

ДИНАМИЧЕСКАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ НА СЛОИСТО-НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМАХ

В.И. Пунегов

Предложенный в работе [1] метод восстановления комплексной отражательной способности кристалла по угловому распределению отраженной интенсивности применим в случае отсутствия микродефектов в кристалле, или в случае, когда дефекты имеют малые размеры. Если эти условия не выполняются, то решение обратной задачи в когерентном приближении может дать неправильный результат, поскольку угловое распределение диффузной компоненты сильно влияет на профиль полной кривой дифракционного отражения (КДО) [2-5]. Предложенные в [2-5] подходы вычисления полной КДО ограничены либо рамками кинематического приближения [2], либо рассмотрением двухслойной структуры [3] с последующим распространением полученного решения на случай полупроводниковой сверхрешетки [4,5].

В данной работе в рамках прямой задачи динамической дифракции предлагается способ вычисления КДО от слоисто-неоднородной системы, учитывающей изменение по глубине межплоскостного расстояния, концентрации и размеров микродефектов.

Кристалл с изменяющимися по глубине структурными параметрами разобьем на N слоев. Каждый такой слой, например, с номером n , характеризуется своим межплоскостным расстоянием d_n , статическим фактором Дебая-Валлера E_n и корреляционной длиной случайных атомных смещений τ_n . Вся эта слоисто-неоднородная система лежит на идеальной полубесконечной подложке с межплоскостным расстоянием d . Ось z перпендикулярна входной поверхности и направлена в глубь многослойной структуры.

Нумерацию слоев проведем снизу вверх. Рассогласование параметров решетки n -го слоя и подложки $\Delta d_n = d_n - d$ вызывает угловое смещение $\Delta \vartheta_n = \vartheta_n - \vartheta_0 = -(\Delta d_n/d) \cdot \operatorname{tg} \vartheta_0$, где ϑ_n и ϑ_0 — брэгговские углы слоя и подложки. Пусть на n -й слой под углом ϑ падает сверху плоская когерентная рентгеновская волна с амплитудой $T_n = E_0^{(n)}(z_n)$ в направлении прохождения, а снизу волна с амплитудой $E_g^{(n-1)}(z_{n-1})$

в направлении дифракции. Когерентные амплитуды проходящей $E_0^{(n)}$ и дифракционной $E_g^{(n)}$ волн внутри слоя имеют вид

$$E_0^{(n)}(z) = [T_n / (S_1 - S_2)] \times \left\{ S_1 \exp[i\varepsilon_2(z - z_n)] - S_2 \exp[i\varepsilon_1(z - z_n)] \right\}, \quad (1)$$

$$E_g^{(n)}(z) = [T_n / (S_1 - S_2)] \times \left\{ S_1 b_2 \exp[i\varepsilon_2(z - z_n)] - S_2 b_1 \exp[i\varepsilon_1(z - z_n)] \right\}, \quad (2)$$

где z_n определяет положение n -го слоя; $S_1 = (R_{n-1} - b_1) \times \exp(i\xi l_n)$, $S_2 = (R_{n-1} - b_2)$, l_n — толщина n -го слоя, $b_{1,2} = \xi i_{1,2} / E_n \sigma_{-g}$; $R_{n-1} = E_g^{(n-1)}(z_{n-1}) / E_0^{(n-1)}(z_{n-1})$ — амплитудный коэффициент отражения (АКО) от $(n-1)$ нижних слоев, $\varepsilon_{1,2}$ — угловые параметры [5]. В данном случае они относятся к n -му слою.

При нормировке амплитуды падающей на слоисто-неоднородную систему рентгеновской волны ($E_0 = 1$) величина T_n представляет собой амплитудный коэффициент прохождения (АКП) верхних $(N - n)$ слоев. Амплитуду T_n можно записать в виде произведения $T_n = t_{N-1} t_{N-2} \dots t_n$, где t_k — АКП k -го слоя. АКО когерентно рассеянной интенсивности от рассматриваемой слоисто-неоднородной системы находится путем последовательного "наращивания" слоев и вычисления коэффициентов отражения по рекуррентной процедуре на основе решения (2), каждый раз предполагая, что амплитуда падающей волны равна единице. Таким образом, мы найдем все R_n , которые присутствуют в решениях (1) и (2). Теперь в нашем распоряжении имеются все значения R_n и T_n , а это означает, что определены амплитуды когерентных полей по всей толщине многослойной системы.

Известно, что в динамической трактовке процесса брэгговской дифракции на многослойной системе угловое распределение диффузной компоненты $I_n^d(\Delta\vartheta)$ определяется интенсивностью проходящей когерентной волны $I_0 = |E_0^{(n)}(z)|^2$. Используя соотношение (2) в общем решении для некогерентно рассеянной интенсивности, приходим к следующей рекуррентной формуле:

$$I_n^d = I_{n-1}^d e^{-\mu_g l_n} + (\beta_n |T_n|^2 / |S_1 - S_2|^2) \times$$

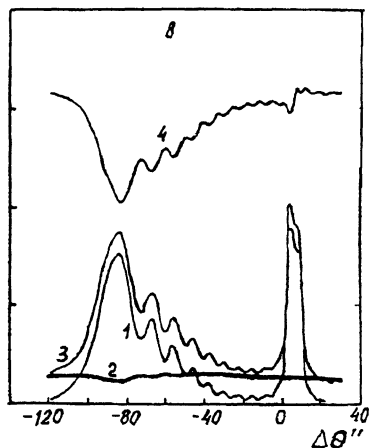
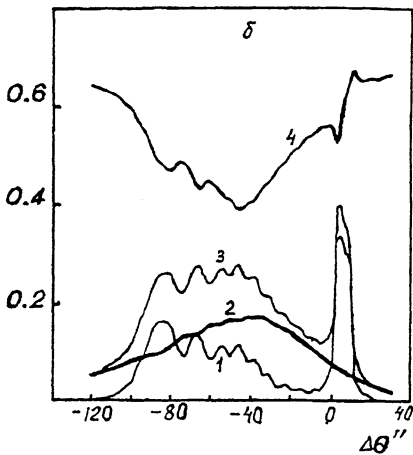
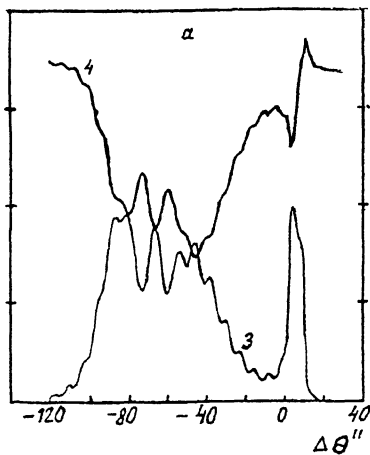
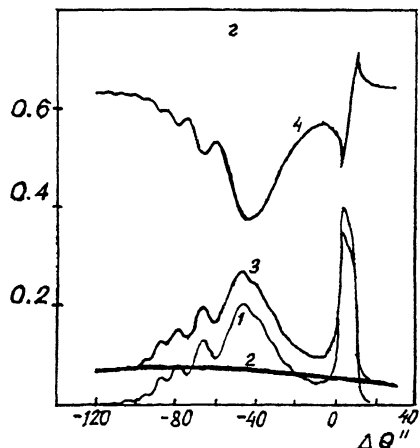
$$\times \{ | - S_2 |^2 a_1 + | S_1 |^2 a_2 + 2 \operatorname{Re} [- S_2 S_1^* a_3] \},$$

где I_{n-1}^d — диффузно рассеянная интенсивность от (n-1) нижних слоев. Здесь $\beta_n = 2|\sigma_g|^2(1 - E_n^2)\tau_n$, μ_g — линейный коэффициент фотопоглощения, параметры σ_g и a_j определены в [5].

Возможности метода иллюстрируются компьютерным моделированием. В рассматриваемой модели слоисто-неоднородная система $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/(100)\text{GaAs}$ имеет следующий закон изменения концентрации x по глубине: $x(z) = [x_0 - (\Delta x/l)z]/(1 + z/l)$, где толщина слоя $l = 4$ мкм, концентрация твердого раствора на входной поверхности $x_0 = 0.3$, а на границе с подложкой $(x_0\Delta x)/2 = 0.05$. Для длины корреляции случайных атомных смещений $\tau(z)$ и статического фактора Лебая-Валлера $E(z)$ использованы более простые зависимости: $\tau(z) = \tau_0 + (\Delta\tau/l)z$, $E(z) = E_0 + (\Delta E/l)z$. Здесь τ_0 и E_0 — соответствующие величины у входной поверхности. Угловая зависимость корреляционной длины соответствует гауссовской корреляционной функции.

КДО вычислены для отражения (400) σ -поляризованного $\text{CuK}\alpha_1$ излучения. На рисунке показаны КДО и угловые зависимости коэффициентов прохождения (КП) рассматриваемой структуры с различными типами дефектности. Градиент корреляционной длины вызывает асимметрию профиля диффузного фона (рисунок, б) и полная КДО отличается от бездефектной структуры (рисунок, а). Еще более сильное отличие имеет место при наличии градиента статфактора (в, з). При обратном градиенте статфактора осцилляционная структура КДО может измениться таким образом, что дифракционный спектр будет соответствовать обратному градиенту деформации решетки (ср. (в) и (з)). Этот эффект проявляется в тех случаях, когда послойное ослабление дифрагированной интенсивности в приповерхностной области многослойной системы за счет аморфизованности структуры существенно превышает фотопоглощение рентгеновских лучей.

В заключение отметим, что предложенный метод может быть использован для расчетов КДО от периодических многослойных систем (сверхрешеток). Для когерентно рассеянной интенсивности задача имеет аналитическое решение. Однако, если распределение задача имеет аналитическое решение. Однако, если распределение дефектов по глубине сверхрешетки неоднородно, вычисление КДО возможно лишь по предложенному в данной работе методу.

$I_{a,g}^{c,d}$  $I_{a,g}^{c,d}$ 

Кривые дифракционного отражения: 1 — когерентная, 2 — диффузная составляющая, 3 — полная КДО; угловая зависимость коэффициента прохождения 4 слоисто-неоднородной системы.

а — структура без микродефектов; б — $E_0 = 0.6$, $\Delta E = 0$, $\tau_0 = 0.3$ мкм, $\Delta\tau = 0.29$ мкм; в — $E_0 = 1.0$, $\Delta E = -0.8$, $\tau_0 = 0.05$ мкм, $\Delta\tau = 0$ мкм; г — $E_0 = 0.2$, $\Delta E = 0.8$, $\tau_0 = 0.05$ мкм, $\Delta\tau = 0$ мкм.

Список литературы

- [1] Дарбинян С.П., Петрашень П.В., Чуковский Ф.Н. // Кристаллография. 1992. Т. 37. В. 4. С. 854-862.
- [2] Пунегов В.И. // ЖТФ. 1991. Т. 61. В. 12. С. 82-87.
- [3] Пунегов В.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. В. 1. С. 234-242.
- [4] Пунегов В.И. // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. В. 4. С. 66-70.
- [5] Punegov V.I. // Phys. Stat. Sol. (a). 1993. V. 136. N 1. P. 9-19.

Сыктывкарский государственный
университет

Поступило в Редакцию
21 октября 1993 г.

