

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

На правах рукопису

УДК 539.261, 538.975

ЄФАНОВ Олександр Миколайович

**ДИНАМІЧНА ДИФРАКЦІЯ Х-ПРОМЕНІВ
В БАГАТОШАРОВИХ СТРУКТУРАХ**

ВЕТТА-ВЕРСИЯ!

01.04.07 - фізика твердого тіла

Д и с е р т а ц і я

на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник:

доктор фіз.-мат. наук,

В.П. Кладько

КИЇВ-2006

ЗМІСТ

УМОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ	4
ВСТУП	5
1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	11
1.1 Динамічна теорія дифракції: класифікація та історична справка . .	11
1.2 Методи розрахунку дифракції в одно- та багаточарових структурах (–)	12
1.2.1 Розрахунок напрямків векторів дифракції	13
1.2.2 Рекурентні співвідношення (Пінскер) для одношаровки ?– .	13
1.2.3 Метод матриць Абеле –	13
1.2.4 Одновимірні рівняння Такагі –	13
1.2.5 Алгоритм матриці проходження (ТМА) –	14
1.2.6 Рекурентні співвідношення (Бартелс) для дифрактометрії та рефлектометрії –	15
1.2.7 Алгоритм рекурсивних матриць (РМА)–	15
1.2.8 Багатохвильовий ТМА (Степанов) –	15
1.2.9 Розрахунок некомпланарної багатохвильової дифракції в одношаровій структурі (Стецько, Чен)	15
1.2.10 Розрахунок некомпланарної багатохвильової дифракції в ба- гаточаровій структурі (Суворов)	15
2 ВИВЕДЕННЯ ГОЛОВНИХ ФОРМУЛ ДИНАМІЧНОЇ ТЕОРІЇ ДИФРАКЦІЇ	17
2.1 Рівняння розповсюдження	17
2.2 Граничні умови	20
3 РОЗВ'ЯЗОК ДИСПЕРСІЙНОГО РІВНЯННЯ	23
3.1 Чисельний та приблизний аналітичний розв'язок в дво- променевому випадку	23
3.2 Точний аналітичний розв'язок в дво-променевому випадку	42
3.3 Чисельний розв'язок в трьох- та чотирьох-променевому випадку . .	44
4 ОРИГІНАЛЬНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ДИНАМІ- ЧНОЇ ДИФРАКЦІЇ	48
4.1 Компланарна багатопроменева динамічна теорія	48
4.2 Багатопроменевий некомпланарний РМА	59

5	ЗАСТОСУВАННЯ РОЗРОБЛЕНИХ МЕТОДІВ ДЛЯ ВИРІШЕННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ЗАДАЧ	67
5.1	Рефлектометрія (—)	67
5.2	Точне врахування та розрахунок довільної лінійної поляризації . .	67
5.3	Ренінгеровське сканування	68
5.4	Розрахунок поляризованості	68
5.5	Перехідна область між шарами	69
5.6	Автофітування кривих	78
5.7	Вплив анізотропії полів деформації в багатошарових структурах (InGa)As/GaAs на дифракцію рентгенівських променів.	80
5.8	Азимутальні залежності дифракції як новий метод аналізу	86
5.9	Розрахунок карт зворотного простору(—)	89
5.9.1	Карти для надграток що складаються з шарів двох типів . .	90
5.9.2	Карти для довільних надграток	92
	ВИСНОВКИ	94
	СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ . . .	102

УМОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ

В дисертації використані наступні позначення:

КДВ— крива дифракційного відбиття

ОКС — одно-кристальний спектрометр

ДКС — двох-кристальний спектрометр

ТКС — трьох-кристальний спектрометр

КГ — крива гойдання

МПЕ — молекулярно-променева епітаксія

RMA — Recursion Matrix Algorithm

TMA — Recursion Matrix Algorithm

ВРРД — високороздільна рентгенівська дифрактометрія

НГ — надгратка

ВСТУП

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 багат шарових структурах із використанням компланарної геометрії та асиметричного і ковзного бреггівського відбиття від кристала.

Однозначна інтерпретація рентгенівських дифракційних спектрів багат шарових напівпровідникових структур має суттєві обмеження навіть для ідеальних шарів при використанні або кінематичної, або двоххвильової 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 багат шарових структурах пов'язана також із відсутністю відповідних алгоритмів розрахунку інтенсивності дифракції в багат шарових структурах з врахуванням

багатьох хвиль, а також часткової релаксації системи і локальної разорієнтації вектора оберненої ґратки. Крім того, для підвищення однозначності результатів рентгено-структурного 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 багаточастотних планарних структурах і методик їх аналізу є актуальною й у той же час непростю 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 A_3B_5 і A_2B_6 " № 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 динамі-

чної 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 ме-

тодів, який включає в себе високороздільну рентгенівську дифрактометрію; методи 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 Бреґга та Лауе для 2-х, 3-х, 4-х та N -хвильового випадку. Встановлено, що дисперсійна поверхня для поглинаючих кристалів у геометрії Бреґга кардинально відрізняється від випадку Лауе. Показано, що лише у випадку дійсного дисперсійного рівняння можна говорити про діаметр дисперсійної поверхні у випадку Бреґга - 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 Бреґга. 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 багат шарових структур, зокрема профілів деформації, композиційних профілів, геометричних параметрів. Отримані результати дозволяють оптимізувати фізико-технологічні умови росту і обробки складних багат шарових 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 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: II Українська наукова конференція з фізики напівпровідників - УНКФН-II (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-й Міжнародний науковий семінар "Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная

микроскопия)"(Росія, 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).

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.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Спочатку необхідно накреслити рамки проблеми, що розглядається. Для цього згадаємо що таке динамічна теорія, звідки вона з'явилась та які її різновиди існують.

Далі, оскільки динамічній теорії дифракції рентгенівських променів в багаточастотних структурах присвячено багато книжок та статей, спробуємо в цьому розділі дати опис розроблених методів динамічного моделювання взаємодії випромінювання з речовиною.

1.1 Динамічна теорія дифракції: класифікація та історична справка

Існує дві поширені теорії, які описують дифракцію рентгенівських променів в кристалах: кінематична та динамічна. Оскільки розгляд кінематичної теорії виходить за рамки цієї роботи, нагадаємо лише той факт, що ця теорія побудована на незалежному розгляді розсіювання від кожного елемента об'єму з врахуванням лише втрати енергії за рахунок звичайного поглинання. Динамічна теорія враховує всю взаємодію випромінювання з речовиною.

Вперше динамічна теорія дифракції була розглянута Евальдом у 1916 році [32]: він розглядав атоми в кристалічній решітці як диполі і розраховував їх самоузгоджене поле. Потім Лауе [33] в 1931 році переформулював теорію Евальда, розглянувши взаємодію рентгенівських променів з речовиною за допомогою рівнянь Максвелла — це дозволило значно простіше отримати ті ж самі результати що і за допомогою теорії Евальда.

Паралельно Дарвін [34] в 1914 році розробив свою динамічну теорію, яка яв-

ляла собою розширену кінематичну: були враховані ефекти багатократного розсіювання, тобто взаємодія кристала не тільки з хвилею що падає, але і з хвилею що вже розсіяна.

Слід зазначити, що всі три теорії, хоч і були виведені зовсім по різному, але дають однаковий результат. Доходить навіть до того, що деякі автори не можуть дійти згоди з якої теорії виведено рівняння Такагі: Отьє [1] виводить ці рівняння з теорії Лауе, а Іверонова [7] пише, що їх виведено з теорії Дарвіна.

В цій дисертації буде розглянута теорія Евальда, модернізована Лауе, як найбільш зрозуміла, послідовна і точна.

Необхідно звернути увагу на один факт: теорія Лауе є інтегральною (використовуються такі макропараметри системи як діелектрична та магнітні сприйнятливості речовини) і саме цей факт іноді закидають як недолік методів, які базуються на теорії Лауе, тому що часто розглядається взаємодія випромінювання з об'єктами, розмірі яких в одному з напрямків порядку атомних і навіть менше (приклад буде наведено в розділі 5.5). Правомірність такого розгляду пояснюється тим, що рентгено-структурний аналіз є інтегральним методом і опромінює досить велику область зразка, що аналізується.

1.2 Методи розрахунку дифракції в одно- та багат шарових структурах (—)

Розглянемо найбільш розповсюджені методи розрахунку дифракції рентгєнівських хвиль на одношарових та багат шарових кристалічних структурах за допомогою динамічної теорії.

1.2.1 Розрахунок напрямків векторів дифракції

1.2.1.1 – Параметр відхилення від Брегівського положення

1.2.1.2 – Точний розрахунок

1.2.2 Рекурентні співвідношення (Пінскер) для одношаровки ?–

1.2.3 Метод матриць Абеле –

Взаємодія електромагнітних хвиль з речовиною може бути описана за допомогою рівнянь Максвелла. Зазвичай спочатку записується і розв'язується рівняння розповсюдження в речовині, а потім застосовуються граничні умови на межах структури. Такий метод досить зручний для опису дифракції електромагнітних хвиль в шаруватих структурах — структурах в яких параметри сталі на кожній площині, що перпендикулярна фіксованому напрямку [?].

Щоб перейти від векторних рівнянь Максвелла зазвичай розглядають лінійно поляризовані хвилі ТЕ (електричний вектор перпендикулярен площині падіння) або ТМ (магнітний вектор перпендикулярен площині падіння). Всі інші випадки можуть бути отримані лінійною комбінацією цих двох випадків [?].

Оскільки граничні умови між шарами являють собою систему лінійних рівнянь, їх досить зручно записувати у матричному вигляді. Саме цей принцип покладено в основу методу матриць Абеле [?]. Цей метод широко застосовують для аналізу оптичних явищ, а також саме він лежить в основі більшості методів моделювання взаємодії Х-променів з шаруватим середовищем.

1.2.4 Одновимірні рівняння Такагі –

З усіх описаних нижче алгоритмів метод рівнянь Такагі займає окрему позицію — ці рівняння виведено з рівнянь Максвелла при допущенні повільної зміни амплітуди хвилі та вилученні з розгляду ковзної геометрії. Рівняння Такагі для випадку двох сильних хвиль являють систему з двох диференціальних рівнянь першого ступеню. При розгляді структур, властивості яких змінюються лише по

одній координаті (наприклад надгратки), ця система може бути зведена до одного диференційного рівняння першого ступеню [61]:

$$\frac{dX}{dz} = iG(AX^2 + 2BX + E), \quad (1.1)$$

де $X = \frac{D_h}{D_0}$ – коефіцієнт дифракції, A , B , E , G – константи для даного кута падіння, які залежать від матеріалу, z – координата, по якій змінюються параметри структури. Рівняння (1.1) може бути розв’язано аналітично [61, 10]. В цьому підході не розглядаються окремо граничні умови на межі між шарами, а просто розв’язуються рівняння в залежності від глибини. Тобто в межах одного шару структура не змінюється, тому можна розрахувати дифракцію тільки на межі шару.

Використовують цей метод наступним чином: розраховують дифракцію від напівнескінченної підкладинки, а потім по рекурентній формулі розраховують дифракцію послідовно в кожному шарі аж до поверхні.

Перевага цього методу – його швидкість, оскільки все розраховується аналітично і замість знаходження хвильових векторів вводять кутове відхилення $\Delta\theta$ (див. розділ 1.2.1.1). Недоліки методу наступні: неможливість застосування для ковзаючої геометрії, відсутність врахування дзеркально відбитого променя, некоректне введення поляризаційного множника для π поляризації, застосовність лише поблизу точного Бреґівського кута,

1.2.5 Алгоритм матриці проходження (ТМА) –

Метод матриць Абеле першим для Х-променів застосував Паррат [?], потім був вдосконалений декількома авторами. Зупинимось на інтерпретації цього методу Степановим [17].

1.2.6 Рекурентні співвідношення (Бартелс) для дифрактометрії та рефлектометрії –

1.2.7 Алгоритм рекурсивних матриць (РМА)–

1.2.8 Багатохвильовий ТМА (Степанов) –

а потім для багатохвильової дифракції [64]

1.2.9 Розрахунок некомпланарної багатохвильової дифракції в одношаровій структурі (Стецько, Чен)

Найкращий на сьогоднішній день підхід для розв'язку задачі динамічної дифракції рентгенівських хвиль в кристалі запропонували в 1997 році Стецько і Чен [14]. Цей метод базується на розгляді векторних рівнянь розповсюдження (2.9) на їх проекції на декартові вісі координат. Таким чином задача розв'язується для багатопроменевої дифракції з мінімальною кількістю допущень.

Цей метод дозволяє розрахувати дифракцію в паралельній платівці невеликої товщини. Насправді в статті вказано шлях для застосування цього метода для товстих платівок, але цей метод, нажаль, хибний.

Саме цей метод було покладено в основу розробленого оригінального метода, який наведено у розділі 4.2. Тому більш детальний опис цього метода буде дано в відповідному розділі.

1.2.10 Розрахунок некомпланарної багатохвильової дифракції в багат шаровій структурі (Суворов)

Найкращий метод для розв'язку задачі багатопроменевої дифракції рентгенівських хвиль в багат шаровій структурі було наведено Суворовим та іншими [?] в 2004-му році. Цей метод виправляє недоліки метода Стецько [14] і дозволяє розраховувати шаруваті структури з довільною товщиною шарів.

До недоліків цього методу можна віднести його непридатність для розв'язку задачі дифракції в частково релаксованій структурі, або в структурі, деякі шари

якої мають локальну розорієнтацію вектора оберненої ґратки.

Нажаль в Україні на сьогоднішній день існує багато проблем пов'язаних з недостатнім фінансуванням науки. Одна з найболючіших - це відсутність нових наукових журналів. Саме тому наведений в розділі 4.2 метод було розроблено в 2005 році не маючи інформації про вже розроблений метод Суворова. Однак слід зазначити відмінності цих двох методів: для ліквідації проблеми товстих шарів Суворов використав деякі оригінальні математичні прийоми, які дозволяли не розбивати матрицю на 4 більш маленьких [30, 31, 16]. Недоліком такого підходу є його менша швидкість. Друга відмінність запропонованого в розділі 4.2 методу - його придатність для розрахунку як релаксованих структур, так і частково розарієнтованих. Крім зазначених відмінностей Суворов не вказав дуже багато застосувань і відмінностей такого підходу, які можливо використовувати для отримання додаткової інформації про структуру.

РОЗДІЛ 2

ВИВЕДЕННЯ ГОЛОВНИХ ФОРМУЛ ДИНАМІЧНОЇ ТЕОРІЇ ДИФРАКЦІЇ

Оскільки в більшості книжок та підручників з рентгено-структурного аналізу рівняння розповсюдження записують в спрощеному вигляді без доведення та описання припущень, що були прийняті при виводі цих рівнянь, в цьому розділі всі рівняння будуть виведені з рівнянь Максвелла з детальним описом всіх спрощень і припущень.

2.1 Рівняння розповсюдження

Рівняння Максвелла для середовища з діелектричною проникністю ϵ та магнітною проникністю μ у непровідному середовищі без вільних зарядів¹ має вигляд:

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

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

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

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

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

Матеріальні рівняння:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E} \quad (2.5)$$

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

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

де $\epsilon_0 = 8.85418782 \cdot 10^{-12}$ Ф/м, $\mu_0 = 1.256637061 \cdot 10^{-6}$ Гн/м. Діелектрична сприйнятливість пов'язана з поляризуємністю χ : $\epsilon = 1 + \chi$.

Розв'язок рівнянь Максвелла будемо шукати у вигляді:

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

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

Якщо взяти rot від рівняння (2.2) та підставити туди (2.1) з врахуванням (2.5) та (2.6) отримаємо рівняння розповсюдження:

$$\text{rot rot } \mathbf{E} - 4\pi^2 K^2 (1 + \chi) \mathbf{E} = 0, \quad (2.8)$$

тут враховані ті факти, що: швидкість світла $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$ та $\nu = K \cdot c$, де $K = 1/\lambda$ - довжина хвильового вектора в вакуумі, λ - довжина хвилі. Крім того, вважається, що $\mu = 1$, що правомірно для рентгенівських хвиль [1].

Скориставшись співвідношенням:

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

запишемо рівняння розповсюдження у вигляді:

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

Треба відмітити другий доданок в (2.9) - в більшості книжок їм просто нехтують. Це пояснюється тим фактом, що величина поляризуємості χ досить мала (порядку 10^{-5}), і тому напруженість $\mathbf{E}$ та індукція $\mathbf{D}$ електричного поля відрізняються слабо. Враховуючи це, рівняння (2.3) часто заміняють таким: $\text{div } \mathbf{E} = 0$ і другий доданок просто знакає. Однак таке припущення стає хибним в випадках малих кутів дифракції [14]. Тому в розділі 4.2 буде продемонстровано розв'язок без цього припущення.

Координатна частина (2.7) плоскої хвилі в середовищі з показником заломлення $n = \sqrt{\epsilon \mu} \approx \sqrt{1 + \chi}$ буде мати вигляд:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.10)$$

де $k = nK$ - хвильовий вектор в середовищі.

В результаті підстановки (2.10) в рівняння розповсюдження (2.9) отримаємо:

$$\frac{k^2}{K^2} \mathbf{E} - \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{k}}{K^2} - (1 + \chi) \mathbf{E} = 0. \quad (2.11)$$

Враховуючи те, що кристал - це періодичне середовище, будемо розглядати хвилю як суму Блохівських, які відповідають точкам оберненого простору, що беруть участь в дифракції:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_h \mathbf{E}_h \exp(2\pi i \mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}) \quad (2.12)$$

а також запишемо поляризованість у вигляді її Фур'є розкладу (розкласти будемо по векторам оберненої ґратки $\mathbf{h}$, які ведуть до тих самих точок оберненого простору):

$$\chi = \sum_h \chi_h \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.13)$$

В результаті підстановки (2.12) та (2.13) в рівняння розповсюдження (2.11) отримаємо систему рівнянь виду:

$$\frac{(k_h^2 - K^2)}{K^2} \mathbf{E}_h = \frac{(\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{E}_h) \mathbf{k}_h}{K^2} + \sum_{g \neq h} \chi_{h-g} \mathbf{E}_g. \quad (2.14)$$

Є два шляхи звести цю систему рівнянь до скалярної: розкласти по координатам (тоді кожне векторне рівняння трансформується в 3 скалярних) або ввести поляризацію хвилі і розглядати окремо 2 поляризації (тоді кожне рівняння розкладається на 2). Перший шлях більш точний і у випадку багатохвильової дифракції тільки він дозволяє правильно розв'язати задачу, однак другий шлях більш простий і він застосовується в більшості алгоритмів розрахунку дифракції.

Рівність нулю детермінанта системи (2.14) являє дисперсійне рівняння, тобто рівняння яке пов'язує хвильові вектори в системі з показником заломлення:

$$\det \Delta_E = 0 \quad (2.15)$$

Найбільш розповсюджений випадок дифракції рентгенівських хвиль – коли задіяно дві сильні хвилі, за звичай їх позначають індексами 0 та h , (звісно однохвильовий випадок відбувається більш часто, однак практичного застосування

він практично не має):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{E}_h \exp(2\pi i \mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}), \quad (2.16)$$

При припущенні колінеарності векторів $\mathbf{E}$ та $\mathbf{D}$ а також $\chi \approx \chi_0$ (досить обгрунтоване припущення, оскільки χ_0 на 2 порядки більше χ_h) рівняння розповсюдження (2.14) в двохвильовому випадку приймає вигляд:

$$\begin{cases} \frac{(k_0^2 - (1 + \chi_0) * K^2)}{K^2} \mathbf{E}_0 = C_{\chi_{\bar{h}}} \mathbf{E}_h \\ \frac{(k_h^2 - (1 + \chi_0) * K^2)}{K^2} \mathbf{E}_h = C_{\chi_h} \mathbf{E}_0 \end{cases}, \quad (2.17)$$

а дисперсійне рівняння (2.15) записується так:

$$(k_0^2 - (1 + \chi_0)K^2)(k_h^2 - (1 + \chi_0)K^2) = C^2 K^4 \chi_{\bar{h}} \chi_h \quad (2.18)$$

де $\bar{h}$ відповідає зворотній хвилі, а C - поляризаційний множник, такий, що для σ -поляризації $C = 1$ і для π -поляризації $C = \cos(2\theta_B)$, де θ_B кут Вульфа-Брега.

Рівняння розповсюдження (2.9) може бути записано і для індукції електричного поля $\mathbf{D}$ (див. розділ 3.1), але в цьому випадку необхідно буде брати похідні від виразу $\mathbf{D}/\epsilon$, що досить сильно ускладнює розв'язок. Тому при запису рівняння розповсюдження в термінах $\mathbf{D}$ завжди використовують припущення про малу величину поляризуємості. Однак насправді немає різниці в яких величинах розв'язувати задачу, тому що обидва підходи рівноцінні.

Розв'язавши рівняння (2.14) можна знайти хвильові вектори та, з точністю до деякої сталої, хвильові поля в середовищі. Однак для того, щоб остаточно визначити величини полів необхідно накласти на розв'язок граничні умови.

2.2 Граничні умови

На границі розділу двох середовищ повинні виконуватись наступні умови: неперервність тангенціальних (паралельних границі розділу) складових електричного та магнітного полів та нормальних (перпендикулярних границі розділу)

складових їх індукцій:

$$\mathbf{E}_t = \text{const} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{D}_n = \text{const} \quad (2.20)$$

$$\mathbf{H}_t = \text{const} \quad (2.21)$$

$$\mathbf{B}_n = \text{const} \quad (2.22)$$

Якщо врахувати наступні рівності:

$$\mathbf{D} = (1 + \chi)\mathbf{E} \quad (2.23)$$

$$\mathbf{H} = [\mathbf{k} \times \mathbf{E}] \quad (2.24)$$

а також (2.12), (2.13) та припущення $\mu = 1$, можна записати граничні умови в вигляді:

$$\sum_h (\mathbf{E}_h)_t = \text{const} \quad (2.25)$$

$$\sum_h \left((\mathbf{E}_h)_n + \sum_{h'} \chi_{h-h'} (\mathbf{E}_{h'})_n \right) = \text{const} \quad (2.26)$$

$$\sum_h [\mathbf{k}_h \times \mathbf{E}_h] = \text{const} \quad (2.27)$$

У випадку псевдоморфної структури рівність нормальних компонент в рівнянні (2.27) (тобто рівняння (2.22)) являє собою лінійну комбінацію рівнянь (2.25), тому що латеральні компоненти (паралельні границі поділу) хвильових векторів в різних шарах однакові.

В більшості книжок нехтують різницею між напруженістю та індукцією полів і записують ці умови у вигляді двох скалярних рівнянь:

$$E = \text{const}$$

$$k_n E = \text{const}$$

Або так само для індукції електричного поля.

Однак такий запис є вірним лише з точністю до величини поляризуємості, типове значення якої порядку 10^{-5} .

Підсумуємо всі зроблені при виводі формул припущення:

- розглядаються плоскі монохроматичні хвилі
- середовище кристалічне і в межах шару однорідне
- відсутні заряди та токи
- $\mu = 1$
- і може щось ще?

РОЗДІЛ 3

РОЗВ'ЯЗОК ДИСПЕРСІЙНОГО РІВНЯННЯ

Розв'язок дисперсійного рівняння (2.15) дозволяє знайти хвильові вектори в речовині, що розглядається. В огляді літератури ми розглядали як зазвичай розв'язується дисперсійне рівняння, тепер розглянемо деякі методи точного розв'язку цього рівняння.

Продемонструємо спочатку варіанти розв'язку найбільш важливого випадку двох сильних хвиль, а потім випадок трьох та чотирьох хвиль. Розв'язок у випадку більшої кількості хвиль (майже до нескінченності) буде дано в розділі 4.

3.1 Чисельний та приблизний аналітичний розв'язок в дво-променевому випадку

Дисперсійна поверхня є одним з найбільш зручних і наочних інструментів для вивчення дифракції рентгенівських променів. Для успішного моделювання дифракційних процесів нам потрібно знати хвильові вектори всіх наявних в системі хвиль, для чого необхідно якомога точніше розв'язати дисперсійне рівняння (2.15).

Раніше цією проблемою займалися багато авторів [68, 48, 1, 3], проте в більшості робіт це були або приблизні геометричні моделі, або чисельні моделі часткових випадків. Дуже часто уявлення про дисперсійну поверхню для геометрії Лауе переносилися на геометрію Брега (картинку просто повертали на 90 градусів - рис. 3.1). Найповніший аналіз дисперсійного рівняння для випадку Брега був даний в роботах Т. Fukamachi [49, 50], проте графіки були приведені тільки для симетричної дифракції, зі спрощеннями та з аналізом деяких умовних параметрів, які не мають фізичного змісту.

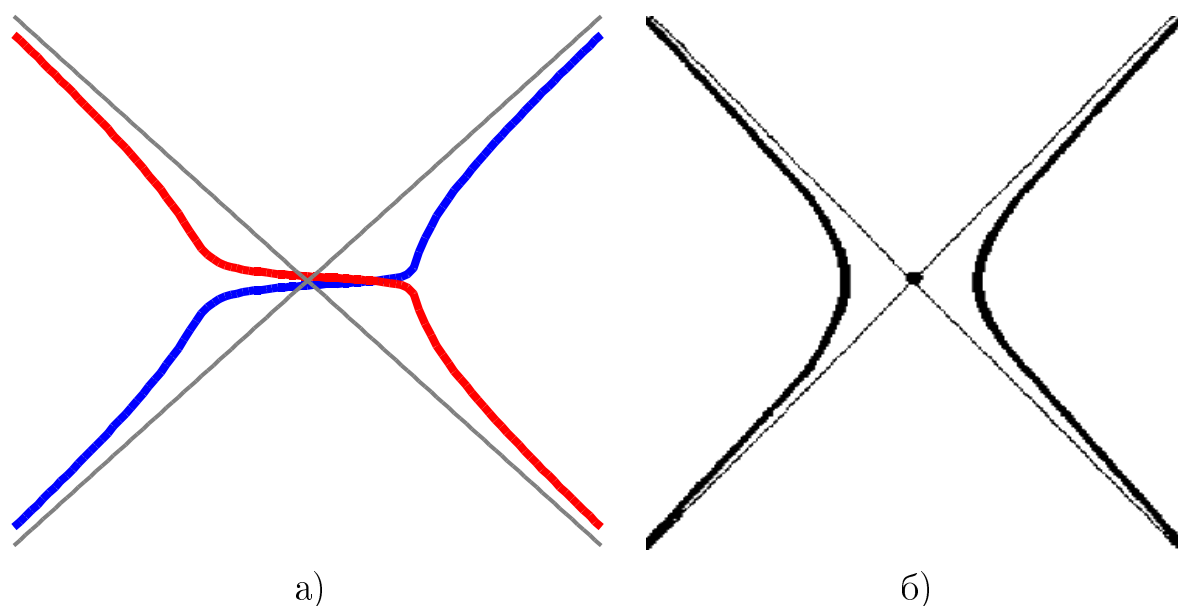


Рис. 3.1. Дисперсійна крива для симетричної геометрії Брега: а) точно розрахована, б) типова крива, що наводиться в книгах (цей малюнок з книги [8])

Тому нами було зроблено чисельний розв'язок дисперсійного рівняння для двохвильового випадку в геометрії як Брега, так і Лауе декількома різними методами, а також аналітичний розв'язок наближеного рівняння поблизу кута Вульфа-Брега (для двох коренів). Крім того, був проаналізований приблизний підхід для пошуку хвильових векторів, що застосовується в більшості програм для розрахунку кривих гойдання, а так само проведено порівняння даного підходу з чисельним розв'язком.

Цінність запропонованого точного розв'язку дисперсійного рівняння проявляється найчіткіше при аналізі експериментальних кривих гойдання далеко від Брегівського положення. Дане завдання стає все більш актуальним у зв'язку зі зменшенням характерних розмірів досліджуваних об'єктів, таких як квантові точки і квантові дроти, надтонкі шари (товщиною в декілька постійних ґратки) і т.п. Ще один плюс чисельного розв'язку – точніший аналіз структур, що складаються з матеріалів, що значно відрізняються параметрами ґраток. Крім того, даний підхід повинен значно збільшити точність аналізу експериментальних кривих, одержаних в сильно асиметричній геометрії, зокрема, при ковзаючій дифракції (GID).

Чисельний розв'язок дисперсійного рівняння 4-го ступеня (геометрія Брега).

Перейдемо до безрозмірних хвильових векторів: $k_0 \equiv \frac{k_0}{K}$, $k_h \equiv \frac{k_h}{K}$) а також векторів оберненої ґратки $h \equiv \frac{h}{K}$. Тоді дисперсійне рівняння в двоххвильовому випадку (2.18) приймає вигляд:

$$(k_0^2 - n^2) \cdot (k_h^2 - n^2) = C^2 \cdot \chi_h \cdot \chi_{\bar{h}} \quad (3.1)$$

Відмітимо, що в кристалі більш правильно було б оперувати векторами індукції електричного поля, для яких дисперсійне рівняння з приведеними хвильовими векторами матиме вигляд [1]:

$$\left(\frac{k_0^2 - 1}{k_0^2} - \chi_0 \right) \cdot \left(\frac{k_h^2 - 1}{k_h^2} - \chi_0 \right) = C^2 \cdot \chi_h \cdot \chi_{\bar{h}} \quad (3.2)$$

Проте, можна показати, що ця формула зводиться до (3.1) при заміні

$$n \rightarrow \sqrt{\frac{1 - \chi_0}{(1 - \chi_0)^2 - C^2 \cdot \chi_h \cdot \chi_{\bar{h}}}} \approx \sqrt{1 + \chi_0} \quad (3.3)$$

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

Перейдемо до декартових координат, для чого введемо наступні величини (рис. 3.2):

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

де α - кут між падаючим з вакууму на поверхню променем K_0 і поверхнею ϕ - кут між нормаллю і вектором $\vec{h}$, $\vec{h}$ – вектор оберненої ґратки.

Тоді квадрати модулів хвильових векторів можуть бути виражені наступним чином:

$$k_0^2 = x^2 + y^2 \quad (3.4)$$

$$k_h^2 = (z - y)^2 + d^2 = y^2 - 2 \cdot z \cdot y + z^2 + d^2$$

Підставивши дані вирази в дисперсійне рівняння, одержимо:

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

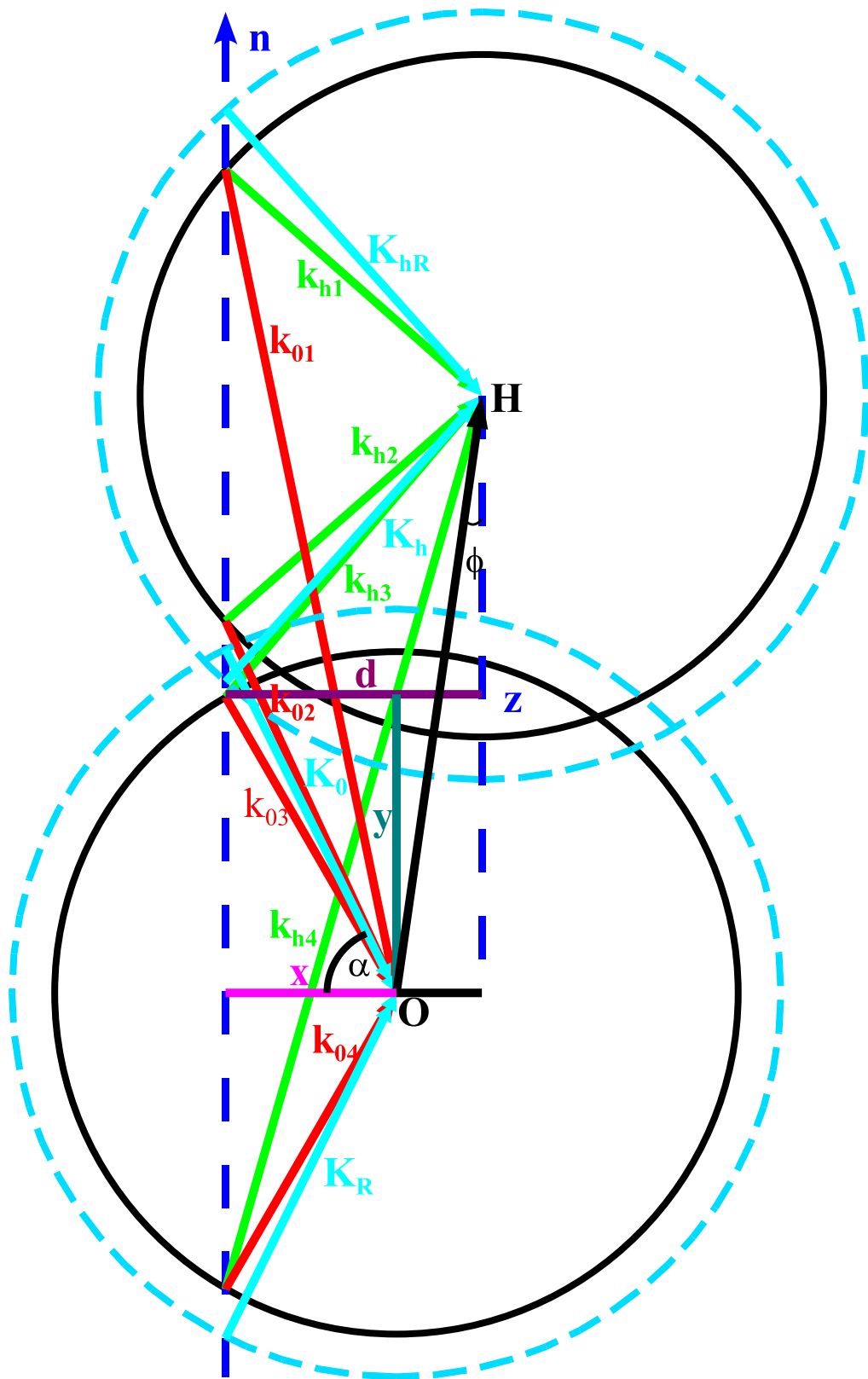


Рис. 3.2. Проекція дисперсійної поверхні на площину дифракції в зворотному просторі (геометрія Брега).

Або, після перетворення:

$$y^4 - 2 \cdot z \cdot y^3 + (z^2 + d^2 + x^2 - 2 \cdot n^2) \cdot y^2 - 2 \cdot z \cdot (x^2 - n^2) \cdot y + (x^2 - n^2) \cdot (z^2 + d^2 - n^2) - C^2 \cdot \chi_h \cdot \chi_{\bar{h}} = 0 \quad (3.5)$$

Дане рівняння четвертого ступеня легко розв'язати за допомогою методу Лагера [51], оскільки даний метод дозволяє знайти комплексні корені. Проте, необхідно враховувати, що після застосування чисельного методу, корені необхідно відсортувати відповідно до їх фізичного сенсу (в даному випадку - по величині дійсної і уявної частин).

Розв'язавши рівняння (3.5) і підставивши результати в (3.4), ми знайдемо k_0^i і k_h^i , де $i = 1..4$. Підставивши знайдені величини хвильових векторів в (2.17) ми одержимо відношення амплітуд дифрагрованої і падаючої хвиль:

$$c_i = \frac{E_h^i}{E_0^i} = \frac{k_0^2 - (1 + \chi_0) \cdot K^2}{C \cdot K^2 \cdot \chi_{\bar{h}}} = \frac{C \cdot K^2 \cdot \chi_h}{k_h^2 - (1 + \chi_0) \cdot K^2} \quad (3.6)$$

Для напівнескінченного кристалу один з цих коефіцієнтів і буде представляти дифракційну здатність кристалу, рівну, у випадку Брега:

$$R = \frac{\sqrt{1 - d^2}}{\sqrt{1 - x^2}} \cdot c_i^2 \quad (3.7)$$

Чисельний розв'язок дисперсійного рівняння 4-го ступеня в геометрії Лауе.

У геометрії проходження дисперсійна поверхня виглядатиме наступним чином:

У даній геометрії, представлений на рис. 3.3, величини дорівнюють:

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

Тоді квадрати модулів хвильових векторів можуть бути виражені наступним чином:

$$k_0^2 = x^2 + y^2, \\ k_h^2 = (z - x)^2 + (y + d)^2 = y^2 + 2 \cdot d \cdot y + (x^2 - 2 \cdot z \cdot x + z^2 + d^2).$$

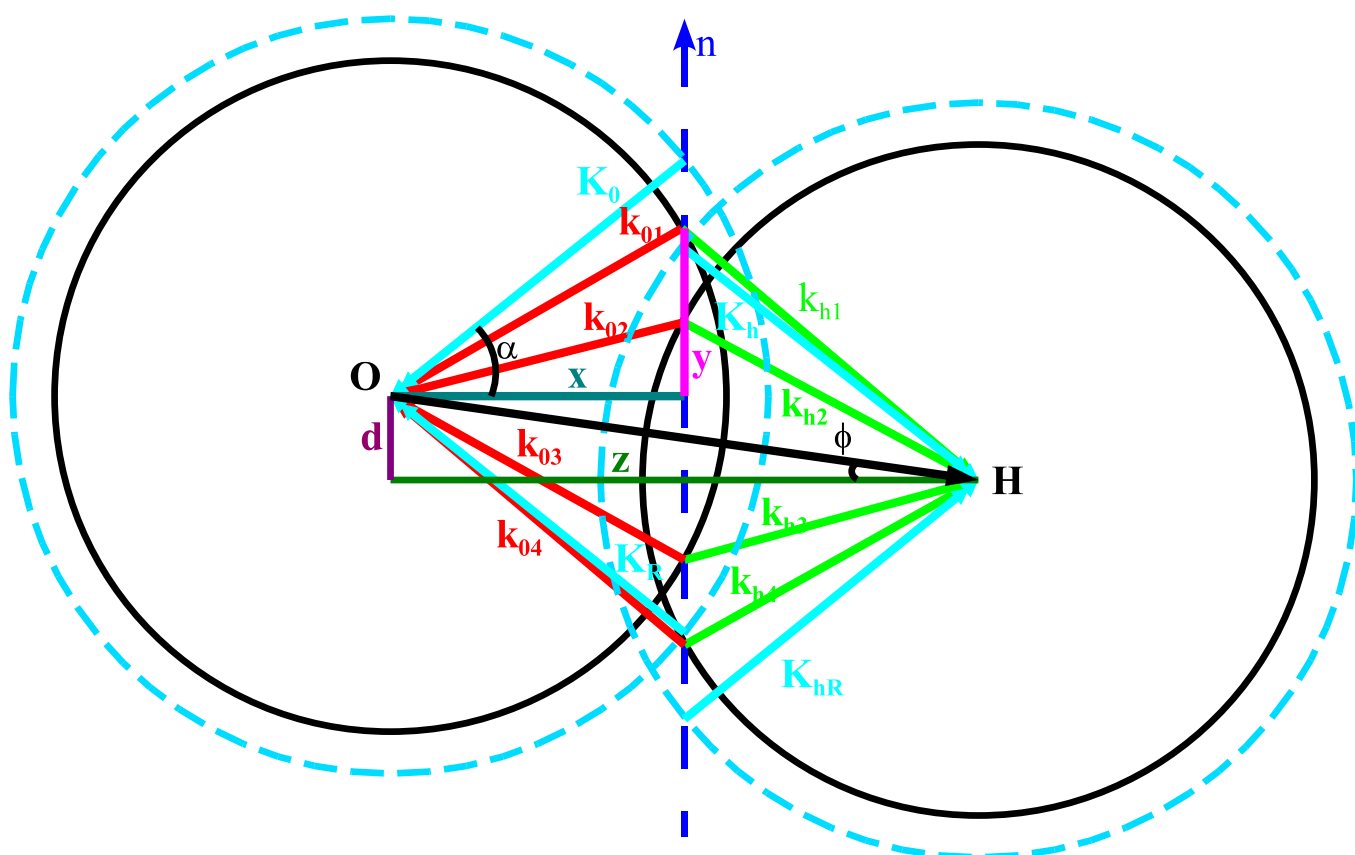


Рис. 3.3. Проекція дисперсійної поверхні на площину дифракції в оберненому просторі (геометрія Лаве).

Підставивши ці вирази в дисперсійне рівняння (3.1), після перетворення одержимо:

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

Аналітичний розв'язок спрощеного дисперсійного рівняння 2-го ступеня поблизу кута Вульфа-Брега в геометрії Брега.

Якщо в дисперсійному рівнянні (3.1) прийняти, що $k_0 \approx k_h \approx n$, то одержимо спрощене дисперсійне рівняння другого ступеня:

$$\xi_0 \cdot \xi_h = \frac{1}{4} \cdot C^2 \cdot \chi_h \cdot \chi_{\bar{h}} \quad (3.8)$$

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

У декартових координатах ξ_0 і ξ_b можна виразити наступним чином (рис. 3.4):

$$\xi_0 = x \cdot \sin(\theta_2) \pm y \cdot \cos(\theta_2), \quad (3.9)$$

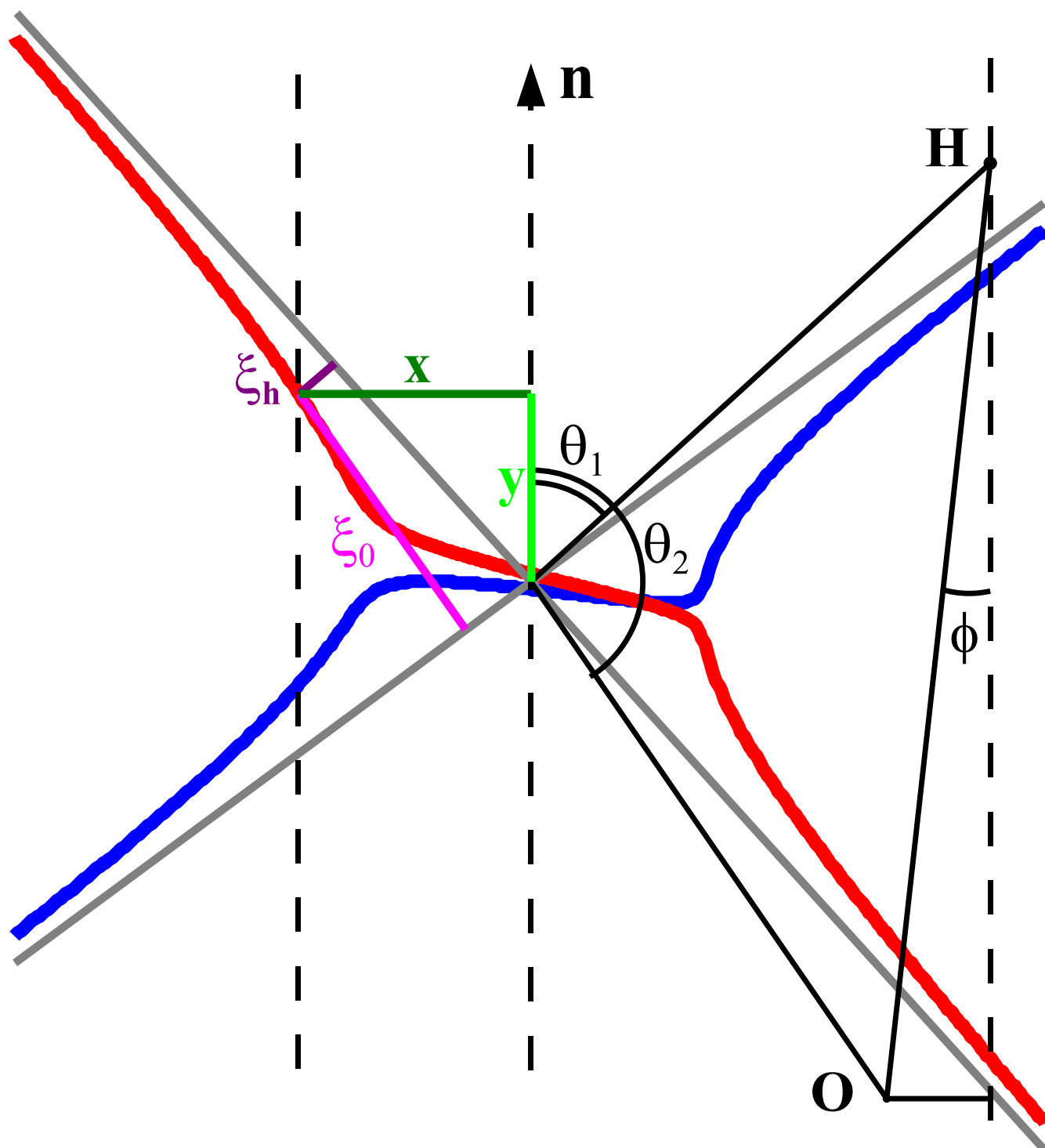


Рис. 3.4. Проекція дисперсійної поверхні близько точного брегівського положення в геометрії Брега ($\Delta\alpha = 5$ сек.).

$$\xi_h = x \cdot \sin(\theta_1) \pm y \cdot \cos(\theta_1),$$

де кути θ_1 і θ_2 визначені таким чином [5]:

$$\theta_1 = \arctan \left| \frac{X_0 - h \cdot \sin(\varphi)}{z - Y_0} \right|,$$

$$\theta_2 = \pi - \arctan \left| \frac{X_0}{Y_0} \right|,$$

а X_0 і Y_0 є координатами точного Брегівського положення (точка Лорентца), тобто точки перетину двох кіл радіусами n з центрами в точках О і Н:

$$X_0 = -\sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cdot \cos(\varphi) + \frac{h \cdot \sin(\varphi)}{2},$$

$$Y_0 = \sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cdot \sin(\varphi) + \frac{z}{2}.$$

Підставивши (3.9) в (3.8) одержимо:

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

Звідки знайдемо координату у:

$$y = \frac{\pm x \sin(\theta_1 + \theta_2)}{2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_2)} \cdot \left(\mp \sqrt{x^2 \sin^2(\theta_1 + \theta_2) - \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) (4x^2 \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}})} \right) \quad (3.10)$$

Необхідно також враховувати сортування коренів по величині уявної частини.

Даний підхід дозволяє достатньо точно розв'язати дисперсійне рівняння поблизу точного положення Брега, проте далеко від точки Лорентца його не можна застосувати (оскільки тут кола апроксимуються прямими). Виграш в швидкості розрахунку виходить в 6-10 разів в порівнянні з чисельним розв'язком формули (3.6), що вельми непогано.

Аналітичний розв'язок спрощеного дисперсійного рівняння 2-го ступеня поблизу кута Вульфа-брега в геометрії Лауе.

У геометрії Лауе координати ξ_0 і ξ_h виражатимуться через декартові координати таким чином:

$$\xi_0 = y \cdot \sin(\theta_2) \pm x \cdot \cos(\theta_2), \quad (3.11)$$

$$\xi_h = y \cdot \sin(\theta_1) \pm x \cdot \cos(\theta_1),$$

але і самі координати x і y матимуть дещо інше значення (рис. 3.5):

Кути θ_1 і θ_2 будуть перевизначені X_0 і Y_0 таким чином:

$$\theta_1 = \arctan \left| \frac{Y_0 + h \cdot \sin(\varphi)}{z - X_0} \right|,$$

$$\theta_2 = \pi - \arctan \left| \frac{Y_0}{X_0} \right|$$

а координати X_0 и Y_0 :

$$X_0 = \sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cdot \sin(\varphi) + \frac{z}{2},$$

$$Y_0 = -\sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cdot \cos(\varphi) - \frac{h \cdot \sin(\varphi)}{2}.$$

Підставивши (3.11) в (3.8) одержимо:

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

Звідки знайдемо координату y :

$$y = \frac{\pm x \sin(\theta_1 + \theta_2)}{2 \sin(\theta_1) \sin(\theta_2)} \cdot \left(\mp \sqrt{x^2 \sin^2(\theta_1 + \theta_2) - \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) (4x^2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}})} \right) \quad (3.12)$$

Порівняння точної дисперсійної кривої з приблизною.

У літературі (наприклад [4]) є наступна часто використовувана приблизна формула для y , яка в симетричному випадку (при $\varphi = 0$ на рис.1) приймає вигляд:

$$y = \pm \sqrt{\beta^2 - 4 \cdot C^2 \cdot \chi_h \cdot \chi_{\bar{h}}}, \quad (3.13)$$

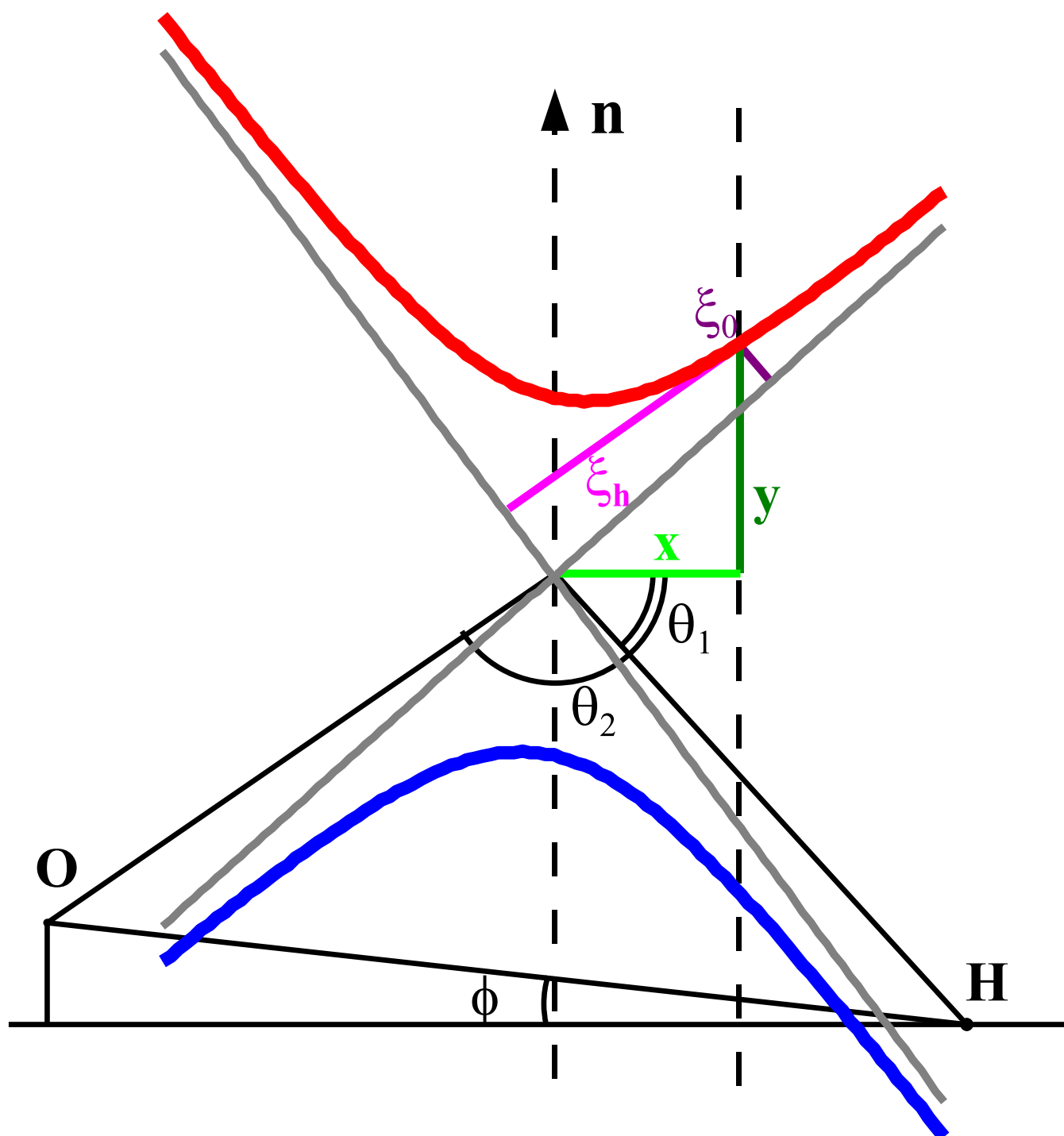


Рис. 3.5. Проекція дисперсійної поверхні близько точного брегівського положення в геометрії Лауе ($\Delta\alpha = 5$ сек.).

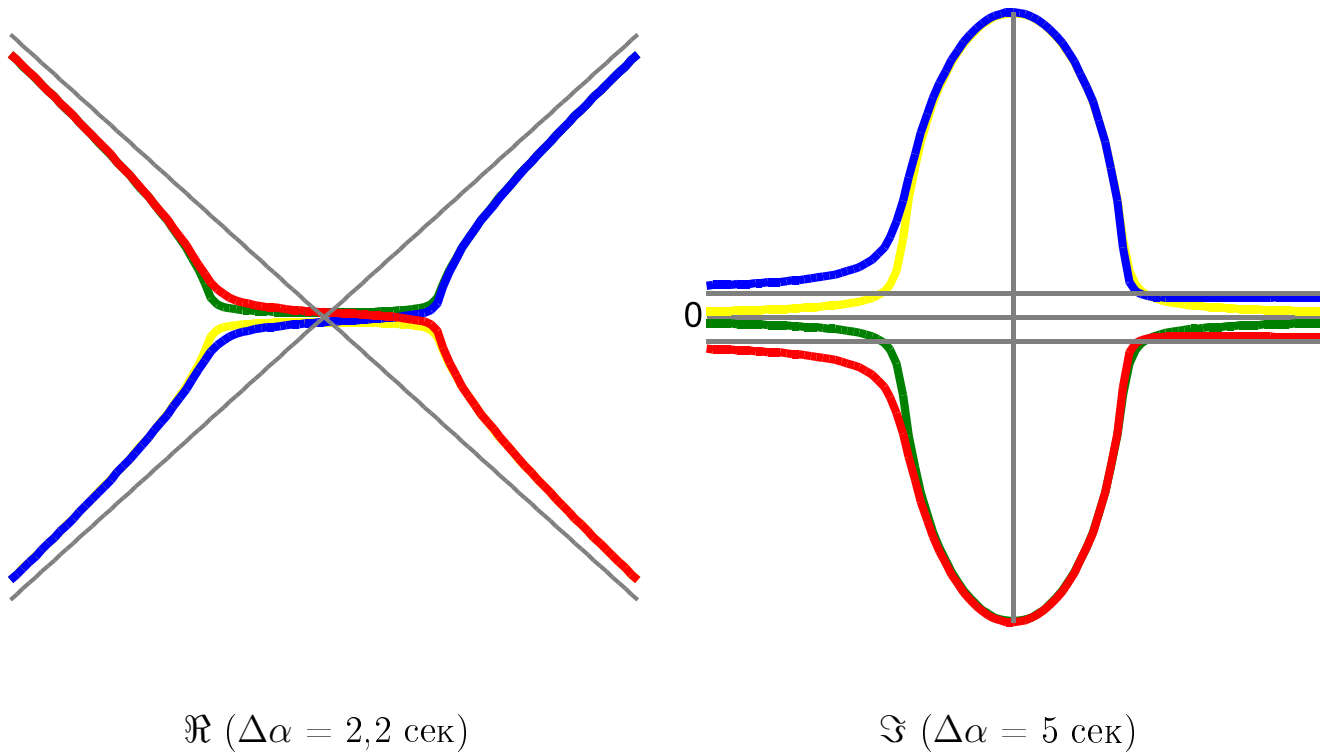


Рис. 3.6. Пунктирні криві — "точно" рішення дисперсійного рівняння по формулі (3.5); суцільні — "приблизне" по формулі (3.13).

де $\beta = 2 \cdot (\alpha - \theta_B) \cdot \sin(2 \cdot \theta_B)$, θ_B - кут Вульфа-брега.

Як видно з приведених графіків (рис. 3.6) приблизний розв'язок вельми непогано відображає поведінку дисперсійної поверхні поблизу кута Вульфа-брега. Проте, як видно з малюнка для дійсних частин хвильових векторів, напрям вектора Пойнтінга при проходженні через точне брегівське положення дуже сильно змінюється, що не відповідає дійсності. Крім того, з дисперсійної кривої для уявної частини хвильових векторів видно, що далеко від точного Брегівського положення, в приблизному методі, поглинання прагне до нуля, а отже виникає необхідність вносити додатково поглинання при розрахунку кривих гойдання. Ще один недолік спрощеного підходу — його непридатність далеко від Брегівського положення, оскільки тут кола дисперсійної кривої апроксимуються прямими (асимптоти на графіку для дійсної частини хвильових векторів).

У геометрії Лауе збіг чисельного і приблизного аналітичного методів значно краще (з точністю до товщини лінії дисперсійної кривої на графіку), а значить

застосування цього підходу, поблизу кута Вульфа-Брега більш виправдано.

Тут і далі $\Re$ означає дійсну частину, а $\Im$ — уявну. Всі малюнки проекції дисперсійної поверхні поблизу точки Лорентца приведені для діапазону кутів падаючої хвилі $\Delta\alpha = 5$ сек. (по 2.5 секунди ліворуч і праворуч від точного кута Вульфа-Брега) якщо не вказано інше.

Моделювання різних фізично важливих окремих випадків описаними вище підходами.

Окрім описаних вище методів розв'язку дисперсійних рівнянь були також реалізовані наступні:

1. запропонований в [8] метод, в якому вводиться позначення $K \cdot \delta \vec{n} = \vec{k}_0 - \vec{K}_0$ і одержане рівняння 4-го ступеня розв'язується чисельно;
2. чисельний розв'язок рівняння для $\vec{D}$ (формула (3.2));
3. аналітичні приблизні формули Fukamachi [6].

Проте, результати застосування першого методу повністю співпадали з розв'язком формули (3.5) — різниця тільки в геометричній інтерпретації (рівняння четвертого ступеня необхідно вирішувати відносно невідомої δ , а не y). Другий метод з точністю до обумовленої вище (формула (3.3)) заміни також зводиться до розв'язку рівняння (3.5). Що стосується третього методу, то результат Fukamachi слабо відрізнявся від розв'язку формули (3.10), оскільки при виведенні цього методу були відкинуті квадрати уявної частини хвильових векторів для того, щоб алгебраїчним чином перейти від векторних рівнянь до скалярних, на відміну від описаного геометричного підходу.

Порівняння чисельного розв'язку (3.5) і аналітичного (3.10) показує, що поблизу точки Лорентца графіки співпадають з точністю до товщини лінії (у діапазоні кутів падіння в межах одного градуса), проте на відстані декількох градусів від кута Вульфа-Брега приблизний аналітичний підхід (3.10) стає слабо застосовний.

Приведені в таблицях 3.1 і 3.2 графіки розраховані для кристала Si з орієнтацією площин (3,3,3) для π -поляризації Cu K α випромінювання в симетричній геометрії Брега. Корені рівнянь сортувалися з врахуванням вимоги безперервності дисперсійних кривих, що у випадку Брега приводило до фізичної доцільності формули (3.7) для відбиття від напівнескінченного кристала. У рядках таблиці представлені зверху вниз: дійсна і уявна частини хвильових векторів поблизу точки Лорентца і коефіцієнт відбиття від напівнескінченного кристала (формула (3.7)).

Як і слід було чекати, далеко від точного положення Брега як уявна, так і дійсна частини хвильових векторів прагнуть до їх значення в кристалі n (пунктирні прямі на графіках), як у разі однієї сильної хвилі.

У першому стовпці таблиці 3.1 представлена проекція дисперсійної поверхні на площину дифракції при описаних вище параметрах.

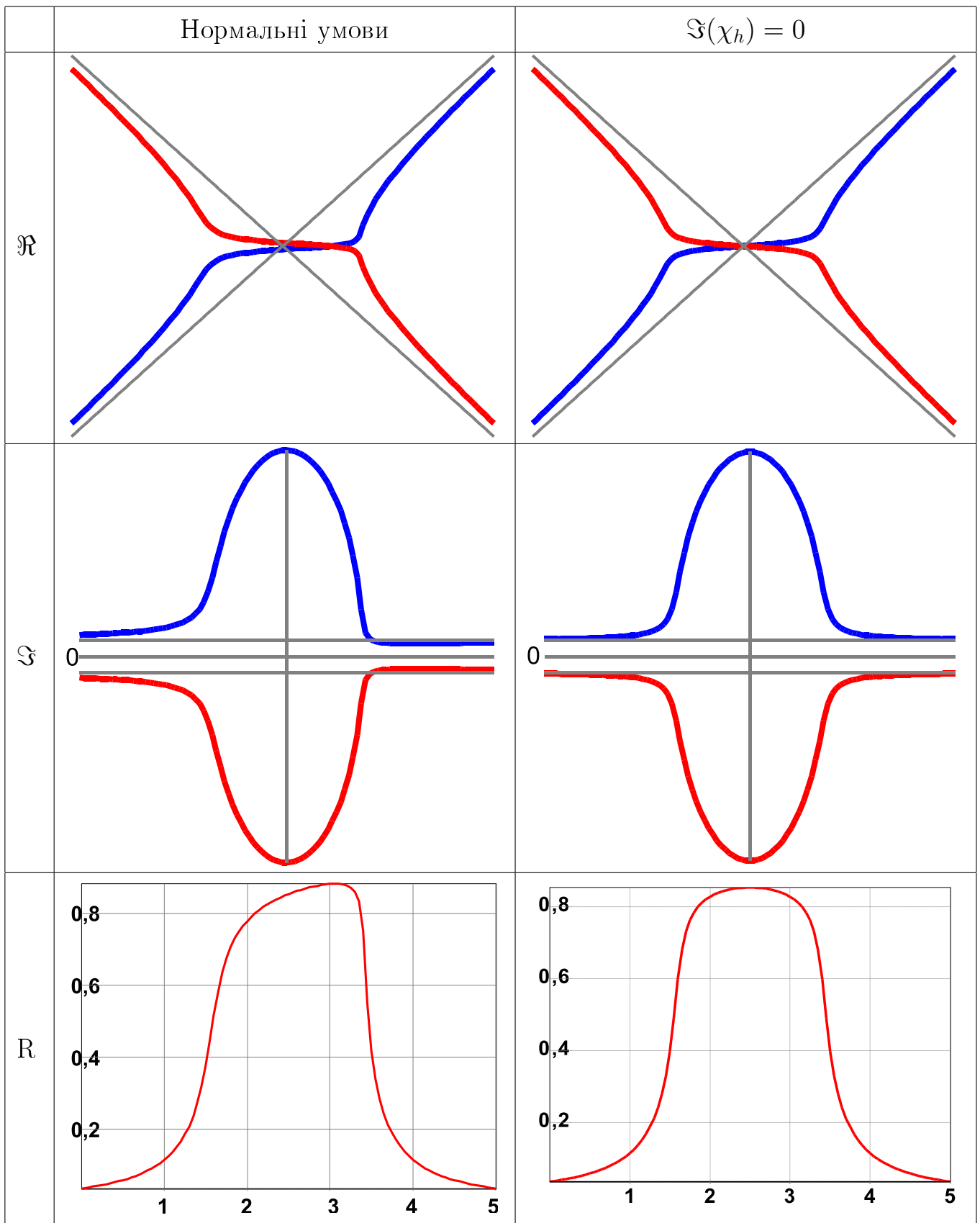
При рівності нулю уявної частини χ_h (другий стовпець таблиці 3.1) всі графіки стають строго симетричними, що говорить про те, що асиметрію вносить саме уявна частина χ_h .

Якщо ж рівна нулю дійсна частина χ_h (перший стовпець таблиці 3.2), тоді, як і слід було чекати, дифракція на кристалі дуже слабшає і пік відбиття стає дуже вузьким (останній графік в третьому стовпчику). Крім того, хід дійсної частини дисперсійних кривих в цьому випадку нагадує випадок Лауе (рис. 3.5).

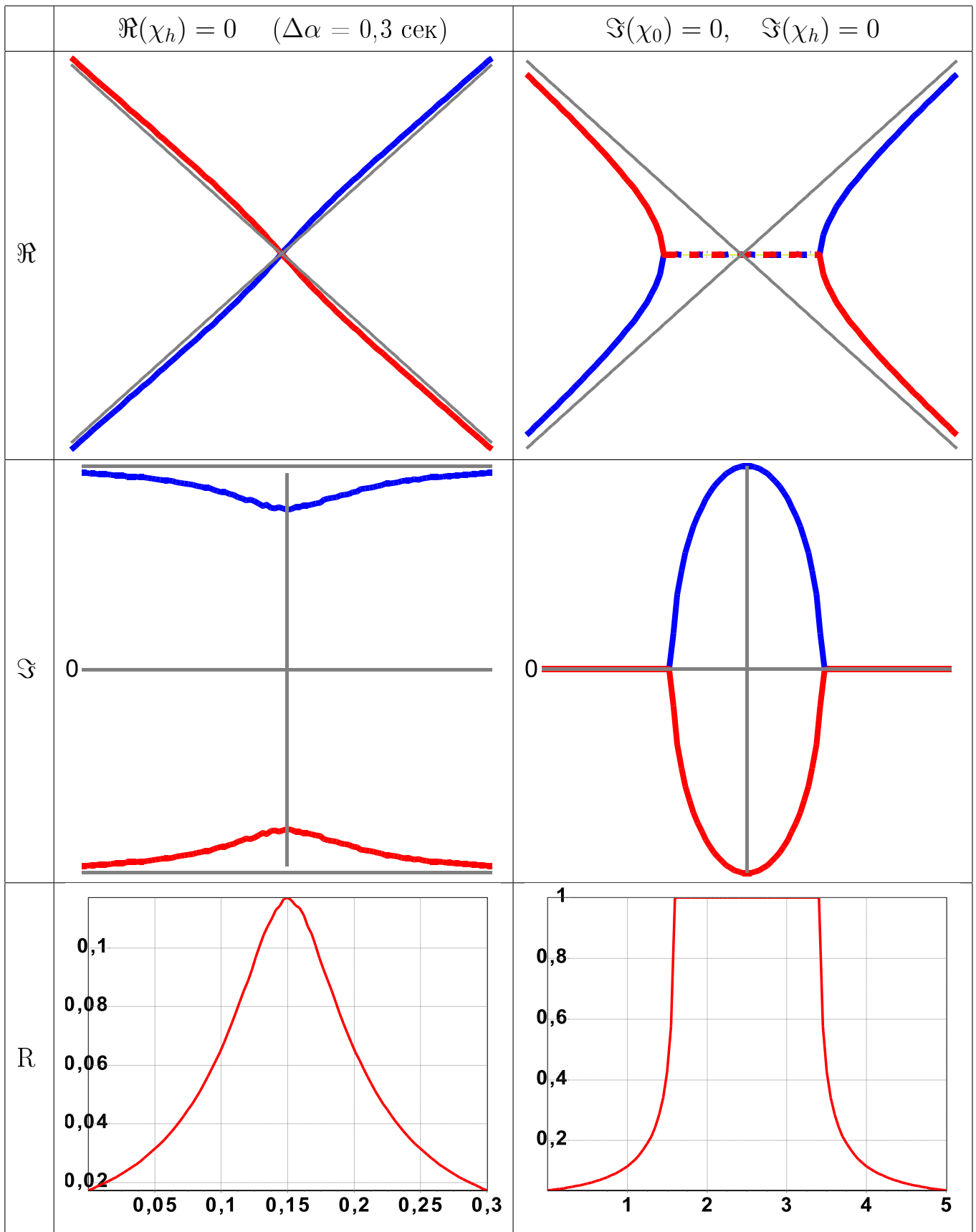
Найцікавіший крайній випадок – рівність нулю уявних частин як χ_0 , так і χ_h (другий стовпець таблиці 3.2). Саме цю картинку для уявної і дійсної частин хвильових векторів в кристалі найчастіше видають за дисперсійну криву. У цих умовах зникає як поглинання, так і асиметрія і з'являється область повного відбиття. Крім того, тільки в цьому випадку можна говорити про дисперсійну криву у випадку Брега як про дві гіперболи (і те, тільки у разі неправильного сортування коренів!) Так само з цих графіків видно, що тільки у разі чисто дійсного дисперсійного рівняння можна говорити про «діаметр» дисперсійної поверхні в геометрії Брега.

Порівняння результатів моделювання дифракції в геометрії Брега

Таблиця 3.1. Геометрія Брега



Таблиця 3.2. Геометрія Брега (продовження)



і Лауе.

За тих же умов, що і для геометрії Брега, були побудовані дисперсійні криві в геометрії Лауе. В цьому випадку для сортування коренів можна скористатися цілком фізичною вимогою відсутності стрибка на графіку уявної частини хвильових векторів. Тоді виходять графіки, приведені таблиці 3.3.

У першому рядку таблиці зображено хід дійсної і уявної частин хвильового вектора в симетричній геометрії Лауе. Як і слід було чекати проекція на площину дифракції дійсної частини являє собою дві гіперболи, асимптотичні до дійсної частини показника заломлення n . Уявні частини обох хвильових векторів позитивні, що говорить про те, що поглинання позитивно для обох сильних хвильових полів, які виникають в кристалі, правда для одного хвильового поля воно більше, а для іншого менше, як і було описано в літературі [1] (так звані сильно- та слабопоглинаючі гілки).

У разі асиметричної геометрії Лауе (другий рядок таблиці 3.3) ситуація сильно змінюється: поглинання на одній гілці при деякому значенні кута падіння стає більше поглинання на другій гілці. Це досить цікавий результат, слабо описаний в літературі (однак треба відзначити що подібний графік для уявної частини хвильового вектора в цьому випадку приведений [3], але на цьому факті не акцентовано увагу).

У разі, коли дійсна частина χ_h обертається в нуль, вигляд дисперсійної кривої (третій рядок таблиці 3.3) стає практично ідентичним її вигляду в геометрії Брега (таблиця 3.1), проте і в цьому випадку поглинання для обох гілок залишається позитивним.

Вплив різних методів знаходження хвильового вектора на вигляд КДВ.

На рисунках 3.7 і 3.8 приведені криві дифракційного відбиття від надграток, змодельовані рекурсивним методом Бартелза і ін. [9] для ідеальних недеформованих шарів. Даний метод достатньо точний для так званої «звичайної дифракції» плоскої хвилі на кристалі. При виведенні даного методу не передбачається близькість до точного положення Брега [4], а тільки умова слабкості ще двох хвильових

Таблиця 3.3. Геометрія Лауе

	$\Re$	$\Im$
Лауе $\varphi = 0$ $\Delta\alpha =$ 10 сек.		
Лауе $\varphi = 11,5^\circ$ $\Delta\alpha =$ 10 сек.		
Лауе $\Re(\chi_h) = 0$ $\varphi = 5,7^\circ$ $\Delta\alpha =$ 0,3 сек.		

полів, що існують в кристалі (це несправедливо тільки в деяких екзотичних випадках – наприклад в ковзаючій геометрії). Звичайно, якраз в цих «екзотичних випадках» перевага чисельного методу знаходження хвильових векторів повинна проявитися особливо явно, однак в рамках цього розділу розглядається лише так звана «звичайна дифракція».

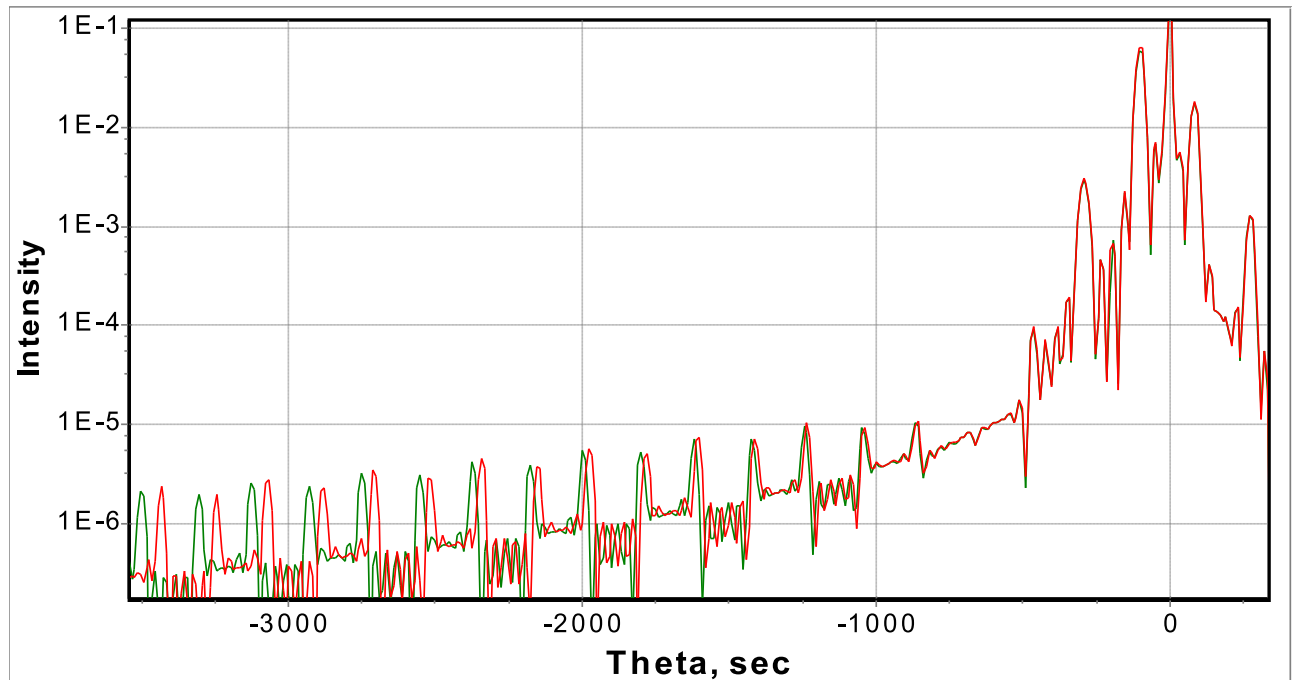


Рис. 3.7. Відбиття 004 від надґратки AlAs/GaAs на GaAs (5 пар шарів по $5 \cdot 10^{-8}$ м кожен).

У приведених на малюнках КДВ суцільна крива відповідає чисельно знайденим хвильовим векторам, а пунктирна крива – знайденим по приблизній аналітичній формулі (3.13).

Для надґраток які складаються з матеріалів з близькими параметрами ґратки, обидва розглянуті методи дають достатньо схожі КДВ поблизу кута Вульффа-брега, проте, як і слід було чекати, на кутових віддалях більше градуса від піку підкладки починаються помітні розбіжності (3.7).

Зовсім інакше відбувається для надґраток з дуже різними постійними ґратки. Тут КДВ відрізняються дуже сильно навіть поблизу піку підкладки. Даний факт пояснюється тим, що рентгенівські промені що падають на кристал під кутами близькими до Брегівських для підкладки, можуть бути вельми далекі від кута

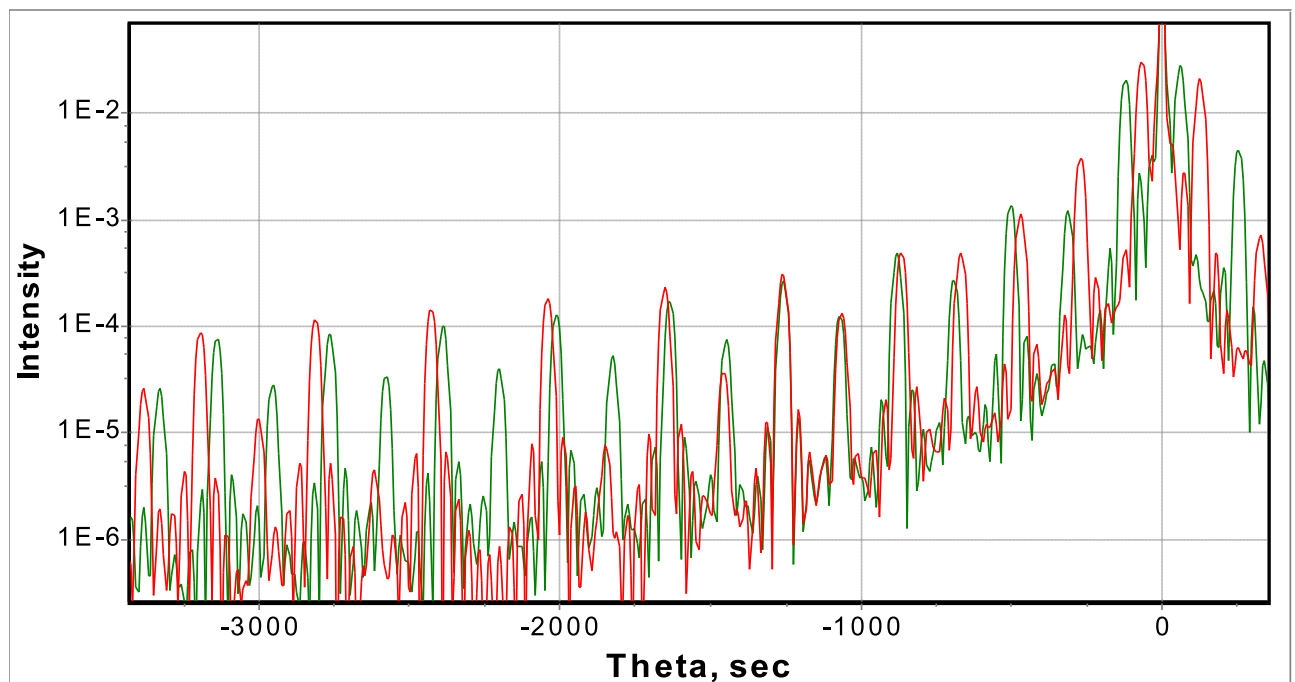


Рис. 3.8. Надґратка InAs/GaAs на GaAs (5 пар шарів по $5 \cdot 10^{-8}$ м кожен).

Вульфа-Брега для конкретних шарів. Це означає, що для шарів з параметром ґратки дуже відмінним від, наприклад, підкладки, формула (3.13) і побудований на ній приблизний підхід не застосовні. На рис. 3.8 представлена крива гойдання для надґратки GaAs/InAs. Кут Вульфа-Брега для InAs, що дорівнює 30.57 градусів, а для GaAs - 33.03 градуса, тобто відрізняються на 2.5 градуса. Крім того, якщо шари InAs тонкі, то необхідно врахувати що їх постійна ґратки в латеральному напрямі практично дорівнює цьому параметру підкладки з GaAs і відповідно перпендикулярний параметр ґратки (в напрямі нормалі до поверхні) збільшується, а значить різниця кутів Вульфа-Брега в різних шарах може досягти 5 градусів. Очевидно, що на таких великих відстанях від точки Лорентца допущені при виведенні формули (3.13) апроксимації не застосовні і цей метод не працює. Спроба ввести поправку розузгодження постійних ґратки [4] практично не покращує ситуацію.

Висновки.

Як і слід було чекати у геометрії Брега, перетин дисперсійної поверхні площиною дифракції не є просто поверненими на 90 градусів двома гіперболами,

які є дисперсійною кривою у геометрії Лауе. Це виходило хоча б з того, що вектор Пойнтінга для дифрагованої хвилі повинен, в цілому, зберігати свій напрям під час переходу кута падіння через кут Вульфа-Брега, а для двох гіпербол це можливо тільки за наявності стрибка з однією на іншу, чого в реальності не спостерігається.

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

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

3.2 Точний аналітичний розв'язок в дво-променевому випадку

В розділі 3.1 було показано можливість точного чисельного розв'язку дисперсійного рівняння для випадку двох сильних хвиль (2.18). Однак це дисперсійне рівняння являє собою рівняння четвертого ступеню (3.5) і може бути розв'язано аналітично за допомогою дещо модернізованого методу Феррарі [54]. Опишемо зміст метода.

Для рівняння четвертого ступеню:

$$x^4 + A_3x^3 + A_2x^2 + A_1x + A_0 = 0 \quad (3.14)$$

вводимо наступні змінні:

$$\begin{aligned} p &= A_2 - 3\frac{A_3^2}{8} \\ q &= A_1 - \frac{A_2A_3}{2} + \frac{A_3^3}{8} \\ r &= A_0 - \frac{A_1A_3}{4} + \frac{A_2A_3^2}{16} - 3\frac{A_3^4}{256} \end{aligned} \quad (3.15)$$

та будемо рівняння третього ступеню:

$$y^3 + B_2y^2 + B_1y + B_0 = 0 \quad (3.16)$$

з коефіцієнтами:

$$B_0 = q^2, \quad B_1 = p^2 - 4r, \quad B_2 = -2p, \quad B_3 = 1. \quad (3.17)$$

Для розв'язку рівняння 3.16 вводимо наступні змінні:

$$\begin{aligned} Q &= \frac{3B_1 - B_2^2}{9} \\ R &= \frac{9B_1B_2 - 27B_0 - 2A_2^3}{54} \\ S &= \left(R + \sqrt{Q * Q * Q + R * R} \right)^{\frac{1}{3}} \\ T &= \left(R - \sqrt{Q * Q * Q + R * R} \right)^{\frac{1}{3}} \end{aligned} \quad (3.18)$$

тоді розв'язок 3.16 буде:

$$\begin{aligned} y_1 &= -\frac{B_2}{3} + (S + T) \\ y_2 &= -\frac{B_2}{3} - \frac{S + T}{2} + i \frac{\sqrt{3}(S - T)}{2} \\ y_3 &= -\frac{B_2}{3} - \frac{S + T}{2} - i \frac{\sqrt{3}(S - T)}{2} \end{aligned} \quad (3.19)$$

I, в свою чергу, розв'язок 3.14 буде:

$$\begin{aligned} x_1 &= -\frac{1}{2}(\sqrt{-y_3} + \sqrt{-y_2} - \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4} \\ x_2 &= -\frac{1}{2}(\sqrt{-y_3} - \sqrt{-y_2} + \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4} \\ x_3 &= -\frac{1}{2}(-\sqrt{-y_3} + \sqrt{-y_2} + \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4} \\ x_4 &= -\frac{1}{2}(-\sqrt{-y_3} - \sqrt{-y_2} - \sqrt{-y_1}) - \frac{A_3}{4} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Таким чином рівняння (3.5) може бути розв'язано аналітично. Звісно результат не відрізняється від знайденого чисельно за допомогою методу Лагера [51], однак такий підхід в декілька разів швидший.

Зазначимо, що крім описаного вище методу було реалізовано та використано ще оригінальний метод Феррарі описаний в [55], однак результат був, звичайно, тим самим.

3.3 Чисельний розв'язок в трьох- та чотирьох-променевому випадку

На рис. 3.9 показана схематична побудова перерізу дисперсійної поверхні площиною дифракції в компланарному чотирьох-променевому випадку.

В трьох-хвильовому та чотирьох-хвильовому випадках дисперсійне рівняння (2.15) являє відповідно рівняння шостого та восьмого ступеню. Зрозуміло що аналітичний розв'язок для таких рівнянь отримати в загальному випадку не можливо, тому це було зроблено чисельно за допомогою того ж методу Лагера [51]. Скориставшись наведеною вище методикою ці рівняння були отримані в явному вигляді.

Введемо позначення (рис. 3.9):

$$\begin{aligned} sx &= \sin(\alpha) \\ hhh &= 2(\sin(\alpha) - h \cos(\phi)) \\ ppp &= 2(\sin(\alpha) - h \cos(\phi) + p \cos(\psi)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
qqq &= 2(\sin(\alpha) - h \cos(\phi) + q \cos(\eta)) \\
doph &= h(h - 2 \sin(\alpha - \phi)) + 1 - n2 \\
dopp &= h(h - 2 \sin(\alpha - \phi)) + p(p + 2 \sin(\alpha - \psi)) - 2hp \cos(\psi - \phi) + 1 - n2 \\
dopq &= h(h - 2 \sin(\alpha - \phi)) + q(q + 2 \sin(\alpha - \eta)) - 2hq \cos(\eta - \phi) + 1 - n2
\end{aligned}$$

де $n2 = n^2$.

Тоді коефіцієнти рівняння восьмого ступеню:

$$a_8 x^8 + a_7 x^7 + a_6 x^6 + a_5 x^5 + a_4 x^4 + a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0 \quad (3.21)$$

будуть:

$$\begin{aligned}
a[0] &= -(1-n2)*Hqh*Hhq*dopp-(1-n2)*Hqh*Hhp*Hrp-(1-n2)*Hph*Hhq*Hqp-(1-n2)*Hph*Hhp*dopp-(1-n2)*doph*Hqp*Hqp+ \\
&+ (1-n2)*doph*dopp*dopp-Hh*Hph*H_q*Hqp-Hh*Hqh*H_p*Hrp+Hh*H_h*Hqp*Hqp+Hq*Hph*H_q*Hhp-Hq*Hph*H_p*Hhq-Hq*H_h*Hhp*Hrp- \\
&+ Hrp*Hqh*H_q*Hhp+Hrp*Hqh*H_p*Hhq-Hp*H_h*Hhq*Hqp-Hh*H_h*dopp*dopp-Hh*Hph*H_p*dopp-Hh*Hqh*H_q*dopp-Hp*H_h*Hhp*dopp- \\
&+ Hrp*H_p*dopp*dopp-Hp*H_q*Hqp*dopp-Hq*H_h*Hhq*dopp-Hq*H_p*Hrp*dopp-Hq*H_q*dopp*dopp; \\
a[1] &= -Hq*H_p*Hrp*hhh-Hq*H_h*Hhq*ppp+(1-n2)*doph*dopp*qqq+((1-n2)*doph*ppp+((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*dopp)*dopp- \\
&- 2*Hph*Hhq*Hqp*sx-((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*Hqp*Hqp-Hp*H_q*Hqp*hhh-Hh*Hqh*H_q*ppp-Hh*Hph*H_p*qqq-Hq*H_q*dopp*ppp- \\
&- Hq*H_q*hhh*dopp-2*Hqh*Hhp*Hqp*sx-Hp*H_p*dopp*qqq-Hp*H_p*hhh*dopp-(1-n2)*Hph*Hhp*qqq-2*Hph*Hhp*sx*dopp- \\
&- Hrp*H_h*Hhp*qqq-Hh*H_h*dopp*qqq-Hh*H_h*ppp*dopp-(1-n2)*Hqh*Hhq*ppp-2*Hqh*Hhq*sx*dopp; \\
a[2] &= -(1-n2)*Hqh*Hhq-(1-n2)*Hph*Hhp+(1-n2)*doph*dopp-Hqh*Hhq*dopp-Hph*Hhq*Hqp+((1-n2)*doph*ppp+ \\
&+ ((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*dopp)*qqq+((1-n2)*doph+((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*ppp+(1-n2+2*sx*hhh+doph)*dopp)*dopp- \\
&- (1-n2+2*sx*hhh+doph)*Hqp*Hqp-Hqh*Hhp*Hqp-Hph*Hhp*dopp-Hh*Hph*H_p-Hh*Hqh*H_q-Hp*H_h*Hhp-Hp*H_q*Hqp-Hq*H_h*Hhq- \\
&- Hq*H_p*Hrp-Hh*H_h*dopp-Hh*H_h*ppp*qqq-Hh*H_h*dopp-Hp*H_p*dopp-Hp*H_p*hhh*qqq-Hp*H_p*dopp-Hq*H_q*dopp- \\
&- Hq*H_q*hhh*ppp-Hq*H_q*dopp-2*Hqh*Hhq*sx*ppp-2*Hph*Hhp*sx*qqq; \\
a[3] &= -(2*sx*hhh)*Hqp*Hqp-Hq*H_q*hhh-Hq*H_q*ppp+(1-n2)*doph*ppp+((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*dopp+((1-n2)*doph+ \\
&+ ((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*ppp+(1-n2+2*sx*hhh+doph)*dopp)*qqq+((1-n2)*hhh+2*sx*doph+(1-n2+2*sx*hhh+doph)*ppp+ \\
&+ (2*sx*hhh)*dopp)*dopp-2*Hph*Hhp*sx-Hph*Hhp*qqq-Hh*H_h*ppp-Hh*H_h*qqq-2*Hqh*Hhq*sx-Hqh*Hhq*ppp-Hp*H_p*hhh-Hp*H_p*qqq; \\
a[4] &= -Hrp*H_p-Hph*Hhp-Hh*H_h-Hqh*Hhq-Hq*H_q-Hqp*Hqp+(1-n2)*doph+((1-n2)*hhh+2*sx*doph)*ppp+(1-n2+2*sx*hhh+doph)* \\
&+ doph+((1-n2)*hhh+2*sx*doph+(1-n2+2*sx*hhh+doph)*ppp+(2*sx*hhh)*dopp)*qqq+(1-n2+2*sx*hhh+doph+(2*sx*hhh)*ppp+dopp)*dopp; \\
a[5] &= (1-n2)*hhh+2*sx*doph+(1-n2+2*sx*hhh+doph)*ppp+(2*sx*hhh)*dopp+(1-n2+2*sx*hhh+doph+(2*sx*hhh)*ppp+dopp)*qqq+ \\
&+ (2*sx*hhh*ppp)*dopp; \\
a[6] &= 1-n2+2*sx*hhh+doph+(2*sx*hhh)*ppp+dopp+(2*sx*hhh*ppp)*qqq+dopp; \\
a[7] &= ppp+qqq+2*sx*hhh; \\
a[8] &= 1;
\end{aligned}$$

$N_h, N_q, N_r, N_{hq}, N_{rq}, N_{hr}$ та інші варіанти - відповідні поляризованості.

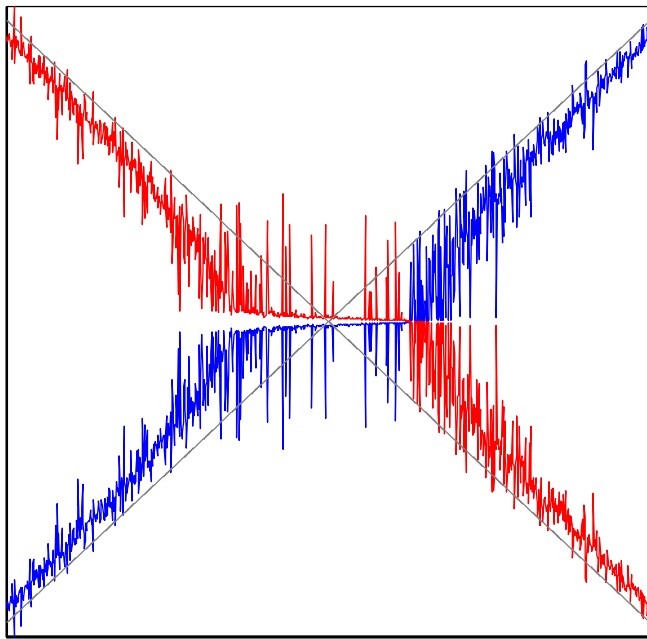
Слід зазначити одну важливу річ: для трьох і більше сильних хвиль не слід розкладати вектори дифракції на їх декартові компоненти, а необхідно ввести допоміжну змінну, яка є різницею між нормальними компонентами хвильових векторів в кристалі та вакуумі (див. рис. 4.1 на сторінці 51):

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h} + K\epsilon \mathbf{n}. \quad (3.22)$$

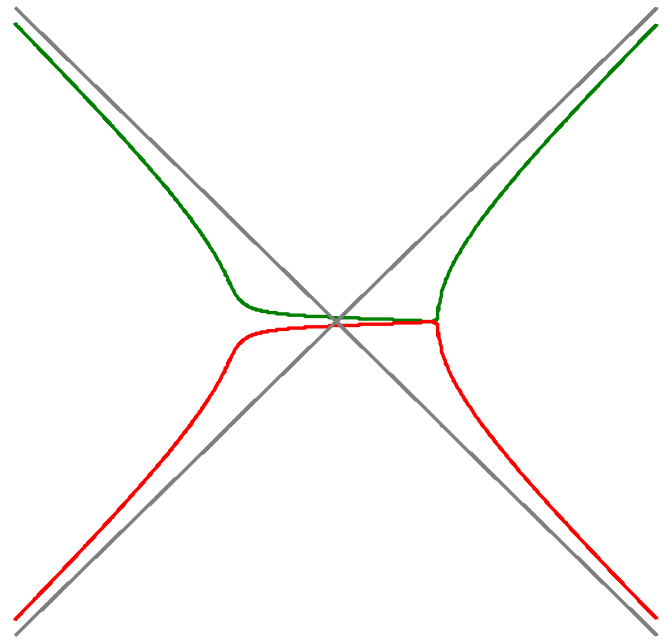
Необхідність такого кроку пов'язана з кінцевою машинною точністю - навіть використання типу `extended` не допоможе вже в трьох-хвильовому випадку при виконанні умов дифракції одночасно для всіх хвиль. Відбувається це тому, що

поблизу точного Брегівського положення ϵ 3 дуже близькі за значенням корені, різниця між якими на багато порядків менша ніж їх значення. Тому при чисельному розв'язку відрізнити ці корені неможливо. Якщо ж ввести описаним вище чином нову змінну ϵ , то проблема зникає, тому що ця змінна і являє різницю між хвильовими векторами (рис. 4.1).

На рис. 3.10 продемонстровано що буде, якщо не перейти до нової змінної.



а)



б)

Рис. 3.10. Поганий розв'язок (а) і гарний (б)

РОЗДІЛ 4

ОРИГІНАЛЬНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ДИНАМІЧНОЇ ДИФРАКЦІЇ

Сучасна електроніка йде шляхом зменшення характерних розмірів складових частин інтегральних мікросхем, при цьому зростають труднощі не тільки із створенням цих нанорозмірних структур, але й з контролем їхньої геометрії та складу.

Одним з основних засобів неруйнівного структурного аналізу є дифракція Х-променів. В основі більшості методик аналізу, що застосовуються сьогодні, лежить розв'язання зворотної задачі за допомогою кінематичної або двопроменевої динамічної теорії. Обидві теорії створювалися з безліччю спрощень і для структур з товстими шарами, ширококутної дифракції, дифракції одночасно від декількох наборів кристалічних площин і т.д. дають неправильні результати. Тому часто є необхідним застосування коректніших (з меншою кількістю спрощень) теорій.

4.1 Компланарна багатопроменева динамічна теорія

У даній роботі викладено теорію багатопроменевої дифракції Х-променів у шаруватих структурах. В основу лягли роботи [9], [64], присвячені багатопроменевій дифракції в одношарових структурах, а також роботи [30], [31], [18]. Роботи Кона і Степанова були враховані і при розв'язанні проблем з товстими шарами [31], і у ковзній геометрії [16]. Деякі корисні думки щодо розв'язування дисперсійного рівняння було запозичено в роботі [52]. Крім того, для збільшення точності і розширення кутового діапазону хвильові вектори в середовищі знаходились чисельно [44].

Оскільки найчастіше зустрічається компланарна багатопроменева дифракція

Х-променів [9], розглянуто було саме цей випадок. Крім того, такий розгляд дозволяє у декілька разів зменшити час обчислень, що особливо важливо у разі автоматизованого фітування спектрів.

Дисперсійне рівняння

Перепишемо рівняння розповсюдження 2.14 в більш спрощеному вигляді [1]:

$$\frac{|k_h|^2 \vec{E}_h - K^2 \vec{E}_h}{K^2} \approx \sum_p \chi_{h-p} \vec{E}_p, \quad (4.1)$$

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

Перейдемо до зведених координат

$$\frac{k_h}{K} \rightarrow k_h, \quad \frac{h}{K} \rightarrow h, \quad (4.2)$$

де h — довжина вектора оберненої ґратки.

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

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

Тоді рівняння (4.1) у компланарному випадку набуває вигляду

$$(k_h^2 - n^2) E_h = \sum_{p \neq h} \chi_{h-p} E_p. \quad (4.3)$$

Розділивши (4.3) на амплітуду падаючої хвилі і записавши у матричному вигляді, одержимо

$$\Delta_E E = 0, \quad (4.4)$$

де

$$\Delta_E = \begin{pmatrix} k_0^2 - n^2 & -\chi_{0,-1} & -\chi_{0,-2} & -\chi_{0,-(N-1)} \\ -\chi_{1,0} & k_1^2 - n^2 & -\chi_{1,-2} & -\chi_{1,-(N-1)} \\ -\chi_{2,0} & -\chi_{2,-1} & k_2^2 - n^2 & -\chi_{2,-(N-1)} \\ -\chi_{N-1,0} & -\chi_{N-1,-1} & -\chi_{N-1,-2} & k_{N-1}^2 - n^2 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

та

$$E = \begin{pmatrix} 1 \\ c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

коефіцієнти $c_i = E_h^i / E_0^i$.

Відповідно дисперсійне рівняння виглядає в загальному випадку так:

$$\Delta_E = 0. \quad (4.7)$$

Шукати хвильові вектори у тій формі, в якій вони фігурують в Δ_E , досить незручно: знайшовши їх довжину, необхідно буде окремо шукати напрямки. Тому скористаємося тим фактом, що при заломленні тангенціальна компонента хвильового вектора зберігає свою довжину, і введемо величину ε , що характеризує різницю нормальних компонент хвильових векторів у середовищі k_h і у вакуумі K (рис. 4.1).

Тоді $\vec{k}_h$ запишеться як

$$\vec{k}_h = \vec{K}_0 + \vec{h} + K\varepsilon\vec{n}, \quad (4.8)$$

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

Враховуючи введене позначення і прийняте раніше (4.2) нормування, одержимо

$$\begin{aligned} k_h^2 &= (\vec{S}_0 + \vec{h} + \varepsilon\vec{n}) \cdot (\vec{S}_0 + \vec{h} + \varepsilon\vec{n}) = \\ &= 1 + 2(\vec{S}_0 \cdot \vec{h}) + 2\varepsilon(\vec{S}_0 \cdot \vec{n}) + 2\varepsilon(\vec{h} \cdot \vec{n}) + h^2 + \varepsilon^2, \end{aligned} \quad (4.9)$$

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

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

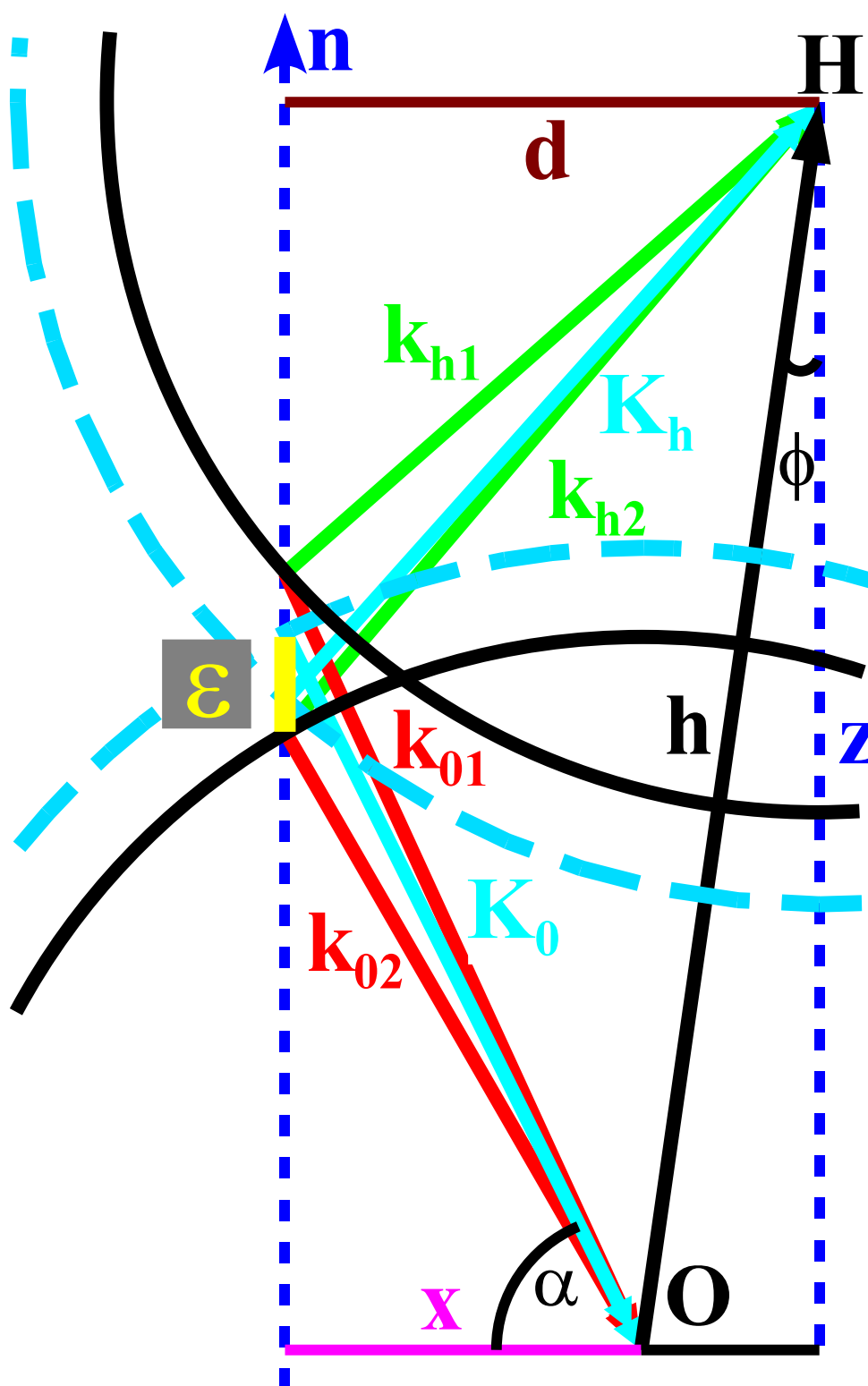


Рис. 4.1. Дисперсійна поверхня в двохвильовому випадку.

$$\left(\vec{S}_0 \cdot \vec{h}\right) = h \cos(\alpha + 90^\circ - \varphi) = -h \sin(\alpha - \varphi),$$

$$\left(\vec{h} \cdot \vec{n}\right) = h \cdot \cos \varphi,$$

де α — кут між падаючим променем і поверхнею, φ — між вектором $\vec{h}$ і нормаллю до поверхні.

Отже,

$$k_0^2 = \varepsilon^2 + 1 - 2\varepsilon \sin \alpha,$$

$$k_h^2 = \varepsilon^2 + 1 + h^2 - 2\varepsilon \sin \alpha - 2h \sin(\alpha - \varphi) + 2\varepsilon h \cos \varphi.$$

І, у свою чергу, шукані величини

$$k_0^2 - n^2 = \varepsilon^2 - 2 \sin \alpha \cdot \varepsilon + (1 - n^2),$$

$$k_h^2 - n^2 = \varepsilon^2 + 2(h \cos \varphi - \sin \alpha) \varepsilon + (1 - n^2) + h(h - 2 \sin(\alpha - \varphi)).$$

Тоді дисперсійне рівняння (4.7) набуває вигляду

$$\Delta_E = \varepsilon^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} -2 \sin \alpha & 0 \\ 0 & 2(h_1 \cos \varphi_1 - \sin \alpha) \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2(h_1 \cos \varphi_1 - \sin \alpha) \end{vmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} 1 - n^2 & -\chi_{0,-1} \\ -\chi_{1,0} & 1 - n^2 + h_1(h_1 - 2 \sin(\alpha - \varphi_1)) \\ -\chi_{2,0} & -\chi_{2,-1} \\ -\chi_{N-1,0} & -\chi_{N-1,-1} \end{pmatrix} \begin{vmatrix} -\chi_{0,-(N-1)} \\ -\chi_{1,-(N-1)} \\ -\chi_{2,-(N-1)} \\ 1 - n^2 + h_N(h_N - 2 \sin(\alpha - \varphi_N)) \end{vmatrix} = 0 \quad (4.10)$$

Або у відповідних позначеннях

$$\Delta_E = \varepsilon^2 I + \varepsilon A + B, \quad (4.11)$$

де I — одинична матриця, а A і B — відповідні матриці з (??):

$$A = \{\delta_{ij} \cdot 2(h_i \cos \varphi_i - \sin \alpha)\},$$

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

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

Підставляючи (4.11) в (4.4) маємо

$$\varepsilon^2 IE + \varepsilon AE = \varepsilon (\varepsilon IE + AE) = -BE \quad (4.12)$$

і, ввівши позначення

$$\varepsilon IE \equiv E_S, \quad (4.13)$$

перепишемо (4.12) у вигляді

$$\varepsilon (E_S + AE) = -BE. \quad (4.14)$$

Об'єднуючи рівняння (4.13) і (4.14) одержимо

$$\begin{pmatrix} -B & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ D_S \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} A & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ D_S \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Рівняння (4.15) є узагальненою проблемою власних значень ε і розв'язується за допомогою стандартних алгоритмів (наприклад, функціями, що входять у бібліотеки NAG або IMSL [53], або програмами, представленими на www.srcc.msu.su).

Розв'язками цього рівняння є $2N$ власних значень ε і $[N \times 2N]$ значень власних векторів, які є амплітудами хвиль всіх хвильових полів. Проте ці хвильові вектори необхідно нормувати, розділивши кожний з N стовпців на перше в стовпці значення, яке відповідає падаючій хвилі і повинно дорівнювати одиниці. Далі необхідно визначити $[N \times 2N]$ нормальних компонент хвильових векторів:

$$k_{hz} = \left(\vec{k}_h \cdot -\vec{n} \right) = \sin \alpha - \varepsilon - h_i \cos \varphi_i. \quad (4.16)$$

Таким чином, задача визначення хвильових полів у даній речовині вирішена. Тепер знайдемо точні значення хвильових полів і поширимо цю задачу на структуру, що складається з M плоскопаралельних шарів (надґратку). Для цього необхідно записати граничні умови.

Застосування граничних умов

Граничними умовами для електромагнітних хвиль є неперервність тангенціальної (паралельної поверхні) компоненти електричного $\vec{E}$ і магнітного $\vec{H}$ полів. З цього одержимо умови на кожному інтерфейсі ??:

$$\sum_{n=0}^{2N-1} c_n E_{0n} = \text{const},$$

$$\sum_{n=0}^{2N-1} c_n k_{zn} E_{0n} = \text{const}, \quad (4.17)$$

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

Записавши умови (4.17) і врахувавши ослаблення внаслідок поглинання хвилі, що проходить через m -й шар, одержимо для інтерфейсу

$$S_m F_m E_m = S_{m+1} E_{m+1}, \quad (4.18)$$

де E_m — вектор-стовпець амплітуд напруженостей в m -му шарі,

$$S_m = \begin{pmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & c_{0,2N-1} \\ c_{1,0} & c_{1,1} & c_{1,2N-1} \\ c_{N-1,0} & c_{N-1,1} & c_{N-1,2N-1} \\ c_{0,0}k_{z0,0} & c_{0,1}k_{z0,1} & c_{0,2N-1}k_{z0,2N-1} \\ c_{1,0}k_{z1,0} & c_{1,1}k_{z1,1} & c_{1,2N-1}k_{z1,2N-1} \\ c_{N-1,0}k_{zN-1,0} & c_{N-1,1}k_{zN-1,1} & c_{N-1,2N-1}k_{zN-1,2N-1} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

і

$$F_m = \delta_{ij} \exp \left(-ik_{0z}^j K t_m \right). \quad (4.20)$$

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

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

$$E'_0 = S_0^{-1} S_1 F_1 S_1^{-1} S_2 F_2 \cdots S_{M-1}^{-1} S_M \Phi_M^{(U)} E_M, \quad (4.21)$$

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

$$S_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ K_{z0} & 0 & 0 & -K_{z0} & 0 & 0 \\ 0 & K_{z1} & 0 & 0 & -K_{z1} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zN} & 0 & 0 & -K_{zN} \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

$$E'_0 = \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \\ E_R \\ E_1 \\ E_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

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

Розв'язок рівняння (4.21) приводить до великих значень похибок у ковзній геометрії і для товстих шарів, оскільки матриця F_m містить рівну кількість зростаючих і спадаючих експонент (половина коренів дисперсійного рівняння має від'ємну уявну частину, а друга половина — додатну). Тому скористаємося підходом, запропонованим у роботі [31].

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

$$E_m \equiv \Phi_m^L E_m, \quad (4.24)$$

де Φ_m^L — фаза хвилі на нижній межі m -го шару.

І введемо у розгляд матрицю

$$X_m = \begin{pmatrix} X^{tt} & X^{tr} \\ X^{rt} & X^{rr} \end{pmatrix} = S_{m-1}^{-1} S_m. \quad (4.25)$$

Тоді рівняння (4.18) можна записати у вигляді

$$E_m = X_{m+1} F_{m+1} E_{m+1}. \quad (4.26)$$

Враховуючи введене нами сортування коренів, перші N елементів матриці E_m представлятимуть падаючі хвилі, а другі N елементів — відбиті (або дифраговані) хвилі. Тобто $E_m = \begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix}$, наприклад, для повітря $T_0 = (E_0 \ 0 \ 0 \dots 0)$ і $R_0 = (E_R \ E_1 \ E_2 \dots E_{N-1})$. Тоді (4.26) виглядатиме так:

$$\begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{tt} & X^{tr} \\ X^{rt} & X^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_+ & 0 \\ 0 & F_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{m+1} \\ R_{m+1} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

де F_+ і F_- — діагональні матриці розміром $N \times N$ вигляду (4.20), що містять зростаючі і спадаючі експоненти відповідно.

Далі введемо такі матриці:

$$\begin{aligned} M^{tt} &= (F_+)^{-1} (X^{tt})^{-1}, \\ M^{tr} &= -M^{tt} X^{tr} F_-, \\ M^{tr} &= X^{rt} (X^{tt})^{-1}, \\ M^{rr} &= (X^{rr} - M^{rt} X^{tr}) F_- \end{aligned} \quad (4.28)$$

і перепишемо (4.27) у вигляді

$$\begin{pmatrix} T_{m+1} \\ R_{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{tt} & M^{tr} \\ M^{rt} & M^{rr} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Ввівши матриці

$$\begin{aligned} W_m^{tt} &= A_m W_{m-1}^{tt}, \\ W_m^{tr} &= M_m^{tr} + A_m W_{m-1}^{tr} M_m^{rr}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_m^{rt} &= W_m^{rt} + B_m M_m^{rt} W_{m-1}^{tt}, \\
W_m^{rr} &= B_m M_m^{rr}, \\
A_m &= M_m^{tt} (1 - W_{m-1}^{tr} M_m^{rt})^{-1}, \\
B_m &= W_{m-1}^{rr} (1 - M_m^{rt} W_{m-1}^{rt})^{-1},
\end{aligned} \tag{4.30}$$

одержимо

$$\begin{pmatrix} T_m \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_m^{tt} & W_m^{tr} \\ W_m^{rt} & W_m^{rr} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_0 \\ R_m \end{pmatrix}. \tag{4.31}$$

В результаті, відбиття від кристала виражатиметься матричним рівнянням:

$$R_0 = W_M^{rt} T_0. \tag{4.32}$$

Процедура розв'язання

Для отримання інтенсивності дифрагованих на багат шаровій структурі Х-хвиль необхідно виконати такі дії:

- 1) із знайденої для попереднього шару матриці S_{m-1} знаходимо S_{m-1}^{-1} (для повітря S_0 задана рівнянням (??));
- 2) розв'язуємо дисперсійне рівняння (4.16), знаходимо матриці k_{hz} і c_n для m -го шару і сортуємо їх рядки за зменшенням уявної частини k_{hz} ;
- 3) будуємо матрицю S_m ;
- 4) знаходимо $X_m = S_{m-1}^{-1} \cdot S_m$;
- 5) будуємо матрицю F_- для перших N коренів і F_+^{-1} для решти;
- 6) обчислюємо матриці M_m ;
- 7) знаходимо рекурсивно W_m , причому для повітря $W_0^{tt} = I$, $W_0^{rr} = I$, $W_0^{rt} = 0$, $W_0^{tr} = 0$ і для першого шару $W_1^{tt} = M_1^{tt}$, $W_1^{tr} = M_1^{tr}$, $W_1^{rt} = M_1^{rt}$, $W_1^{rr} = M_1^{rr}$;
- 8) знаходимо коефіцієнт дифракції від досліджуваної структури

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

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

9) знаходимо інтенсивність $\Re = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} |R|^2$;

10) виводимо залежність інтенсивності від кута падіння.

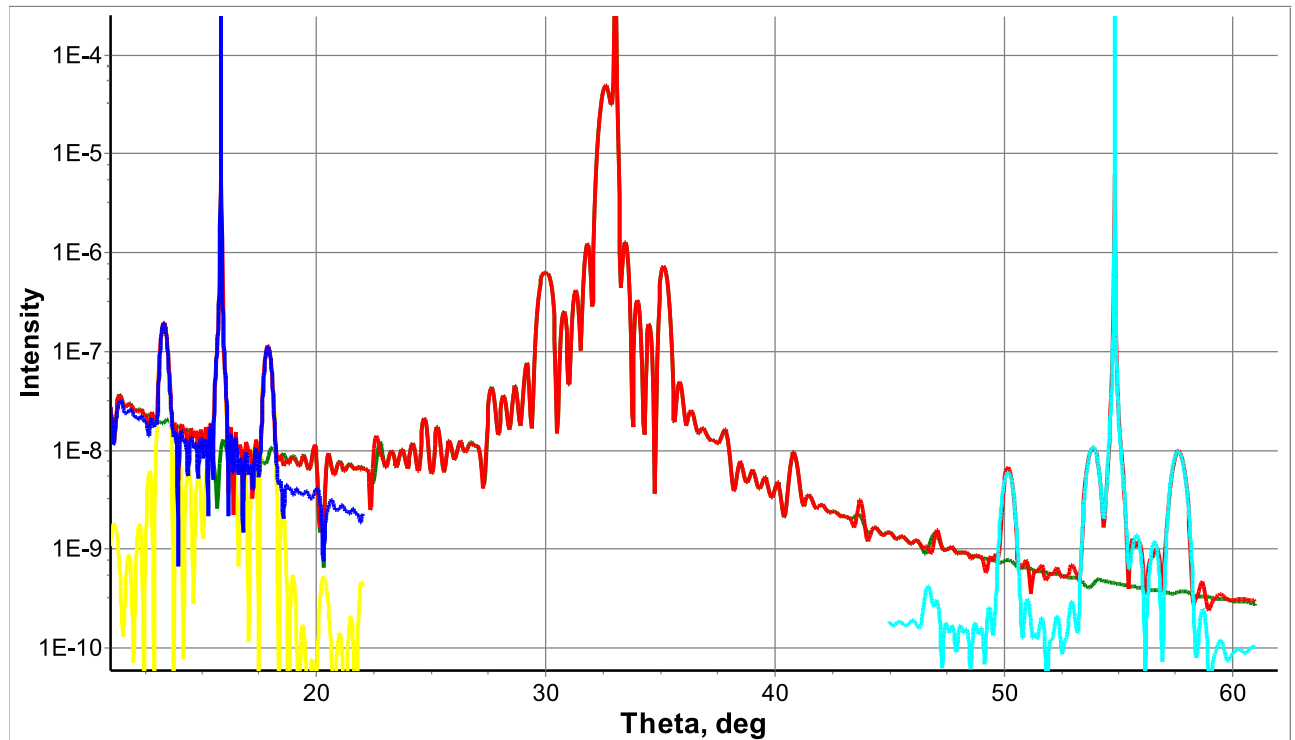


Рис. 4.2. Приклад ширококутової дифракції від надґратки (рефлекси зліва на право 200, 400, 600). Суцільна крива — багатопроменева теорія із врахуванням відбитого променя, пунктирні — звичайна двопроемова

На рис. 4.2 представлена так звана ширококутна дифракція Х-променів на шаруватій структурі. У дифракції беруть участь чотири вузли оберненої ґратки: 000, 002, 004, 006.

Висновки

У даній роботі розроблено динамічну теорію взаємодії Х-хвиль з речовиною для випадку, коли у формуванні дифракційної картини бере участь одночасно декілька точок оберненої ґратки. Дана теорія відрізняється від розроблених раніше за такими позиціями:

- коректна інтерпретація експерименту у ковзній геометрії;
- розв’язана проблема нескінченно зростаючих в деякому кутовому діапазоні експонент;

- для розв’язання дисперсійного рівняння введено змінну, використання якої дозволяє уникнути похибок, котрі виникають при розрахунку дифракції від великої кількості вузлів оберненої ґратки;
- зменшено розмір матриць, які описують граничні умови, і тим самим збільшено швидкість розрахунку;
- розв’язок розширений на кутовий діапазон, далекий від точного положення Бреґга (рис. 4.2);
- задачу вирішено з мінімумом спрощень: наближення плоских хвиль, що проходять крізь кристал, компланарна геометрія і наявність лише σ -поляризації випромінювання.

Найближчим часом теорія багатопроменевої дифракції в шаруватих структурах буде поширена розвинута на некомпланарну геометрію і довільний стан поляризації базуючись на роботі [14].

4.2 Багатопроменевий некомпланарний RMA

У [14] розроблений алгоритм розрахунку некомпланарної багатохвильової дифракції в паралельній пластинці, в [?] даний підхід розширений на випадок багат шарової структури. У даній роботі запропонований альтернативний [?] алгоритм розрахунку, схожий в ключових моментах, проте виведений незалежно, справедливий не тільки для повністю напруженої структури і такий, що не містить помилок при інтерпретації фазових множників.

Основні властивості запропонованого методу:

- розглядаються плоскі хвилі;
- рівняння розповсюдження і граничні умови розв’язуються без спрощень;
- будь-яка геометрія (Брег, Лауе, Брег-Лауе);
- 3D моделювання в зворотному просторі і 1D в прямому
- весь можливий кутовий діапазон;

- точний розрахунок будь-якої поляризації і інформація про поляризацію променів, що дифрагували;
- немає принципових обмежень на кількість точок зворотного простору тих, що беруть участь в дифракції
- немає обмежень на товщини шарів
- всі розрахунки проводяться для x, y, z компонент хвильових векторів, векторів дифракції і полів

Розв'язок дисперсійного рівняння.

Рівняння розповсюдження для векторів напруженості електричного поля в періодичному середовищі для N точок зворотного простору (2.14) необхідно звести до системи скалярних рівнянь. Для цього представимо всі вектора в декартових координатах:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_{h_n} &= (X_n - x)\mathbf{i} + (Y_n - y)\mathbf{j} + (Z_n - z)\mathbf{k} = \\
 &= x_n\mathbf{i} + y_n\mathbf{j} + (Z_n - z)\mathbf{k}, \\
 \mathbf{E}_{h_n} &= E_n^x\mathbf{i} + E_n^y\mathbf{j} + E_n^z\mathbf{k},
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

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

Тоді рівняння (2.14) прийме вигляд:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}^2 + \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{AB} & -\mathbf{AH} \\ -\mathbf{AB} & \mathbf{H}^2 + \mathbf{A}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{BH} \\ -\mathbf{AH} & -\mathbf{BH} & \mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_x \\ \mathbf{E}_y \\ \mathbf{E}_z \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \tag{4.34}$$

де матриці розміру $[N \times N]$ $\mathbf{I} = \{\delta_{nm}\}$, $\mathbf{A} = \{\delta_{nm}x_n\}$, $\mathbf{B} = \{\delta_{nm}y_n\}$, $\mathbf{C} = \{\delta_{nm}Z_n\}$, $\mathbf{X} = \{\chi_{h_n-h_m}\}$, $\mathbf{G} = (\mathbf{I} + \mathbf{X})$ та δ_{nm} — дельта функція. Поляризуємість $\chi_{h_n-h_m}$ розраховувалась розробленою в рамках даної роботи методом ??, що буде детально описано в розділі 5.4. Матриці $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$ — вектор-стовпці розміром $[1 \times N]$ напруженостей електричного поля, типу: $\mathbf{E}_x = (E_0^x, E_1^x, \dots, E_{N-1}^x)^T$, де T означає транспоноване.

Ввівши два вектор-стовпчика: $\mathbf{E}_v = (\mathbf{C} - z\mathbf{I})\mathbf{E}_x - \mathbf{A}\mathbf{E}_z$ та $\mathbf{E}_w = (\mathbf{C} - z\mathbf{I})\mathbf{E}_y - \mathbf{B}\mathbf{E}_z$ після перетворення зведемо (4.34) до системи:

$$\mathbf{Q}\mathbf{E}_4 = z\mathbf{E}_4, \quad (4.35)$$

$$\mathbf{E}_z = -(\mathbf{I} + \mathbf{X})^{-2}(\mathbf{A}\mathbf{E}_z + \mathbf{B}\mathbf{E}_w) \quad (4.36)$$

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

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{0} & \mathbf{A}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{A} - \mathbf{I} & \mathbf{A}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{B}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{A} & \mathbf{B}\mathbf{G}^{-2}\mathbf{B} - \mathbf{I} \\ \mathbf{B}^2 - \mathbf{G}^2 & -\mathbf{A}\mathbf{B} & \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}\mathbf{B} & \mathbf{A}^2 - \mathbf{G}^2 & \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

Таким чином, рівняння (4.35) є дисперсійним рівнянням з якого можна знайти вектора дифракції в середовищі, а в комбінації з (4.36), ще і хвилеві поля, що відповідають всім дифрагованим променям (з точністю до невідомого коефіцієнта c_j^m).

На рис. 4.3 зображено частина розв'язку рівняння $\det \mathbf{Q} = 0$, тобто дисперсійну поверхню поблизу точки Лорентца.

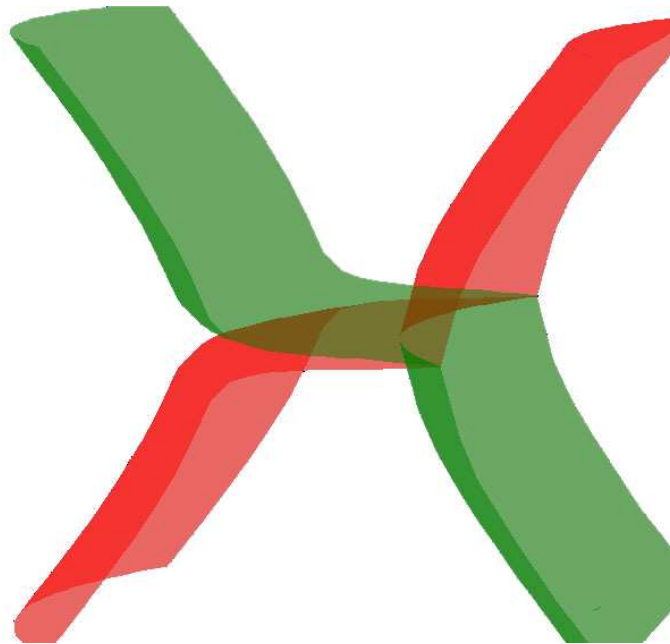


Рис. 4.3. Частина дисперсійної поверхні GaAs 004.

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

Граничні умови

Запишемо хвилю в кристалі:

$$E^{x,y,z}(r) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i\vec{k}_{\perp n}\vec{r}_{\perp} + iZ_n t + iC_n} \sum_{j=0}^{4N-1} c_j E_{nj}^{x,y,z} e^{-iz_j t} \quad (4.38)$$

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 (2.25, 2.26, 2.27) в матричному вигляді матимуть вигляд:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_m \mathbf{E}_m^x &= \mathbf{c}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^x \mathbf{F}_{m-1} \\ \mathbf{c}_m \mathbf{E}_m^y &= \mathbf{c}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^y \mathbf{F}_{m-1} \\ \mathbf{c}_m (\mathbf{I} + \mathbf{X}_m) \mathbf{E}_m^z &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{I} + \mathbf{X}_m) \mathbf{E}_{m-1}^z \mathbf{F}_{m-1} \\ \mathbf{c}_m (\mathbf{E}_m^{zy} - \mathbf{B}_m \mathbf{E}_m^z) &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{E}_{m-1}^{zy} - \mathbf{B}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^z) \mathbf{F}_{m-1} \\ \mathbf{c}_m (\mathbf{A}_m \mathbf{E}_m^z - \mathbf{E}_m^{zx}) &= \mathbf{c}_{m-1} (\mathbf{A}_{m-1} \mathbf{E}_{m-1}^z - \mathbf{E}_{m-1}^{zx}) \mathbf{F}_{m-1} \end{aligned} \quad (4.39)$$

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 межі структури, що складається з M шарів (1 - верхній, M - підкладка), умови (4.40) приймуть вигляд:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_1 \mathbf{E}_1^x &= \mathbf{E}_0^x + \mathbf{E}_{up}^x \\ \mathbf{c}_1 \mathbf{E}_1^y &= \mathbf{E}_0^y + \mathbf{E}_{up}^y \\ \mathbf{c}_1 (\mathbf{I} + \mathbf{X}_1) \mathbf{E}_1^z &= \mathbf{E}_0^z + \mathbf{E}_{up}^z \\ \mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zy} - \mathbf{B}_1 \mathbf{E}_1^z) &= \mathbf{K}^z (\mathbf{E}_0^y - \mathbf{E}_{up}^y) - \mathbf{B} (\mathbf{E}_0^z + \mathbf{E}_{up}^z) \\ \mathbf{c}_1 (\mathbf{A}_1 \mathbf{E}_1^z - \mathbf{E}_1^{zx}) &= \mathbf{K}^z (\mathbf{E}_{up}^x - \mathbf{E}_0^x) + \mathbf{A} (\mathbf{E}_0^z + \mathbf{E}_{up}^z) \end{aligned} \quad (4.40)$$

І на нижній межі:

$$\mathbf{c}_M \mathbf{E}_M^x = \mathbf{E}_{down}^x \phi_M$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_M \mathbf{E}_M^y &= \mathbf{E}_{down}^y \phi_M \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{I} + \mathbf{X}_M) \mathbf{E}_M^z &= \mathbf{E}_{down}^z \phi_M \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zy} - \mathbf{B}_M \mathbf{E}_M^z) &= (\mathbf{K}^z \mathbf{E}_{down}^y - \mathbf{B} E_{down}^z) \phi_M \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{A}_M \mathbf{E}_M^z - \mathbf{E}_M^{zx}) &= (\mathbf{A} \mathbf{E}_{down}^z - \mathbf{K}^z \mathbf{E}_{down}^x) \phi_M
\end{aligned} \tag{4.41}$$

У рівняннях (4.41) і (4.42) введені позначення: вектор-стовпчики: $E_0^{x,y,z}$ — падаючі на структуру промені (відмінний від 0 тільки перший елемент кожного вектора), $E_{up}^{x,y,z}$ - дифраговані вгору (Брег) промені, $E_{down}^{x,y,z}$ - дифраговані вниз (Лауе) промені, діагональна матриця φ_M - фаза хвилі, що вийшла із структури $K_m^z = \{-\delta_{ni} \sqrt{1 - (x_n^2 + y_n^2)}\}$.

Якщо з рівнянь (4.41) і (4.42) виключити невідомі дифраговані хвилі, одержимо 4 рівняння:

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zx} + \mathbf{K}_z \mathbf{E}_1^x + \mathbf{A}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{E}_1^z) &= 2 \mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^x \\
\mathbf{c}_1 (\mathbf{E}_1^{zy} + \mathbf{K}_z \mathbf{E}_1^y + \mathbf{B}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{E}_1^z) &= 2 \mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^y \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zx} - \mathbf{K}_z \mathbf{E}_M^x + \mathbf{A}_M \mathbf{X}_M \mathbf{E}_M^z) \mathbf{F}_M &= 0 \\
\mathbf{c}_M (\mathbf{E}_M^{zy} - \mathbf{K}_z \mathbf{E}_M^y + \mathbf{B}_M \mathbf{X}_M \mathbf{E}_M^z) \mathbf{F}_M &= 0
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Або у більш компактному вигляді:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_u \mathbf{c}_1 &= 2 \mathbf{K}^z \mathbf{E}_0^{xy}, \\
\mathbf{S}_d \mathbf{F}_M \mathbf{c}_M &= \mathbf{0},
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Рівняння (4.40) теж можна представити в компактному вигляді (достатньо 4 рівняння з 5-ти):

$$\mathbf{S}_{m+1} \mathbf{c}_{m+1} = \mathbf{S}_m \mathbf{F}_m \mathbf{c}_m, \tag{4.44}$$

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

$$\mathbf{S}_m = \begin{pmatrix} E_m^x \\ E_m^y \\ E_m^{zy} - B E_m^z \\ A E_m^z - E_m^{zx} \end{pmatrix} \tag{4.45}$$

Послідовно застосовуючи формулу (4.44) для всіх шарів одержимо рекурентне співвідношення:

$$\mathbf{c}_M = (\mathbf{S}_M)^{-1} \mathbf{S}_{M-1} \mathbf{F}_{M-1} (\mathbf{S}_{M-1})^{-1} \cdot \dots \cdot (\mathbf{S}_2)^{-1} \mathbf{S}_1 \mathbf{F}_1 \mathbf{c}_1, \quad (4.46)$$

За допомогою рівнянь (4.43) і (4.46) можна розрахувати c_1 і c_M . Далі з (4.41) і (4.42) можна знайти дифраговані промені зверху структури:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_1^x \\ \mathbf{E}_1^y \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_1) \mathbf{E}_1^z \end{pmatrix} \mathbf{c}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0^x \\ \mathbf{E}_0^y \\ \mathbf{E}_0^z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{up}^x \\ \mathbf{E}_{up}^y \\ \mathbf{E}_{up}^z \end{pmatrix}, \quad (4.47)$$

та знизу:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_M^x \\ \mathbf{E}_M^y \\ (\mathbf{I} + \mathbf{X}_M) \mathbf{E}_M^z \end{pmatrix} \mathbf{F}_M \mathbf{c}_M = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{down}^x \\ \mathbf{E}_{down}^y \\ \mathbf{E}_{down}^z \end{pmatrix} \phi_M. \quad (4.48)$$

Проблема даного розв'язку полягає в тому, що при великій товщині шарів матриця F_n стає нескінченно великою для коренів z_j з негативною уявною частиною [30]. Рішення даної проблеми запропоноване в [31] і проаналізовано в [16]. Застосуємо цей підхід.

Коректний розв'язок для товстих шарів.

Відсортуємо корені дисперсійного рівняння (4.35) z_j по зменшенню уявної частини (коренів з позитивними і негативними уявними частинами однакова кількість [31]) і розіб'ємо матриці S_m і F_m розміру $[4N \times 4N]$ в (4.44) відповідно на матриці розміру $[2N \times 2N]$, а матрицю c_m $[4N \times 1]$ на дві $[2N \times 1]$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{m+1}^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_m^{11} & \mathbf{X}_m^{12} \\ \mathbf{X}_m^{21} & \mathbf{X}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_m^+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_m^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

Тоді можна записати, що:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_{m+1}^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_m^{11} & \mathbf{M}_m^{12} \\ \mathbf{M}_m^{21} & \mathbf{M}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_{m+1}^- \end{pmatrix}, \quad (4.50)$$

де

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_m^{12} &= \mathbf{X}_m^{12}(\mathbf{X}_m^{22})^{-1} \\
\mathbf{M}_m^{11} &= (\mathbf{X}_m^{11} - \mathbf{M}_m^{12}\mathbf{X}_m^{21})\mathbf{F}_m^+ \\
\mathbf{M}_m^{22} &= (\mathbf{F}_m^-)^{-1}(\mathbf{X}_m^{22})^{-1} \\
\mathbf{M}_m^{21} &= -\mathbf{M}_m^{22}\mathbf{X}_m^{21}\mathbf{F}_m^+
\end{aligned} \tag{4.51}$$

Або так:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}_m^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_m^{11} & \mathbf{W}_m^{12} \\ \mathbf{W}_m^{21} & \mathbf{W}_m^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_m^- \end{pmatrix}, \tag{4.52}$$

де:

$$\begin{aligned}
\mathbf{W}_{m+1}^{11} &= -\mathbf{M}_m^{11}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{11} \\
\mathbf{W}_{m+1}^{12} &= \mathbf{M}_m^{12} - \mathbf{M}_m^{11}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{22} \\
\mathbf{W}_{m+1}^{21} &= \mathbf{W}_m^{21} - \mathbf{W}_m^{22}\mathbf{M}_m^{21}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{11} \\
\mathbf{W}_{m+1}^{22} &= \mathbf{W}_m^{22}(\mathbf{I} - \mathbf{M}_m^{21}(\mathbf{W}_m^{12}\mathbf{M}_m^{21} - \mathbf{I})^{-1}\mathbf{W}_m^{12})\mathbf{M}_m^{22}
\end{aligned} \tag{4.53}$$

Застосовуючи рівняння (4.54) послідовно для всіх шарів починаючи від поверхні (для першого шару $\mathbf{W}_1^{11} = \mathbf{W}_1^{22} = \mathbf{I}$ $\mathbf{W}_1^{12} = \mathbf{W}_1^{21} = 0$) і враховуючи граничні умови (4.43) можна знайти:

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_1^- &= \mathbf{S}_1\mathbf{c}_1^+ \\
\mathbf{c}_1^+ &= (\mathbf{S}_u^+ + \mathbf{S}_u^-\mathbf{S}_1)^{-1}\mathbf{E}_0 \\
\mathbf{c}_M^- &= \mathbf{S}_M\mathbf{c}_M^+ \\
\mathbf{c}_M^+ &= (\mathbf{I} - \mathbf{W}_M^{12}\mathbf{S}_M)^{-1}\mathbf{W}_M^{11}\mathbf{c}_1^+
\end{aligned} \tag{4.54}$$

де

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

Підставивши одержані $\mathbf{c}_1$ і $\mathbf{c}_M$ в рівняння (4.47) і (4.48) можна визначити всі компоненти дифрагованих променів (нульові елементи в матрицях $E_{up}^{x,y,z}$ і $E_{dwn}^{x,y,z}$ є відповідно відбитим променем та тим, що пройшов).

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

РОЗДІЛ 5

ЗАСТОСУВАННЯ РОЗРОБЛЕНИХ МЕТОДІВ ДЛЯ ВИРІШЕННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ЗАДАЧ

В цьому розділі будуть описані деякі можливі застосування приведених методів для інтерпретації експериментальних вимірювань.

5.1 Рефлектометрія (—)

Описаний в розділі 4.2 метод моделювання взаємодії рентгенівських хвиль з багатошаровими структурами можливо застосувати для задач рентгенівської рефлектометрії.

Рис. 5.1. Приклад кривої дзеркального відбиття від структури...

5.2 Точне врахування та розрахунок довільної лінійної поляризації

В розділі 4.2 розроблено методику моделювання дифракції X-променів на шаруватих структурах, яка дозволяє оперувати декартовими координатами всіх векторів, що задіяні в дифракції. Серед цих векторів є напруженість електричного поля падаючої на кристал хвилі $\mathbf{E}_0$ та напруженості дифрагованих та дзеркльно відбитого променю $\mathbf{E}_h$. Декартові складові вектора падаючого променю задані в першій матриці після знака рівності в рівнянні (4.47) (див. сторінку 64), а складові дифрагованих вгору та вниз променів - відповідно в другій матриці після знаку рівності в рівнянні (4.47) та в першій в рівнянні (4.48). Тобто можна точно

задати декартові складові напруженості електричного поля (поляризацію) падаючої хвилі та отримати точну інформацію про поляризацію всіх дифрагованих променів.

5.3 Ренінгеровське сканування

Ще одне можливе використання розробленого в розділі 4.2 методу – для моделювання Ренінгеровського скану від структури (рис. 5.2). Виконувати таке сканування можна як обертаючи зразок відносно нормалі (як це найчастіше і роблять в експерименті), так і обертаючи зразок відносно вектора оберненої ґратки (це більш коректно). Однак моделювання обох обертань реалізується однаково легко в рамках запропонованого методу, оскільки всі величини в системі задані у вигляді векторів, а обертання вектору навколо довільного напрямку виконується досить просто.

Рис. 5.2. Приклад ренінгеровського скану від рефлексу 002 GaAs.

5.4 Розрахунок поляризуємості

Для точного розв’язку рівняння розповсюдження 2.14 необхідно точно розрахувати Фур’є компоненти поляризуємості χ_{h-g} . Для двохвильового випадку величини χ_h , χ_{-h} та χ_0 можна виписати з довідників або з відповідних програм, наприклад ХОР 2.11 [66] або [67]. Однак це незручно - необхідно робити базу даних поляризуємостей для різних рефлексів та матеріалів (навіть різні концентрації одної з речовин в твердому розчині вимагають окремо розрахованих Фур’є компонент). Крім того при розрахунках багатохвильової дифракції кількість різних Фур’є компонент для кожного матеріалу складає $N^2 - N + 1$ і база даних поляризуємостей стає дуже великою та незручною в користуванні.

Саме з описаних вище причин виникла необхідність створити програму (а точніше бібліотеку) для розрахунку Фур’є компонент поляризуємостей для до-

вільних рефлексів та найбільш поширених структур. В основу програми покладено загальні принципи розрахунку поляризуємості описані в [68]. Для складених структур поляризуємість розраховується на основі закону Вегарда. Поправки f' , f'' а також всі необхідні для розрахунку f_0 атомні константи для різних елементів запозичені з програми ХОР [66]. Оскільки всі поправки коректні навіть на краях поглинання різних матеріалів, розроблена бібліотека не має обмежень на область застосування по частотам випромінювання, що використовується. Файли з описом взаємного розташування атомів в складених структурах запозичені з програми Степанова X0h. На рис. 5.3 графічно зображено структуру розробленої бібліотеки.

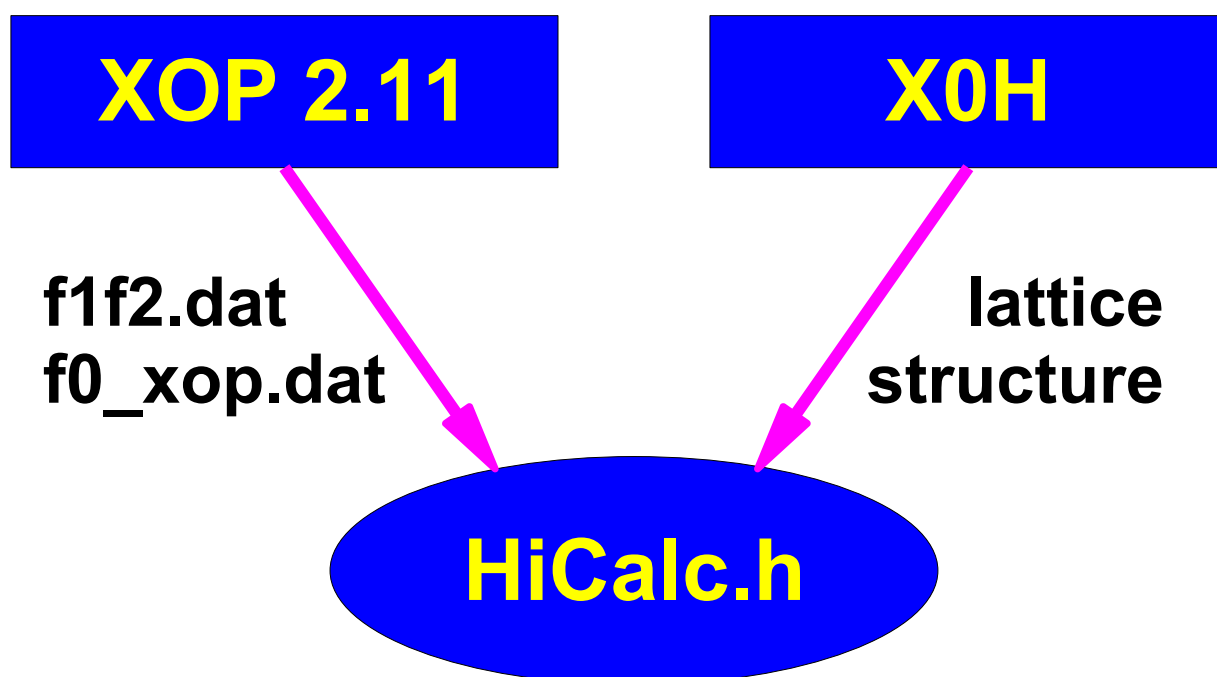


Рис. 5.3. Структура бібліотеки для розрахунку Фур'є компонент поляризуємості.

Ця бібліотека, написана мовою C++, може бути вільно завантажена з сайту <http://x-ray.net.ua> та використана на умовах ліцензії GPL.

5.5 Перехідна область між шарами

Завдання визначення структури вирощеної надґратки далеко від однозначної реалізації і методи аналізу багат шарових структур, що широко застосовуються

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

Даний підхід не новий і багато авторів [56, 57, 58] [1,2,3] раніше вводили подібні градієнти для поліпшення збігу експериментальної і модельованої кривої. Проте, це були або моделі з симетричним профілем [57], або змінювалася тільки глибина проникнення градієнта [56, 58] при незмінній формі. Крім того, в цих роботах не була помічена зміна ефективних товщини шарів залежно від градієнта складу.

Методика моделювання.

Розглядатимемо псевдоморфне зростання кристалів з кубічною симетрією. Величина параметра ґратки, паралельного площинам що відбивають, в цьому випадку залишається постійною і рівною відповідному параметру не напруженої підкладки (це з великою точністю відповідає дійсності, оскільки деформація розтягування в більш товстому шарі періоду надґратки на порядки менше, ніж більш тонкого), а величина перпендикулярного параметра змінюватиметься залежно від складу [59]. При цьому вважа-

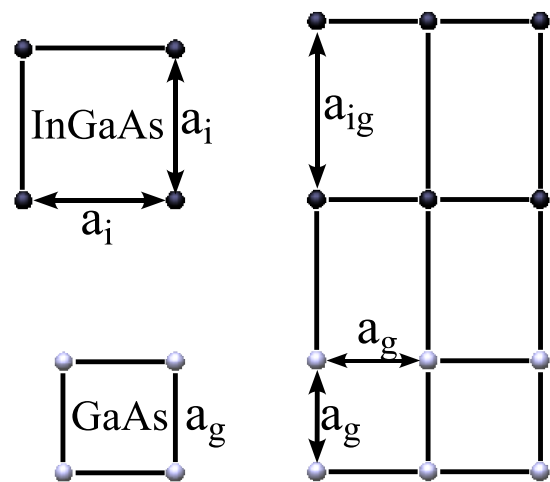


Рис. 5.4. Модель зростання InGaAs плівки на GaAs підкладці. Зліва – релаксована ґратка, справа – напружений InGaAs.

тимемо, що вирощена структура повністю напружена (рис. 5.4) і

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

де ν - коефіцієнт Пуассона розтягнутого шару [8].

Зміна локального параметра ґратки, нормального до шарів, що відбивають (a_{ig}) приводить до зміни вектора дифракції h , оскільки

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

де m_1, m_2, m_3 - індекси Міллера відбиваючих площин. Таким чином, деформація структури впливає на просторове положення дифрагованого променя.

Криві дифракційного відбиття моделювалися для рефлексів 004 і 113 для випадку двох плоских хвиль методом [24], що цілком правомірно для планарної структури. Для збільшення точності хвилові вектори знаходились чисельно [44]. Крім того, моделювання було проведено і за допомогою рівнянь Такаґі [1], проте цей метод дав практично ті самі результати.

Експериментальні КДВ були взяті з роботи [60]. Дана структура складалася з товстої GaAs підкладки (близько 300 мкм, орієнтації 100) з нанесеними за допомогою МПЕ 8 періодами $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ шарів. Технологічно задані товщини окремих шарів періоду складали відповідно 40 і 113 Å. При моделюванні ці шари розбивалися на значно тонші (близько 0.1 Å) підшари, параметри яких змінювалися відповідно до вибраної моделі градієнта складу. На перший погляд, величина параметра 0.1 Å, який в десятки разів менше параметра ґратки, здається не фізичною, проте, рентгеноструктурний аналіз є інтегральним в латеральному напрямку методом (площа поверхні зразка, що бере участь у формуванні дифракційної картини, може складати декілька мм^2), тому можна вважати параметри структури такими, що змінюються безперервно за глибиною. Для збільшення швидкості розрахунку, та частина зразка склад якої залишався постійним, не розбивалася на підшари.

Основним параметром матеріалу, який впливає на дифракцію, є кристалічна будова речовини. Оскільки ми розглядаємо кубічну методом ґратку і деякий фі-

ксований рефлекс, то єдиним параметром кристалічної будови матеріалу, який ми можемо змінювати при моделюванні, є відстань між атомами. При розгляді псевдоморфного росту кристалу, латеральні параметри ґратки (ті, що лежать в площині зростання) не змінюються при варіюванні складу вирощуваної плівки. Окрім того, при використанні симетричного рефлексу вони не впливають на дифракцію. Відповідно залишається тільки один параметр ґратки, що відображає зміну складу – перпендикулярний до площини, що відбиває. Саме його ми і варіюватимемо для подальшого моделювання структур з складним градієнтом складу. Окрім цього параметра, треба ще врахувати поляризуємість, яка також залежить від матеріалу, на якому відбувається дифракція. Проте необхідно відмітити, що її вплив для незаборонених рефлексів дуже малий. У подальшому під зміною складу ми будемо розуміти зміну параметра ґратки, хоча при розрахунках описані нижче підходи, в рівній мірі, застосовувалися і до поляризуємості.

Були розглянуті 4 види градієнта на межі розділу шарів:

1. різкий (ідеальні шари);
2. лінійний;
3. квадратичний;
4. квадратично-гіперболічний.

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

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

Різкий градієнт.

Це найпростіший випадок (синім на вставці в рис. 5.5 та 5.6), який звичайно розглядають при моделюванні багатошарової структури. Використовуючи цю модель, можна визначити період структури (сумарну товщину $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} + \text{GaAs}$

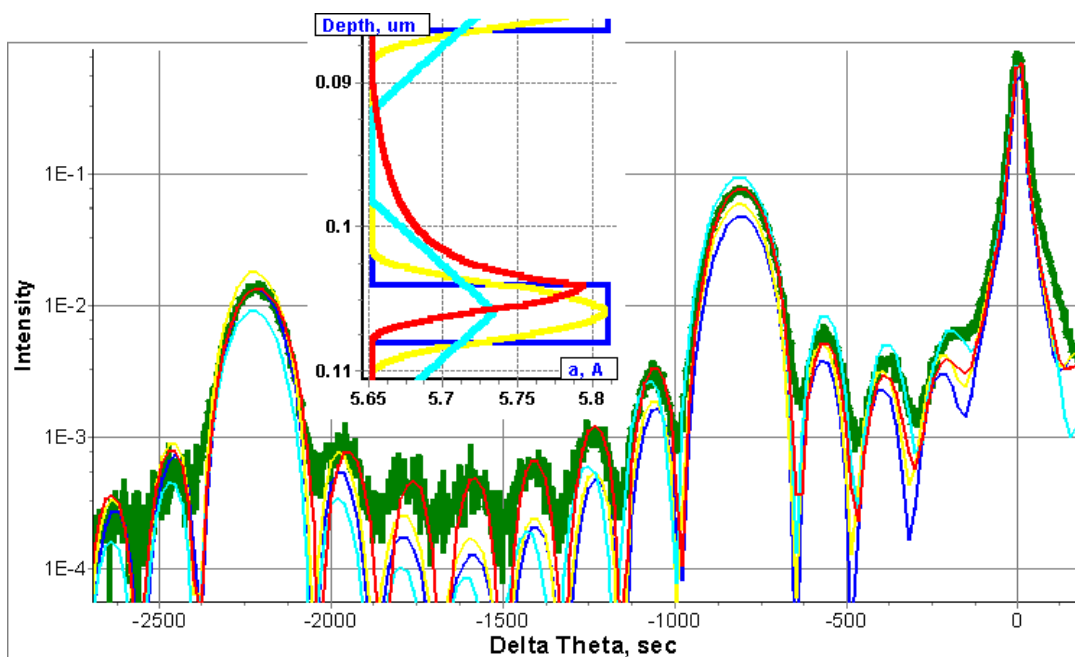


Рис. 5.5. Експериментальна (зеленим) і модельовані КДВ для рефлексу 113 від даної структури з: різким (синім), лінійним (блакитним), квадратичним (жовтим) і гіперболічним (червоним) градієнтом на інтерфейсі між шарами (на вставці по осі x – нормальний параметр ґратки, по y – глибина залягання підшару).

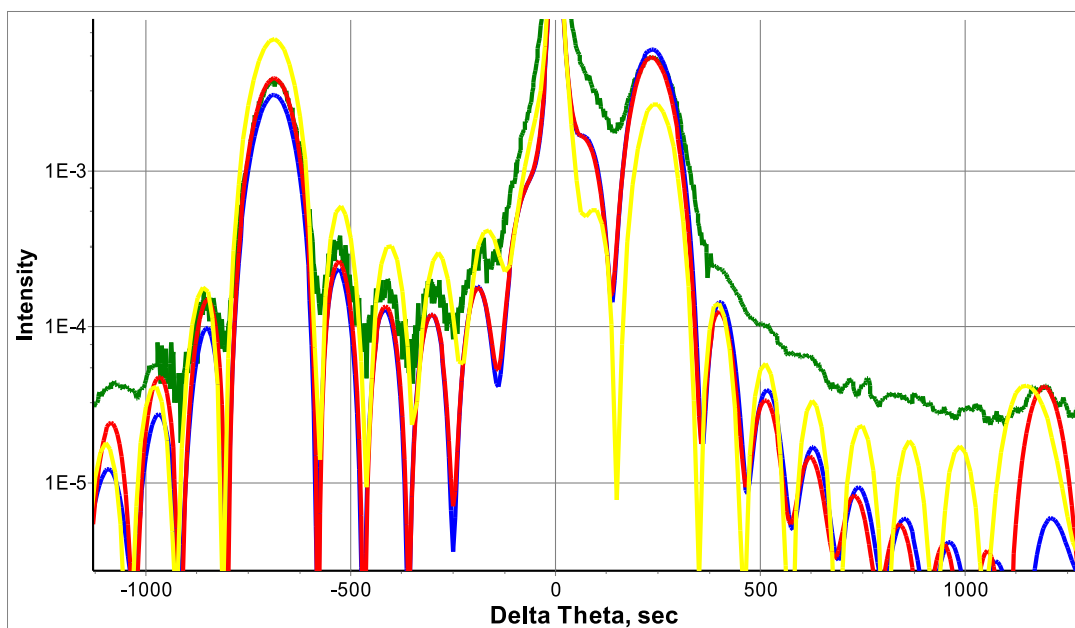


Рис. 5.6. Експериментальна (зеленим) і модельовані КДВ для рефлексу 004 від даної структури з: різким (синім), лінійним (жовтим) і гіперболічним (червоним) градієнтом на інтерфейсі між шарами.

шарів), і, з деякою точністю, співвідношення товщин цих шарів. Проте, при використанні цієї моделі практично неможливо підігнати інтенсивності піків, сателітів на кривій гойдання для узгодження з експериментом (рис. 5.5).

Лінійний градієнт.

Досить просто задати градієнт, що змінюється за лінійним законом (блакитним на вставці в рис. 5.5). В цьому випадку ми задавали глибину проникнення градієнта (e_t на рис. 5.7) в обидва шари і функціональну залежність градієнта складу, що відповідно зверху і знизу від межі розділу шарів виражалася формулами:

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

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

Цікавий ефект можна відмітити для рефлексу 004 (рис. 5.6): перший сателіт КДВ з лінійним градієнтом (жовта крива) є зсунутим відносно інших модельних кривих - подібний ефект іноді спостерігається на експерименті.

Для досліджуваних структур подібний вид градієнта не дозволив отримати задовільного збігу інтенсивностей піків, сателітів (рис. 5.5 і рис. 5.6).

Квадратичний градієнт.

Більш фізичною (з міркувань відсутності різких змін складу) видається квадратична модель градієнта складу на межах шарів (рис. 5.7). Його функціональна залежність за умови рівності нулю похідних в точках А і В і наявність перегину в точці С буде наступна:

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

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

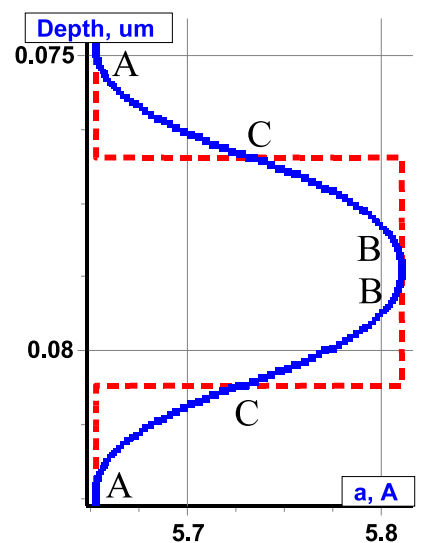


Рис. 5.7. Квадратичний градієнт (синім).

знову таки вище і нижче межі розділу.

КДВ для даного виду градієнта показана жовтим на рис. 5.5 і рис. 5.6.

Гіперболічний градієнт.

В процесі вирощування структури методом МПЕ, процес однакової взаємодифузії між різними шарами є маловірогідним. Особливо це буде помітно за відсутності пауз при вирощуванні різних шарів і різної адсорбційної здатності матеріалів, з яких складаються ці шари. У нашому випадку ($\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ з більш товстим GaAs шаром) можливий градієнт складу, показаний на рис. 5.8.

В області з великим параметром ґратки (InGaAs – за рахунок присутності In) концентрація In зростає майже лінійно (для згладжування кутів була обрана описана вище квадратична інтерполяція), а в області з меншим параметром ґратки (GaAs) концентрація In зменшується по гіперболі, що описується формулою:

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

де h - максимальна різниця параметрів суміжних шарів (зазвичай $h = a_0 - a_1$ - рис. 5.8), c - параметр кривизни гіперболи, що змінюється від 0 (велика кривизна) до 1 (майже пряма лінія).

Площа $t \cdot (a_1 - a_0)$ пропорційна кількості In в InGaAs шарі відповідної площі S_1 (як параметр моделі задається співвідношення $k = \frac{S_1 \cdot 100\%}{t \cdot (a_1 - a_0)}$), повинна бути рівна площі S_2 (рис. 5.9):

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

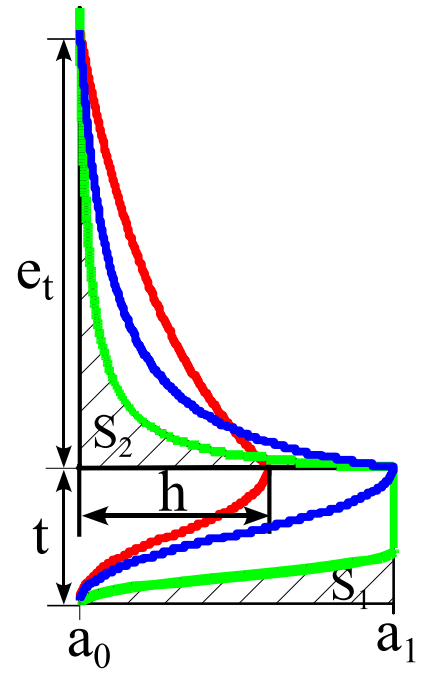


Рис. 5.8. Гіперболічний градієнт. Зелена крива $k = 80\%$, синя $k = 50\%$, червона $k = 30\%$.

З цієї умови підбирається параметр c . Проте, це рівняння виходить істотно нелінійним відносно c . Звичайно, можна розв'язувати його чисельно, проте висока точність в даному випадку не є для нас критична, оскільки ми і так робимо значно істотніші і слабо обгрунтовані припущення (наприклад, форма кривої, що обмежує площу S_1). Виходячи з цього можна апроксимувати функцію $f(c) = c \cdot (1 - (c + 1) \cdot \ln \left| \frac{c+1}{c} \right|)$ у діапазоні значень c від 0 до 1 так: $f'(c) = \frac{0.10661}{c+0.2443} - 0.46914$ (рис. 5.9).

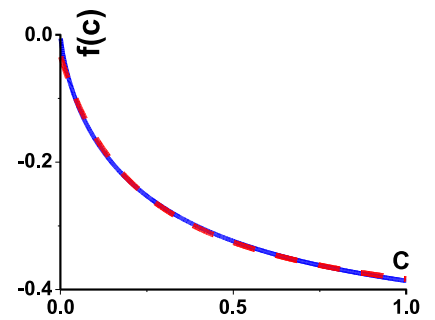


Рис. 5.9. Апроксимація функції $f(c)$.

Підставивши цю апроксимацію у вираз для S_2 , легко знайти значення параметра c :

$$c = \frac{0.10661}{0.46914 - \frac{(1-k) \cdot t \cdot (a_1 - a_0)}{e_t \cdot h}} - 0.2443.$$

Як видно з рис. 5.5 і рис. 5.6, подібна модель градієнта складу на межах шарів дозволяє отримати хорошу відповідність інтенсивностей піків експериментальної і змодельованої кривих.

Обговорення.

Якщо для перших трьох форм градієнта за товщину шарів обирається напівширина, то у випадку гіперболічного градієнта цей параметр вимагає окремого обговорення. Дійсно, судячи з рис. 5.8, достатньо важко сказати, де саме вимірюється товщина InGaAs шару. На наш погляд, найбільш фізично правильним є обирати цей параметр виходячи з кількості речовини витраченої при створенні структури. Тобто при вирощуванні в структуру ввели таку кількість InGaAs, яка займає на рис. 5.8 площу рівну: $(a_0 - a_1) \cdot t$, де t - і є товщина шару, що фігурує в усіх наших моделях. Далі градієнт складу формується так, щоб ця площа залишалася постійною (як це робиться, описано вище).

Відмітимо, що якщо для перших трьох моделей товщини шарів In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs при моделюванні КДВ бралися рівними 38.5/163 Å відповідно, то для останнього випадку ця товщина була 39.5/162 Å. Тобто, розподілені за

деяким об'ємом атоми In дають менший внесок в дифракцію, ніж локалізовані у вузькому шарі. Це означає, що якщо ми визначатимемо склад вирощених структур методом рентгено-структурного аналізу, підганяючи промодельовану криву гойдання до одержаної експериментально, і використовуючи при цьому припущення про різкість перехідної межі між шарами, то ми можемо зробити невірні висновки кількості вирощеного того або іншого матеріалу. Тим самим ми невірною визначимо будову багат шарової структури.

Висновки.

З аналізу проведених розрахунків можна зробити наступні висновки:

1. Введення різної форми градієнта складу на межах шарів не впливає на визначення періоду структури, проте впливає на визначення співвідношення товщини шарів $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$.
2. Завдяки градієнту концентрації можна отримати добрий збіг інтенсивностей експериментальних і модельованих піків сателітів.
3. Для однозначного з'ясування форми перехідної області між шарами необхідно спільно аналізувати КДВ від симетричних і несиметричних рефлексів або побудувати двовимірну карту розподілу інтенсивностей.
4. Для деяких типів градієнта між шарами, сателітна структура втрачає свою періодичність.

Незважаючи на позитивні здобутки, що можна отримати шляхом введення різних перехідних областей між шарами, треба відмітити і недоліки запропонованого підходу. Справа в тому що на різній глибині та між шарами з різних матеріалів можуть існувати різні перехідні області, як за формою зміни концентрації так і за глибиною проникнення в шари. Тому некоректно задавати однакову перехідну область для всієї структури. При такому моделюванні неможливо отримати

повне співпадіння модельної та експериментальної КДВ. Крім того однозначність подібного розгляду вимагає подальшого аналізу.

В розділі 5.6 буде продемонстровано більш точний метод аналізу перехідних областей між шарами в багат шарових структурах.

5.6 Автофітування кривих

Врахування градієнта складу на межі шарів дозволяє отримати хорошу відповідність між інтенсивностями основних сателітів промодельованої та експериментальної кривих поблизу точного кута Бреґґа підкалдинки. Однак досягти співпадіння товщинних осциляцій всієї структури та далеко від піка підкалдки таким чином не вдається. Пов'язано це з тим, що всі періоди надгратки вважаються однаковими, але насправді ця умова майже ніколи точно не виконується. З цієї причини необхідно розраховувати параметри кожного шару окремо, а зробити це вручну майже неможливо. Саме тому для успішного розв'язку зворотної задачі, якою і є рентгеноструктурний аналіз, необхідно використовувати методи підгонки (автофітування). В роботі було використано генетичний алгоритм Вормінгтона [69] (рис. 5.10).

Нажаль використаний алгоритм дуже повільний, тому підгонка робилась по малій кількості параметрів (товщина, нормальний параметр ґратки та фактор Дебая-Валлера кожного шару), а оскільки структура складалась з GaAs підкалдинки з вісім'ю періодами InGaAs/GaAs, то сумарна кількість параметрів була біля 50. Для кращого співпадіння фітованої кривої з експериментальною необхідно розбивати кожен шар на підшари і тоді можна отримати точну інформацію про структуру по товщині. Однак при такому підході на порядки збільшується кількість параметрів, по яким проводиться підгонка, і відповідний час, необхідний для виконання цього фітування.

Необхідно ще зазначити, що для автоматизованого визначення параметрів структури необхідно виключити вплив вимірюючого приладу, тобто зробити деконволюцію між експериментально вимірюваною кривою та кривою, що відповідає апа-

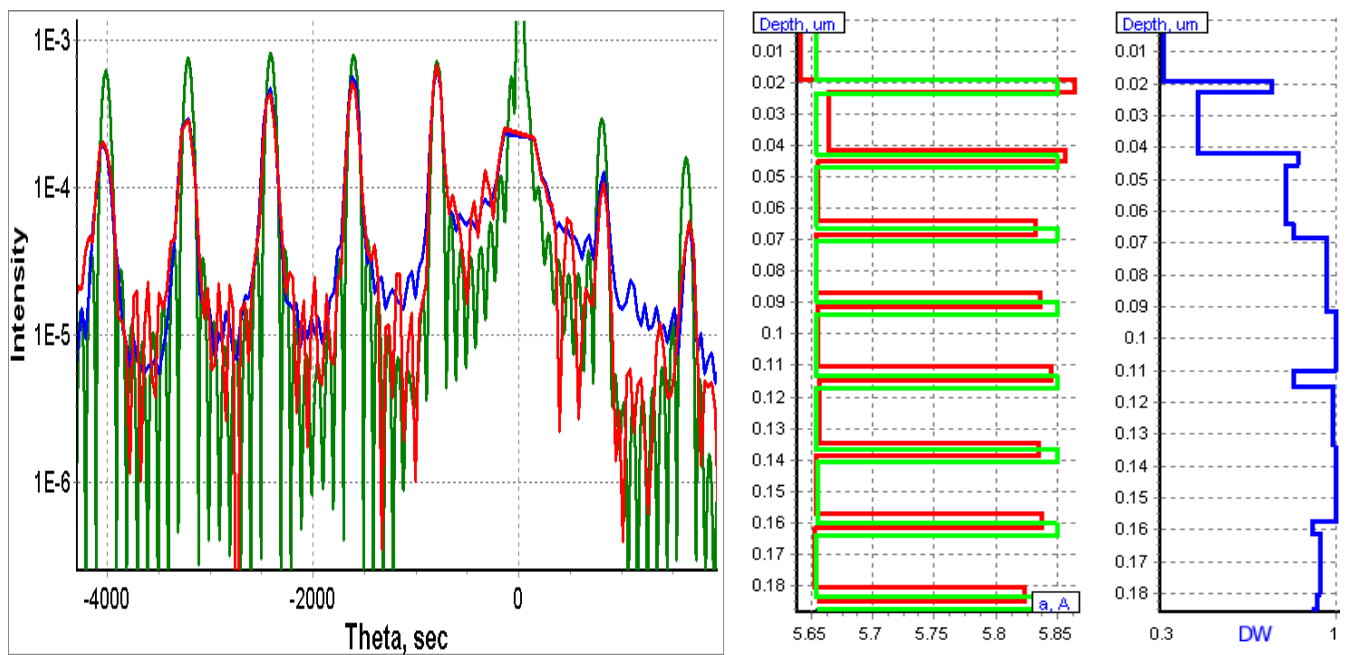


Рис. 5.10. Автофітування. а) КДВ: експериментальна - синім, модельована з різкими межами - зеленим, автофітована - червоним; б) параметр ґратки: початковий - зеленим, після підгонки - червоним; в) фактор Дебая-Валлера після фітування (до фітування було 0.9 для всіх шарів)

ратній функції дифрактометра. Для цього в розроблений під час виконання дисертаційної роботи програмі (див. додаток 1) було програмно реалізовано один з методів деконволюції. Однак визначення апаратної функції прилада є досить складною задачею, яка потребує окремого розгляду.

Ще одна проблема, яку необхідно буде вирішити, – однозначність результатів. Справа в тому, що при визначенні параметрів структури по одному лише скану не завжди можна отримати однозначну інформацію про об'єкт, що досліджується. Для збільшення точності та однозначності необхідно робити підгонку одночасно для декількох рефлексів та рефлектиметричних кривих [?]. Крім того необхідно паралельно застосовувати азимутально-залежне сканування, тому що інакше можна отримати хибну інформацію про структуру (див. 5.7). Тому, хоч в рамках цієї дисертаційної роботи і продемонстровано принципову можливість і переваги використання автофітування, але розробка цих методів потребує окремого дослідження, яке буде проведено в подальшому.

5.7 Вплив анізотропії полів деформації в багатошарових структурах (InGa)As/GaAs на дифракцію рентгенівських променів.

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

Вплив розорієнтації підкладки на криві дифракційного відбиття продемонстровано в підручниках з рентгено-структурного аналізу [8], проте при вирощуванні багатошарової структури на такій підкладці зазвичай виникають додаткові розорієнтації в окремих шарах [61]. Для мінімізації деформаційної енергії у шарах, що складаються з матеріалів з різними параметрами ґратки, їх кристалічна решітка може анізотропно спотворюватися [62].

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

Хоч ці факти і були описані раніше [61, 62], проте вони спостерігалися для великих кутів розорієнтації і не всі параметри деформацій були визначені.

Асиметричне спотворення ґратки призводить до зсуву брегівського піку щодо азимутальної орієнтації зразка. Це може призводити до помилок при інтерпретації кривих, оскільки вони можуть бути інтерпретовані як композиційні коливання або нахили площин в релаксаційних механізмах. Тому коректне визначення параметрів розорієнтованих псевдоморфних зразків повинно базуватися на при-

пущенні про асиметричні спотворення деформованих елементарних комірок.

Ще одним джерелом інформації про досліджувані зразки є амплітуди піків сателітів на КДВ [45]. Цей метод, детально описаний в розділі 5.5, був застосований і для інтерпретації цих експериментів.

Пропонується модель, яка дозволяє розрахувати дифракційний профіль псевдоморфних багатошарових структур, вирощених на довільно орієнтованій підкладці. Зосередимо також увагу на деяких геометричних аспектах, пов'язаних з вивченням дифракції рентгенівського випромінювання на розорієнтованих підкладках.

Експериментальна методика

Досліджувані зразки були вирощені на GaAs підкладці з орієнтацією 100 при допомозі МПЕ і склалися з 17 періодів $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ шарів з товщиною 33/189 ангстремів відповідно. Додаткова інформація про ці шари може бути знайдена [60].

Рентгенівські КДВ вимірювались в діапазоні 3° , поблизу точного кута Вульфа-Брегга для рефлексу 004 в $\omega/2\theta$ режимі на двокристальному спектрометрі (GaAs (001) монохроматор Cu $K\alpha$ випромінювання). КДВ вимірювались для азимутальних кутів 0° , 45° , 90° , 135° , 180° , 225° , 270° , 315° по відношенню до напрямку [110]. Вся інформація про структури була одержана зіставленням експериментальних і модельованих КДВ.

Азимутально-залежне моделювання КДВ

Для моделювання КДВ використовувався плоско-хвильовий рекурентний метод [24], цілком адекватний для планарних структур, а також розв'язок рівнянь Такагі [1]. Обидва методи дали ідентичні результати. Для підвищення точності хвильові вектори знаходилися чисельно [44]. Зміна азимутального кута моделювалася за допомогою зміни кутів розорієнтації InGaAs шарів і всієї структури в цілому за гармонійним законом.

Окрім описаних вище підходів, результати були перевірені за допомогою чистого тривимірного моделювання, заснованого на методі моделювання багатопроменевої дифракції [14]. У даному підході розглядаються x, y, z проекції векторів

оберненої ґратки і всіх $4 \cdot N$ хвильових векторів (де N – кількість точок зворотного простору, які беруть участь в дифракції), завдяки чому досить просто реалізувати азимутальне сканування зразка. Даний метод був модифікований для багатошарових структур [63] і застосований для аналізованих об'єктів. Результати моделювання повністю співпали з описаними вище двовимірними підходами.

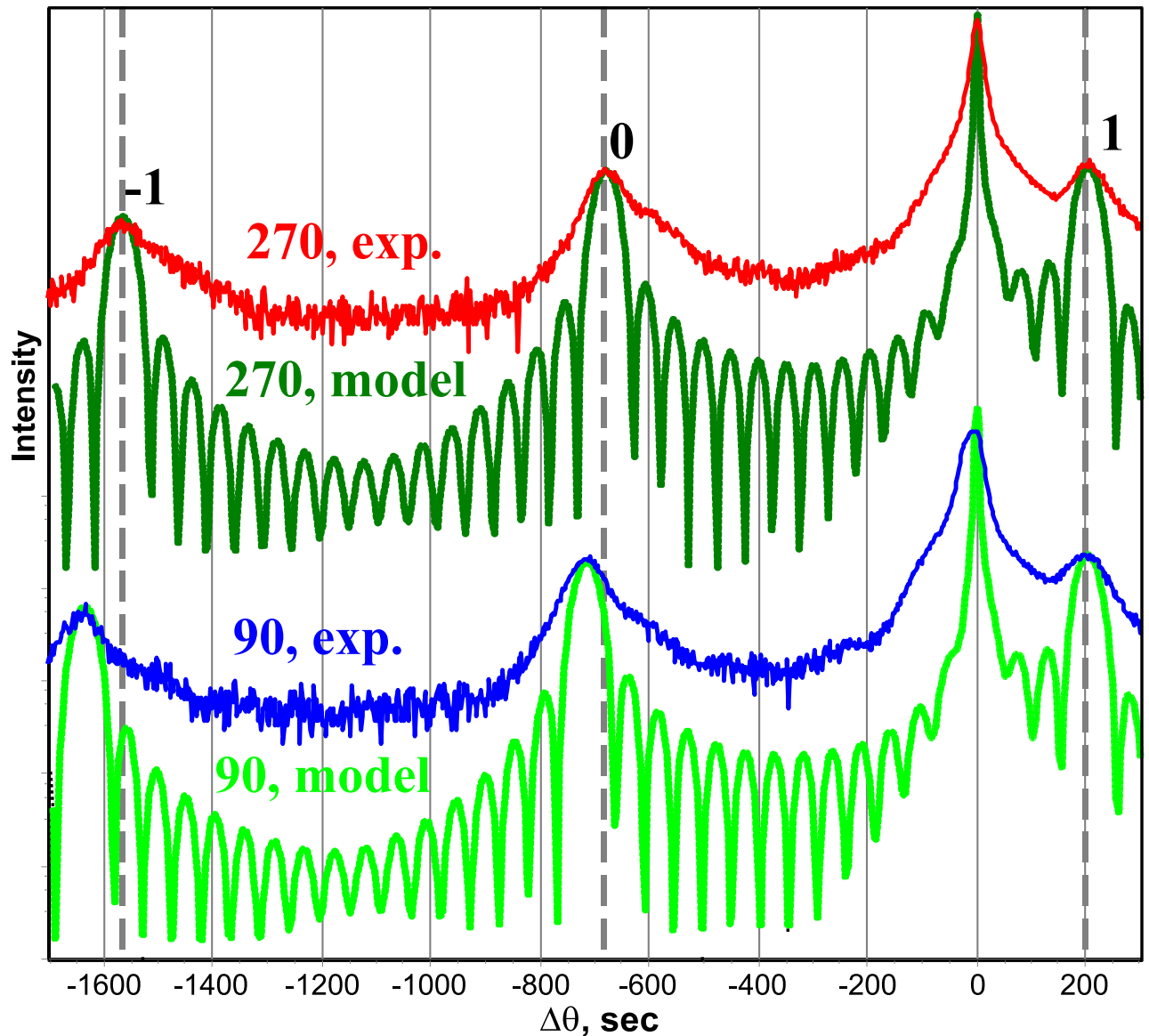


Рис. 5.11. Експериментальні (червоним та синім) і модельовані (зеленим і салатовим) КДВ для азимутальних кутів 90° (2 верхні криві) і 270° (2 нижні криві).

На рис. 5.11 показані дві пари експериментальних і змодельованих КДВ для азимутальних кутів 90° і 270° . Відстань між піками сателітів різна для різних азимутальних кутів. Це пояснюється наявністю розорієнтації підкладки, яка в

нашому випадку складала близько 40 кутових хвилин. Відзначимо, що ця розорієнтація зберігається і у всіх вирощених шарах.

Проте можна бачити що нульовий пік теж зсунутий і для пояснення цього факту зроблено припущення, що вектор дифракції деяких шарів нахилений щодо вектора дифракції підкладки. Оскільки InGaAs має більшу постійну ґратки ніж GaAs, то цілком закономірно, що за наявності анізотропії в структурі, що викликана розорієнтацією вектора дифракції підкладки щодо поверхні, можуть виникнути деформації, направлені на збільшення локального параметру ґратки для InGaAs шарів (рис. 5.12).

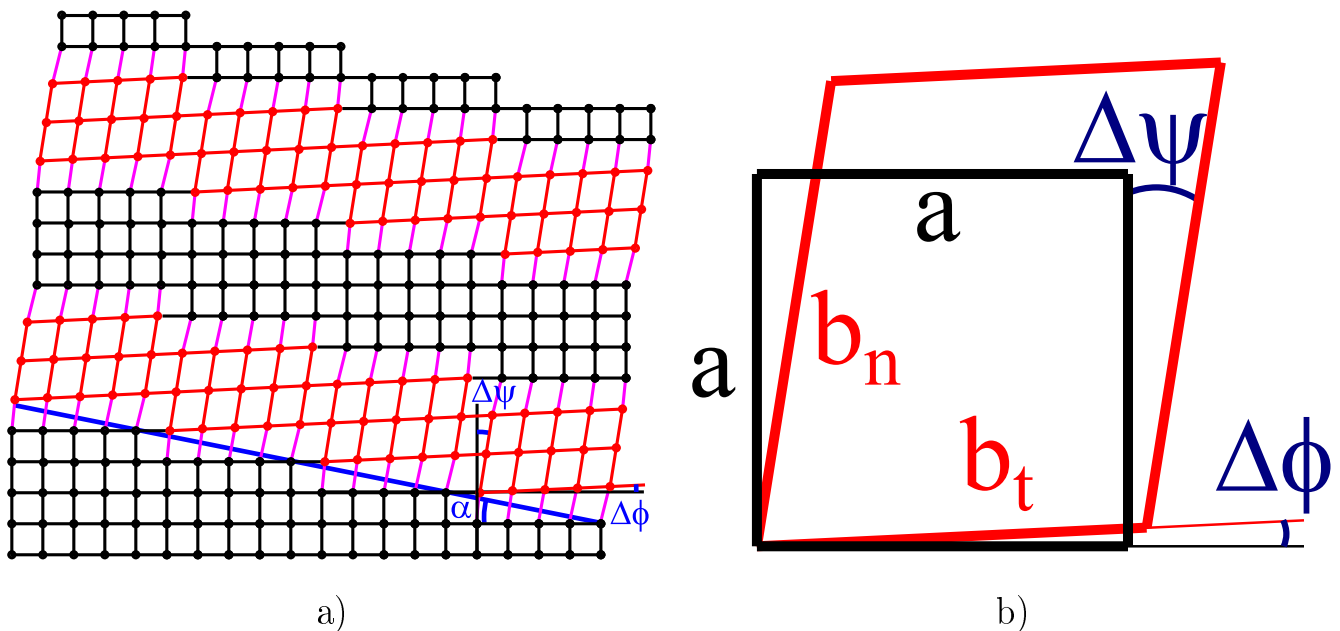


Рис. 5.12. Модель деформації кристалічної ґратки $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ зразка з розорієнтацією. Чорним – атоми GaAs, червоним - атоми InGaAs. а) вся багатошарова структура б) елементарна комірка. Тут α – кут розорієнтації підкладки, a - параметр ґратки GaAs b_n і b_t – нормальні і тангенціальні параметри ґратки напруженого InGaAs $\Delta\psi$ і $\Delta\phi$ – нормальні і тангенціальні кути розорієнтації атомних площин InGaAs.

На рис. 5.12а представлена модель спотвореної описаним вище чином кристалічної ґратки, а на рис. 5.12б спотворена елементарна комірка InGaAs і не спотворена для GaAs. Оскільки параметр ґратки для InGaAs b_t більш ніж a для GaAs, подібна деформація стає енергетично вигідною [62]. Крім того, необхідно окремо відзначити що подібна деформація не супроводжується утворенням дис-

локацій, отже збільшення енергії за рахунок їх появи не відбувається.

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

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

Перехідна область між шарами

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

Методику моделювання перехідної області між шарами детально описано в розділі 5.5 а в цьому розділі просто використано для демонстрації її можливостей 5.13.

Спроби моделювати КДВ при лінійному або квадратичному градієнті концентрації In та при однаковій глибині проникнення градієнта в обидва шари, що контактують, не дало задовільного результату. Тому була вибрана модель зміни параметрів представлена на вставці в рис. 5.13. У цій моделі вважається, що концентрація In, який абсорбуються на поверхні гірше, ніж Ga, збільшується поступово в InGaAs шарі, а надлишок In опиняється в GaAs шарі, де його концентрація падає за гіперболічним законом.

Як видно з рис. 5.13 таким чином досягається хороша відповідність інтенсивностей основних піків, проте між ними інтенсивність експериментальної кривої

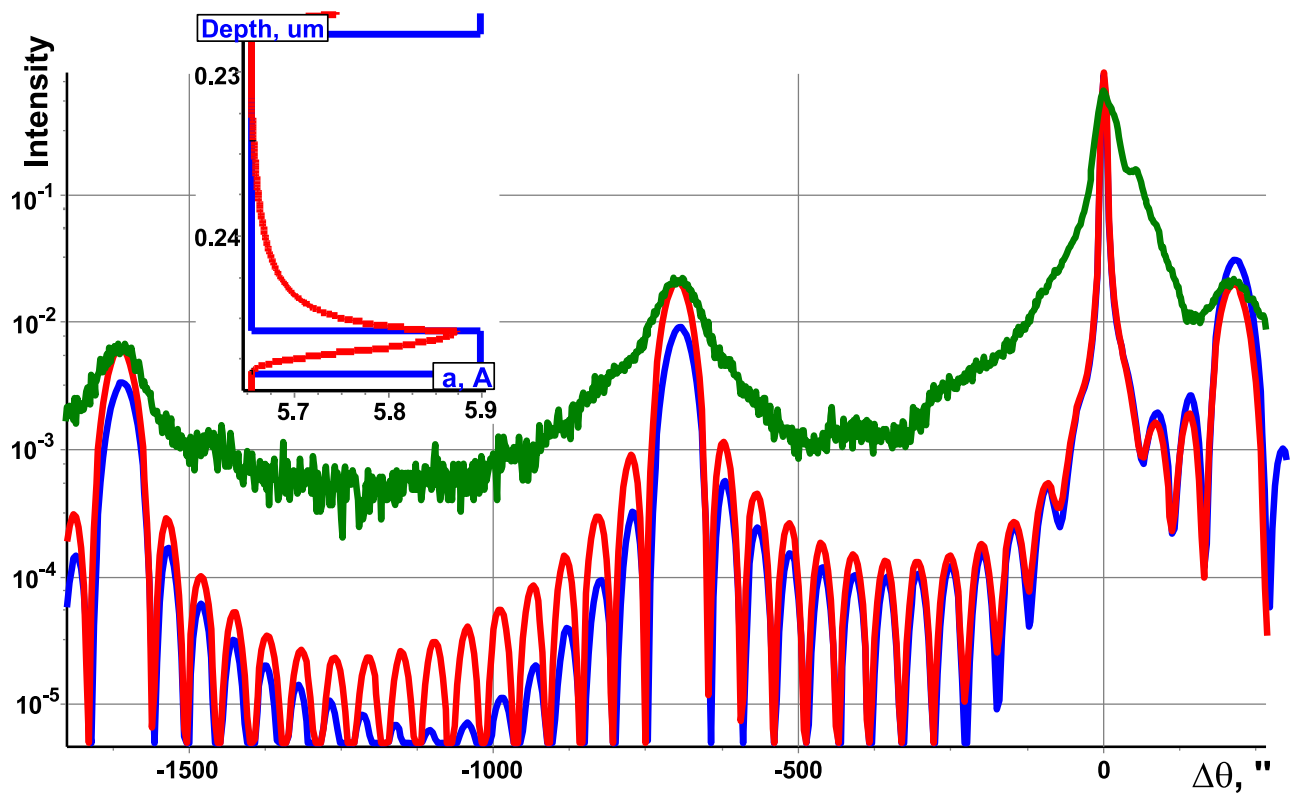


Рис. 5.13. Експериментальна (чорним) КДВ для рефлексу 400, КДВ для моделі з різким градієнтом (сірим, штрихами) і КДВ з гіперболічним градієнтом на інтерфейсі між шарами (чорним, пунктиром). На вставці параметри ґраток в ангстремах по осі x і глибина підшару в мкм по осі y : чорним - гіперболічний, сірим - різкий градієнт.

значно вище ніж у модельованій. Це пояснюється дисперсією товщини шарів в різних періодах структури [10].

Висновки

З аналізу приведених результатів, можна зробити наступні висновки:

- неврахування анізотропного характеру деформації при визначенні параметрів досліджуваних структур призводить до невірних висновків щодо структури зразків, що досліджуються, і навіть фізиці їх вирощування;
- азимутальні залежності КДВ дозволяють визначити параметри анізотропної деформації кристалічної ґратки, яка спостерігається навіть для дуже малих кутів розорієнтації структури (менше одного градуса);
- аналізуючи в комплексі КДВ для симетричних і асиметричних рефлексів можна визначити всі параметри спотвореної комірки кристалічної ґратки;

—підгонкою інтенсивностей піків, сателітів, що моделюються КДВ, під експериментальні можна визначити параметри інтерфейсу між різними шарами.

5.8 Азимутальні залежності дифракції як новий метод аналізу

Аналіз структур за допомогою рентгенівських променів зазвичай проводять таким чином: змінюють кут падіння випромінювання на зразок, або кут, під яким дифраговане випромінювання реєструється, і вимірюють інтенсивність дифрагованого пучка. Один з варіантів зміни геометрії падіння променя на зразок - це обертання зразка навколо нормалі до його поверхні - так зване азимутальне сканування. Такий тип вимірювання дозволяє легко знаходити анізотропні деформації структури (наприклад розорієнтацію атомних площин відносно поверхні). Крім того для асиметричних рефлексів цей метод дає можливість отримати інформацію про зразок навіть маючи малу кутову роздільну здатність дифрактометра по кутам обертання зразка (рис. 5.14).

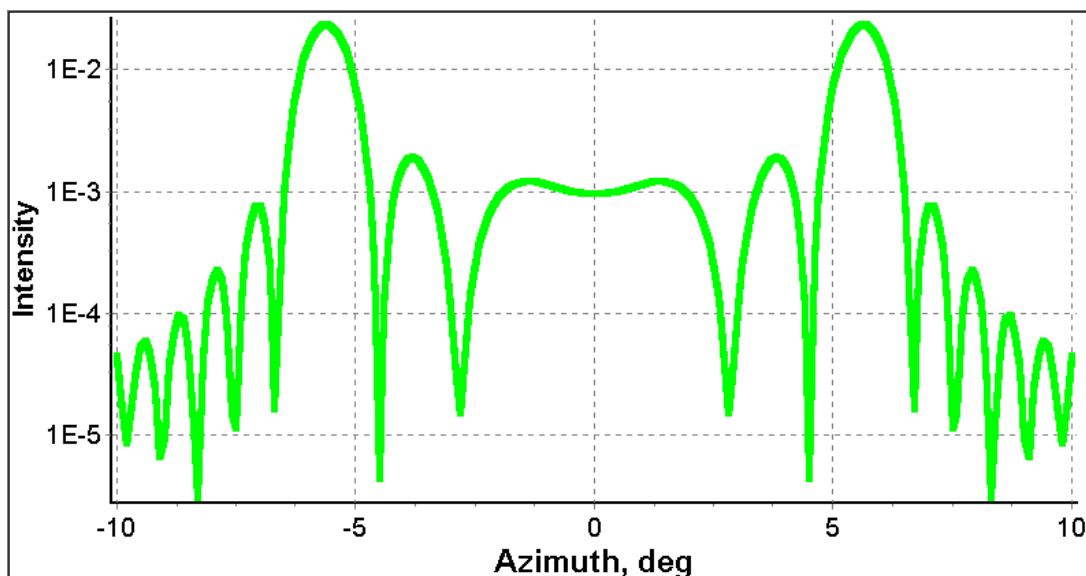


Рис. 5.14. Азимутальне сканування InGaAs/GaAs надгратки поблизу рефлексу 113.

Окрім простих азимутальних сканів можна використовувати комбінацію таких сканів із звичайним $\omega - 2\theta$ скануванням (рис. 5.15).

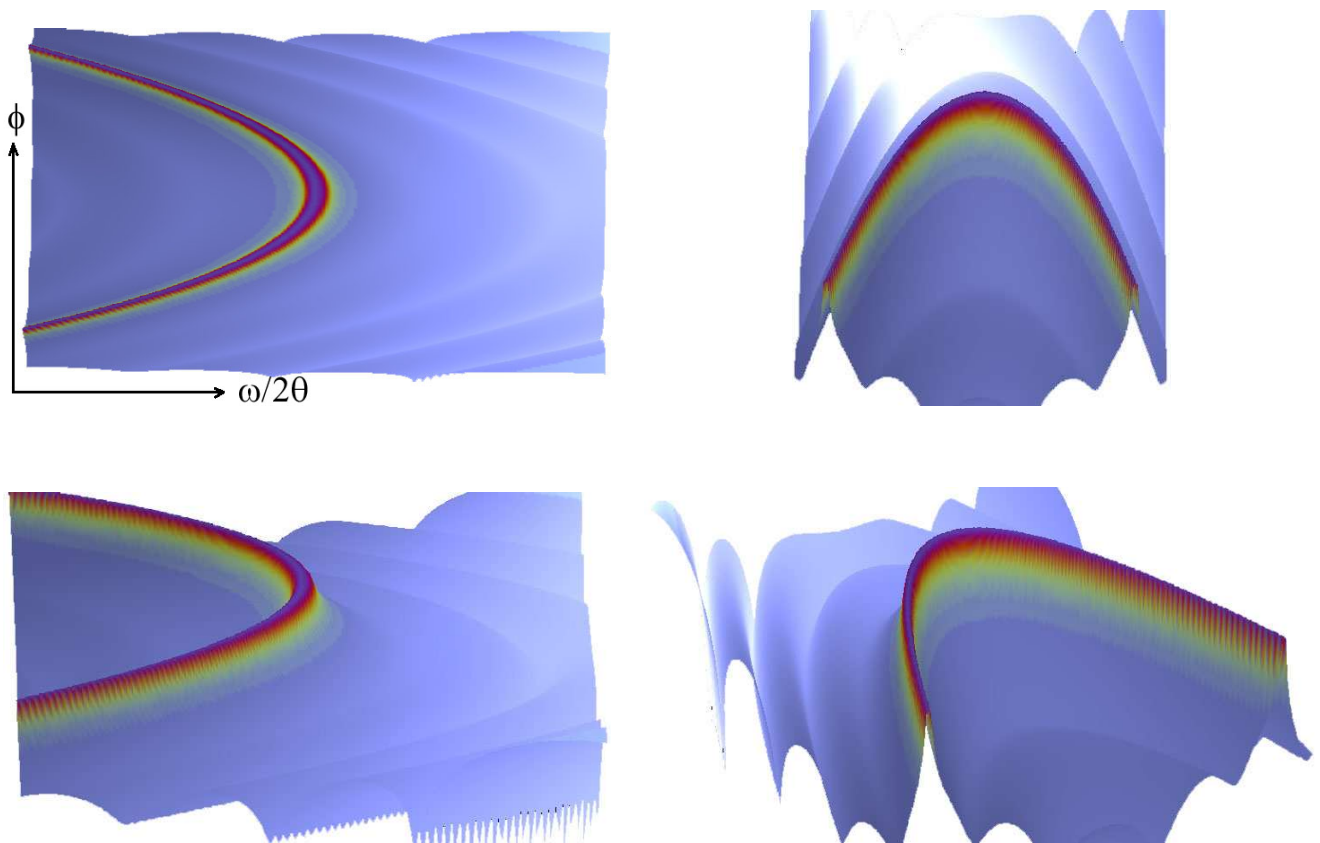


Рис. 5.15. Азимутальні карти від InGaAs/GaAs надгратки поблизу 113 рефлексу.

На рис. 5.16 зображено теоретично розрахована та експериментально виміряні азимутальні карти.

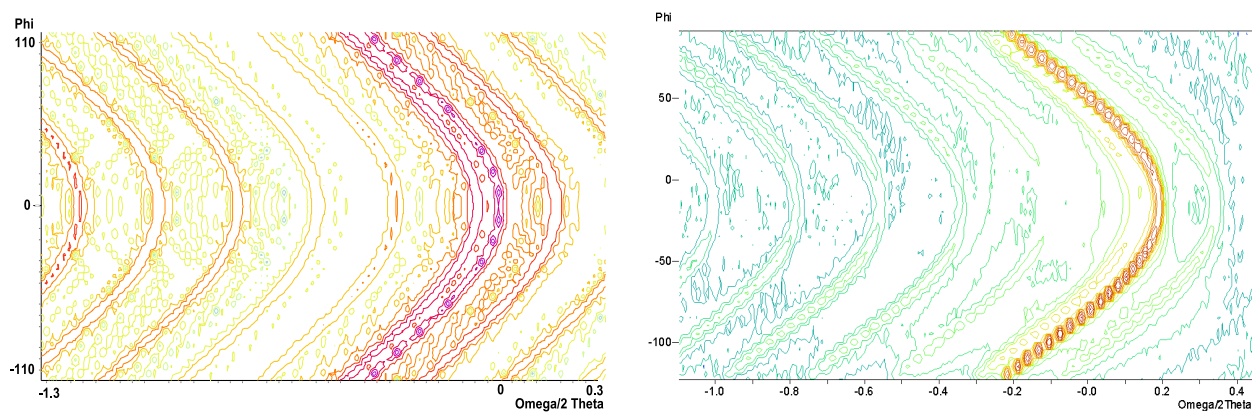


Рис. 5.16. Азимутальні карти рефлексу 113 від 8-шарвої InGaAs/GaAs (8нм/40нм) надгратки. Зліва - теоретично розрахований, зправа - експериментальний.

Однак навіть потрібні такі збачення? Під час аналізу виміряних результа-

тів може виникнути неоднозначність інтерпретації отриманих КДВ пов'язана з азимутальною анізотропією зразку, що вимірюється. На рис. 5.17 зображено дві КДВ від 8-шарвої InGaAs/GaAs (8нм/40нм) надгратки: одна крива для нормальної, а друга – для структури в якій InGaAs шари мають розорієнтацію. Як бачимо ці криві майже однакові. Однак на азимутальній карті відразу можна побачити різницю і навіть виміряти розорієнтацію (рис. 5.18).

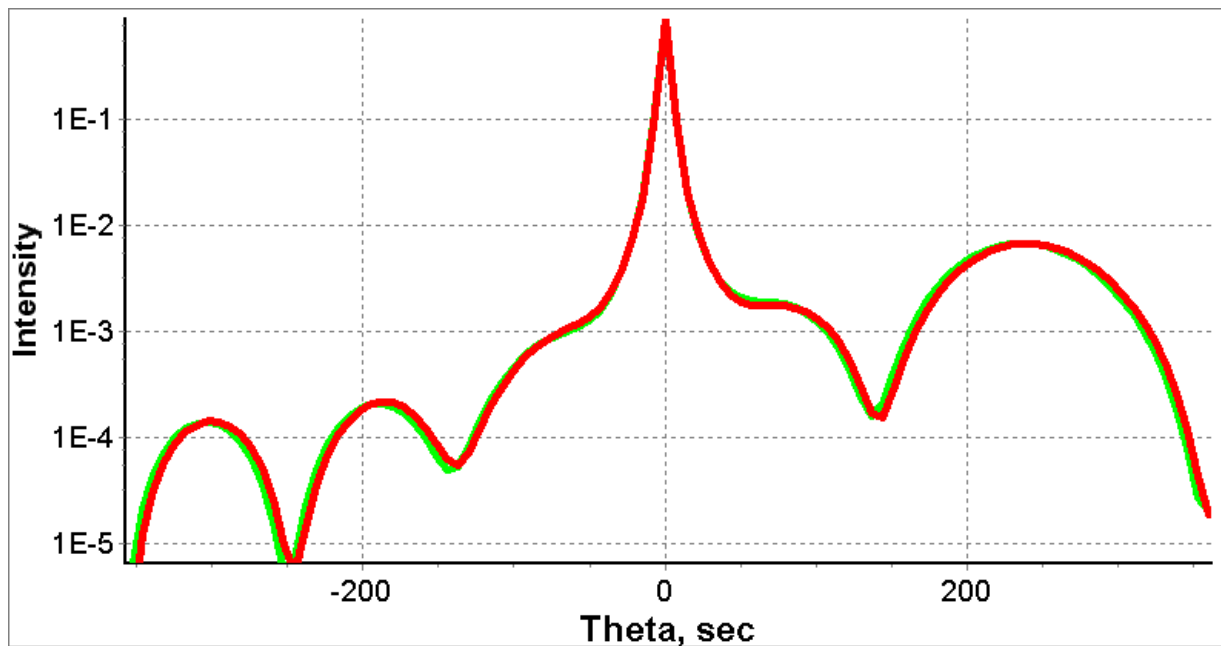


Рис. 5.17. КДВ рефлексу 004 від 8-шарвої InGaAs/GaAs (8нм/40нм) надгратки. Зеленим - з розорієнтацією InGaAs шарів, красним - без.

Ще одне використання азимутальних карт - для аналізу багатохвильової дифракції. На рис. 5.19 зображено випадок 6-хвильової дифракції від GaAs кристала. Основний (квазізаборонений) рефлекс 002 і ще чотири: 204 404 40-2 20-2.

Зрозуміло, що подібні вимірювання багатохвильової дифракції можливо проводити і для багатошарових структур для більш точного визначення їх параметрів. На конференції X-TOP 2006 було продемонстровано експериментальну роботу в якій досліджувались саме багатохвильові ефекти в шаруватих структурах. Ці ефекти були легко пояснено і промодельовано за допомогою розробленого в рамках цієї дисертаційної роботи методом.

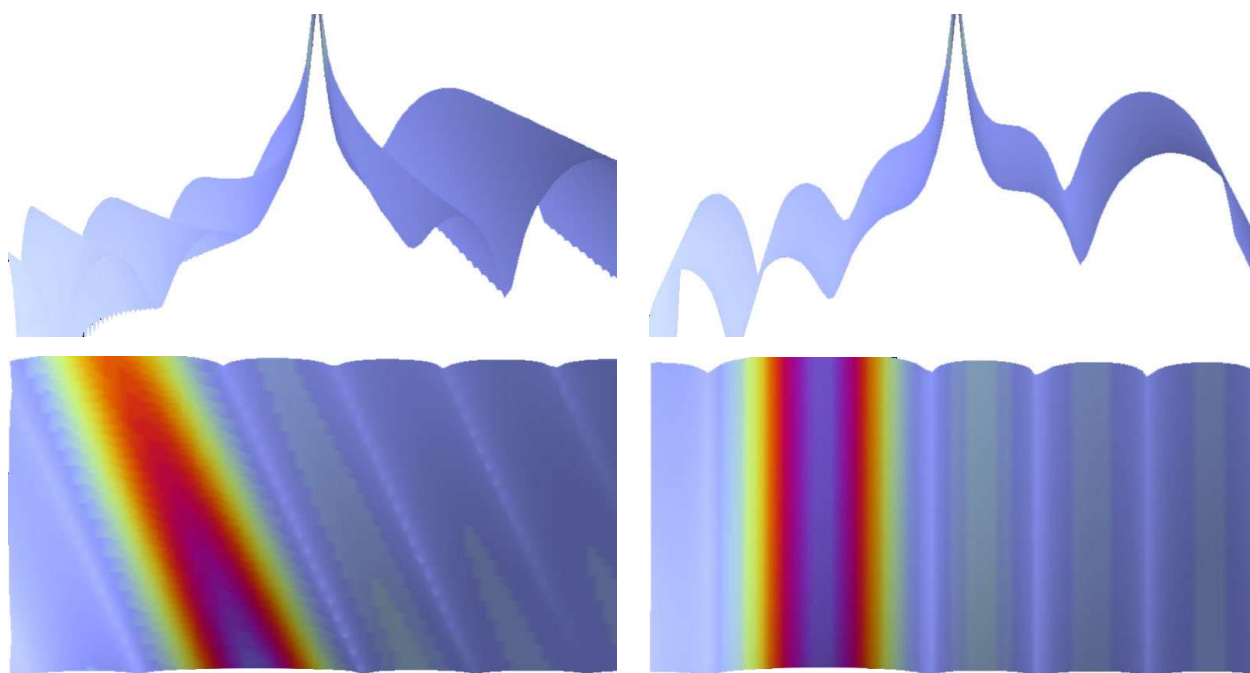


Рис. 5.18. Азимутальні карти рефлексу 004 від 8-шарвої InGaAs/GaAs (8нм/40нм) надгратки. Зліва - з розорієнтацією, зправа - без.

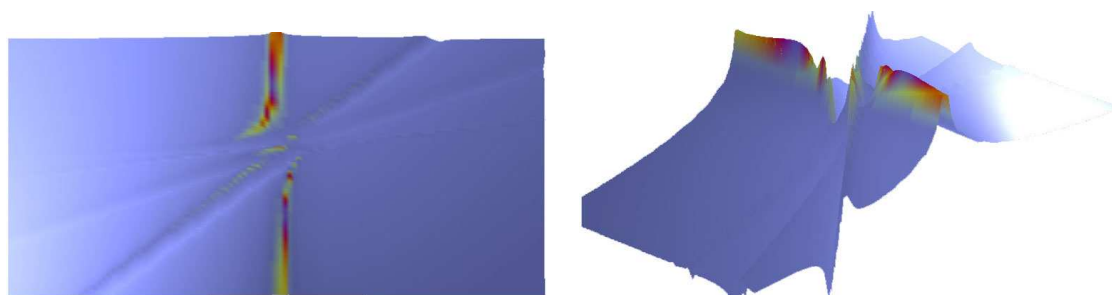


Рис. 5.19. Азимутальні карти рефлексів 000 002 204 404 40-2 20-2 від GaAs кристала.

5.9 Розрахунок карт зворотного простору(—)

Для однозначного визначення параметрів внутрішньої структури кристалічного твердого тіла методами рентгеноструктурного аналізу простих кривих дифракційного відбиття буває недостатньо. Тому виникає необхідність в більш інформативних методах вимірювання, так званих двомірних картах розподілу інтенсивності. Найбільш поширений вид таких карт є суміщенням $\omega/2\theta$ і ω сканування - так звані карти зворотного простору. Аналіз одержаних картин дуже часто проводиться просто емпіричним методом за аналогією з вже відомими з літера-

тури результатами.

Для більш якісного аналізу необхідне моделювання подібних карт розподілу інтенсивностей. Проте існуючі на сьогодні методи засновані або на кінематичних моделях або на рівняннях Такагі, що не блищать точністю. Плоскохвильова динамічна теорія є більш точною і широко застосовною, але має істотне обмеження - відсутність інформації про напрям дифрагованого променя.

У цьому розділі найбільш точний на сьогодні алгоритм розрахунку дифракції від шаруватих структур, що описано в розділі 4.2, застосований для побудови карт зворотного простору.

5.9.1 Карти для надграток що складаються з шарів двох типів

Метод, що описано в розділі 4.2, розраховує всі хвилі що виходять з кристала без урахування їх напрямку. Тому для моделювання реального експерименту з кінцевим детектором необхідний додатковий розрахунок напрямку дифрагованих променів.

На рис. 5.22 представлена схема, що пояснює дифракцію променів в багатошаровій структурі, що складається з двох різних матеріалів.

Вектора $\vec{K}_0$ і $\vec{K}_h$ – відповідно падаючий і дифрагований промені, O і O' – точки початку падаючого променя (центри кіл з радіусами K) для суцільних і пунктирних ліній відповідно, $\vec{h}_S$ і $\vec{h}_L$ - вектора оберненої ґратки підкладки і шару в повітрі; вздовж прямій LM спостерігається сателитна структура картини дифракції. Якщо шари абсолютно напружені, пряма LM буде паралельна нормалі $\vec{n}$, якщо абсолютно релаксовані – паралельна вектору $\vec{h}_S$ (тоді вектори $\vec{h}_S$ і $\vec{h}_L$ колінеарні). На мал. 1 зображений випадок частково релаксованих шарів.

Хай координати кінців векторів $\vec{h}_S = (h_{xs}, h_{ys}, h'_{zs})$ і $\vec{h}_L = (h_{xl}, h_{yl}, h'_{zl})$ (h'_{zs} і h'_{zl} - перераховані для повітря), початка і кінця вектора $\vec{K}_h = (K_x, K_y, K_z)$ і (x_h, y_h, z_h) . Тоді кінець вектора $\vec{K}_h$ можна знайти з умови знаходження цієї крапки на сфері з центром в точці O і радіусом K :

$$(x_h - K_x)^2 + (y_h - K_y)^2 + (z_h - K_z)^2 = 1 \quad (5.1)$$

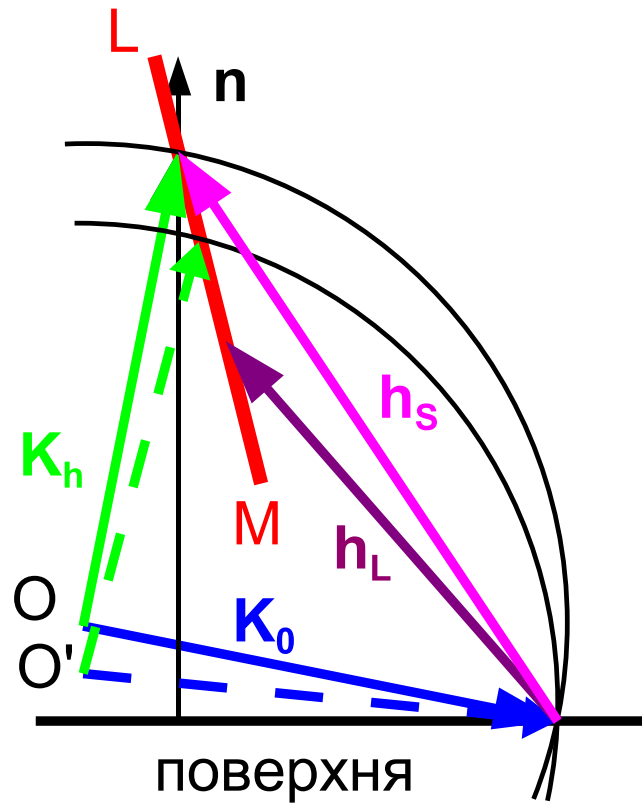


Рис. 5.20. Хід променів на поверхні структури, що складається з шарів з двох різних матеріалів.

і одночасно на прямій LM:

$$\frac{x_h - h_{xs}}{h_{xl} - h_{xs}} = \frac{y_h - h_{ys}}{h_{yl} - h_{ys}} = \frac{z_h - h'_{zs}}{h'_{zl} - h'_{zs}} \quad (5.2)$$

Розв'язками цієї системи будуть два корені, з яких вибирається найбільш близький до кінця дифрагованого від підкладки вектора. Таким чином можна знайти напрям вектора $\vec{K}_h$ від структури для даного кута падіння.

Оскільки ω -скан для плосковолнової динамічної теорії є дельта функцією (монохроматична хвиля і ніякої кутової розбіжності), необхідно вводити деяку апаратну функцію детектора – наприклад Гамма-функцію, функцію Лоренця або просто прямокутну щілину. Для побудови карти зворотного простору проводиться аналіз: чи потрапляє кут між проекцією дифрагованого променя в площину дифракції і положенням детектора (однозначно визначається з умови зв'язаного $\omega/2\theta$ сканування) в апаратну функцію. Якщо потрапляє – виводиться розрахована для даного кута падіння інтенсивність, якщо ні – нуль. На рис. 5.21

б) представлена експериментальна карта для рефлексу 113 8-слойной надгратки InGaAs/GaAs. На рис. 5.21 а) – промодельована описаним вище методом повністю напружена така ж структура.

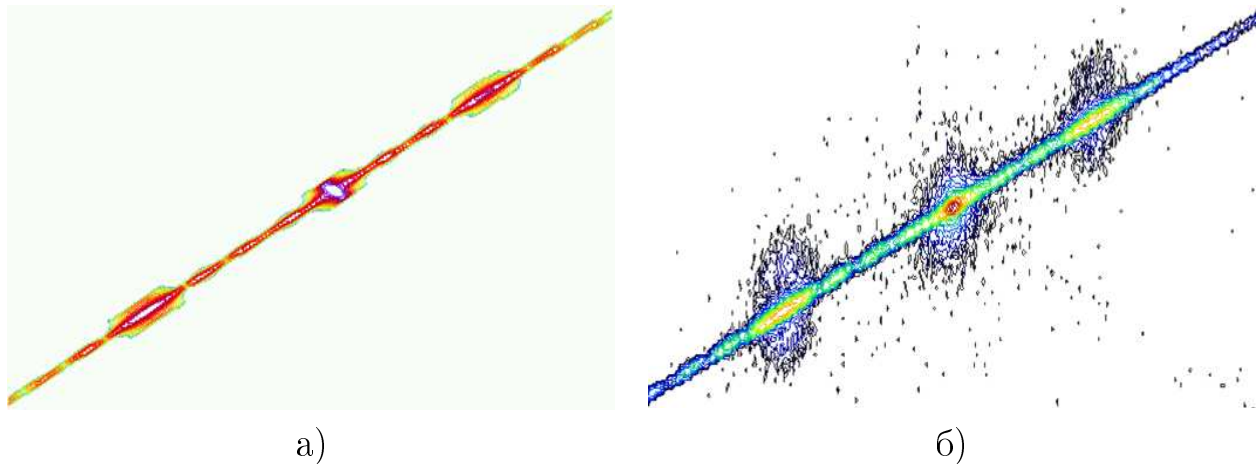


Рис. 5.21. Карта рефлексу 113 від 8-періодної надгратки $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ (40/113 Å) на GaAs підкладинці. а) модель, б) – експеримент. По осі $x - \omega/2\theta$ КДВ, по $y - \omega$.

Висновки.

Запропонований метод дозволяє розраховувати карти зворотного простору від багат шарових структур з довільними напругами і локальними разорієнтаціями в шарах.

Розрахувати карту зворотного простору запропонованим методом можна і на базі будь-якого плосковолнового підходу - просто треба спроектувати на площину дифракції все вектора в системі, проте правомірність такого підходу необхідно аналізувати у кожному випадку окремо. Використання описаного вище тривимірного алгоритму моделювання дифракції позбавляє від зайвих операцій і гарантує правильність розрахунку для планарних структур.

5.9.2 Карты для довільних надграток

Існує і інший метод побудови карт на базі описаного вище алгоритму розрахунку багатопроменевої дифракції: оскільки в розрахунках інформація про поляризацію падаючого променя задається тільки на останній стадії (??), можна розрахувати амплітуди дифрагованих променів сигма і пі поляризації і побуду-

вавши дві площини перпендикулярні цим амплітудам, лінія їх перетину і буде напрямом вектора $\vec{K}_h$. Хоч цей метод більш універсальний і вже випробуваний у дії, проте він ще не доведений до стану придатного для нормального використання.

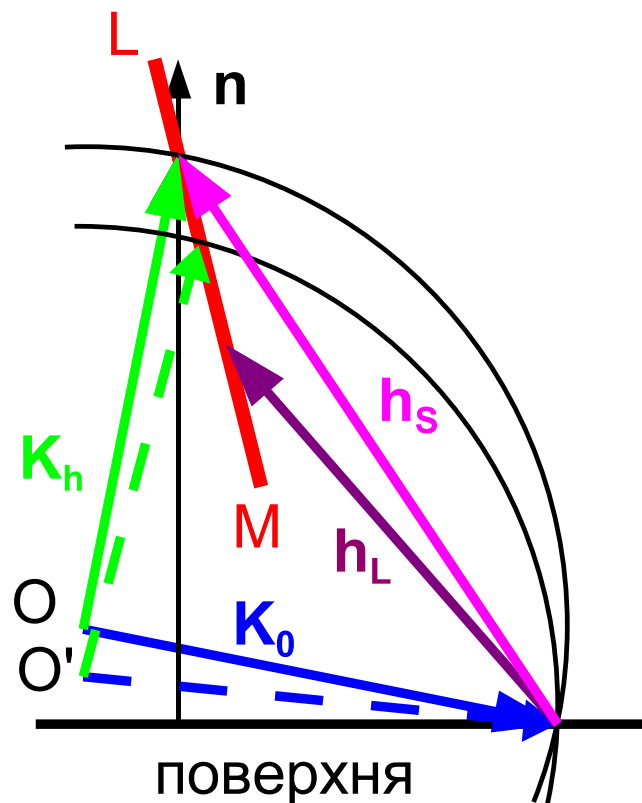


Рис. 5.22. Хід променів на поверхні структури, що складається з шарів з двох різних матеріалів.

Висновки.

Оскільки алгоритм розрахунку взаємодії рентгенівських променів із структурою є багатопроменевим, описаним вище методом можна змодельовати карту зворотного простору у разі одночасної дифракції декількох променів. Проте дане завдання виходить за рамки даних тез і, можливо, буде реалізована надалі.

Врахування впливу неідеальностей в площині структури в даній моделі поки неможливий.

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. Досліджені багат шарові структури InGaAs/GaAs, AlGaAs/GaAs, SiGe/Si. З аналізу отриманих результатів слідують такі висновки:

1. Вперше створено точну теоретичну модель динамічної N -хвильової дифракції в планарних багат шарових структурах з шарами довільної товщини. Зокрема, враховано ефекти відбиття при малих кутах падіння і виходу. Цінність запропонованого рішення цієї проблеми полягає в 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.

2. Проаналізовано дійсну частину дисперсійного рівняння та побудовано дисперсійну поверхню для геометрій Бреґґа 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, що для поглинаючих кристалів в геометрії Бреґґа в більшості підручників приведено невірну картину дисперсійної кривої.

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

4. З'ясовано роль форми розподілу компонентів на межах поділу шарів на форму КДВ у випадку дифракції Бреґґа. При розгляді різних моделей градієнта складу на межі поділу було встановлено, що найбільш адекватно криві відбиття описуються при введенні гіперболічного закону зміни градієнта на границі шарів

InGaAs/GaAs.

5. Запропоновано модель і процедуру підгонки теоретичних спектрів до експериментальних 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 встановлений профіль розподілу компонентного складу як на межі інтерфейсу, так і по глибині шарів.

7. Створена методологічна основа, алгоритми та програмне забезпечення для кількісної діагностики багат шарових напівпровідникових структур методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] *Authier A.* Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. –N.-Y.: Oxford Press, 2001. – 661 pp.
- [2] *Authier A., S.Lagomarsino, B.K.Tanner* X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction: Theory and Applications. –N.-Y.: Plenum Press, 1996. – 419 pp.
- [3] *Holy V., Pietch U., Baumbach T.* High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers. –Berlin: Springer, 1999. – 255 pp.
- [4] *Pietch U., Holy V., Baumbach T.* High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films to Lateral Nanostructures. –N.-Y.: Springer, 2004. – 409 pp.
- [5] *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика. –М.: Наука, 1982. – 392с.
- [6] *Афанасьев А.М., Александров П.Ф., Имамов П.М.* Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. –М.: Наука, 1989. – 152с.
- [7] *Иверонова В.И., Ревкевич Г.П.* Теория рассеяния рентгеновских лучей. –М.: МГУ, 1978. – 277с.
- [8] *Боуэн Д.К., Таннер Б.К.* Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. –С.-П.: Наука, 2002. – 275с.
- [9] *Чжан Ш.-Л.* Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. –М.: Мир, 1987. – 335 с.
- [10] *Fewster P.F* X-Ray Scattering from Semiconductors. –London: Imperial College Press, 2003. – 300 pp.
- [11] *Fewster P.* Superlattices in X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction Theory and Applications. –N.-Y.: Plenum Press, 1996. – ??? pp.

- [12] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. –М.: Наука, 1973. – 721с.
- [13] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. –М.: Наука, 1973. – 721с.
- [14] Stetsko Y. P., Chang S.-L. An Algorithm for Solving Multiple-Wave Dynamical X-Ray Diffraction Equations//Acta Cryst A. – 1997. – Vol.53. – P. 28–34.
- [15] Stetsko Y. P., Chang S.-L. Dynamical calculation of crystal truncation rod for surfaces and interfaces using a Cartesian coordinate transformation technique//Acta Cryst A. – 1999. – Vol.57. – P. 677–682.
- [16] Stepanov S. A., Kondrashkina E. A., Kohler R., Novikov D.V., Materlik G. and Durbin S.M. Dynamical X-ray Diffraction of Multilayers and Superlattices: Recursion Matrix Extension to Grazing Angles//Phys. Rev. B – 1998. – Vol.57, № 8. – P. 4829–4841.
- [17] Stepanov S. A. Method of Transfer Matrices and Dynamical Thick-Crystal Approximation in Surface X-ray Diffraction by Multilayer Structures//Crystallogr. Reports – 1994. – Vol.39, № 2. – P. 182–187.
- [18] Stepanov S.A., Ulyanenko A.P. A New Algorithm for Computation of X-Ray Multiple Bragg Diffraction//Acta cryst. A. – 1994. – Vol.50. – P. 579–585.
- [19] Stepanov S.A., Pietsch U. and Baumbach G.T. A matrix approach to x-ray grazing incidence diffraction in multilayers//Z. Physik B. – 1995. – Vol.96. – P. 341–347.
- [20] Stepanov S.A. and Koehler R. Real-structure effects in the dynamical theory of grazing incidence x-ray diffraction//J. Appl. Phys. – 1994. – Vol.76. – P. 7809–7815.
- [21] Stepanov S.A. and Koehler R. A dynamical theory of extremely asymmetric x-ray diffraction taking account of normal lattice strain//J. Phys. D: Applied Physics. – 1994. – Vol.27. P. 1923–1928.

- [22] *Kohn V. G.* On the Theory of the Bragg Reflection in the Case of Multiple X-Ray Diffraction//Phys. Stat. Sol. (a) – 1979. – Vol.54. – P. 375–384.
- [23] *Kohn V. G.* A Theory of Multiple Bragg Diffraction of X Rays in Multilayer Crystal Systems//J. Moscow Phys. Soc. – 1977. – Vol.1. – P. 425–434.
- [24] *Bartels W. J., Hornsrta J., Lobeek D.J.W.* X-ray Diffraction of Multilayers and Superlattices//Acta Cryst. A – 1986. Vol.42. – P. 539–545.
- [25] *Souvorov, etc.* X-ray Multiple Diffraction from Crystalline Multilayers: Application to a 90° Bragg Reflection//Phys. Rev. B – 2004. – Vol.70, № 224109. – P. 1–9.
- [26] *Huang H.-R., Dudley M.* A universal computation method for two-beam dynamical X-ray diffraction//Acta Cryst. A – 2003. – Vol.59. – P. 163–167.
- [27] *Caticha A.* Diffraction of x rays at the far tails of the Bragg peaks//Phys. Rev. B – 1993. – Vol.47, № 1. – P. 76–83.
- [28] *Caticha A.* Diffraction of x rays at the far tails of the Bragg peaks. II. Darwin dynamical theory//Phys. Rev. B – 1994. – Vol.49, № 1. – P. 33–38.
- [29] *Чуев, Ломов ВВВ*//Phys. Rev. B – 2004. – Vol.70, № 224109. – P. 1–9.
- [30] *Кон В. Г.* ФТТ 1977. V. 19. № 12. С. 3567.
- [31] *Кон В. Г.* Металлофізика. 1988. V. 10. № 2. С. 78.
- [32] Evald, (1916)
- [33] Laue, (1931)
- [34] Darwin, (1914)
- [35] *Abeles F.* //Ann. de Physique. – 1948. – Vol.3. – P. 504–520.
- [36] *Abeles F.* //Ann. de Physique. – 1950. – Vol.5. – P. 596–640.

- [37] *Abeles F.* //Ann. de Physique. – 1950. – Vol.5. – P. 706–782.
- [38] *Parratt L.G.* Surface studies of solids by total reflection of x-rays//Phys. Rev. B – 1954. – Vol.95 – P.359–369.
- [39] *Grundmann M. and Krost A.* Atomic structure based simulation of X-ray scattering from strained superlattices//Phys. Stat. Sol. (b) – 2000. – Vol.218. – P.417–423.
- [40] Takagi, (196x)
- [41] Taupin, (196x)
- [42] Yefanov, UPJ, (2006)
- [43] Yefanov, PSS, (2006)
- [44] А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, Металофізика і новітні технології, 28 №2, 227-244 (2006)
- [45] А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, Металофізика і новітні технології, №, (2006)
- [46] А. Н. Ефанов, В. П. Кладько, Металофізика і новітні технології, №, (2006)
- [47] *Batterman B., Cole H.* Dynamical Diffraction of X Rays by Perfect Crystals. Reviews of Modern Physics. 1964.
- [48] *Authier A.* Ewald Waves in Theory and Experiment (Dynamical Theory of X-Ray Diffraction). ASRDF 1970. 1-51.
- [49] T. Fukamachi, R. Negishi, T. Kawamura (1995) Acta Cryst. A41, 253-258.
- [50] T. Fukamachi, R. Negishi, S. Zhou, M. Yoshizawa, T. Kawamura (2002) Acta Cryst. A58, 552-558.
- [51] Numerical Recipes in C. <http://www.nr.com/>

- [52] X. Huang, M. Dudley (2003) Acta Cryst. A59, 163-167.
- [53] IMSL Numerical Library <http://www.vni.com>
- [54] quartic eq www.mahtworld.com
- [55] Korn, Korn
- [56] P.Yashar, M.R.Pillai, J.Mirecki-Millunchick, S.A.Barnett. J. Appl. Rhys. 83, N. 4, 2010 (1998).
- [57] C.S.Peng, E.-M.Pavelescu, T.Jouhti, J.Konttinen, I.M.Fodchuk, Y.Kyslovsky, M.Pessa. Appl. Rhys. Let. 80, N. 25, 4720 (2002).
- [58] N.Boudet, J.Eymery, N.Magnea. Phys. Rev. 55, N.23, 15804 (1997).
- [59] Ю.а.тхорік, Л.с.хазан, Пластична деформація і дислокації невідповідності в гетероепітаксціальних системах. - Київ: Наукова думання. – 1983. – 304 с.
- [60] В.в. стрельчук, В.п. кладько, М.я. валах, В.ф. мачулін і ін. Наносистеми, наноматеріали і нанотехнології, 1, 309-327 (2003).
- [61] A. Sanz-Hervas et al., J. Appl. Phys. 82, 3297 (1997).
- [62] R. M. Fleming et al., J. Appl. Phys. 51, 357 (1980).
- [63] O. M. Yefanov and V. P. Kladko, N-Beam 3D Plane Wave Algorithm for Diffraction Calculation in Multilayers for Any Geometry and With no Numerical Errors, to be printed (2006).
- [64] *Collela R.* Acta cryst. A. 1974. — **30**. — P. 413.
- [65] <http://efa.hotbox.ru/hi.html>
- [66] <http://XOP>
- [67] <http://Stepanov>

[68] Batteran, Kole.

[69]

[70]

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. // SQO – 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 островців у багатопарових 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. – С.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., Korsunskaya N., Kryshchuk T., Sadofyev Yu., Zhang Y.-H. Effect of Growth Temperature on the Luminescent and structural properties of InGaAsSbN/GaAs quantum wells for 1.3μm 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 надграткових 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 надграткових 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 багат шарових (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. – р.21.

14. Ефанов А.Н., Кладько В.П., Мачулин В.Ф. Динамический расчет некомпланарной многоволновой дифракции рентгеновских лучей в сверхрешетках. // Тезисы: РСНН-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 неком-планарным 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 ла-теральных модуляций состава и 2D - 3D структурных переходов в многослойных периодических структурах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 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: ХТОР 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: ХТОР 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 of ХТОР2006. – р.174.