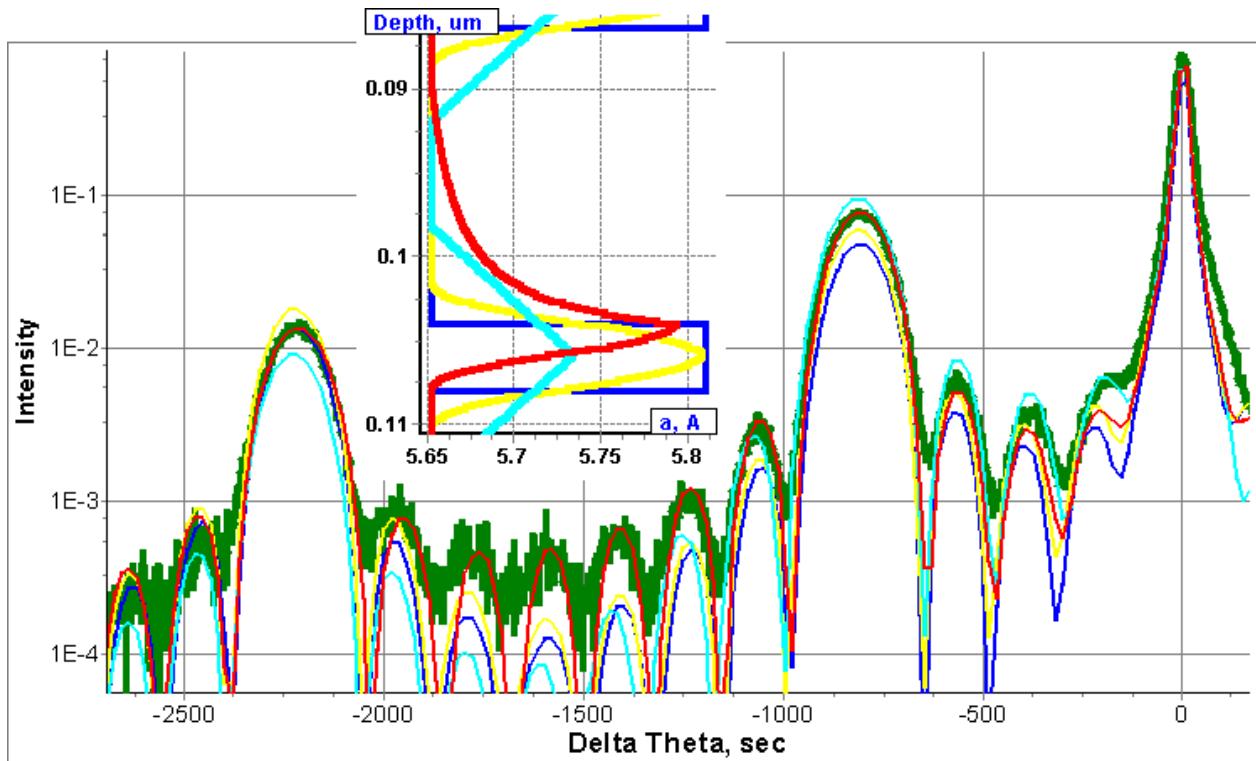


Рис. 7. Экспериментальная (зеленым) и моделированная КДО для рефлекса 113 от 8-периодной сверхрешетки $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ ($40/113 \text{ \AA}$) с: резким (синим), линейным (голубым), квадратичным (желтым) и квадратично-гиперболичным (красным) градиентом на интерфейсе между слоями (на вставке по оси x – нормальный параметр решетки, по у – глубина залегания субслоя).

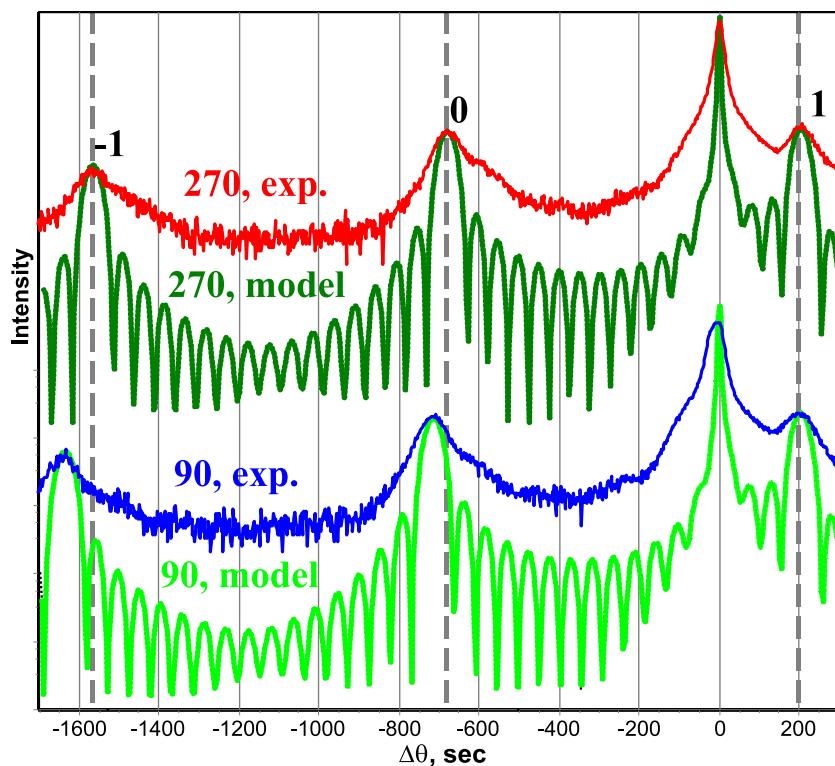


Рис. 8. Експериментальныe (красным и синим) и моделированные (зеленым и салатовым) КДО для InGaAs/GaAs сверхрешетки. Азимутальные углы 90° (2 верхние кривые) и 270° (2 нижние).

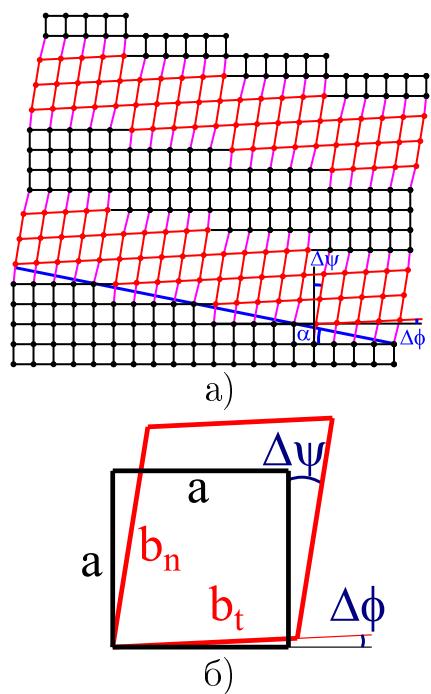


Рис. 9. Деформированная крист. решетка $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$. Чёрным - GaAs, красным - InGaAs. а) вся структура, б) элементарная ячейка.

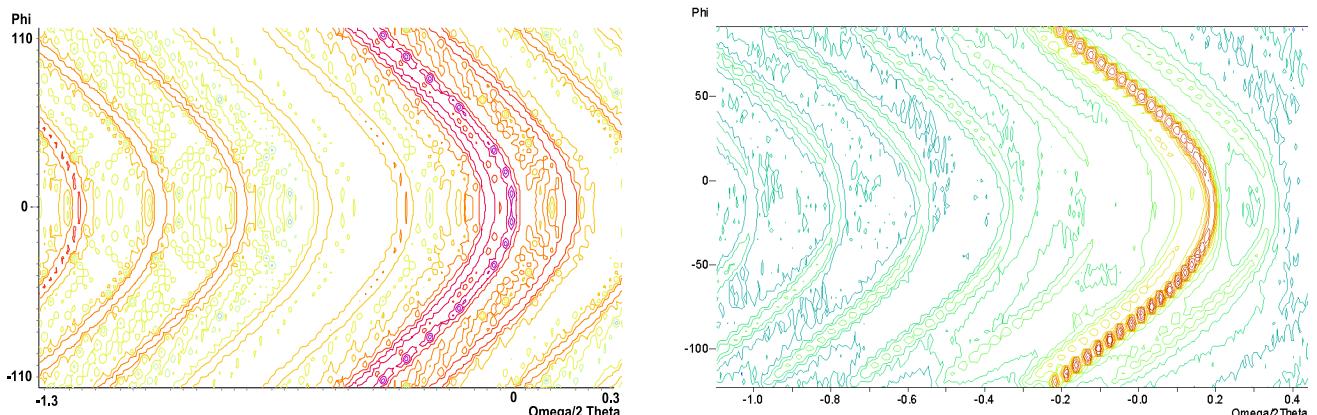


Рис. 10. Азимутальныe карты от 8-периодной сверхрешетки $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ ($40/113 \text{ \AA}$) на GaAs подкладке. Слева – модель, справа – эксперимент. Phi – азимутальний угол.

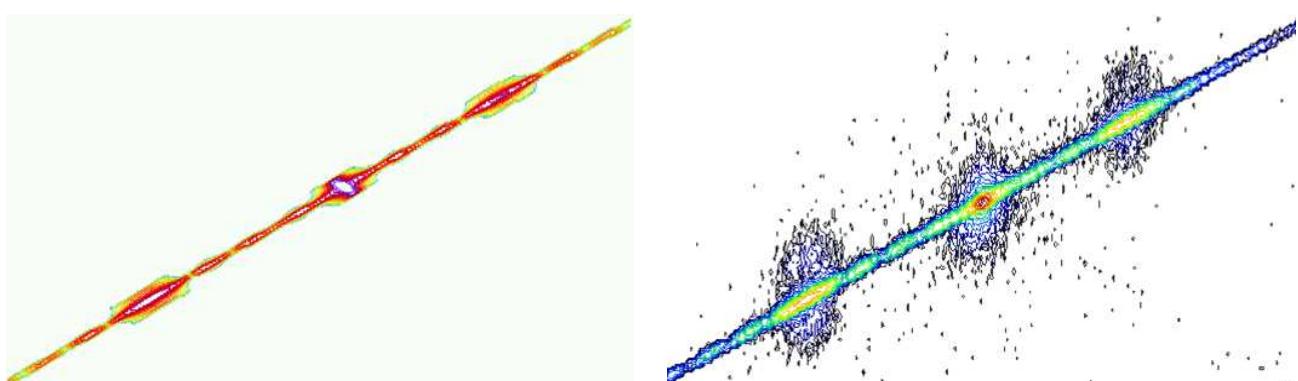


Рис. 11. Карта рефлекса 113 от структуры описанной под рис. 10. Слева – модель, справа – эксперимент. По оси x – $\omega/2\theta$ КДО, по y – ω .

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В диссертации обоснованы и опробованы новые теоретические подходы для описания и анализа наблюдаемых одномерных профилей и карт распределения дифрагированной интенсивности вокруг узлов обратной решетки, которые базируются на динамической теории дифракции. Исследованы многослойные структуры InGaAs/GaAs, AlGaAs/GaAs, SiGe/Si. Из анализа полученных результатов следуют такие выводы:

1. Впервые создана точная теоретическая модель динамической N -волновой дифракции в планарных многослойных структурах со слоями произвольной толщины. Ценность предложенного решения этой проблемы заключается в том, что оно может быть применено для анализа экспериментальных КДО вдалеке от брэгговского положения, то есть для анализа структур которые состоят из материалов, которые значительно отличаются параметрами решетки и структур с очень тонкими слоями, а также при использовании произвольной геометрии дифракции, в том числе при малых углах падения и выхода.

2. Проанализирована действительная часть дисперсионного уравнения и построена дисперсионная поверхность для геометрий Брэгга и Лауэ для 2-х, 3-х, 4-х и N -волнового случая. Также построена мнимая часть дисперсионного уравнения, которая пропорциональна поглощению в структурах, для 2-х (обе геометрии) и N -волнового случая. Показано отличие точно рассчитанной дисперсионной кривой для поглощающих кристаллов в геометрии Брэгга от приведенной в большинстве публикаций.

3. Предложена методика контроля структуры слоев, которая заключается в измерениях азимутальной зависимости КДО, позволившая определить параметры анизотропной деформации кристаллической решетки.

4. Выяснено влияние формы распределения компонентов на границах раздела слоев на форму КДО в случае дифракции Брэгга. При рассмотрении разных моделей градиента состава на границе раздела было установлено, что наиболее адекватно кривые отражения для исследуемых образцов описываются при введении гиперболического закона изменения градиента на границе слоев InGaAs/GaAs.

5. Предложена модель и процедура согласования теоретических спектров с экспериментальными с целью получения информации о параметрах и характеристиках полупроводниковых структур и степени их совершенства (стат. фактор Дебая-Валлера).

6. Достигнуто полное (по угловым положениям и по интенсивностям пиков) количественное согласование разработанной теории с экспериментальными дифракционными КДО для структур с размытым интерфейсом. На основе этих исследований определен профиль компонентного состава как на интерфейсе, так и по глубине слоев.

7. Создана методологическая основа, алгоритмы и программное обеспечение для количественной диагностики многослойных кристаллических структур методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

СПИСОК ЦИТОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Fewster P. X-Ray Scattering from Semiconductors. – L.: I.C.P., 2003. – 300 pp.

- [2] Stepanov S. A. // Cryst. Rep. – 1994. – Vol.39, № 2. – P. 182–187.
- [3] Bartels W. J., etc. // Acta Cryst. A – 1986. Vol.42. – P. 539–545.
- [4] Stepanov S. A., etc. // Phys. Rev. B – 1998. – Vol.57, № 8. – P. 4829–4841.
- [5] Stepanov S.A., Ulyanenkov A.P. // Acta cryst. A. – 1994. – Vol.50. – P. 579–585.
- [6] Stetsko Y. P., Chang S.-L. // Acta Cryst A. – 1997. – Vol.53. – P. 28–34.
- [7] Souvorov, etc. // Phys. Rev. B – 2004. – Vol.70, № 224109. – P. 1–9.
- [8] Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Выс. рентг. дифр. и топ. – С.-П.: Наука, 2002. – 275с.
- [9] Kohn V. G. // Phys. Stat. Sol. (a) – 1979. – Vol.54. – P. 375–384.
- [10] Kohn V. G. // J. Moscow Phys. Soc. – 1977. – Vol.1. – P. 425–434.
- [11] Ломов А.А., Чуев М.А., etc. // Письма ЖТФ – 2004. – Vol.30, №10. – P.89–95.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Кладъко В.П., Мачулин В.Ф., Молодкин В.Б., Первак Е.Б., Корчевой А.А., Ефанов А.Н., Когутюк П.П., Скакунова Е.С. Влияние упорядочения в периодических структурах с квантовыми точками на характер брэгговской дифракции. // Мет.физ. и нов. техн. – 2004. – Т.26, №10. – С.1255-1265.
2. Strelchuk V.V., Kladko V.P., Yefanov O.M., Kolomys O.F., Gudymenko O.Yo., Valakh M.Ya., Mazur Yu.I., Wang Z.M., Salamo J.G. Anisotropy of elastic deformations in multilayered (In, Ga)As/GaAs structures with quantum wires: X-ray diffractometry study. // Semicond.Phys.Quantum&Optoelectronics – 2005. – V.8, №1. – P.36-45.
3. Кладъко В.П., Мачулін В.Ф., Єфанов О.М., Юхимчук В.О., Гудименко О.Й., Когутюк П.П., Шалімов А.В. Прояв просторового упорядкування квантових островців у багатошарових наноструктурах SiGe у рентгенівській дифракції. // УФЖ. – 2005. – V.50, №9. – С.976-980.
4. 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. – V.203, Issue 1. – P.154-157.
5. Ефанов А.Н., Кладъко В.П. Решение дисперсионного уравнения в явном виде для случая двух сильных волн. // Мет.физ. и нов.техн. – 2006. – V.28, №2. – С.231-248.
6. Ефанов А.Н., Кладъко В.П., Гудыменко А.И., Стрельчук В.В., Мазур Ю.И., Wang Z.M., Salamo J. Влияние анизотропии полей деформации в многослойных структурах (InGa) As/GaAs на спектры отражения рентгеновских лучей. // Мет.физ. и нов. техн. – 2006. – Т.28, №4. – С.441-448.
7. Ефанов А.Н., Кладъко В.П. Моделирование дифракции рентгеновских лучей от многослойной структуры с различным градиентом состава на границах слоев. // Мет.физ. и нов. техн. – 2006. – Т.28, №5. – С.619-629.
8. Єфанов О.М., Кладъко В.П., Мачулін В.Ф. Компланаарна багатопроменева динамічна теорія дифракції Х-променів в шаруватих структурах. // УФЖ. – 2006. – V.51, №9. – С.894-900.
9. Borkovska L., Yefanov O., Gudymenko O., Johnson S., Kladko V., Korsunska N., Kryshtab T., Sadofyev Yu., Zhang Y.-H. Effect of Growth Temperature on the Luminescent and structural properties of InGaAsSbN/GaAs quantum wells for 1.3um telecom application. // Thin Solid Films. – 2006. – V.515, Issue 2. – P.786-789.

10. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Валах М.Я., Литвин П.М., Стрельчук В.В., Мазур Ю.І., Корчовий А.А., Єфанов О.М., Дослідження особливостей вертикального та латерального впорядкування квантових точок в сверхрешеткових напівпровідниковых структурах. // Тези: II Ukr. Conf. Semiconductor Physics. – 2004. – Т.2. – с.183
11. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Литвин П.М., Прокопенко І.В. Корчовий А.А., Єфанов О.М., Гудименко О. Й. Діагностика тонкої структури границь розділу фаз в сверхрешеткових структурах бінарних напівпровідників методом квазізаборонених відбиттів рентгенівських променів. // Тези там же. – Т.1. – с. 175
12. Єфанов О.М., Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Стрельчук В.В., Корчевої А.А. Дослідження анізотропії залишкових деформацій в багатошарових (In,Ga)As/GaAs структурах з квантовими нитками методом високороздільної рентгенівської дифрактометрії. // Тези: Фізика і технологія тонких плівок. №10. – 2005. – Т.2. – С.28-29.
13. Yefanov O.M., Kladko V.P., Gudymenko O.Y., Strelchuk V.V., Mazur Yu.I., Wang Zh.V., Salamo G.J. Investigation of deformation fields anisotropy in multilayered (In,Ga)As/GaAs structures with quantum wires by HRXRD. // Тези: EMRS2005. – p.21.
14. Ефанов А.Н., Кладько В.П., Мачулин В.Ф. Динамический расчет некомпьютерной многоволновой дифракции рентгеновских лучей в сверхрешетках. // Тезисы: РСНЕ-НАНО 2005. – с.283.
15. Ефанов А.Н., Кладько В.П., Мачулин В.Ф., Стрельчук В.В., Корчевої А.А., Mazur Yu., Wang Zh.M., Salamo G.J. Исследование анизотропии остаточных деформаций в многослойных структурах с квантовыми нитями. // Тезисы там же. – с.158.
16. Ефанов А.Н., Кладько В.П., Савельева И.С. Динамический расчет карт обратного пространства частично релаксированных многослойных структур некомпьютерным многоволновым методом. // Материалы международного научного семинара "Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)", В.Новгород. – 2006. – С.148-152.
17. Кладько В.П., Ефанов А.Н., Слободян Н.В., Мачулин В.Ф. Исследование латеральных модуляций состава и 2D - 3D структурных переходов в многослойных периодических структурах In_xGa_{1-x}As/GaAs методом высоко-разрешающей рентгеновской дифрактометрии. // Материалы там же. – С.167-169.
18. Ефанов А.Н., Кладько В.П., Слободян Н.В., Мачулин В.Ф., Стрельчук В.В. Новый подход для анализа анизотропных деформаций в многослойных структурах. // Материалы там же. – с.233.
19. Kladko V.P., Yefanov O.M., Slobodyan M.V., Strelchuk V.V., Mazur Yu.I., Wang Zh.V., Salamo G.J. Structural Anisotropy and Optical Properties In-GaAs/GaAs(100) Quantum Dot Chains Structures. // Тези: XTOP 2006. – p. 144.
20. Kladko V., Yefanov O., Slobodyan M., Machulin V., Borkovska L., Sadofyev Yu. HPXRD Investigations of Deformation Fields InGaAsSbN/GaAs Heterostructures With Quantum Well. // Тези: XTOP 2006. – p. 162.
21. Yefanov O.M., Kladko V.P. Simulation of Reciprocal Space Maps for Partially Relaxed Multilayered Structures by 3d Dynamical Multi-Beam Theory. // Thesis XTOP2006. – p.174.

АННОТАЦІЯ

Єфанов А.Н. Динамічна дифракція рентгеновських лучей в многослойних структурах. – Рукопись.

Дисертація на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарьова НАН України, Київ, 2006.

В работе проведены комплексные исследования механизмов дифракции рентгеновских лучей в многослойных структурах. Разработан метод расчета многоволновой дифракции в планарных многослойных структурах и показано его практическое применение для интерпретации экспериментальных данных. В основе метода лежит точное решение уравнений Максвелла для плоских монохроматических рентгеновских лучей в кристаллической среде. Метод применим для произвольной геометрии дифракции (отражение или прохождение) и произвольного углового диапазона. Приведены примеры применения для анализа экспериментальных кривых дифракционного отражения (КДО), кривых зеркального отражения, ренингеровского сканирования и карт обратного пространства.

Решено дисперсионное уравнение для 2-х, 3-х, 4-х и N-волновой дифракции и построены дисперсионные поверхности для этих случаев. При решении учтены эффект поглощения и различные геометрии дифракции. Указано на причины и пути избежания проблем при численных расчетах в случае многоволновой дифракции.

Проанализировано влияние на КДО градиента состава на границе слоев. Показано, что наиболее адекватно кривые отражения для исследуемых образцов описываются гиперболическим законом градиента на границе InGaAs/GaAs слоев. Применены методы автофитирования для анализа КДО. Предложена методика контроля структуры слоев путем измерения азимутальной зависимости КДО, что позволило определить параметры анизотропной деформации кристаллической решетки.

Ключевые слова: дисперсионная поверхность, дифракция рентгеновских лучей, многослойные структуры, квантово-размерные слои, многоволновая дифракция, деформация, сверхрешетки.

АННОТАЦІЯ

Єфанов О.М. Динамічна дифракція Х-променів в багатошарових структурах. – Рукопись.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, 2006.

У роботі проведено комплексні дослідження механізмів дифракції Х-променів у багатошарових структурах. Розроблено метод обрахунку багато-хвильової дифракції у планарних багатошарових структурах та показано його практичне застосування для інтерпретації експериментальних даних. Метод базується на розв'язку рівнянь Максвелла для плоских Х-хвиль без спрощень і може бути застосованим для довільної геометрії дифракції (відбиття чи проходження) та довільного кутового

діапазону. Наведено приклади застосування методу для аналізу експериментальних кривих дифракційного відбиття (КДВ), кривих дзеркального відбиття, ренінгерівського сканування та карт оберненого простору.

Розв'язано дисперсійне рівняння для 2-х, 3-х, 4-х та N-хвильової дифракції та побудовано дисперсійні поверхні для цих випадків. При розв'язку враховано ефект поглинання та різні геометрії дифракції. Вказано на причини та шляхи уникнення проблем чисельних розрахунків у випадку багатохвильової дифракції.

Проаналізовано вплив на КДВ градієнту складу на межі шарів. Показано, що найбільш адекватно криві відбиття для зразків, що досліджувались, описуються гіперболічним законом градієнта на границі шарів InGaAs/GaAs. Застосовано методи автофітування для аналізу КДВ. Запропоновано методику контролю структури шарів шляхом вимірювання азимутальних залежностей КДВ, що дозволяє визначити параметри анізотропної деформації кристалічної ґратки.

Ключові слова: дисперсійна поверхня, дифракція Х-променів, багатошарові структури, квантово-розмірні шари, багатохвильова дифракція, деформація, надґратки.

ABSTRACT

Yefanov O.M. Dynamical X-Ray Diffraction in Multilayered Structures.
– Manuscript.

Dissertation for the Ph.D. degree by speciality 01.04.07 – solid state physics. V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2006.

The thesis is devoted to investigation of X-ray diffraction in multilayered structures. A new approach for calculation of N-beam dynamical diffraction in planar multilayers is developed and its applications for experimental data analysis are shown. The main features of proposed model are: plane waves are considered; propagation equation, derived from Maxwell equations, and boundary conditions are solved without simplifications; suitable for any geometry (Bragg, Laue, Bragg-Laue); 3D simulation in reciprocal and 1D in real space; covers the whole angular range, including grazing angles, backscattering and specular reflection; precise calculation of any polarization with information about diffracted and reflected beams polarization; no principal limitation on quantity of reciprocal lattice points taken part in diffraction; arbitrary layers thickness (valid for both thick and thin layers); all calculation are carried out for x,y,z projections of wave vectors, diffraction vectors and electric field. The examples of developed approach application, such as diffraction curves (DC), reflection curves, Renninger scan and reciprocal space maps are shown.

One more method for N-beam diffraction in multilayers calculation is presented. This method is less common and is suitable only for coplanar case and only sigma polarization, but it is faster then 3D algorithm described above.

Dispersion equation for 2, 3, 4 and N-beam diffraction are numerically solved and dispersion surfaces for these cases are drawn. For two-beam case the simplified (quadratic) and exact (quartic) equations are solved analytically. Absorption is taken into account

and different geometries as well. For many-beam cases (more than two) the way for avoiding numerical problems is shown. These problems arise if the wave vectors are expressed in Cartethian coordinates with the origin in (000) point. This is explained by the fact that there could be many origins of wave vectors near the same Lorentz point, so the precision of computer calculations is not enough to distinguish the difference between solutions (its order is about 10^{-5}) while the value of these roots is about 1. That's why the origin of coordinate system must be placed in Lorentz point.

The influence of composition gradient on boundaries between GaAs and InGaAs layers in 8-period superlattice is analyzed. Four type of gradient functions were considered: sharp, linear, quadratic and quadratic-hyperbolic. With the last function the best coincidence between simulated and experimental DC near substrate peak was achieved. But for good intensity correlation on the far tails of DC different parameters of composition gradient must be set for each boundary in superlattice. For this reason autofit procedure was used and this gave better results.

Anisotropic deformations investigation was done with the help of measuring azimuthaly dependent diffraction curves. It allows to explain satellite peaks period dependence on azimuthal angle and shift of the zero satellite. The first fact is well known to be explained by the structure diffraction vector misorientation to the surface normal, while the latter is more interesting and is explained by local InGaAs layers misorientation.

A new method of structure analysis via calculation of two-dimensional maps of azimuthal dependent intensity distribution is presented (one axis is usual $\omega/2\theta$ and the other is azimuthal angle). The advantages of such approach for multilayers analysis is underlined.

The program developed for diffraction calculation is described. Among with original methods mentioned above it incorporates the best algorithms for X-ray diffraction in multilayers calculation, such as Bartels recursion formula (Bartels, Acta Cr.A, 1986), Transfer Matrix Algorithm (Stepanov, Cr.Rep., 1994), Recursion Matrix Algorithm (Stepanov, Phys.Rev.B, 1998), 1D Takagi recursion equation (Fewster, 2003), N-Beam Transfer Matrix Algorithm (Stepanov, Acta Cr.A, 1994), Souvorov 3D algorithm (Souvorov, Phys.Rev.B, 2004). The part of the program is "open source" C++ library developed to calculate the polarizability of complex structures (<http://x-ray.net.ua/software.php>). The program is equipped with comfortable interface and it was applied for all simulations described in the thesis.

Keywords: dispersion surface, X-ray diffraction, quantum layers, multi-beam diffraction, deformation, superlattices.

Підписано до друку 10.11.2006 р. Формат 60×90/16.
Ум. друк. арк. 0,9. Обл.-вид. арк. 0,9.
Тираж 100. Зам. 69.

«Видавництво “Науковий світ”»[®]
Свідоцтво ДК № 249 від 16.11.2000 р.
м. Київ, вул. Боженка, 17, оф. 504.
200-87-13, 200-87-15, 8-050-525-88-77

Литература

- [1] *Fewster P.F* X-Ray Scattering from Semiconductors. – L.: Imp. Col. Press, 2003. – 300 pp.
- [2] *Stepanov S. A.* // Cryst. Rep. – 1994. – Vol. 39, № 2. – P. 182–187.
- [3] *Bartels W. J., Hornsrtta J., Lobeek D.J.W.* // Acta Cryst. A – 1986. Vol. 42. – P. 539–545.
- [4] *Stepanov S. A., etc.* // Phys. Rev. B – 1998. – Vol. 57, № 8. – P. 4829–4841.
- [5] *Stepanov S.A., Ulyanenkov A.P.* // Acta cryst. A. – 1994. – Vol. 50. – P. 579–585.
- [6] *Stetsko Y. P., Chang S.-L.* // Acta Cryst. A. – 1997. – Vol. 53. – P. 28–34.
- [7] *Souvorov, etc.* // Phys. Rev. B – 2004. – Vol. 70, № 224109. – P. 1–9.
- [8] *Боуэн Д.К., Таннер Б.К.* Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. – С.-П.: Наука, 2002. – 275с.
- [9] *Kohn V. G.* // Phys. Stat. Sol. (a) – 1979. – Vol. 54. – P. 375–384.
- [10] *Kohn V. G.* // J. Moscow Phys. Soc. – 1977. – Vol. 1. – P. 425–434.
- [11] *Ломов А.А., Чуб М.А., etc.* // Письма ЖТФ – 2004. – Vol. 30, № 10. – P. 89–95.