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

ЄФАНОВ Олександр Миколайович

УДК: 539.26, 548.73, 548.736.64

ДИНАМІЧНА ДИФРАКЦІЯ Х-ПРОМЕНІВ В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ

01.04.07 - фізика твердого тіла

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Київ-2006

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Науковий керівник:	доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, Кладько Василь Петрович , Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України (м. Київ), завідувач відділом
Офіційні опоненти:	доктор фізико-математичних наук, професор, Репецький Станіслав Петрович , Київський Національний Університет імені Тараса Шевченка, професор кафедри фізики функціональних матеріалів
	доктор фізико-математичних наук, професор, Фодчук Ігор Михайлович , Чернівецький Національний Університет ім. Ю.Федьковича, професор кафедри фізики твердого тіла
Провідна установа:	Інститут металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України (м. Київ), відділ теорії твердого тіла

Захист відбудеться 15 грудня 2006 р. о 14¹⁵ на засіданні спеціалізованої вченої ради К 26.199.01 при Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України за адресою: 03028, м. Київ, пр. Науки, 41.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України (м. Київ, пр. Науки, 45) та на сайті відділу дифракційних досліджень структури напівпровідників http://www.x-ray.net.ua.

Автореферат розісланий 14 листопада 2006 р.

Вчений секретар Спеціалізованої вченої ради К 26.199.01 кандидат фізико-математичних наук

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми.

Високороздільна рентгенівська дифрактометрія (ВРРД) 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 по об'єкту, а також достатню точність визначення параметрів таких структур. Дана робота присвячена розвитку теорії методів ВРРД на основі динамічної теорії дифракції рентгенівських променів. Основна увага приділена використанню багатохвильової дифракції в багатошарових структурах із використанням компланарної геометрії та асиметричного і ковзного бреггівського відбиття від кристала.

Однозначна інтерпретація рентгенівських дифракційних спектрів багатошарових напівпровідникових структур має суттєві обмеження навіть для ідеальних шарів при використанні або кінематичної, або двохвильової динамічної моделей дифракції. Разом з тим, аналіз літератури свідчить про те, 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 була неоднозначність визначення розподілу компонентів на границях інтерфейсу в багатокомпонентних квантових шарах НГ та вплив анізотропії деформаційних полів на криві дифракційного відбиття (КДВ).

Обмеженість застосування існуючих теорій для опису дифракції в багатошарових структурах пов'язана також із відсутністю відповідних алгоритмів розрахунку інтенсивності дифракції в багатошарових структурах з врахуванням багатьох хвиль, а також часткової релаксації системи і локальної разорієнтації вектора оберненої ґратки. Крім того, для підвищення однозначності результатів рентгеноструктурного аналізу необхідне використання карт оберненого простору. А їхня інтерпретація вимагає відповідних розрахунків (моделювання цих карт).

Проведені дослідження показують, що неврахування цих факторів може призвести до невірного трактування дифракційних ефектів, і, відповідно, структури нанокристалічних об'єктів. Тому, розробка теоретичних основ дифракції на багатошарових планарних структурах і методик їх аналізу є актуальною й у той же час непростою на практиці задачею.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України і виконана у відповідності до тем:

1. "Комплексні структурні та морфологічні дослідження гетероепітаксійних (у тому числі нанорозмірних) систем на основі напівпровідників IV групи та сполук АЗВ5 і А2В6"№ державної реєстрації 0103U000380.

2. Науково-технічна програма "Розробка науково-технічних методів, засобів і автоматизованих систем контролю параметрів напівпровідникових матеріалів, структур і приладів". Тема "Сертифікація", проект "Рентгеноспектральна методика і апаратура для контролю хімічного складу в ході технологічного процесу"№ державної реєстрації 0197U008669.

3. Цільова комплексна програма фундаментальних досліджень "Наносистеми, наноматеріали та нанотехнології"№ дер. реєстрації 0103U006315.

Роль автора у виконанні науково-дослідних робіт полягала в розробці та програмній реалізації теоретичних моделей, отриманні експериментальних спектрів та дослідженні структурних властивостей нанорозмірних епітаксійних шарів, квантових дротів та точок.

Мета і завдання дослідження.

Мета дисертаційної роботи полягала у розвитку теоретичних основ динамічної дифракції Х-променів в багатошарових структурах у різних геометріях, а також у дослідженні деформаційних та композиційних властивостей, з метою оптимізації фізико-технологічних умов отримання багатошарових напружених структур із квантовими ямами і точками, з наперед заданими властивостями.

Для досягнення поставленої мети, вирішувалися наступні наукові завдання:

1. Уточнення і розширення теоретичних основ динамічної дифракції Х-променів у багатошарових структурах для випадку впливу на дифракцію декількох вузлів оберненої ґратки. Ця модель повинна враховувати взаємодію випромінювання, дифрагованого різними вузлами ґратки, в тому числі і дзеркально відбитого.

2. Створення методології, алгоритмів та програмного забезпечення для високороздільної дифрактометричної кількісної діагностики багатошарових напівпровідникових структур.

3. Проведення комплексу високороздільних дифрактометричних досліджень структурних та деформаційних властивостей багатошарових структур на основі InGaAs/GaAs у залежності від умов росту.

4. Встановлення взаємозв'язку між експериментальними картинами дифракції Х-променів і чисельним розрахунком з використанням розроблених теоретичних підходів та технологічними і деформаційними параметрами епітаксійних плівок.

5. Визначення впливу анізотропних спотворень кристалічної ґратки та перехідної області між шарами на рентгенівські вимірювання параметрів структур.

Об'єкт дослідження: багатошарові надґраткові структури InGaAs/GaAs та SiGe/Si із різним вмістом індію та германію, структури з одиничними квантовими ямами (InGaAs/AlGaAs/GaAs) та структури з квантовими точками і дротами.

Предмет дослідження: дво- та N-хвильова динамічна дифракція в шаруватих структурах в різних геометріях експерименту при бреггівській дифракції; взаємодифузія компонент на границях шарів та релаксація напруг на інтерфейсах; геометричні параметри шарів.

Методи дослідження: комплекс експериментальних та розрахункових методів, який включає в себе високороздільну рентгенівську дифрактометрію; методи

2

комп'ютерного моделювання спектрів дифракції і відбиття, а також двовимірних карт розподілу інтенсивності.

Наукова новизна одержаних результатів.

Головна відмінність даної роботи від аналогічних попередніх досліджень полягає у повному кількісному врахуванні динамічних ефектів при дифракції в багатошарових планарних структурах. **Вперше** отримані такі наукові результати:

• з перших принципів створено теоретичну модель динамічної N-хвильової дифракції в багатошарових структурах, адекватну для шарів довільної товщини; зокрема, враховано ефекти відбиття та дифракції при малих кутах падіння і виходу, та при кутах падіння 45° і 90°. Знайдено точний напрямок дифрагованого в кристалі променю. Показано, що переваги запропонованого рішення найчіткіше проявляються при аналізі експериментальних КДВ далеко від бреггівського положення, тобто дають можливість точного аналізу структур, які складаються з матеріалів, що значно відрізняються параметрами ґратки, а також при використанні сильно асиметричної геометрії дифракції;

• проаналізовано дисперсійну поверхню (як дійсну, так і уявну її частину) для геометрій Брегга та Лауе для 2-х, 3-х, 4-х та *N*-хвильового випадку. Встановлено, що дисперсійна поверхня для поглинаючих кристалів у геометрії Брегга кардинально відрізняється від випадку Лауе. Показано, що лише у випадку дійсного дисперсійного рівняння можна говорити про діаметр дисперсійної поверхні у випадку Брегга - тоді зникає як поглинання, так і асиметрія дисперсійної поверхні, і з'являється область повного відбиття;

• на основі розробленої теоретичної моделі дифракції запропоновано методику контролю структури і деформації напружених і частково релаксованих шарів, яка полягає у вимірюваннях азимутальних залежностей КДВ;

• з'ясовано роль форми градієнта розподілу компонентного складу на межах поділу в багатошарових InGaAs/GaAs структурах на КДВ у випадку дифракції Брегга. Зокрема встановлено, що найбільш адекватно криві відбиття описуються при введенні гіперболічного закону зміни градієнта складу на границі шарів. Продемонстровано, що товщина шару може бути невірно визначена при використанні допущення про різку зміну складу на межі між шарами.

Практичне значення одержаних результатів.

Методи чисельного розрахунку та процедуру фітування можна використовувати для визначення характеристик багатошарових структур, зокрема профілів деформації, композиційних профілів, геометричних параметрів. Отримані результати дозволяють оптимізувати фізико-технологічні умови росту і обробки складних багатошарових систем та тонких плівок для створення приладів на їх основі. Описані в роботі теоретичні моделі та методичні підходи можуть бути використані в спецкурсах по фізиці твердого тіла, рентгеноструктурному аналізу, комп'ютерній фізиці.

Особистий внесок здобувача.

В опублікованих працях [1 - 21], особистий внесок дисертанта полягає у створенні теоретичних моделей та експериментальних вимірюваннях спектрів відбиття і карт

4

оберненого простору, розрахунку параметрів деформації в шарах НГ структур та профілів розподілу компонентів в областях інтерфейсів. Також, в усіх роботах дисертант приймав активну участь у аналізі та інтерпретації результатів досліджень та написанні статей.

Апробація результатів дисертації.

Основні результати досліджень, що викладені у дисертаційній роботі, доповідались та обговорювались на наукових конференціях: ІІ Українська наукова конференція з фізики напівпровідників - УНКФН-ІІ (Чернівці-Вижниця, Україна, 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 національна конференція по застосуванню рентгенівського, синхротронного випромінювання, нейтронів і електронів для дослідження матеріалів РСНЭ-НАНО-2005 (Росія, Москва 14-19.11.05); 3-ій Міжнародний науковий семінар "Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)"(Росія, B.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).

Публікації.

За матеріалами дисертації опубліковано 21 наукову працю, з яких 9 статей, 3 матеріали та 9 тез доповідей на наукових конференціях. Список публікацій наведено наприкінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації.

Дисертаційна робота складається із вступу, літературного огляду з теми досліджень (розділ 1), чотирьох оригінальних розділів, висновків, одного доданку та списку цитованої літератури з 104 найменувань. Основний текст дисертації викладено на 115 сторінках. Дисертація містить 37 рисунків та 3 таблиці.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, її зв'язок з науковими програмами і темами, сформульовані мета та завдання роботи, її наукову новизну, практичне значення отриманих результатів, наведено дані про особистий внесок дисертанта, а також відомості про апробацію роботи та публікації.

У **розділі 1** представлено огляд методів моделювання дифракції рентгенівських променів на багатошарових структурах на основі динамічної теорії. Розглянуті такі алгоритми, як: метод матриць Абеле, одновимірні рівняння Такагі [1], TMA [2], рекурентні співвідношення Бартелса [3], PMA [4], багатохвильовий TMA [5], 3-х вимірний багатохвильовий алгоритм Стецька для одношарової структури [6] та алгоритм Суворова для багатошарових структур [7]. Приведено аналіз основних характеристик цих методів, вказано їх недоліки та переваги. Всі описані методи в рамках дисертаційної роботи було реалізовано програмно. Окремий підрозділ присвячено загальноприйнятим методам врахування напрямків векторів дифракції. Крім цього, у розділі 1 приведено невелику історичну довідку про динамічну теорію дифракції.

У **розділі 2** з рівнянь Максвела виведено основні формули динамічної теорії ди-

фракції. Без спрощень виведено у загальному вигляді рівняння поширення плоских монохроматичних рентгенівських хвиль в кристалічному середовищі (при умові відсутності зарядів та $\mu = 1$), яке для кожної блохівської хвилі приймає вигляд:

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

де **Е** — напруженість електричного поля, $\mathbf{k}_{\mathbf{h}}$ та **К** — хвильові вектори відповідно в кристалі та вакуумі ($K = 1/\lambda$), $\chi_{h-g} - \Phi$ ур'є компоненти поляризуємості, N кількість точок оберненого простору, що приймають участь у дифракції.

У цьому ж розділі введено поняття дисперсійного рівняння для багатохвильового випадку та наведено загальний вигляд граничних умов між шарами та на поверхнях структури:

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

Крім точних виразів приведено загальновживані приблизні із вказівками, які допущення використовуються при їх виведенні. Ці припущення наступні: мала величина поляризуємості, поляризаційний фактор для Pi-поляризації $C = \cos(2\theta_0)$, колінеарність у кристалі векторів **E** та **D**,... Тут і у подальшому основні рівняння з такими припущеннями будемо називати спрощеними.

Розділ 3 присвячений розв'язку дисперсійного рівняння в компланарних дво-, трьо- та чотирьохвильових випадках. Наведено алгоритм чисельного розрахунку методом Лагера дисперсійної поверхні для цих випадків. Для двохвильового випадку запропоновано наближений аналітичний розв'язок (квадратне рівняння) та точний аналітичний розв'язок (рівняння четвертого ступеню) методом Феррарі.

Дисперсійне рівняння можна отримати з вимоги нетривіального розв'язку системи, яку складено з N рівнянь розповсюдження (1), тобто det $\Delta_E = 0$. Для двохвильового випадку (N = 2) у спрощеній формі воно має вигляд:

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

де $\mathbf{k_h} = \mathbf{k_0} + \mathbf{h}$, \mathbf{h} - вектор дифракції.

Це рівняння четвертого ступеню, і його розв'язком є дві сфери, що перетинаються, з центрами в точках О та Н (початок та кінець **h**) та радіусом k = nK, де n— коефіцієнт заломлення середовища (рис. 1).

Найбільш цікаві ефекти (динамічні) спостерігаються поблизу точки перетину сфер Евальда (так звана точка Лорентца). Однак саме ця область в геометрії Брегга у більшості книжок по рентгено-структурному аналізу наведена не зовсім вірно (рис. 2 а), насправді для поглинаючого кристала вона виглядає як показано на рис. 2 б).

У таблиці 1 приведено різні граничні випадки дифракції по Бреггу (на відбиття).

Для розв'язку дисперсійного рівняння (3) необхідно зробити заміну змінних, щоб залишилась лише одна невідома, враховуючи, що змінні k_h та k_0 пов'язані (підпис під рівнянням (3). Цього можна досягти двома шляхами: розкласти хвильові вектори на декартові координати x та y і врахувати що координата x відома, оскільки

вона зберігається при заломленні променя; або, знову ж таки, враховуючи неперервність тангенційної складової падаючого хвильового вектора, ввести нову змінну ϵ : $\mathbf{k}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h} + K\epsilon \mathbf{n}$, де \mathbf{n} — зовнішня нормаль кристала. Для двохвильового випадку обидва підходи еквівалентні, але для випадку трьох або більше сильних хвиль перший підхід може дати хибні результати (рис. 3), а щодо другого, то його можна використовувати майже для довільної кількості хвиль (рис. 2 б). Пов'язано це із скінченною точністю розрахунків на ЕОМ, і навіть для трьохвильового випадку та при використанні дійсних чисел типу *long double* можуть виникнути проблеми.

В огляді літератури показано, як зазвичай розв'язується проблема пошуку хвильових векторів — у лінійному наближенні вводиться кутове відхилення від точного Бреггівського кута $\Delta \theta$. Такий наближений метод можна використовувати лише в діапазоні приблизно одного градуса від бреггівського кута. Таким чином можна розраховувати КДВ для надґраток, які складаються з матеріалів із близькими параметрами ґратки, але не для ковзної геометрії. Однак, для надґраток з дуже різними постійними ґратки, такий наближений підхід вже не можна застосовувати. Пов'язано це із тим, що кути Вульфа-Брегга для різних шарів дуже відрізняються: наприклад для абсолютно напруженого ІпАs шару на GaAs підкладинці кути відрізняються майже на 5 градусів. На рис. 4 зображено саме таку ситуацію. Як бачимо, навіть поблизу точного кута Брегга наближений підхід дає зовсім іншу картину. Тобто, аналізуючи експериментальні результати за допомогою таких методів, можна зробити помилкові висновки щодо структури зразка.

У **розділі 4** приведено два оригінальні методи розрахунку багатохвильової дифракції в багатошарових структурах. Перший метод дозволяє розрахувати найбільш поширений випадок компланарної багатохвильової дифракції у зразках з довільними товщинами шарів. Однак виведено цей метод із загальновживаного наближеного рівняння розповсюдження та з урахуванням приблизних граничних умов.

Другий метод більш точний і оригінальний. Він базується на описаному в [6] найкращому на сьогоднішній день алгоритмі розрахунку некомпланарної багатохвильової дифракції в паралельній платівці, але може бути застосованим для багатошарової структури з шарами довільної товщини. Необхідно відмітити, що в роботі [7] описано подібний до наведеного нижче підхід, але запропонований нами в роботі алгоритм справедливий не лише для повністю напруженої структури, але й не містить помилок при інтерпретації фазових множників.

Основні характеристики запропонованого методу:

розглядаються плоскі хвилі; рвняння розповсюдження і граничні умови розв'язуються без спрощень; будь-яка геометрія (Брегг, Лауе, Брегг-Лауе); 3D моделювання в оберненому просторі і 1D в прямому; необмежений кутовий діапазон; точний розрахунок будь-якої поляризації, а також інформація про поляризацію дифрагованих променів; немає принципових обмежень на кількість точок оберненого простору, які беруть участь в дифракції; немає обмежень на товщини шарів; усі розрахунки проводяться для х,у,z компонент хвильових векторів, векторів дифракції і полів.



Рис. 1. Дисперсійна крива (2 хвилі).



Рис. 2. Дисперсійна крива для симетричної геометрії Брега: а) типова крива, що наводиться в книгах (цей малюнок з книги [8]); б) точно розрахована.



Рис. 3. Розв'язок для 4-х хвиль в декартових координатах.



Рис. 4. Надґратка InAs/GaAs на GaAs підкладці (5 пар шарів по 50 нм кожен).



Таблиця 1. Дисперсійна крива в геометрії Брега.

Розв'язок дисперсійного рівняння.

Рівняння розповсюдження для векторів напруженості електричного поля в періодичному середовищі (1) необхідно звести до системи скалярних рівнянь. Для цього представимо всі вектори в декартових координатах:

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

де X_n, Y_n, Z_n - координати точок оберненого простору, а x, y, z - координати початків хвильових векторів.

Тоді рівняння (1) прийме вигляд:

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

де матриці розміру [N*N] $\mathbf{I} = \{\delta_{nm}\}, \mathbf{A} = \{\delta_{nm}x_n\}, \mathbf{B} = \{\delta_{nm}y_n\}, \mathbf{C} = \{\delta_{nm}Z_n\}, \mathbf{X} = \{\chi_{h_n-h_m}\}, \mathbf{G} = (\mathbf{I} + \mathbf{X})$ та δ_{nm} — дельта функція. Поляризуємість $\chi_{h_n-h_m}$ розраховувалась розробленим у рамках даної роботи методом, опис якого можна знайти на сайті http://x-ray.net.ua. Матриці $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$ — вектор-стовиці розміром $[1 \times N]$ напруженостей електричного поля вигляду: $\mathbf{E}_x = (E_0^x, E_1^x, \ldots, E_{N-1}^x)^T$, де T означає транспонування.

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 (5) до системи:

$$\mathbf{Q}\mathbf{E}_4 = z\mathbf{E}_4,\tag{6}$$

$$\mathbf{E}_z = -(\mathbf{I} + \mathbf{X})^{-2} (\mathbf{A}\mathbf{E}_z + \mathbf{B}\mathbf{E}_w)$$
(7)

де $\mathbf{E}_4 = (\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_v, \mathbf{E}_w)$ та матриця **Q** розміром $[4N \times 4N]$ є:

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

Таким чином, вираз (6) є дисперсійним рівнянням, з якого можна знайти вектори дифракції у середовищі, а в комбінації з (7), ще і хвильові поля, що відповідають усім дифрагованим променям (з точністю до невідомого коефіцієнта c_j^m).

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

Граничні умови

Запишемо хвилю в кристалі:

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

де константа інтеграції, для безперервності фази між шарами, повинна дорівнювати: $C_n = \vec{k}_{\perp n} \vec{r}_n - Z_n t$, t - товщина поточного шару.

На межі між шаром (m) і (m-1) умови (2) в матричній формі матимуть вигляд:

$$\mathbf{c}_{m}\mathbf{E}_{m}^{x} = \mathbf{c}_{m-1}\mathbf{E}_{m-1}^{x}\mathbf{F}_{m-1} \qquad \mathbf{c}_{m}\mathbf{E}_{m}^{y} = \mathbf{c}_{m-1}\mathbf{E}_{m-1}^{y}\mathbf{F}_{m-1}$$

$$\mathbf{c}_{m}(\mathbf{I} + \mathbf{X}_{m})\mathbf{E}_{m}^{z} = \mathbf{c}_{m-1}(\mathbf{I} + \mathbf{X}_{m})\mathbf{E}_{m-1}^{z}\mathbf{F}_{m-1} \qquad (10)$$

$$\mathbf{c}_{m}(\mathbf{E}_{m}^{zy} - \mathbf{B}_{m}\mathbf{E}_{m}^{z}) = \mathbf{c}_{m-1}(\mathbf{E}_{m-1}^{zy} - \mathbf{B}_{m-1}\mathbf{E}_{m-1}^{z})\mathbf{F}_{m-1}$$

$$\mathbf{c}_{m}(\mathbf{A}_{m}\mathbf{E}_{m}^{z} - \mathbf{E}_{m}^{zx}) = \mathbf{c}_{m-1}(\mathbf{A}_{m-1}\mathbf{E}_{m-1}^{z} - \mathbf{E}_{m-1}^{zx})\mathbf{F}_{m-1}$$

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

На верхній та нижній поверхнях структури, що складається з M шарів (1 - верхній, M - підкладка), умови (10) виглядають схожим чином (по 5N с кожного боку структури). Якщо з цих 10N рівнянь виключити невідомі дифраговані вгору промені $E_{up}^{x,y,z}$ та дифраговані вниз промені $E_{dwn}^{x,y,z}$ та ввести змінну $K_m^z = \{-\delta_{ni}\sqrt{1-(x_n^2+y_n^2)}\}$ та вектор-стовпчик $E_0^{x,y,z}$ — падаючі на структуру промені (відмінний від 0 тільки перший елемент кожного вектора), одержимо 4N рівнянь:

$$\mathbf{c}_{1}(\mathbf{E}_{1}^{zx} + \mathbf{K}_{z}\mathbf{E}_{1}^{x} + \mathbf{A}_{1}\mathbf{X}_{1}\mathbf{E}_{1}^{z}) = 2\mathbf{K}^{z}\mathbf{E}_{0}^{x}$$

$$\mathbf{c}_{1}(\mathbf{E}_{1}^{zy} + \mathbf{K}_{z}\mathbf{E}_{1}^{y} + \mathbf{B}_{1}\mathbf{X}_{1}\mathbf{E}_{1}^{z}) = 2\mathbf{K}^{z}\mathbf{E}_{0}^{y}$$

$$\mathbf{c}_{M}(\mathbf{E}_{M}^{zx} - \mathbf{K}_{z}\mathbf{E}_{M}^{x} + \mathbf{A}_{M}\mathbf{X}_{M}\mathbf{E}_{M}^{z})\mathbf{F}_{M} = 0$$

$$\mathbf{c}_{M}(\mathbf{E}_{M}^{zy} - \mathbf{K}_{z}\mathbf{E}_{M}^{y} + B_{M}\mathbf{X}_{M}\mathbf{E}_{M}^{z})\mathbf{F}_{M} = 0$$
(11)

або у більш компактному вигляді:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{u}\mathbf{c}_{1} &= 2\mathbf{K}^{z}\mathbf{E}_{0}^{xy}, \\ \mathbf{S}_{d}\mathbf{F}_{M}\mathbf{c}_{M} &= \mathbf{0}, \end{aligned} \tag{12}$$

Рівняння (10) теж можна представити в компактному вигляді (достатньо 4-х рівнянь з 5-ти):

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

де матриці S_m можна вибрати, наприклад, так:

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

Послідовно застосовуючи формулу (13) для всіх шарів, одержимо рекурентне співвідношення:

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

За допомогою рівнянь (12) і (15) можна розрахувати c_1 і c_M . Далі, з умов на верхній та нижній границях структури, можна знайти дифраговані промені зверху та знизу структури:

10

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{1}^{x} \\ \mathbf{E}_{1}^{y} \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_{1})\mathbf{E}_{1}^{z} \end{pmatrix} \mathbf{c}_{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{0}^{x} \\ \mathbf{E}_{0}^{y} \\ \mathbf{E}_{0}^{z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{up}^{x} \\ \mathbf{E}_{up}^{y} \\ \mathbf{E}_{up}^{z} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{M}^{x} \\ \mathbf{E}_{M}^{y} \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_{M})\mathbf{E}_{M}^{z} \end{pmatrix} \mathbf{F}_{M} \mathbf{c}_{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{dwn}^{x} \\ \mathbf{E}_{dwn}^{y} \\ \mathbf{E}_{dwn}^{z} \end{pmatrix} \phi_{M}, \quad (16)$$

де діагональна матриця φ_M - фаза хвилі, що вийшла із структури.

Проблема даного розв'язку полягає у тому, що, при великій товщині шарів, матриця F_n стає нескінченно великою для коренів z_j з негативною уявною частиною [9]. Рішення даної проблеми запропоноване в [10] і проаналізовано в [4]. Застосуємо цей підхід.

Коректний розв'язок для товстих шарів.

Відсортуємо корені дисперсійного рівняння (6) z_j по зменшенню уявної частини (коренів з позитивними і негативними уявними частинами однакова кількість [10]) і розіб'ємо матриці S_m і F_m розміру [4N*4N] в рівнянні (13) відповідно на матриці розміру [2N*2N], а матрицю c_m [4N*1] на дві [2N*1]:

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

Тоді можна записати, що:

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

де

$$\mathbf{M}_{m}^{12} = \mathbf{X}_{m}^{12} (\mathbf{X}_{m}^{22})^{-1} \qquad \mathbf{W}_{m+1}^{11} = -\mathbf{M}_{m}^{11} (\mathbf{W}_{m}^{12} \mathbf{M}_{m}^{21} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{W}_{m}^{11}
\mathbf{M}_{m}^{11} = (\mathbf{X}_{m}^{11} - \mathbf{M}_{m}^{12} \mathbf{X}_{m}^{21}) \mathbf{F}_{m}^{+} \qquad \mathbf{W}_{m+1}^{12} = \mathbf{M}_{m}^{12} - \mathbf{M}_{m}^{11} (\mathbf{W}_{m}^{12} \mathbf{M}_{m}^{21} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{W}_{m}^{12} \mathbf{M}_{m}^{22}
\mathbf{M}_{m}^{22} = (\mathbf{F}_{m}^{-})^{-1} (\mathbf{X}_{m}^{22})^{-1} \qquad \mathbf{W}_{m+1}^{21} = \mathbf{W}_{m}^{21} - \mathbf{W}_{m}^{22} \mathbf{M}_{m}^{21} (\mathbf{W}_{m}^{12} \mathbf{M}_{m}^{21} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{W}_{m}^{11}
\mathbf{M}_{m}^{21} = -\mathbf{M}_{m}^{22} \mathbf{X}_{m}^{21} \mathbf{F}_{m}^{+} \qquad \mathbf{W}_{m+1}^{22} = \mathbf{W}_{m}^{22} (\mathbf{I} - \mathbf{M}_{m}^{21} (\mathbf{W}_{m}^{12} \mathbf{M}_{m}^{21} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{W}_{m}^{12}) \mathbf{M}_{m}^{22}$$
(19)

Застосовуючи рівняння (19) послідовно для всіх шарів, починаючи від поверхні (для першого шару $W_1^{11} = W_1^{22} = I \quad W_1^{12} = W_1^{21} = 0$), і враховуючи граничні умови (12), можна знайти:

де $S_M = -(F_M^-)^{-1}(S_d^-)^{-1}S_d^+F_M^+, \quad S_1 = W_M^{21} + W_M^{22}S_M(I - W_M^{12}S_M)^{-1}W_M^{11}.$

Підставивши одержані c_1 і c_M в рівняння (16) можна визначити всі компоненти дифрагованих променів (нульові елементи в матрицях $E_{up}^{x,y,z}$ і $E_{dwn}^{x,y,z}$ описують відповідно дзеркально відбитий промінь та промінь, що пройшов крізь всю структуру).

Даний підхід позбавлений проблем із товстими шарами, оскільки матриця, що містить зростаючі експоненти F_M^- , скрізь фігурує в інвертованому вигляді.

Приклади використання описаного підходу показано на рис. 5 та рис. 6.

Розділ 5 присвячено застосуванню різних методик моделювання динамічної дифракції рентгенівських променів у багатошарових структурах. Наведено застосування описаного вище методу для моделювання дзеркально-відбитого променю (в p-ні (16) перший член матриць-рядків $E_{up}^x, E_{up}^y, E_{up}^z)$, для точного врахування поляризації падаючого та дифрагованих променів (в p-ні (16) в явному вигляді присутні декартові координати всіх полів), для моделювання Ренінгеровського сканування (оскільки всі вектори в системі записані в явній декартовій формі, можна задати всі точки оберненого простору, які будуть брати участь у дифракції, та обертати зразок). Також описано розроблену в рамках роботи ореп-source програму для розрахунку поляризуємості складених кристалів (детальний опис та саму програму з необхідними файлами даних можна знайти на сайті http://www.x-ray.net.ua).

Ще одне застосування описаних у роботі методик моделювання - аналіз перехідної області між шарами в надґратках. У роботі представлена методика моделювання різних перехідних областей між шарами, що складаються з різних матеріалів. Проаналізовано різкий, лінійний, квадратичний та квадратично-гіперболічний градієнт складу (вставка на рис. 7). Показано вплив цих градієнтів на криву дифракційного відбиття (рис. 7).

Основні висновки цієї глави наступні: введення різної форми градієнта складу на межах шарів не впливає на визначення періоду структури, проте впливає на визначення співвідношення товщини шарів In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs; завдяки градієнту концентрації можна отримати добре узгодження інтенсивностей експериментальних і модельованих піків сателітів; для однозначного з'ясування форми перехідної області між шарами необхідно спільно аналізувати КДВ від симетричних і несиметричних рефлексів або побудувати двовимірну карту розподілу інтенсивностей; для деяких типів градієнту між шарами сателітна структура втрачає свою періодичність.

Необхідно, однак, зазначити, що введення однакового градієнту між шарами по всій структурі не може точно відобразити реальну картину, тому для більш точного аналізу багатошарових структур необхідно використовувати досить поширений метод розв'язку оберненої задачі — автофітування [11]. В дисертації є окремий параграф, присвячений цій проблемі.

Наступне застосування описаних методик моделювання — аналіз анізотропних деформацій в планарних структурах. Для проведення такого аналізу проводиться вимірювання КДВ для різних азимутальних положень зразка (рис. 8) і, порівнюючи експериментальні та модельовані КДВ, можна отримати інформацію про анізотропні деформації (рис. 9). Таке спотворення структури пов'язане з наявністю разорієнтації між атомними площинами підкладинки та її поверхнею.

Ще одне застосування описаної вище 3D методики моделювання — азимутальнозалежні вимірювання. Приклад теоретично розрахованої та експериментально виміряної азимутальної карти показано на рис. 10.

Розроблений метод дає повну інформацію про дифрагований промінь, що можна використовувати для моделювання карт оберненого простору. На рис. 11 зображено

приклад такого моделювання.

В кінці роботи зроблено висновки.

У додатку представлена інформація щодо розробленої в рамках дисертаційної роботи програми для моделювання динамічної дифракції Х-променів.





Рис. 5. Частина дисперсійної поверхні GaAs 004.

Рис. 6. Ширококутова дифракція на InGaAs/GaAs надґратці (червоним), 002 – синім (жовтим - без дзеркального відбиття), 004 – зеленим, 006 – блакитним.



Рис. 7. Експериментальна (зеленим) і модельовані КДВ для рефлексу 113 від 8-періодної надґратки In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs (40/113 Å) з: різким (синім), лінійним (блакитним), квадратичним (жовтим) і квадратично-гіперболічним (червоним) градієнтом на інтерфейсі між шарами (на вставці по осі х – нормальний параметр ґратки, по у – глибина залягання підшару).



Рис. 8. Експериментальні (червоним та синім) і модельо-

вані (зеленим і салатовим) КДВ для InGaAs/GaAs надґра-

тки. Азимутальні кути 90 ° (2 верхні криві) і 270 ° (2 нижні).



Рис. 9. Деформована крист. ґратка In_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs. Чорним - GaAs, червоним - InGaAs. а) вся структура, б) елементарна комірка.



Рис. 10. Азимутальні карти від 8-періодної надґратки In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs (40/113 Å) на GaAs підкладинці. Зліва – модель, справа – експеримент. Рhi – азимутальний кут.



Рис. 11. Карта рефлексу 113 від структури, що описана під рис. 10. Зліва – модель, справа – експеримент. По осі х – $\omega/2\theta$ КДВ, по у – ω .

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертації обґрунтовано та апробовано нові теоретичні підходи для опису і аналізу спостережуваних одновимірних профілів та карт розподілу дифрагованих інтенсивностей навколо вузлів оберненої ґратки, які базуються на динамічній теорії дифракції. Досліджено багатошарові структури InGaAs/GaAs, AlGaAs/GaAs, SiGe/Si. З аналізу отриманих результатів випливають такі висновки:

1. Вперше створено точну теоретичну модель динамічної N-хвильової дифракції в планарних багатошарових структурах з шарами довільної товщини. Цінність запропонованого рішення цієї проблеми полягає у тому, що воно може бути застосовано для аналізу експериментальних КДВ далеко від бреггівського положення, тобто для аналізу структур, які складаються з матеріалів, що значно відрізняються параметрами ґратки та структур з дуже тонкими шарами, а також при використанні довільної геометрії дифракції, у тому числі при малих кутах падіння і виходу.

2. Проаналізовано дійсну частину дисперсійного рівняння та побудовано дисперсійну поверхню для геометрій Брегга та Лауе для 2-х, 3-х, 4-х та *N*-хвильового випадку. Також побудовано уявну частину дисперсійного рівняння, яка пропорційна поглинанню в структурах, для 2-х та *N*-хвильового випадку обох геометрій. Показано відмінність точно розрахованої дисперсійної кривої для поглинаючих кристалів в геометрії Брегга від приведеної в більшості публікацій.

3. Запропоновано методику контролю структури шарів, яка полягає у вимірюваннях азимутальних залежностей КДВ, що дозволило визначити параметри анізотропної деформації кристалічної ґратки.

4. З'ясовано вплив форми розподілу компонентів на межах поділу шарів на форму КДВ у випадку дифракції Брегга. При розгляді різних моделей градієнта складу на межі поділу було встановлено, що найбільш адекватно криві відбиття для зразків, що досліджувались, описуються при введенні гіперболічного закону зміни градієнта на границі шарів InGaAs/GaAs.

5. Запропоновано модель і процедуру узгодження теоретичних спектрів з експериментальними з метою отримання інформації про параметри і характеристики напівпровідникових структур та ступінь їх досконалості (стат. фактор Дебая-Валлера).

6. Досягнута повна (за кутовими положеннями та за інтенсивностями піків) кількісна узгодженість розробленої теорії з експериментальними дифракційними КДВ для структур з розмитим інтерфейсом. На основі цих досліджень визначено профіль розподілу компонентного складу як на межі інтерфейсу, так і по глибині шарів.

7. Створена методологічна основа, алгоритми та програмне забезпечення для кількісної діагностики багатошарових кристалічних структур методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії.

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [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. рент. 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. – Р.89–95. СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Кладько 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. Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Єфанов О.М., Юхимчук В.О., Гудименко О.Й., Когутюк П.П., Шалімов А.В. Прояв просторового упорядкування квантових острівців 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., Кладько В.П. Решение дисперсионного уравнения в явном виде для случая двух сильных волн. // Мет.физ. и нов.тех. – 2006. – V.28, №2. – C.231-248.

6. Ефанов А.Н., Кладько 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., Кладько 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., Кладько В.П., Мачулін В.Ф. Компланарна 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., Ма-

зур Ю.І., Корчовий А.А., Єфанов О.М., Дослідження особливостей вертикального та латерального впорядкування квантових точок в надґраткових напівпровідникових 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 надґраткових 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., Корчевой 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 некомпланарной 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., Корчевой 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 некомпланарным 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 InxGa1-хAs/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. – р. 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. – р. 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.

АНОТАЦІЯ

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

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 вимірюваннях 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.

АННОТАЦИЯ

Ефанов А.Н. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в многослойных структурах. – Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физикоматематических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарьова НАН Украины, Киев, 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 учтен 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.

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://xray.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

Бібліоґрафія

- Fewster P.F X-Ray Scattering from Semiconductors. L.: Imp.Col.Press, 2003. -300 pp.
- [2] Stepanov S. A. //Cryst. Rep. 1994. Vol.39, Nº 2. P. 182-187.
- [3] Bartels W. J., Hornsrta 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., Чуев М.А., etc. //Письма ЖТФ 2004. Vol.30, № 10. Р. 89–95.