

Российская академия наук
Коми Научный центр Уральского отделения РАН
Лаборатория теоретической и вычислительной физики
Отдел математики

На правах рукописи

КОЛОСОВ Сергей Иванович

**Теория дифракции рентгеновских лучей
на латеральных структурах**

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Научный руководитель —
доктор физико-математических наук,
профессор В.И. Пунегов

Сыктывкар – 2015

Оглавление

Введение	3
1 Литературный обзор и основные теоретические положения	7
1.1 Теория Дарвина	7
1.2 Метод Такаги-Топена	9
1.3 Трехосевая дифрактометрия	15
1.3.1 Основные уравнения теории трехосевой рентгеновской дифракции	22
1.4 Дифракция на фазовой решетке	31
2 Динамическая дифракция на латеральных структурах	36
2.1 Метод Такаги-Топена	36
2.1.1 Введение	36
2.1.2 Основные уравнения	37
2.1.3 Численное решение на разностной сетке	39
2.1.4 Использование преобразования Лапласа.	40
2.1.5 Кинематическое приближение	42
2.1.6 Результаты расчетов	44
2.2 Метод Дарвина	48
2.2.1 Введение	48
2.2.2 Дифракция на плоскопараллельном кристалле	51
2.2.3 Дифракция Дарвина на кристалле прямоугольного се- чения	53

2.2.4	Численное моделирование	59
2.3	Дифракция на кристалле с металлической поверхностной решеткой	66
2.3.1	Введение	66
2.3.2	Теория	66
2.3.3	Численное моделирование	69
3	Кинематическая теория дифракции на латеральных структурах	72
3.1	Кинематическая теория дифракции на неидеальных структурах	72
3.1.1	Основные уравнения	72
3.1.2	Когерентное рассеяние	75
3.1.3	Диффузное рассеяние	79
3.1.4	Численное моделирование	81
	Заключение	87
	Литература	88

Введение

Среди многочисленных методов исследования структуры вещества наиболее универсальными и перспективными являются методы, основанные на дифракционном рассеянии рентгеновского и синхротронного излучений. Эти методы характеризуют высокая чувствительность к хаотически распределенным дефектам и непрерывным деформациям кристаллической решетки, быстрота получения результатов, а главное — неразрушающее воздействие на исследуемый объект и возможность получения количественной информации о его структурных особенностях.

Проблеме дифракции рентгеновских лучей в конденсированной среде посвящено огромное число работ, в том числе монографии последних лет [1]-[2]. Вместе с тем на каждом этапе развития новых физических подходов и технологий ставятся новые экспериментальные и теоретические задачи, связанные с рассеянием рентгеновского излучения. Наблюдается тенденция к исследованиям, с одной стороны, объектов все более малых размеров и, с другой стороны — все более сложных по своему химическому строению. Обращает на себя внимание тот факт, что наряду с традиционными исследованиями планарных структур возрастает явный интерес к латеральным объектам [2]-[3]. Ввод новых современных источников синхротронного излучения предоставляет дополнительные возможности в исследовании одиночных латеральных наноструктур. Исследования в этом направлении только зарождаются. Здесь ряд теоретических результатов ждет своего экспериментального подтверждения.

Цель работы

Цель данной диссертационной работы состояла в том, чтобы разработать методы расчета кривых дифракционного отражения и карт интенсивностей динамического рассеяния в обратном пространстве кристаллической решетки для латерально ограниченных идеальных периодических структур и карт кинематического рассеяния для латеральных структур с нарушениями идеальности решетки.

Структура диссертации

Работа состоит из введения, четырех глав, выводов результатов и списка цитируемой литературы. Общий объем работы составил 100 страниц.

Первая глава носит обзорный характер. В ней рассмотрены основные теоретические положения, на которых основана диссертация. Вначале рассмотрена теория Дарвина. Далее подробно рассматривается метод Такаги-Топена, поскольку этот метод является основным методом расчета в данной работе. Показано, как уравнения Такаги-Топена обобщаются для расчетов дифракции рассеяния рентгеновских волн в пространстве обратной решетки.

Вторая глава состоит из трех разделов. В первом разделе проводятся расчеты кривых дифракционного отражения для кристаллов прямоугольного сечения на основе теории Такаги-Топена. В этом разделе рассматриваются два метода, разработанные для получения данных расчетов: 1) численный метод с использованием разностной сетки для уравнений Такаги-Топена и 2) полуаналитический метод с использованием преобразований Лапласа для уравнений Такаги-Топена. Полуаналитичность метода заключается в том, что обратное преобразование Лапласа выполнялось вычислением ряда по полюсам функции-изображения, полюса же находились численно как корни некоторого трансцендентного уравнения.

Оба метода расчета имеют свои достоинства и недостатки. Первый метод порой требует очень большого времени счета, но является достаточно гибким, чтобы его можно было обобщить на задачи с более сложными граничными условиями. Второй метод является чрезвычайно быстрым в плане затрат машинного времени, но развитие этого метода на более сложные задачи (например, расчет дифракции на кристаллах трапецидального сечения) потребует больших усилий и дополнительных математических исследований. В целом же, оба метода хорошо дополняли друг друга, позволяя оценить точность расчета при различных параметрах задачи, оценить устойчивость разностной схемы и выбрать оптимальный шаг разностной сетки.

Во втором разделе второй главы проводятся расчеты кривых дифракционного отражения исходя из теории Дарвина. Сам Дарвин выполнил расчеты для полубесконечной кристаллической среды и для плоскопараллельной кристаллической пластинки. В этом разделе предлагается способ обобщить теорию Дарвина для расчетов латеральных структур (в данном разделе — для кристалла прямоугольного сечения). Результаты расчетов полностью совпадают с теми, что получены с использованием теории Такаги-Топена. Для количественного сравнения было получено аналитическое решение для плоскопараллельной кристаллической пластины. В результате сравнения этого решения с аналогичным решением, полученным путем решения уравнений Такаги-Топена, была найдена связь между коэффициентами взаимодействия излучения с кристаллом, входящими в обе теории. В итоге показано, что хотя теория Дарвина для данной задачи не несет каких-либо особых преимуществ, но имеет довольно прозрачный физический смысл. Теория Дарвина непосредственно оперирует фазовыми соотношениями, что позволяет понять некоторые результаты теории Такаги-Топена.

В третьем разделе проделаны расчеты карт интенсивностей рассеянно-

го излучения для кристаллов, на поверхности которых нанесена металлическая решетка. Данная задача возникла в связи с экспериментами по дифракции на кристалле кремния, на который нанесены металлические полосы вольфрама шириной $0,5 \mu m$ с периодом $1 \mu m$.

В третьей главе кинематический подход к расчету рентгеновской дифракции на латеральных структурах, а именно, на кристаллах трапециoidalного (в частном случае — треугольного сечения). Задача усложнена тем обстоятельством, что в кристаллическую среду введены нарушения двух типов. Во-первых, в объеме кристалла присутствуют хаотически распределенные дефекты. Во-вторых, имеется изгиб кристаллических плоскостей с постоянным градиентом деформаций вдоль осей x и z .

Для поставленной задачи проведены расчеты карт интенсивностей когерентного и диффузного рассеяний для кристалла InP (004).

Глава 1

Литературный обзор и основные теоретические положения

1.1 Теория Дарвина

Падающая на поверхность кристалла волна генерирует отраженную и проходящую волну. Эти волны при пересечении атомных плоскостей кристалла в свою очередь генерируют отраженные и проходящие волны, и т.д. (см. рис. 1.1) Амплитуды и фазы проходящей и отраженной волн связаны, и это приводит к системе рекуррентных уравнений.

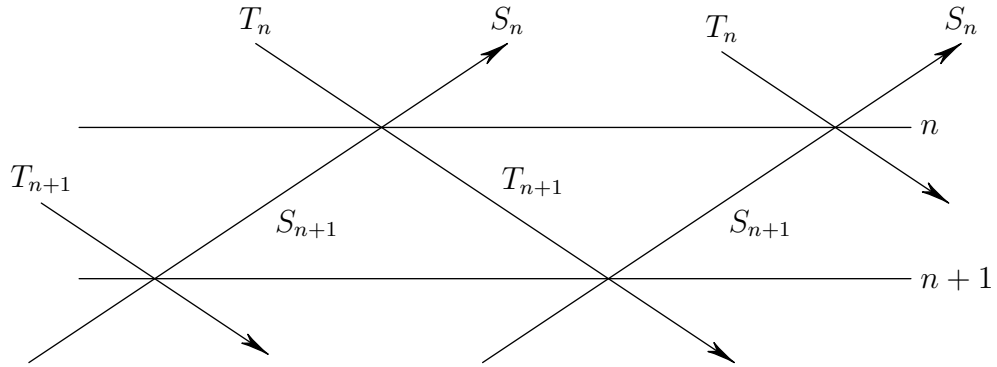


Рис. 1.1. T_n — амплитуда волны, падающей на n -ую плоскость, S_n — амплитуда волны, отраженной от n -ой плоскости.

Рассмотрим для примера n -ую и $(n+1)$ -ую атомные плоскости, как на рис.1.1. А T_n и S_n — амплитуды падающей и отраженной волн от n -ой плоскости соответственно. В работе [4] Дарвин показал, что

$$\begin{aligned} S_n &= -iqT_n + (1 - iq_0)e^{-i\phi}S_{n+1}, \\ T_{n+1}e^{i\phi} &= (1 - iq_0)T_n - i\bar{q}e^{-i\phi}S_{n+1}, \end{aligned} \tag{1.1}$$

где $q = Nd_{hkl}\lambda R|F_{hkl}|/\sin^2\theta_B$ — отношение амплитуды отраженной волны к падающей на кристаллическую плоскость, $\phi = 2\pi d_{hkl}\sin\theta_B/\lambda$ — фазовый множитель, R — классический радиус электрона, d_{hkl} — расстояние между отражающими плоскостями, N — число элементарных ячеек на единицу объема кристалла, λ — длина волны, θ_B — угол Брегга, F_{hkl} — структурный фактор, $\bar{q}$ и q_0 определяются так же, как и q через F_{hkl} , замененное на $F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ и F_{000} соответственно. Мнимые члены связаны с фазовыми сдвигами, которые возникают из-за дифракции волн [5].

Решая уравнения (1.1), можно получить выражение для амплитуды волны, отраженной от поверхности кристалла. Дарвин показал, что в узкой угловой области вблизи центра отражения эта амплитуда чисто мнимая. Интенсивность отражения, следовательно, равна единице, это есть область полного отражения. Её ширина пропорциональна величине структурного фактора и составляет величину порядка нескольких угловых секунд. Кроме того, центр области полного отражения слегка смещен от соответствующего угла Брегга. Интегральная интенсивность, которая определяется площадью под кривой дифракционного отражения, мала, не смотря на существование области полного отражения, поскольку пик кривой отражения очень узкий. В кинематической теории, наоборот, интегральная интенсивность очень велика, поскольку высота пика кривой дифракционного отражения пропорциональна квадрату структурного фактора и объему кристалла.

Теория Дарвина приводит к тем же самым выражениям для коэффициентов отражения, что и теория Эвальда-Лауэ, но в некоторых случаях труднее адаптируется для практических расчетов. Поэтому она редко использовалась в развитии динамической теории дифракции рентгеновских лучей. Однако, теория Дарвина оказалась очень удобной в тех расчетах, когда уравнения задачи можно представить в матричном виде, где элементы матрицы связаны с коэффициентами прохождения и отражения от

атомных плоскостей.

1.2 Метод Такаги-Топена

Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в совершенном (идеальном) кристалле хорошо изучена и, как правило, трактуется в рамках формализма дисперсионной поверхности [1]-[6]. В начале шестидесятых годов прошлого столетия Такаги [7], а затем независимо Топен [8] вывели уравнения, описывающие дифракцию рентгеновских лучей в деформированных кристаллах. Вывод уравнений Такаги-Топена в оригинальной трактовке Такаги можно найти в биографии [?], подход Топена подробно изложен в [6]. Наглядное рассмотрение теории дифракции в искаженных кристаллах предложено Афанасьевым и Коном [9]. Далее мы будем придерживаться формализма этой работы.

Из системы уравнений Максвелла, в предположении, что падающая на кристалл волна является плоской монохроматической волной с частотой ω , следует стационарное волновое уравнение

$$\text{rot rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} (1 + \chi(\mathbf{r}, \omega)) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0. \quad (1.2)$$

Здесь $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ — временной фурье-образ поляризуемости среды $\chi(\mathbf{r}, t)$. Это выражение называют также рентгеновской восприимчивостью. Периодическое расположение атомов в кристалле позволяет разложить выражение для рентгеновской восприимчивости в ряд Фурье по векторам обратной решетки $\mathbf{h}$

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}}. \quad (1.3)$$

Если в волновое уравнение (1.2) подставить разложение (1.3), то непосредственно вытекает система уравнений динамической дифракции в совершенном кристалле. Случай слабо искаженного кристалла реализуется

при выполнении условия

$$\left| \frac{\partial u^i}{\partial x^k} \right| \ll 1, \quad (1.4)$$

где $\mathbf{u}$ — вектор, определяющий атомные смещения из положений (узлов) идеальной кристаллической решетки. С одной стороны, наличие деформаций в структуре кристаллической решетки не позволяет трактовать линейную восприимчивость как строго периодическую функцию. С другой стороны, условие (1.4) для слабых искажений служит основанием для того, чтобы выразить рентгеновскую восприимчивость нарушенной решетки через соответствующую характеристику идеального кристалла:

$$\chi(\mathbf{r}) = \chi^{id}(\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})) = \sum_h \chi_h^{id} \exp(i\mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{u})) = \sum_h [\chi_h^{id} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u})] \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

В отличие от (1.3) в фурье-разложении (1.5) появился дополнительный фазовый множитель (фазовый фактор решетки) $\exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u})$, который описывает искажения кристаллической структуры. Следует заметить, что при этом не учитывается изменение рассеивающей способности (электронной плотности) нарушенных участков кристалла, что является довольно сильным допущением. В сильно искаженной области кристалла, например в месте расположения ядер дислокаций, периодическая структура отсутствует. Такая область рассматривается как однородная среда, и рассеяние рентгеновских лучей в этой области описывается усредненной по пространству рентгеновской восприимчивостью:

$$\chi_0 = \frac{1}{V} \int_V \chi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Если электронная плотность в сильно искаженной области равна электронной плотности идеального кристалла, то $\chi_0 = \chi_0^{id}$. Решение волнового уравнения (1.2) будем искать в виде:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \sum_h \mathbf{E}_h(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

где $\mathbf{k}_0$ — волновой вектор падающей плоской волны, $\mathbf{E}_h(\mathbf{r})$ — медленно меняющиеся амплитуды волнового поля в кристалле. Подставив (1.6) в уравнение (1.2), предварительно проведя необходимые дифференциальные операции, сделаем два основных приближения. Во-первых, не будем брать в расчет пространственные производные второго порядка, поскольку $\mathbf{E}_h(\mathbf{r})$ медленно изменяющиеся функции. Во-вторых, можно пренебречь отклонением от поперечности в среде вектора напряженности $\mathbf{E}_h(\mathbf{r})$. В итоге получаем следующую систему уравнений:

$$\left\{ -\frac{2i}{k^2}(\mathbf{k}_h \nabla) + \alpha_h \right\} \mathbf{E}_h(\mathbf{r}) = \sum_g \mathbf{E}_g(\mathbf{r}) \chi_{hg}(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

где $\alpha_h = (k_h^2 - k^2)/k^2$. Характеристика среды $\chi_{hg}(\mathbf{r})$ в зависимости от пространственной структуры принимает разные значения. В случае слабодеформированного кристалла имеем $\chi_{hg}(\mathbf{r}) = \chi_{h-g}^{id} \exp(-i(\mathbf{h} - \mathbf{g})\mathbf{u}(\mathbf{r}))$. Поскольку в совершенном кристалле атомные смещения отсутствуют, то есть $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0$, поэтому $\chi_{hg}(\mathbf{r}) = \chi_{h-g}^{id} = \text{const}$. В сильно искаженной области дифракционное рассеяние отсутствует и $\chi_{hg}(\mathbf{r}) = \chi_0 \delta_{hg}$, где δ_{hg} — символ Кронекера.

Строго говоря, система (1.7) представляет собой бесконечную систему связанных уравнений, которые описывают многоволновую дифракцию. Решение данной системы в общем случае сопровождается определенными трудностями. Однако при дифракции рентгеновских лучей в кристалле возникает ограниченное число дифракционных волн. Это связано с тем, что длина волны рентгеновского излучения по порядку величины близка постоянной решетки. Поэтому сфера Эвальда имеет небольшой радиус, и на неё может попасть лишь ограниченное число узлов обратной решетки.

Наиболее часто реализуемым в эксперименте является случай двухволновой дифракции, когда в кристалле формируется поле из двух сильных волн в проходящем и дифракционном направлении. Система (1.7) описывает двухволновое приближение, если индексы принимают лишь два зна-

чения: 0 и h .

$$\begin{cases} -\frac{2i}{k^2}(\mathbf{k}_0 \nabla) + \alpha_0 \end{cases} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \chi_{00} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \chi_{0h} \mathbf{E}_h(\mathbf{r})$$

$$\begin{cases} -\frac{2i}{k^2}(\mathbf{k}_h \nabla) + \alpha_h \end{cases} \mathbf{E}_h(\mathbf{r}) = \chi_{h0} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \chi_{hh} \mathbf{E}_h(\mathbf{r}) \quad (1.8)$$

В рентгеновской дифрактометрии разделяют два случая дифракции. Если падающий и дифракционный пучок находятся по одну сторону от входной поверхности кристалла, то такую геометрию дифракции относят к случаю Брегга. В случае Лауэ эти пучки находятся по разные стороны кристаллической пластины.

Стремительный прогресс в технологии изготовления материалов твердотельной электроники, в особенности в создании низкоразмерных наноструктур, дифракционный случай Брегга делает более перспективным. Для этой геометрии преобразуем систему (1.8) к виду, удобному для решения ряда важных дифракционных задач.

Пусть система отражающих атомных плоскостей составляет угол φ с поверхностью кристалла (рис. 1.2). Введем углы $\theta_{1,2} = \theta_b \mp \varphi$, определяющие направления падающего и дифракционного пучков относительно входной поверхности кристалла, где θ_b — угол Брегга. Треугольник, состоящий из векторов падающей волны $\mathbf{k}_0$, дифракционной волны $\mathbf{k}_h$ и вектора рассеяния $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$, лежит в плоскости, перпендикулярной поверхности кристалла. Точное условие Брегга выполняется при равенстве $\mathbf{Q} = \mathbf{h}$, а отклонение от этого условия будет задаваться вектором $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$. Величина вектора обратной решетки $|\mathbf{h}| = 2\pi/d_{hkl}$, где d_{hkl} — межплоскостное расстояние.

Единичные векторы $\mathbf{s}_{0,h}$ указывают направления проходящей и отраженной волны, а единичные векторы $\mathbf{e}_{0,h}^{\sigma,\pi}$ — направление вектора напряженности рентгеновского поля $\mathbf{E}_{0,h}(\mathbf{r})$ в случае σ - и π -поляризации. Введя коэффициент поляризации $C = \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_h$, равный единице для σ -поляризации и $\cos 2\theta_B$ для π -поляризации, систему уравнений (1.8) можно записать в

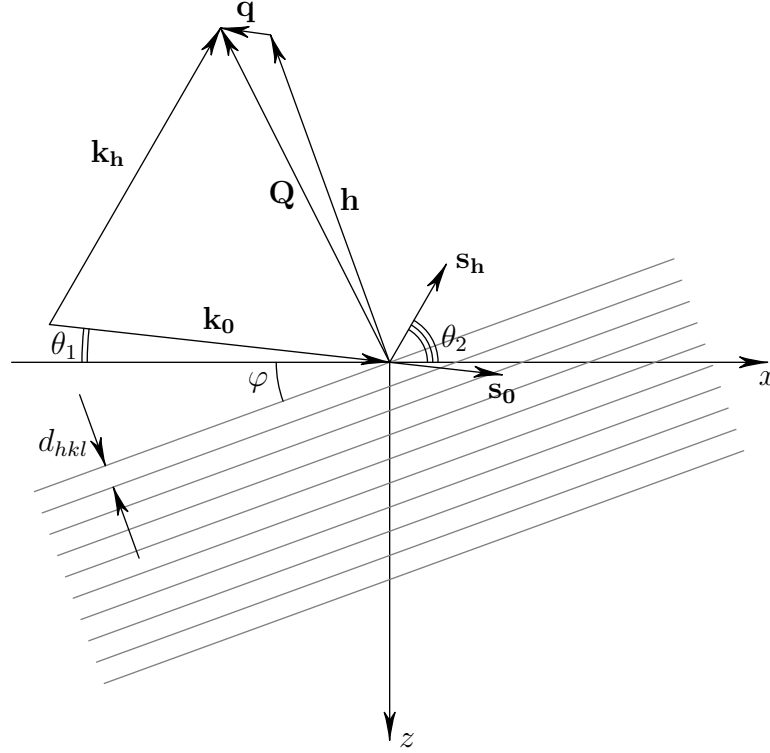


Рис. 1.2. Геометрия в случае дифракции Брегга

скалярной форме. В случае косоугольной системы координат $(\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_h)$ уравнения примут вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0}{\partial s_0} &= \frac{i\pi}{\lambda} [E_0(\chi_0 - \alpha_0) + \chi_{\bar{h}} C e^{i\mathbf{h}\mathbf{u}} E_h], \\ \frac{\partial E_h}{\partial s_h} &= \frac{i\pi}{\lambda} [E_h(\chi_0 - \alpha_h) + \chi_h C e^{-i\mathbf{h}\mathbf{u}} E_0], \end{aligned} \quad (1.9)$$

где $\chi_{00} = \chi_0$, $\chi_{0h} = \chi_{-h} \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u})$, $\chi_{h0} = \chi_h \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u})$ и $\chi_{hh} = \chi_0$.

В декартовой системе координат получаем следующую запись дифракционных уравнений

$$\begin{aligned} \left(\cos \theta_1 \frac{\partial E_0}{\partial x} + \sin \theta_1 \frac{\partial E_0}{\partial z} \right) &= \frac{i\pi}{\lambda} [E_0(\chi_0 - \alpha_0) + \chi_{\bar{h}} C e^{i\mathbf{h}\mathbf{u}} E_h], \\ \left(\cos \theta_2 \frac{\partial E_h}{\partial x} - \sin \theta_2 \frac{\partial E_h}{\partial z} \right) &= \frac{i\pi}{\lambda} [E_h(\chi_0 - \alpha_0) + \chi_h C e^{-i\mathbf{h}\mathbf{u}} E_0]. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Далее нам необходимо определить функциональный вид аккомодаций $\alpha_{0,h}$. В общем случае деформации кристаллической решетки задают локальный вектор обратной решетки. Это также относится к угловым аккомодациям $\alpha_{0,h}$. В [7] при разложении амплитуды волнового поля по блохов-

ским функциям постулируется слабая зависимость фурье-компонент восприимчивости от координат. Эти компоненты реагируют на все изменения вектора обратной решетки внутри кристалла вследствие наличия деформаций. При этом встает проблема с определением волнового вектора. Если в теории динамической дифракции в идеальном кристалле длина волнового вектора падающей волны $\mathbf{k}_0$ изменяется в зависимости от угла падения θ , то в теории [7] предполагается, что длина $\mathbf{k}_0$ всегда остается величиной постоянной.

Следуя работе [9], примем $\alpha_0 = 0$, $\alpha_h = -2 \sin 2\theta_B \omega$. Уравнения дифракции (1.10) перепишутся в виде

$$\begin{aligned} \left(\operatorname{ctg} \theta_1 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right) E_0 &= ia_0 E_0 + ia_{\bar{h}} \phi(r) E_h, \\ \left(\operatorname{ctg} \theta_2 \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} \right) E_h &= i(ba_0 + \eta) E_h + ia_h \phi^*(\mathbf{r}) E_0, \end{aligned} \quad (1.11)$$

где $a_0 = \frac{\pi \chi_0}{\lambda \gamma_0}$, $a_{h,\bar{h}} = C \frac{\pi \chi_{h,\bar{h}}}{\lambda \gamma_{h,0}}$, $\eta = \frac{2\pi}{\lambda \gamma_h} \sin 2\theta_B \omega$ — угловой параметр, используемый в двухкристалльной дифрактометрии, $b = \gamma_0/\gamma_h$ — фактор асимметрии и $\gamma_{0,h} = \sin \theta_{1,2}$. Фазовый фактор кристалла $\phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}))$ зависит от функции атомных смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, вид которой определяется деформациями решетки. Система (1.11) получила название уравнений Такаги [7] и в таком виде будет использоваться для решения конкретных задач. Если свойства кристалла изменяются вдоль одного направления вглубь исследуемого образца, то система уравнений (1.11) упрощается:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0}{\partial z} &= ia_0 E_0 + ia_{\bar{h}} \phi(r) E_h, \\ -\frac{\partial E_h}{\partial z} &= i(ba_0 + \eta) E_h + ia_h \phi^*(\mathbf{r}) E_0. \end{aligned} \quad (1.12)$$

В одномерном случае можно ввести новую функцию $Q = E_h/E_0$. В результате система уравнений (1.17) может быть преобразована в одно нелинейное дифференциальное уравнение типа Риккати

$$i \frac{dQ(z)}{dz} = a_{\bar{h}} \phi(z) Q^2(z) + Q(z)(ba_0 + \eta) + a_h \phi^*(z),$$

которое получило название уравнения Топена [8]. Краевое условие для этого уравнения имеет вид: $Q(z = l) = 0$, где l — координата нижней грани кристаллической пластины. Для модели полубесконечного кристалла это условие рассматривается на бесконечности. Уравнение Топена является весьма удобным для численного решения одномерных дифракционных задач.

1.3 Трехосевая дифрактометрия

Использование рентгеновских лучей для решения разных дифракционных задач в первую очередь предполагает выбор падающего на образец рентгеновского пучка по длине волны, ее монохроматичности и степени угловой расходимости. Практически все теоретические разработки в области рентгеновской дифракции основываются на предположении о падении на кристалл идеально плоской монохроматичной волны, не имеющей латеральных ограничений. В реальной ситуации все происходит несколько сложнее, поскольку любое излучение имеет как спектральную, так и угловую расходимость. Использование совершенных монокристаллов в качестве монохроматоров и устройств для формирования пучков в дифрактометрах позволило достичь высокой коллимации и монохроматизации ($\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-5}$) излучения. В частности, расходимость хорошего синхротронного пучка может быть менее одной угловой секунды.

В последнее время большое количество дифракционных исследований выполняется с использованием синхротронных источников излучения. Главными преимуществами синхротронного излучения являются: непрерывный спектр, высокая интенсивность и яркость, высокая степень поляризации и высокая коллимация по ходу пучка. К недостаткам синхротронного излучения в сравнении с рентгеновской трубкой следует отнести плохое соотношение сигнал/шум, трудности подавления высоких гармоник и относительно низкую стабильность интенсивности излучения.

Для ограничения угловой и спектральной расходимости рентгеновского пучка, падающего на образец, существуют различные схемы кристаллов-монокроматоров, коллиматоров и зеркал [10].

Уменьшение расходимости излучения возможно за счет асимметричной геометрии кристалла монокроматора, то есть если дифракционные плоскости не параллельны поверхности кристалла, а составляют с ним угол φ . При выборе угла скольжения меньше угла Брегга, угловая ширина отраженного пучка уменьшается.

Сужение угловой ширины рентгеновского пучка может быть реализовано за счет уменьшения рентгеновской восприимчивости кристалла χ_h при выборе материала для кристалла-монокроматора. Наиболее распространенными монокроматорами являются кристаллы кремния и германия. Отметим, что в настоящее время алмаз из-за стойкости к радиационным повреждениям используется в качестве монокроматоров для синхротронного излучения.

Использование элементов рентгеновской оптики позволяет формировать пучок с малой расходимостью и с большей степенью монохроматичности для проведения дифракционного эксперимента. Необходимо также тщательно относиться к выбору выходной щели коллиматора. Ширина этой щели сильно влияет на размытие рентгеновского пучка, что может повлиять на результат измерений. Кроме того, предпочтительнее пользоваться кристаллами-монокроматорами с многократным отражением, называемыми щелевыми, впервые предложенными Бонзе и Хартом [11].

С другой стороны, подавление «хвостов» при многократном отражении сопровождается резким уменьшением коэффициента отражения. Действительно, результирующая кривая отражения после щелевого монокроматора является произведением нескольких таких кривых. При этом резко уменьшится интенсивность фона и увеличится соотношение полезный сигнал/шум.

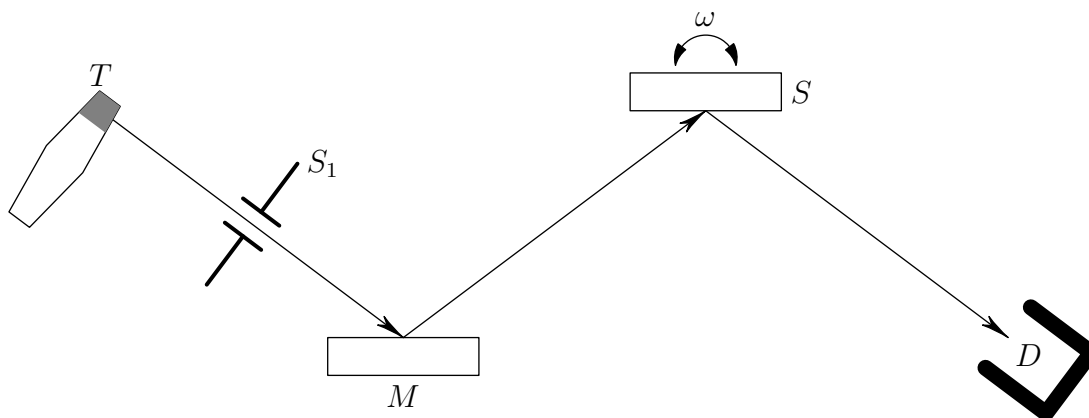


Рис. 1.3. Схема двухосевого рентгеновского дифрактометра с расположением кристаллов в параллельной установке

Двухкристалльный рентгеновский дифрактометр состоит из источника рентгеновского излучения T , щели S_1 перед монохроматором M , исследуемого образца S и детектора D с широкой угловой апертурой (рис. 1.3). Такая схема была предложена Комптоном и Аллисоном [12]. В настоящее время двухкристалльный дифрактометр иногда называют двухосевым дифрактометром, поскольку вместо кристаллов могут использоваться многослойные рентгеновские зеркала или, например, монохроматор может состоять из нескольких кристаллов.

Наличие монохроматора M позволяет значительно снизить влияние спектрального состава излучения и создать монохроматичный, с малой угловой расходимостью, линейно поляризованный пучок плоской рентгеновской волны.

В измерениях с использованием высокоразрешающей двухосевой дифрактометрии рентгеновский пучок, отражаясь от образца, претерпевает размытие из-за дефектов структуры, а также аппаратных искажений. Для того чтобы сигнал был зарегистрирован с высоким угловым разрешением, после образца перед детектором размещают анализатор A (рис. 1.4). Такая схема с учетом вращения образца и анализатора получила название трехкристалльной (трехосевой) рентгеновской дифрактометрии. Хотя исторически впервые такой дифрактометр получил название трехкристалльно-

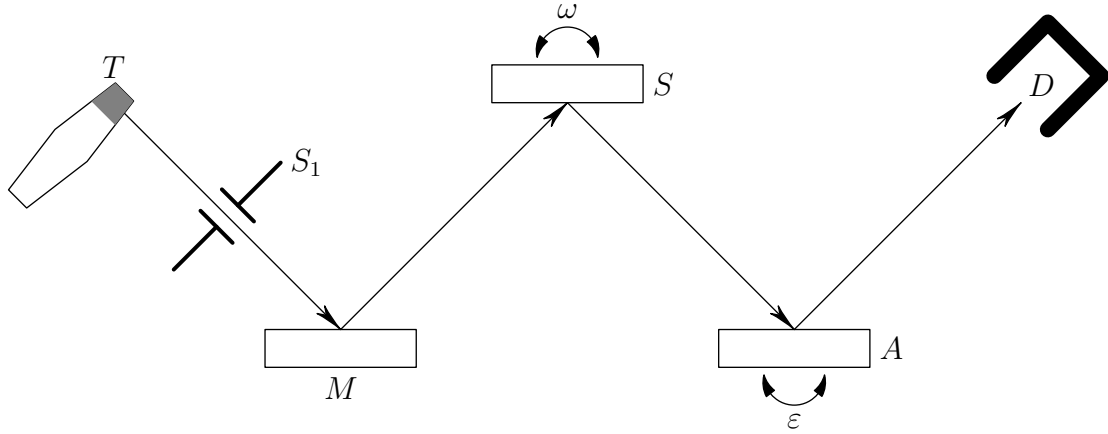


Рис. 1.4. Схема трехосевого рентгеновского дифрактометра

го спектрометра [13], однако в силу вышеупомянутых доводов, связанных с развитием рентгеновской оптики, более правильно его называть трехосевым дифрактометром. Далее будем придерживаться этого физического термина.

Итак, впервые схема трехосевого дифрактометра была реализована при исследовании теплового диффузного рассеяния в кристаллах кремния и алмаза в 1972 году [13]. Годом позже трехосевая схема использовалась для исследования структурных дефектов в меди методом хуанговского рассеяния [14]. Методика трехосевой дифрактометрии в современной интерпретации изложена в работе [15].

В качестве монохроматора и анализатора в методе трехосевой дифрактометрии обычно используют высокосовершенные монокристаллы при параллельном бездисперсионном их расположении. Регистрируемые кривые дифракционного отражения в методе трехосевой дифрактометрии в зависимости от относительного вращения образца и анализатора получили название «сканы» в режиме ω -, ε -, $\theta/2\theta$ -сечений обратного $q(\omega, \varepsilon)$ -пространства.

Интенсивность отражения $I(q)$ от кристалла является функцией углов поворота образца ω и анализатора ε , поэтому карта углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (reciprocal space map (RSM)) выглядит в виде контуров равной интенсивности $I(q) = I(\omega, \varepsilon) = \text{const}$.

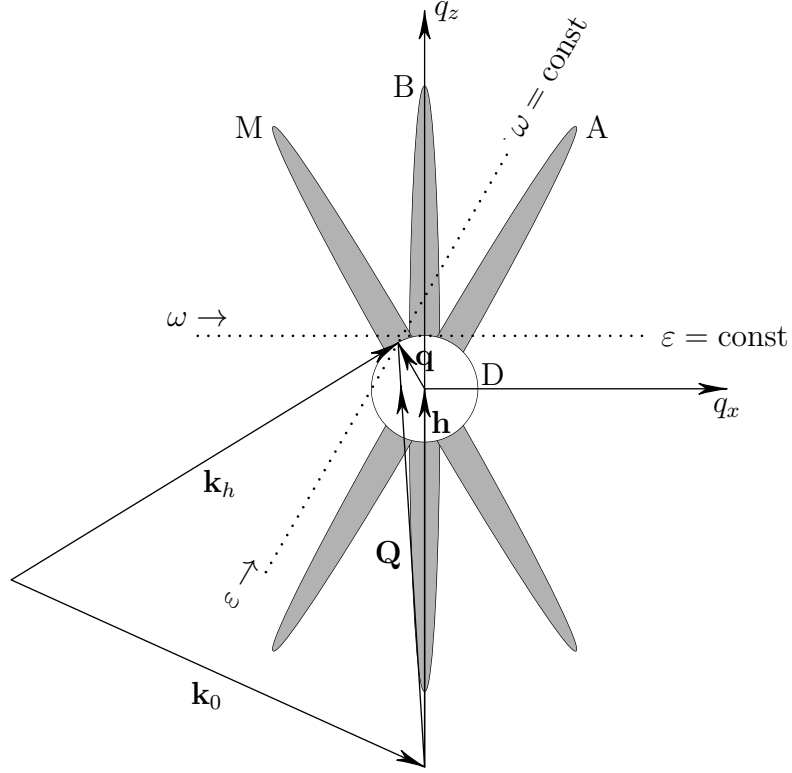


Рис. 1.5. Схематическое изображение формирования RSM. Здесь B — брегговский пик, M — пик монохроматора, A — пик анализатора, D — распределение диффузного рассеяния. Остальные обозначения соответствуют рис. 1.2.

Для ее построения в прямоугольных (q_x, q_z) или в косоугольных (ω, ε) координатах необходимо с заданным угловым разрешением произвести измерения интенсивности рассеяния от образца путем записи серии сечений $I(\omega, \varepsilon)$.

Схема формирования RSM для случая симметричного отражения в геометрии Брегга при исследовании совершенного кристалла с дефектами впервые опубликована в [15] и представлена на рис. 1.5.

Карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве строятся вблизи узла обратной решетки $\mathbf{h}$, соответствующего отражающим плоскостям (hkl) . Вектор рассеяния $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ обычно представляют в виде суммы $\mathbf{Q} = \mathbf{h} + \mathbf{q}$, где вектор $\mathbf{q}$ задает отклонение вектора $\mathbf{Q}$ от узла обратной решетки. В трехосевой дифракционной схеме проекции

вектора $\mathbf{q}$ задаются через угловые отклонения образца и анализатора

$$\begin{aligned} q_x &= k((\sin \theta_1 + \sin \theta_2) \cdot \omega - \sin \theta_2 \cdot \varepsilon), \\ q_z &= -k((\cos \theta_1 - \cos \theta_2) \cdot \omega + \cos \theta_2 \cdot \varepsilon). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Здесь $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число рентгеновского излучения в вакууме. Соотношения (1.6) можно записать как [16]

$$\begin{aligned} q_x &= h \cos \varphi \cdot \omega - k \sin \theta_2 \cdot \varepsilon, \\ q_z &= h \sin \varphi \cdot \omega + k \cos \theta_2 \cdot \varepsilon, \end{aligned} \quad (1.14)$$

где $h = 2\pi/d_{hkl} = 2k \sin \theta_B$ — величина вектора обратной решетки, d_{hkl} — межплоскостное расстояние отражающих атомных плоскостей, направление которых составляет угол φ с поверхностью кристалла. Углы поворота образца ω и анализатора ε запишутся через компоненты вектора $\mathbf{q}$ следующим образом [16]:

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{q_x \cos \theta_2 - q_z \sin \theta_2}{h \cos \theta_B}, \\ \varepsilon &= -\frac{q_x \sin \varphi + q_z \cos \varphi}{k \cos \theta_B}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Для симметричной дифракции, когда $\theta_1 = \theta_2 = \theta_B$, получаем

$$\begin{aligned} q_x &= k \sin \theta_B \cdot (2\omega - \varepsilon), \\ q_z &= -k \cos \theta_B \cdot \varepsilon. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Из этих соотношений следует, что в случае симметричной дифракционной геометрии при вращении образца ω изменяется только q_x и анализируется пространство в направлении, перпендикулярном вектору обратной решетки $\mathbf{h}$. Поворот кристалла-анализатора ε влияет как на q_z , так и на q_x , и дает распределение интенсивности вдоль сферы Эвальда. Для движения вдоль вектора $\mathbf{h}$ необходимо выполнение условия $q_x = 0$, при этом получаем $2\omega = \varepsilon$. Сканирование анализатора осуществляется со скоростью, вдвое большей скорости образца, которое обычно называют $\theta/2\theta$ -сканированием.

Отклонение образца из начального положения при неподвижном анализаторе соответствует повороту обратной решетки вокруг начала координат, поэтому конец вектора $\mathbf{h}$ описывает дугу вокруг узла (000), которая в масштабе рисунка 1.5 представляет собой штриховую прямую горизонтальную линию. Движение только детектора эквивалентно изменению угла между векторами $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_h$. Такое сканирование фиксирует измерение интенсивности вдоль сферы Эвальда. В случае $\theta/2\theta$ -сканирования, когда одновременно поворачивается образец и детектор, на карте распределения интенсивности рассеяния это представляет собой движение вдоль вектора $\mathbf{h}$.

Если провести сечения вдали от узла обратной решетки при помощи вращения кристалла образца по углу ω и, например, при фиксированном положении кристалла анализатора, то получим распределение интенсивности вдоль линии $\varepsilon = \text{const}$ (рис. 1.5). В этом случае на кривой помимо широкого диффузного горба (пика) при $\omega \approx \varepsilon/2$ будут наблюдаться три пика, называемые псевдопиком анализатора, главным пиком и псевдопиком монохроматора, а их угловые положения равны $\omega = 0$, $\omega = \varepsilon/2$ и $\omega = \varepsilon$ соответственно. При другом способе сканирования, когда вращается анализатор, а положение образца остается фиксированным ($\omega = \text{const}$), помимо диффузного фона будут наблюдаться два пика: псевдопик монохроматора при $\varepsilon = \omega$ и главный пик при $\varepsilon = 2\omega$ соответственно. В режиме записи $\omega/2\varepsilon$ имеем дело с сечением обратного пространства вдоль «полосы» образца (брегговское рассеяние) и пик наблюдается только в одной точке $\omega = \varepsilon = 0$, а полный профиль кривой дифракционного отражения при $\varepsilon = 2\omega$.

Вид карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве зависит не только от исследуемого образца, но и от типа монохроматора и анализатора. Если эти рентгенооптические элементы созданы с учетом многократного отражения, то интенсивности псевдопиков на

дифракционной картине существенно уменьшаются, а иногда и вовсе пропадают [17].

1.3.1 Основные уравнения теории трехосевой рентгеновской дифракции

Метод высокоразрешающей трехосевой рентгеновской дифрактометрии широко используется для изучения дефектов в кристаллах, процессов релаксации упругих напряжений в гетероэпитаксиальных системах, шероховатостей интерфейсов многослойных структур и т.д. [18].

Разнообразные экспериментальные данные, полученные с помощью этой теории, в основном обрабатываются качественно с использованием уже имеющихся представлений о дифракции в идеальных и мозаичных кристаллах. Теоретическое описание метода трехосевой рентгеновской дифракции ограничивается исследованием распределения интенсивностей в зависимости от положения образца и анализатора, а также изучением аппаратных функций.

Холи и др. в рамках кинематического приближения разработан метод вычисления распределения диффузного рассеяния в обратном пространстве [18], который основан на введении функции взаимной когерентности $\Gamma(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \langle D(\mathbf{R})D(\mathbf{R}') \rangle$, где $D(\mathbf{R})$ — амплитуда дифракционной волны от кристалла с дефектами в точке наблюдения $\mathbf{R} = (X, Y, 0)$ на поверхности кристалла. Здесь $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по статистическому ансамблю конфигурации дефектов. В рамках данного подхода имеется возможность вычисления диффузно рассеянной интенсивности без учета когерентной составляющей. Иными словами, метод применим для больших значений q_x и q_z , когда влиянием когерентной компоненты можно пренебречь.

В рамках кинематической теории рассеяния Кривоглаза [19] в [20] исследовалась проблема дифракции рентгеновских лучей на гетероэпитаксиальных структурах с дислокациями несоответствия. Полная интенсивность

рассеяния представлена в виде

$$I(q_x, q_z) = 2\pi\delta(q_x)I_{\text{coh}}(q_z) + I_{\text{diff}}(q_x, q_z),$$

где $I_{\text{coh}}(q_z)$ и $I_{\text{diff}}(q_x, q_z)$ — когерентная и диффузная составляющие интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Авторами проведен детальный анализ формирования изодиффузных линий в обратном пространстве и углового распределения когерентного рассеяния вдоль направления q_z .

Рассмотрение проблемы трехосевой рентгеновской дифракции в полукинематическом приближении предпринято в [21] с использованием формализма Дарвина. В этой работе коэффициент экстинкции ξ формально связывается со статическим фактором Дебая-Валлера. Несколько смущает тот факт, что выражение для интенсивности диффузного рассеяния представлено в виде свертки Фурье-трансформанты корреляционной функции и интенсивности дифракционной волны, хотя общеизвестно, что источниками диффузно рассеянных квантов является проходящая когерентная интенсивность [22].

При построении последовательной теории трехкристальной дифрактометрии возникают серьезные проблемы, одна из которых связана с нормировкой интенсивностей. Падающая плоская волна имеет бесконечную интенсивность, в то время как интенсивность диффузных волн остается конечной. Интенсивности когерентных и диффузных волн становятся несоизмеримыми. С другой стороны, в эксперименте интенсивность первичного пучка от монохроматора засвечивает не всю поверхность, а ее определенную площадь в зависимости от входной щели. Поэтому интенсивность рентгеновского пучка, падающего на образец, следует считать конечной.

Еще одна проблема возникает при экспериментальном разделении когерентной и диффузной интенсивностей рассеяния. В непосредственной близости от узла обратной решетки эти интенсивности накладываются друг на друга. Следовательно, незнание характера распределения когерентной и диффузной компоненты сильно затрудняет получение информации о

структурных характеристиках исследуемого объекта.

Как отмечалось выше, формализм статистической динамической теории дифракции сферической волны на кристалле с дефектами предложен Като [22]. Для случая плоской волны эта теория модернизирована Бушуевым [23]. Для градиентных и многослойных кристаллов формализм статистической динамической теории разработан в работах [24]-[28]. В частности, вариант одномерной статистической динамической теории дифракции применен для исследования лазерной гетероструктуры путем анализа двухкристальной кривой дифракционного отражения и выделения когерентной составляющей трехкристалльным дифрактометром в режиме $\omega - 2\omega$ сканирования [26]. Этот же метод был использован в численном решении обратной задачи дифракции от градиентной структуры [27]-[28]. Однако эти теории применимы только для двухкристальной дифрактометрии. Заметим, что Бушуев [29] предложил переход от двухкристальной к трехкристальной дифрактометрии путем модернизации корреляционной длины $\tau(\omega) \rightarrow \tau(\omega, \varepsilon)$, где ω, ε — угловые отклонения образца и анализатора.

Общий случай статистической динамической теории для трехкристальной дифрактометрии разработан в [30]. Эта теория применима для кристаллов любой толщины и основные уравнения имеют сложную математическую структуру. В работах [31]-[32] показано, что для кристаллов толщиной менее 10 мкм эффектами диффузного поглощения когерентных волн, многократным диффузным перерасеянием и брегговской дифракцией диффузных волн можно пренебречь. Поэтому возникает проблема развития статистической теории дифракции для описания рассеяния рентгеновских лучей в используемых в микроэлектронике полупроводниковых слоях и пленках толщиной до 10 мкм. При этом когерентно рассеянную интенсивность следует рассматривать в рамках динамической дифракции, а диффузную компоненту без учета многократного перерасеяния (без учета вторичной экстинкции).

Будем исходить из уравнений Такаги, записанных в декартовой системе координат

$$\begin{aligned} \left(\operatorname{ctg} \theta_1 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}\right) E_0 &= i a_0 E_0 + i a_{\bar{h}} \phi(r) E_h, \\ \left(\operatorname{ctg} \theta_2 \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z}\right) E_h &= i (b a_0 + \eta) E_h + i a_h \phi^*(\mathbf{r}) E_0, \end{aligned} \quad (1.17)$$

где $a_0 = \frac{\pi \chi_0}{\lambda \gamma_0}$, $a_{h,\bar{h}} = C \frac{\pi \chi_{h,\bar{h}}}{\lambda \gamma_{h,0}}$, $\eta = \frac{2\pi}{\lambda \gamma_h} \sin 2\theta_B \omega$ — угловой параметр, используемый в двухкристалльной дифрактометрии в режиме $\theta-2\theta$ -сканирования, λ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме, $\omega = \theta - \theta_B$ — отклонение рентгеновского пучка от угла Брегга θ_B , $b = \gamma_0/\gamma_h$ — фактор асимметрии, $\gamma_{0,h} = \sin \theta_{1,2}/$, $\theta_{1,2} = \theta_B \mp \varphi$ — углы, определяющие направления падающего и дифракционного пучков относительно входной поверхности кристалла, φ — угол скоса отражающих плоскостей к поверхности образца, C — поляризационный фактор, $\chi_{0,h} = -r_0 \frac{\lambda^2}{\pi V_c} F_{0,h}$ — Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, V_c — объем элементарной ячейки, $r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$ — классический радиус электрона, e , m — заряд и масса электрона, $F_{0,h}$ — структурные факторы в направлении прохождения и дифракции рентгеновской волны. Фазовый фактор кристалла $\phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}))$ зависит от функции атомных смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, вид которой определяется деформациями решетки, $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки, причем $h = 2\pi/d_{hkl}$, где d_{hkl} — межплоскостное расстояние.

Перейдем от исходных амплитуд $E_{0,h}(\mathbf{r})$ к их фурье-образам $E_{0,h}(q_x, y, z)$ через преобразование

$$E_{0,h}(q_x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-iq_x x) E_{0,h}(\mathbf{r}). \quad (1.18)$$

При этом обратное фурье-преобразование запишется как

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq_x \exp(iq_x x) E_{0,h}(q_x, y, z). \quad (1.19)$$

Система уравнений (1.17) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1) E_0(q_x, y, z) + i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(\mathbf{r}) \exp(iq_x x) E_h(\mathbf{r}), \\ -\frac{\partial E_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= i(ba_0 + \eta - q_x \operatorname{ctg} \theta_2) E_h(q_x, y, z) + i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(\mathbf{r}) \exp(iq_x x) E_0(\mathbf{r}).\end{aligned}\tag{1.20}$$

Далее введем угловую переменную в обратном пространстве, которая обычно используется при измерении карт интенсивности рассеяния с использованием трехосевого дифрактометра и определена соотношением

$$q_z = q_x \operatorname{ctg} \theta_2 - \eta.\tag{1.21}$$

Для следующих преобразований проведем фазовую перенормировку волновых полей

$$\begin{aligned}\hat{E}_h(q_x, y, z) &= E_h(q_x, y, z) \exp(i(ba_0 - q_z)z), \\ \hat{E}_0(q_x, y, z) &= E_0(q_x, y, z) \exp(-i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z),\end{aligned}\tag{1.22}$$

благодаря которой система уравнений (1.20) преобразуется к более простому виду

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{E}_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(\mathbf{r}) \exp(iq_x x - i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z) E_h(\mathbf{r}), \\ -\frac{\partial \hat{E}_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(\mathbf{r}) \exp(iq_x x + i(ba_0 - q_z)z) E_0(\mathbf{r}).\end{aligned}$$

Полученные уравнения не совсем удобны для практического использования, поскольку под интегралами находятся изначальные амплитуды $E_{0,h}(\mathbf{r})$. Фурье-преобразование (1.19) и перенормировка (1.22) позволяют получить интегро-дифференциальные уравнения для фурье-компонент ам-

плитуд

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \hat{E}_0(q_x, y, z)}{\partial z} = \\
& = i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq'_x \phi(\mathbf{r}) \exp(i(q_x - q'_x)x - i(a_0(1+b) - q_z - q'_x \operatorname{ctg} \theta_1)z) \hat{E}_h(q'_x, y, z) \\
& - \frac{\partial \hat{E}_h(q_x, y, z)}{\partial z} = \\
& = i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq'_x \phi^*(\mathbf{r}) \exp(i(q_x - q'_x)x + i(a_0(1+b) - q_z - q'_x \operatorname{ctg} \theta_1)z) \hat{E}_0(q'_x, y, z)
\end{aligned} \tag{1.23}$$

Введем новый угловой параметр $\hat{\eta}$, который связан с угловой переменной двухосевой дифрактометрии η соотношением

$$\hat{\eta} = a_0(1+b) + \eta - q_x(\operatorname{ctg} \theta_1 + \operatorname{ctg} \theta_2). \tag{1.24}$$

Параметр $\hat{\eta}$ можно выразить через угловые отклонения образца ω и анализатора ε в схеме трехосевой дифрактометрии

$$\hat{\eta} = \frac{\pi}{\lambda \gamma_0} [\chi_0(1+b) + 2 \sin(\theta_1 + \theta_2) \cdot (\varepsilon - \omega)]. \tag{1.25}$$

В уравнениях дифракции для двухкристальной дифрактометрии (1.17) присутствует параметр $\eta \sim \omega$, который отвечает только за угловое положение исследуемого образца. Новый угловой параметр, как это следует из (1.25), $\hat{\eta} \sim \varepsilon \sim \omega$, то есть зависит как от положения образца, так и анализатора. Представим его через проекции вектора $\mathbf{q}$, определяющего отклонение вектора рассеяния $\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ от узла обратной решетки $\mathbf{h}$:

$$\hat{\eta} = a_0(1+b) - q_z - q_x \operatorname{ctg} \theta_1. \tag{1.26}$$

Уравнения дифракции (1.23) перепишутся в виде

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{E}_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= \\
&= i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq'_x \phi(\mathbf{r}) \exp(i(q_x - q'_x)(x - z \operatorname{ctg} \theta_2) - i\hat{\eta}z) \hat{E}_h(q'_x, y, z) \\
-\frac{\partial \hat{E}_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= \\
&= i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dq'_x \phi^*(\mathbf{r}) \exp(i(q_x - q'_x)(x + z \operatorname{ctg} \theta_1) + i\hat{\eta}z) \hat{E}_0(q'_x, y, z)
\end{aligned} \tag{1.27}$$

В случае отсутствия деформаций кристаллической решетки фазовый фактор $\phi(\mathbf{r}) = \phi^*(\mathbf{r}) = 1$, и уравнения запишутся как

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{E}_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= i a_{\bar{h}} \exp(-i(\hat{\eta}z + q_x z \operatorname{ctg} \theta_2)) \hat{E}_h(q_x, y, z), \\
-\frac{\partial \hat{E}_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= i a_h \exp(-i(\hat{\eta}z - q_x z \operatorname{ctg} \theta_1)) \hat{E}_0(q_x, y, z).
\end{aligned} \tag{1.28}$$

Здесь воспользовались определением δ -функции

$$\delta(q_x - q'_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(i(q_x - q'_x)x).$$

С учетом соотношений (1.21), (1.24) и (1.26) получаем следующую систему уравнений для фурье-компонент волновых полей в проходящем и дифракционном направлениях:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{E}_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= i a_{\bar{h}} \exp(-i(a_0(1+b) - q_z)z) \hat{E}_h(q_x, y, z), \\
-\frac{\partial \hat{E}_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= i a_h \exp(i(a_0(1+b) - q_z)z) \hat{E}_0(q_x, y, z).
\end{aligned} \tag{1.29}$$

Заметим, что амплитуды рентгеновских волн в (1.29) зависят от проекций вектора $\mathbf{q}$. Эти амплитуды связаны с волновыми полями исходного уравнения Такаги через преобразования

$$\hat{E}_{0,h}(q_x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-iq_x x) \hat{E}_{0,h}(\mathbf{r}), \tag{1.30}$$

где по аналогии с (1.22) справедливы фазовые преобразования

$$\begin{aligned}\hat{E}_h(\mathbf{r}) &= E_h(\mathbf{r}) \exp(i(ba_0 - q_z)z), \\ \hat{E}_0(\mathbf{r}) &= E_0(\mathbf{r}) \exp(-i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z).\end{aligned}\tag{1.31}$$

Приведем ещё один метод расчета карт интенсивности рассеяния рентгеновских лучей на латеральных структурах.

Как известно, уравнения Такаги-Топена выводятся из волнового уравнения

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}(1 + \chi) \mathbf{E}(\mathbf{r}).\tag{1.32}$$

Решение ищут в виде:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{h}} \mathbf{E}_h(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}}.\tag{1.33}$$

Здесь суммирование проводится по всем векторам $\mathbf{h}$ обратной решетки.

В двухволновом приближении это выражение выглядит так:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{E}_h(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{h})\mathbf{r}} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{E}_h(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}_h\mathbf{r}},\tag{1.34}$$

где $\mathbf{k}_h = \mathbf{k} + \mathbf{h}$.

Подставляя последнее выражение в волновое уравнение (1.32), при некоторых весьма общих предположениях получают уравнения Такаги-Топена в двухволновом приближении.

Попробуем искать решение волнового уравнения в двухволновом приближении, используя вместо разложения (1.34), следующее выражение (рис. 1.6):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{E}_{h+q}(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{h}+\mathbf{q})\mathbf{r}} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{E}_{h+q}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}},\tag{1.35}$$

где $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{h} + \mathbf{q}$, $\mathbf{q}$ — отклонение вектора рассеяния $\mathbf{Q}$ от вектора обратной решетки $\mathbf{h}$. Заметим, что если обозначить $\mathbf{E}_h = \mathbf{E}_{h+q}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$, то выражение (1.35) совпадёт с выражением (1.34).

Вывод уравнений Такаги-Топена в $\mathbf{q}$ -пространстве совершенно аналогичен традиционному выводу этих уравнений. Отличия заключаются лишь

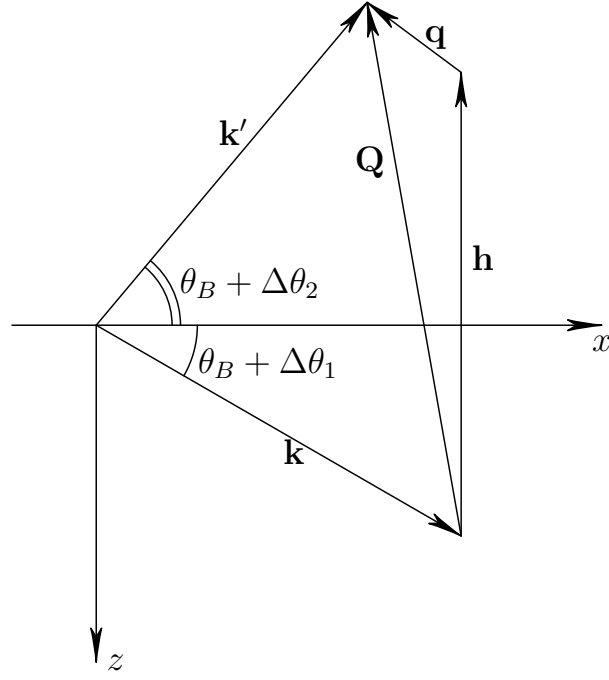


Рис. 1.6. Связь вектора рассеяния $\mathbf{Q}$ с векторами обратной решетки $\mathbf{h}$ и вектором $\mathbf{q}$

в том, что необходимо учитывать, что $k = k'$. В итоге получим уравнения:

$$\begin{aligned} -\frac{2i}{k^2} (\mathbf{k} \nabla) \mathbf{E}_0 &= \chi_0 \mathbf{E}_0 + \chi_{-h} \mathbf{E}_{h+q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \\ -\frac{2i}{k^2} (\mathbf{k}' \nabla) \mathbf{E}_{h+q} &= \chi_h \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \chi_0 \mathbf{E}_{h+q}. \end{aligned}$$

Попробуем избавиться от множителей $e^{\pm i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ в правых частях уравнений. Для этого домножим второе уравнение слева на $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ и заметим, что

$$e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} (\mathbf{k}' \cdot \nabla) \mathbf{E}_{h+q}(\mathbf{r}) = (\mathbf{k}' \cdot \nabla) (\mathbf{E}_{h+q}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}) - i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{q}) \mathbf{E}_{h+q}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

После этого введем обозначение $\mathbf{E}_h = \mathbf{E}_{h+q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$. Тогда получим

$$\begin{aligned} -\frac{2i}{k^2} (\mathbf{k} \nabla) \mathbf{E}_0 &= \chi_0 \mathbf{E}_0 + \chi_{-h} \mathbf{E}_h, \\ -\frac{2i}{k^2} (\mathbf{k}' \nabla) \mathbf{E}_h &= \left(\chi_0 + 2 \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{q}}{k^2} \right) \mathbf{E}_h + \chi_h \mathbf{E}_0. \end{aligned} \tag{1.36}$$

Эти уравнения становятся идентичными обычным уравнениям Такаги-Топена в двухволновом приближении, если вспомнить, что $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{h} + \mathbf{q}$, или $\mathbf{k}' - \mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{h} = \mathbf{k}_h$. Тогда

$$k_h^2 = (\mathbf{k}' - \mathbf{q})^2 = k'^2 + q^2 - 2(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{q}).$$

Отсюда получаем

$$2 \frac{\mathbf{k}'\mathbf{q}}{k^2} = -\frac{k_h^2 - k^2}{k^2} + \frac{q^2}{k^2}.$$

Здесь учтено, что $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k$. Пренебрегая в последнем выражении малой величиной q^2/k^2 , получаем известное выражение для аккомодации

$$-2 \frac{\mathbf{k}'\mathbf{q}}{k^2} \approx \alpha = \frac{k_h^2 - k^2}{k^2} = -2 \sin 2\theta_B \Delta\theta.$$

Простые оценки показывают, что величина $q^2/k^2 \sim (\Delta\theta)^2$, так что предположение о её малости по сравнению с величиной $\frac{k_h^2 - k^2}{k^2}$ является оправданным.

Таким образом, решение для дифрагированной волны получаем из решения системы уравнений (1.36) для амплитуды $\mathbf{E}_h(\mathbf{r}; \Delta q)$ (здесь для краткости обозначено $\Delta q = q_x \operatorname{ctg} \theta_B - q_z$). Окончательное решение будет иметь вид: $\mathbf{E}_{h+q}(\mathbf{r}; \Delta q) = \mathbf{E}_h(\mathbf{r}; \Delta q) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$. Для нахождения интенсивности отражения надо вычислить квадрат модуля интеграла

$$S(q_x, q_z) = \int \mathbf{E}_h(\mathbf{r}; \Delta q) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (1.37)$$

где интегрирование идет по всей отражающей поверхности кристаллической структуры.

1.4 Дифракция на фазовой решетке

Дифракционные решетки являются важными рентгенооптическими элементами и широко используются в качестве монохроматоров и спектральных элементов в рентгеновском диапазоне длин волн. Современная технология позволяет изготавливать дифракционные решетки на больших площадях с очень высокой плотностью штрихов как с использованием методов фото- и электроннолучевой литографии и методов реактивного плазмохимического и ионного травления, так и методов прямого нарезания штрихов дифракционной решетки специально сориентированными алмазными резцами. Дифракционную решетку сегодня можно изготовить с любым про-

филом штриха: прямоугольный, треугольный, трапециевидный, синусоидальный. Большое значение имеет возможность формирования дифракционных решеток с заданным наклоном отражающих плоскостей, что позволяет направить практически все дифрагированное рентгеновское излучение в заданный порядок дифракции, создавая решетки с «эффектом блеска». В данном случае интенсивность первого порядка дифракции может достигать 60-70 % от интенсивности падающего рентгеновского излучения. Оптические свойства дифракционных решеток хорошо изучены для случаев дифракции в условиях нормального падения (дифракционные решетки на прохождение) [33, 34, 35, 36], в условиях полного внешнего отражения [37, 38] и в условиях брэгговской дифракции на многослойных дифракционных решетках [39, 40]. Также были изучены дифракционные свойства кристаллических дифракционных решеток на основе кристалла Si [41, 42, 43], где было показано, что угловая расходимость между дифракционными сателлитами на кривой качания определяется периодом дифракционной решетки. Более того, детально был исследован процесс дифракции рентгеновского излучения на кристаллах, промодулированных поверхностной акустической волной, которая осуществляет синусоидальную модуляцию, как кристаллической решетки, так и поверхности кристалла [44, 45, 46, 47]. Однако следует отметить, что серьезные исследования фазосдвигающих дифракционных решеток до настоящего времени не проводились.

Процесс изготовления фазовых дифракционных решеток схематично представлен на рис. 1.7. В качестве подложки был использован кристалл Si(111) (отражающие плоскости (111) параллельны поверхности кристалла). Шероховатость подложки кристалла Si(111) не превышала 7 Å. Методом электронно-лучевой литографии в слое резиста ПММА толщиной 0.4 мкм на поверхности кристалла Si были сформированы рисунки фазовых дифракционных решеток площадью 2×2 мм². На следующей технологической операции на поверхность подложки с рисунком дифракционной

решетки в резисте методом магнетронного напыления был напылен слой W толщиной 1000 Å. W является сильно поглощающим материалом и был использован в качестве фазосдвигающего слоя для рентгеновского излучения. После заключительной технологической операции “lift-off” на поверхности кристалла Si(111) остается W фазовая дифракционная решетка. Данная технология была использована для изготовления фазосдвигающих дифракционных решеток с периодом $D = 1.6, 1.0, 0.5$ мкм.

Наличие на поверхности кристалла Si(111) решетки из W приводит к формированию сложной двумерной дифракционной картины, связанной с дифракцией рентгеновского излучения на дифракционной решетке на входе и выходе излучения из кристалла. На рис. 1.9 представлены q_x – q_z карты распределения дифрагированной рентгеновской интенсивности, полученные для фазосдвигающих решеток с периодом $D = 1.6$ мкм (а), $D = 1.0$ мкм (b) и $D = 0.5$ мкм (с). Карты были получены путем измерения кривых качания дифракционных решеток при различных угловых положениях кристалла-анализатора. Из карт хорошо видно, что распределение дифрагированной рентгеновской интенсивности носит двумерный характер. Двумерное распределение дифрагированной интенсивности связано с дифракцией рентгеновского излучения на W фазовой дифракционной решетке на входе в кристалл, и далее каждый дифрагированный луч второй раз дифрагирует на W фазовой дифракционной решетке на выходе из кристалла.

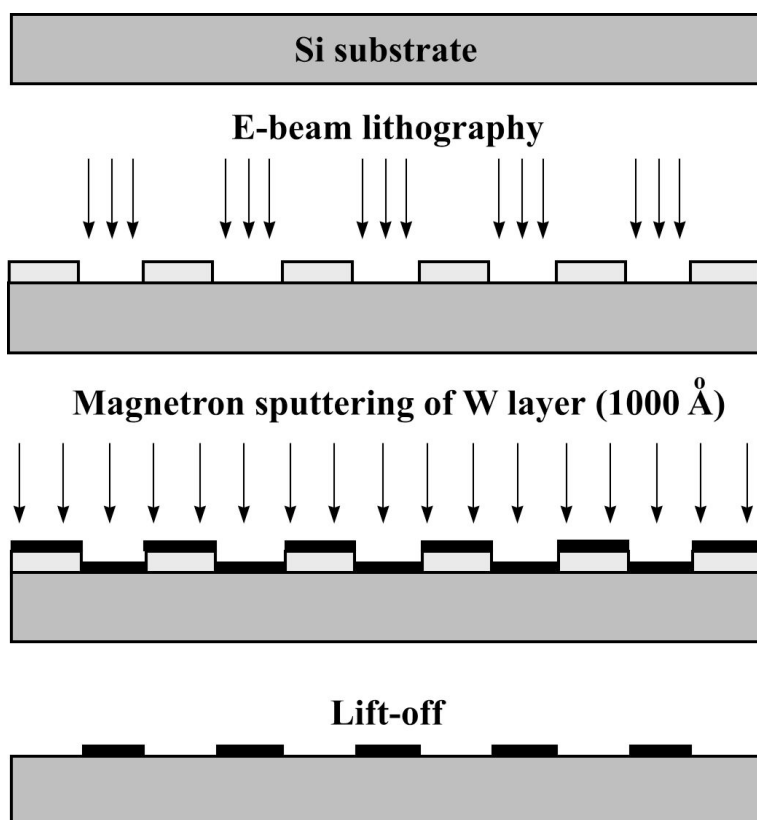


Рис. 1.7. Технология изготовления фазовой решетки.

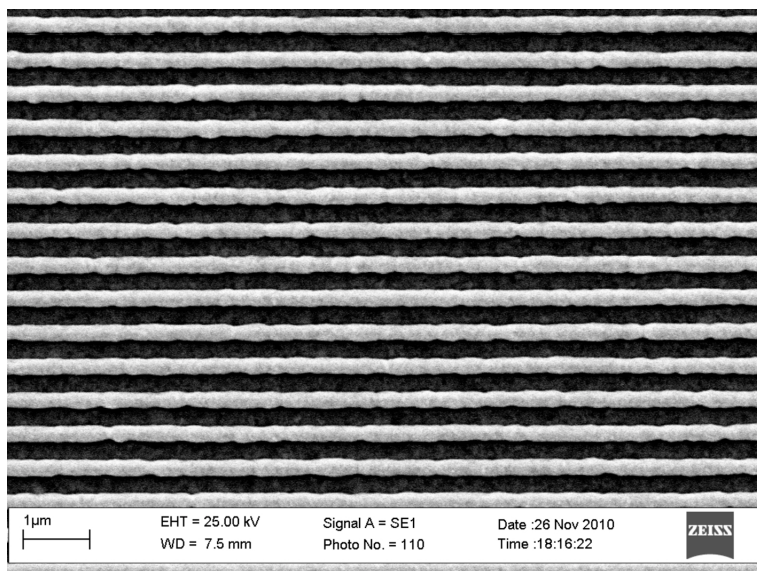


Рис. 1.8. Изображение W фазовой дифракционной решетки с периодом $D = 0.5$ мкм на поверхности подложки кристалла Si(111).

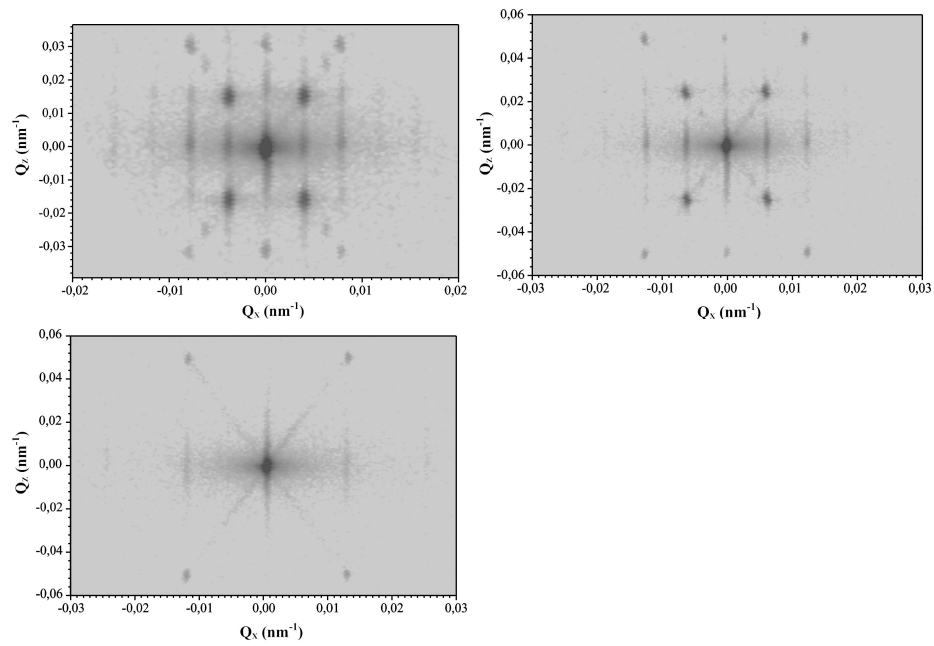


Рис. 1.9. Карты дифракции рентгеновского излучения на W фазовых дифракционных решетках: (a) $D = 1.6 \mu m$; (b) $1.0 \mu m$; (c) $0.5 \mu m$.

Глава 2

Динамическая дифракция на латеральных структурах

2.1 Метод Такаги–Топена

2.1.1 Введение

Полупроводниковые латерально ограниченные кристаллические структуры являются важными элементами современной опто-, микро- и нанoeлектроники. Существуют разные технологические методы для создания таких структур. В частности, перспективным и многообещающим является метод селективного роста эпитаксиальной системы на профилированной подложке. Рентгенодифракционные исследования латерально ограниченных кристаллов пока еще немногочисленны, поскольку имеют недостаточное разрешение и являются весьма трудоемкими для анализа дифракционных данных [1]. Как правило, теоретические расчеты дифракционных спектров проводятся в рамках кинематического приближения [2,3] с использованием метода конечных элементов [2] или аналитических формул [3].

С другой стороны, латерально ограниченные кристаллы могут иметь размеры, сравнимые или превосходящие длину экстинкции. Поэтому кинематическое приближение для таких объектов уже не применимо. Кроме того, для вычислений коэффициентов отражения от латерально ограниченных рентгеновских зеркал, например, штрихов многослойной дифрак-

ционной решетки, из-за сильного взаимодействия рентгеновского поля со средой, следует использовать динамическую теорию дифракции.

Вычисление кривых дифракционного отражения от совершенных кристаллов прямоугольного сечения в рамках динамической дифракции проводилось в работах [4,5]. Однако процедура расчетов дифракционных кривых в этих работах, основанная на методе Коши–Римана, весьма сложна, громоздка и, на наш взгляд, малодоступна для обработки экспериментальных данных. Кроме того, в работах не показан постепенный переход от малых до полубесконечных латеральных размеров кристалла.

В настоящей работе разработаны два новых, независимых алгоритма вычисления кривых дифракционного отражения от латерально ограниченных кристаллов прямоугольного сечения.

2.1.2 Основные уравнения

Пусть на бесконечно длинный кристалл прямоугольного сечения с толщиной L_z вдоль оси OZ и шириной L_x вдоль оси OX падает плоская монохроматическая волна (рис. 2.1). Плоскость падения волны лежит в плос-

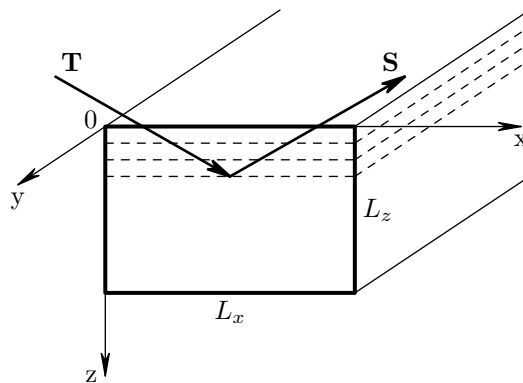


Рис. 2.1. Геометрия системы. Жирной линией показано сечение кристалла. Штриховые линии условно изображают отражающие плоскости. T – падающая волна, R – отраженная волна.

кости XOZ . Для простоты, рассмотрим отражение от системы кристаллических плоскостей, перпендикулярных оси OZ . Тогда в двухволновом приближении для симметричной геометрии Брэгга уравнения Такаги–Топена

в декартовой системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned} \left(\cos \theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \sin \theta_B \frac{\partial}{\partial z} \right) T(x, z) &= i \frac{\pi}{\lambda} \chi_o T(x, z) + i \frac{\pi}{\lambda} \chi_{-g} C R(x, z) \\ \left(\cos \theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \sin \theta_B \frac{\partial}{\partial z} \right) R(x, z) &= i \frac{\pi}{\lambda} (\chi_o - \alpha) R(x, z) + i \frac{\pi}{\lambda} \chi_g C T(x, z), \end{aligned} \quad (2.1)$$

где $T(x, z)$ — поле проходящей волны, $R(x, z)$ — поле дифракционной волны, $\alpha = -2 \sin 2\theta_B \Delta\theta$, θ_B — точный угол Брэгга исследуемого кристалла, $\Delta\theta$ — отклонение угла падения рентгеновских лучей от угла Брэгга, C — фактор поляризации, λ — длина волны рентгеновского излучения, $\chi_{o,g,-g}$ — фурье компоненты рентгеновской поляризуемости.

Определим граничные условия для поставленной задачи:

$$T(x=0, z) = 1, \quad R(x=0, z) = 0, \quad T(x, z=0) = 1, \quad R(x, z=L_z) = 0.$$

Введем новые безразмерные пространственные переменные x' и z' :

$$x' = \frac{x}{L_z} \operatorname{tg} \theta_B, \quad z' = \frac{z}{L_z}. \quad (2.2)$$

Система уравнений (2.28) перепишется в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial x'} + \frac{\partial T}{\partial z'} &= a_1 T + b_1 R \\ \frac{\partial R}{\partial x'} - \frac{\partial R}{\partial z'} &= a_2 R + b_2 T \end{aligned} \quad (2.3)$$

с граничными условиями

$$T(x'=0, z') = 1, \quad R(x'=0, z') = 0, \quad T(x', z'=0) = 1, \quad R(x', z'=1) = 0. \quad (2.4)$$

Здесь параметры a_1, a_2, b_1, b_2 определены следующим образом:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} \chi_o, & a_2 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} (\chi_o - \alpha), \\ b_1 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} \chi_{-g} C, & b_2 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} \chi_g C. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Система уравнений (2.3) с граничными условиями (2.4) решалась двумя методами. Результаты численных расчетов этими методами сравнивались для контроля возможных ошибок.

2.1.3 Численное решение на разностной сетке

В направлении оси OZ разобьем кристалл на N_z слоев толщиной $\Delta z' = 1/N_z$ и введем разностную сетку с узлами $z'_j = j \cdot \Delta z'$ ($0 \leq j \leq N_z$). Для значений амплитуд в этих узлах введем обозначения: $T_j = T(x', z'_j)$ и $R_j = R(x', z'_j)$. Производные $\partial T/\partial z'$ и $\partial R/\partial z'$ заменим симметричными разностными производными:

$$\frac{\partial T_j}{\partial z'} \approx \frac{T_{j+1} - T_{j-1}}{2\Delta z'}, \quad \frac{\partial R_j}{\partial z'} \approx \frac{R_{j+1} - R_{j-1}}{2\Delta z'} \quad \text{для } 1 \leq j \leq N_z - 1.$$

На границах $z' = 0$ и $z' = 1$ необходимо использовать несимметричные разностные производные:

$$\frac{\partial T_j}{\partial z'} \approx \frac{T_j - T_{j-1}}{\Delta z'} \quad \text{для } j = N_z, \quad \frac{\partial R_j}{\partial z'} \approx \frac{R_{j+1} - R_j}{\Delta z'} \quad \text{для } j = 0.$$

Значения $T_0 = 1$ и $R_{N_z} = 0$ определены граничными условиями (2.4). Тогда система уравнений (2.3) примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_j}{\partial x'} &= a_1 T_j - \frac{1}{2\Delta z'}(T_{j+1} - T_{j-1}) + b_1 R_j \\ \frac{\partial R_j}{\partial x'} &= a_2 R_j + \frac{1}{2\Delta z'}(R_{j+1} - R_{j-1}) + b_2 T_j \end{aligned} \quad \text{для } 1 \leq j \leq N_z - 1 \quad (2.6)$$

с двумя дополнительными уравнениями на границах

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_j}{\partial x'} &= \left(a_1 - \frac{1}{\Delta z'}\right) T_j + \frac{1}{\Delta z'} T_{j-1} + b_1 R_j \quad \text{для } j = N_z, \\ \frac{\partial R_j}{\partial x'} &= \left(a_2 - \frac{1}{\Delta z'}\right) R_j + \frac{1}{\Delta z'} R_{j+1} + b_2 T_j \quad \text{для } j = 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

В итоге получена система $2N_z$ обыкновенных дифференциальных уравнений относительно переменной x' с граничными условиями $T_j(x' = 0) = 1$, $R_j(x' = 0) = 0$ (для всех j).

Полученную систему уравнений интегрировали методом Рунге–Кутты второго порядка точности. Шаг интегрирования $\Delta z'$ выбирался в пределах $10^{-2} \div 5 \cdot 10^{-3}$. Эмпирически найдено, что для шага интегрирования по оси OX должно выполняться соотношение $\Delta x \lesssim \Delta z$. Таким образом, для переменных x' и z' , используя соотношения (2.2), получаем: $\Delta x' \lesssim \Delta z' \cdot \operatorname{tg} \theta_B$.

2.1.4 Использование преобразования Лапласа.

Применим к системе уравнений (2.3) преобразование Лапласа по переменной x' :

$$\begin{aligned} T(s, z') &= \mathcal{L}[T(x', z')] = \int_0^{\infty} T(x', z') e^{-sx'} dx', \\ R(s, z') &= \mathcal{L}[R(x', z')] = \int_0^{\infty} R(x', z') e^{-sx'} dx'. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Производные $\frac{\partial T}{\partial x'}$ и $\frac{\partial R}{\partial x'}$ с учетом граничных условий $T(x' = 0, z') = 1$ и $R(x' = 0, z') = 0$ преобразуются следующим образом:

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial T}{\partial x'}\right] = sT(s, z') - 1, \quad \mathcal{L}\left[\frac{\partial R}{\partial x'}\right] = sR(s, z').$$

Тогда преобразованная система уравнений примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial z'} &= (a_1 - s)T + b_1R + 1 \\ \frac{\partial R}{\partial z'} &= -(a_2 - s)R - b_2T \end{aligned} \quad (2.9)$$

с граничными условиями $T(s, z' = 0) = 1/s$ и $R(s, z' = 1) = 0$. Интегрируя эту систему, получаем решение:

$$\begin{aligned} T(s, z') &= (1/s + t) e^{(a_1 - a_2)z'/2} \frac{(\sigma + q) e^{q(1-z')} - (\sigma - q) e^{-q(1-z')}}{(\sigma + q) e^q - (\sigma - q) e^{-q}} + \\ &+ r b_1 e^{-(a_1 - a_2)(1-z')/2} \frac{e^{qz'} - e^{-qz'}}{(\sigma + q) e^q - (\sigma - q) e^{-q}} - t, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} R(s, z') &= (1/s + t) b_2 e^{(a_1 - a_2)z'/2} \frac{e^{q(1-z')} - e^{-q(1-z')}}{(\sigma + q) e^q - (\sigma - q) e^{-q}} + \\ &+ r e^{-(a_1 - a_2)(1-z')/2} \frac{(\sigma + q) e^{qz'} - (\sigma - q) e^{-qz'}}{(\sigma + q) e^q - (\sigma - q) e^{-q}} - r. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} t &= \frac{s - a_2}{b_1 b_2 - (s - a_1)(s - a_2)}, \quad r = \frac{b_2}{b_1 b_2 - (s - a_1)(s - a_2)}, \\ \sigma &= s - \frac{a_1 + a_2}{2}, \quad q = \sqrt{\sigma^2 - b_1 b_2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Амплитуды $T(x', z')$ и $R(x', z')$ вычисляются по формулам:

$$T(x', z') = \sum_k \text{Res} [T(s, z'), s_k] e^{s_k x'}, \quad R(x', z') = \sum_k \text{Res} [R(s, z'), s_k] e^{s_k x'}, \quad (2.13)$$

где $\text{Res} [f(z), z_k]$ — вычет функции $f(z)$ в полюсе z_k .

Анализ решений для $T(s, z')$ и $R(s, z')$ показывает, что полюсами являются точка $s = 0$ и корни уравнения $(\sigma + q) e^q - (\sigma - q) e^{-q} = 0$. Значения s , обращающие в нуль знаменатели выражений для t и r , являются устранимыми особыми точками. Полюс $s = 0$ дает решение для бесконечно протяженного вдоль оси OX кристалла ($L_x = \infty$).

Для вычисления корней уравнения $(\sigma + q) e^q - (\sigma - q) e^{-q} = 0$ перепишем его следующим образом: $e^{2q} = (\sigma - q)/(\sigma + q)$. Далее запишем эквивалентное соотношение

$$e^{2q} + e^{-2q} = \frac{\sigma - q}{\sigma + q} + \frac{\sigma + q}{\sigma - q},$$

откуда легко получаются уравнения:

$$\text{sh } q = \pm \frac{q}{\sqrt{b_1 b_2}}. \quad (2.14)$$

Эти уравнения имеют бесконечное число корней $q_k^{(1)}$ и $q_k^{(2)}$, где верхний индекс 1 соответствует уравнению (2.14) со знаком плюс, индекс 2 — уравнению (2.14) со знаком минус. Нижний индекс нумерует корни в порядке возрастания их модулей. Корни уравнения (2.14) находились численно методом итераций Ньютона. За начальное приближение удобно брать значения

$$q_k^{(1,2)} = \text{arsh } \frac{k\pi}{b} \pm (-1)^k k\pi i, \quad (k = 1, 2, 3, \dots)$$

где $b = |\sqrt{b_1 b_2}|$.

Далее, согласно введенным обозначениям (2.12), находим величины $\sigma_k^{(1,2)} = -q_k^{(1,2)} \text{cth } q_k^{(1,2)}$. Полюсы $s^{(1,2)}$ теперь находим из выражения $s^{(1,2)} = (a_1 + a_2)/2 + \sigma_k^{(1,2)}$.

При вычислении амплитуд $T(x', z')$ и $R(x', z')$ по формулам (2.13) в суммах достаточно учитывать несколько сот пар полюсов, лишь для очень узких (вдоль оси X) кристаллов ($L_x/L_z < 0.1$) требуется рассчитывать на порядок большее количество полюсов. Отметим, что при расчете кривой дифракционного отражения величины $\sigma^{(1,2)}$ вычисляются только один раз, поскольку они определяются уравнением (2.14), в которое входят лишь параметры b_1 и b_2 , которые не зависят от угла отстройки $\Delta\theta$.

2.1.5 Кинематическое приближение

В кинематическом приближении полагаем параметр b_1 равным нулю. Тогда из выражений (2.10–2.11) получим следующее решение:

$$T(s, z') = \left(\frac{1}{s} + \frac{1}{a_1 - s} \right) e^{(a_1 - s)z'} - \frac{1}{a_1 - s}, \quad (2.15)$$

$$R(s, z') = \frac{b_2}{(s - a_1)(s - a_2)} \left[1 - e^{(a_2 - s)(1 - z')} \right] + \frac{b_2 a_1 e^{a_1 - s}}{s(s - a_1)(2s - a_1 - a_2)} \left[e^{(a_2 - s)(1 - z')} - e^{-(a_1 - s)(1 - z')} \right] \quad (2.16)$$

Производя обратное преобразование Лапласа, получаем выражение для амплитуды $T(x', z')$:

$$T(x', z') = e^{a_1 x'} - \left(e^{a_1 x'} - e^{a_1 z'} \right) U(x' - z'), \quad (2.17)$$

где $U(t)$ — функция Хевисайда:

$$U(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t \leq 0 \\ 1 & \text{при } t > 0 \end{cases}$$

Выражение для амплитуды $R(x', z')$ представим в следующем виде:

$$R(x', z') = R_0 + R_1 U(x' - z') + R_2 U(x' + z' - 1) + R_3 U(x' + z' - 2),$$

где

$$R_0 = b_2 \frac{e^{a_1 x'} - e^{a_2 x'}}{a_1 - a_2},$$

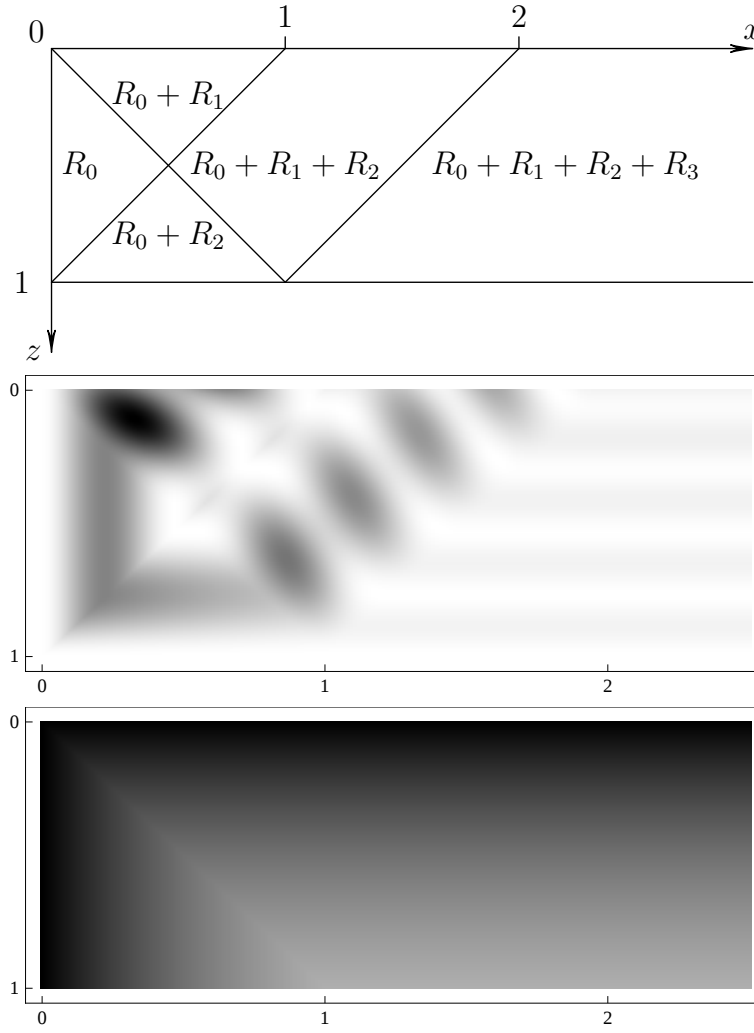


Рис. 2.2. Поля проходящей (нижний рис.) и дифрагированной волн внутри кристалла.

$$R_1 = -b_2 e^{a_1 z'} \left[\frac{1}{a_1 + a_2} + \frac{e^{a_1(x'-z')}}{a_1 - a_2} - \frac{2a_1}{a_1^2 - a_2^2} e^{(a_1+a_2)(x'-z')/2} \right],$$

$$R_2 = -b_2 \frac{e^{a_2(1-z')}}{a_1 - a_2} \left[e^{a_1(x'+z'-1)} - e^{a_2(x'+z'-1)} \right],$$

$$R_3 = b_2 e^{a_1+a_2(1-z')} \left[\frac{1}{a_1 + a_2} + \frac{e^{a_1(x'+z'-2)}}{a_1 - a_2} - \frac{2a_1}{a_1^2 - a_2^2} e^{(a_1+a_2)(x'+z'-2)/2} \right].$$

Как видно, решение в кинематическом приближении сшивается из нескольких частей: R_0 , R_1 , R_2 , R_3 . Область действия каждого решения определяется соответствующей функцией Хевисайда. На рис. 2.2 (верхний рис.) указаны эти области. На среднем рисунке изображено распределение дифрагированной волны внутри сечения кристалла в кинематическом приближении. Это распределение хорошо согласуется с распределением областей

кинематического решения. Видно, что в области $x + z > 2$ поле дифрагированной волны уже не зависит от x . Напомним, что здесь используется приведенная система единиц. В обычной системе единиц эта область определяется неравенством $x \operatorname{tg} \theta_B + z > 2L_z$. В динамическом расчете границы между областями становятся более размытыми.

2.1.6 Результаты расчетов

При использовании вышеописанных методов остался еще ряд нерешенных вопросов по выбору критериев для устойчивой работы того или иного метода. А именно: каков оптимальный шаг интегрирования $\Delta z'$ в первом методе при заданном наборе параметров дифракционной системы; каково оптимальное число полюсов во втором методе при том же наборе параметров. Поэтому расчет кривых дифракционного отражения для контроля производился параллельно тем и другим методом. Расчет с использованием преобразования Лапласа требует значительно меньше машинного времени по сравнению с численным методом на разностной сетке, особенно для длинных (вдоль оси OX) кристаллов (в десятки и даже сотни раз). В то же время, разностный метод обладает большей гибкостью: его значительно легче обобщить для расчета не только кристаллов прямоугольного сечения, но и, например, трапециевидного.

При вычислении кривой дифракционного отражения для кристалла толщиной L_z и шириной L_x сначала интегрированием по поверхностям кристалла $z = 0$ и $x = L_x$ находили суммарную амплитуду отражения:

$$\mathcal{R} = \frac{L_z}{\operatorname{tg} \theta_B} \int_0^{L'_x} R(x', 0) dx' + L_z \int_0^1 R(L'_x, z') dz',$$

где $L'_x = L_x / L_z \cdot \operatorname{tg} \theta_B$. После этого вычислялась интенсивность отраженной волны $I = |\mathcal{R}|^2$. Интегрирование в разностном методе проводилось численно по формуле Симпсона, в методе с использованием преобразования Лапласа — аналитически.

В расчетах использовались параметры, соответствующие (111) отражению CuK_{α_1} излучения от монокристаллов германия.

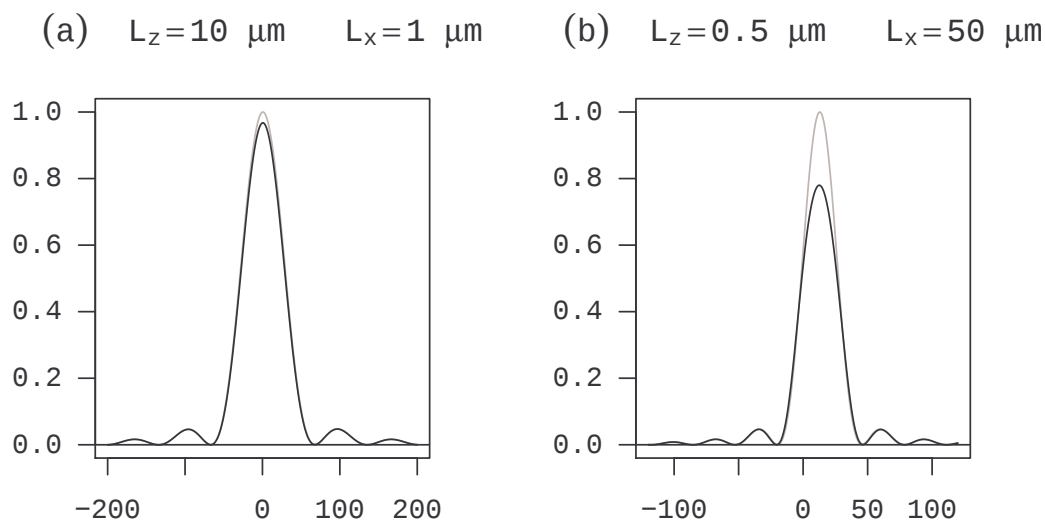


Рис. 2.3. Кривые дифракционного отражения в кинематическом (серая кривая) и динамическом приближениях при различных соотношениях между размерами сечения L_x и L_z

На рисунке 2.3 сравниваются кривые дифракционного отражения, рассчитанные в динамическом и кинематическом приближениях для суженного вдоль оси OX ($L_z/L_x \gg 1$, рис. 2.3(a)) и вдоль оси OZ ($L_z/L_x \ll 1$, рис. 2.3(b)) поперечного сечения кристаллов. При дальнейшем сужении поперечного сечения в соответствующих направлениях наблюдается полное совпадение кривых дифракционного отражения. По абсциссе отложены отклонения от угла Брэгга в угловых секундах. По ординате отсчитывается интенсивность отражения в условных единицах.

На рисунках 2.4 и 2.5 приведены кривые дифракционного отражения для кристаллов толщиной $5 \mu\text{m}$ (рис. 2.4) и $10 \mu\text{m}$ (рис. 2.5) с различной протяженностью вдоль оси OX , рассчитанные методом с использованием преобразования Лапласа.

На этих же рисунках для сравнения показаны кривые дифракционного отражения для бесконечно протяженной вдоль осей OX и OY плоскопараллельной пластинки соответствующей толщины. По абсциссе отложены отклонения от угла Брэгга в угловых секундах. По ординате отсчитывается

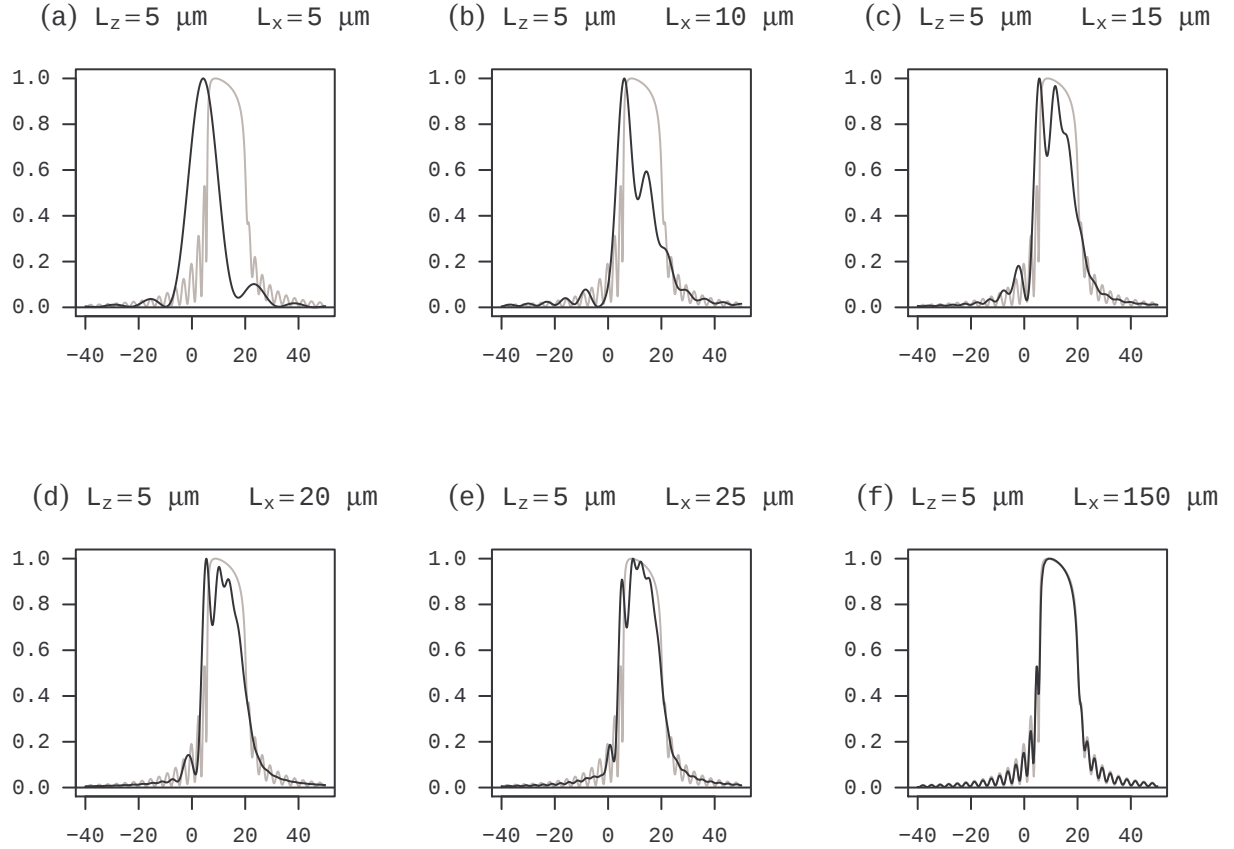


Рис. 2.4. Кривые дифракционного отражения для кристалла толщиной $L_z = 5$ мкм при различных протяженностях L_x . Серой линией изображена кривая дифракционного отражения для бесконечной плоскопараллельной пластинки.

интенсивность отражения в произвольных единицах, в которых максимум каждой кривой берется за единицу. Из этих рисунков видно, что при малой протяженности кристалла вдоль оси OX ($L_x/L_z \lesssim 1$) кривые дифракционного отражения (рис. 2.4(а) и 2.5(а)) по форме мало отличаются от тех, что были получены в кинематическом приближении (рис. 2.3). При возрастании протяженности L_x на кривой отражения появляются дополнительные осцилляции, обусловленные интерференцией волн с боковой поверхности ($x = 0$) и с верхней поверхности ($z = 0$) кристалла (рис. 2.4(б–е) и 2.5(б–е)). При дальнейшем увеличении размера L_x кристалла вклад волн, входящих в кристалл через боковую поверхность, уменьшается по сравнению

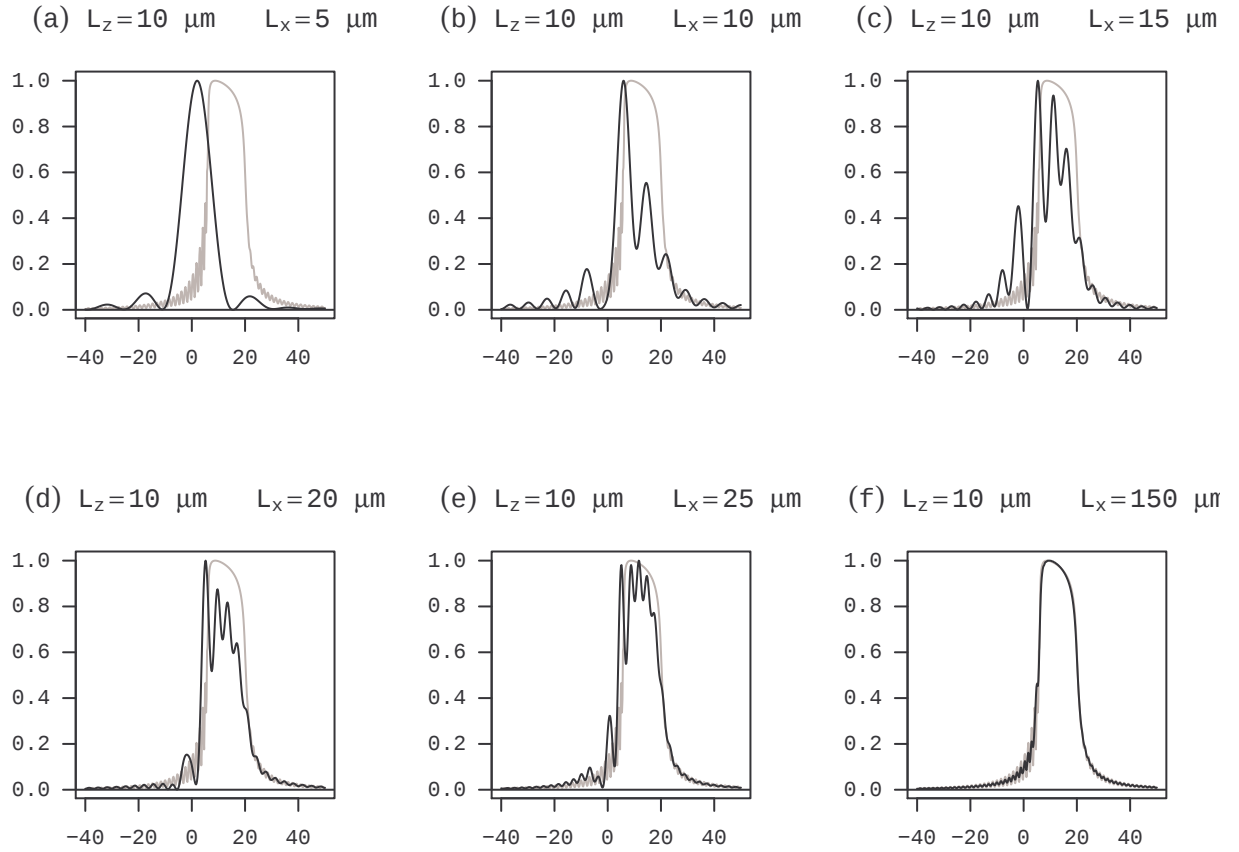


Рис. 2.5. Кривые дифракционного отражения для кристалла толщиной $L_z = 10$ мкм при различных протяженностях L_x . Серой линией изображена кривая дифракционного отражения для бесконечной плоскопараллельной пластинки.

с вкладом волн с верхней поверхности. В итоге кривая дифракционного отражения асимптотически приближается к соответствующей кривой для плоскопараллельной пластинки (рис. 2.4(f) и 2.4(f)).

2.2 Метод Дарвина

2.2.1 Введение

Теория Дарвина обобщена на случай динамической дифракции рентгеновских лучей в латеральном кристалле. Разработан алгоритм вычислений кривых дифракционного отражения и карт распределения интенсивности рассеяния (RSM) от кристалла прямоугольного сечения. Проведено численное моделирование рентгеновской дифракции от кристаллов с разными латеральными размерами. Показано, что для толстых кристаллов с малыми латеральными размерами выполняется условие кинематической дифракции.

Введение. В настоящее время существуют разные подходы для описания динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах [1]. Динамическая теория дифракции Дарвина [56, 57], основанная на методе рекуррентных соотношений, является наиболее простой и наглядной для решения конкретных задач рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов от кристаллов. Продолжительное время теория Дарвина не использовалась, поскольку имела некоторые ограничения по сравнению с теорией Эвальда-Лауэ [1]. Бори [51] первым сделал попытку описать эффект Бормана с использованием системы разностных уравнений Дарвина. В рамках этого подхода Безирганяном и Навасардяном [49] показано, что эффект Бормана зависит от размера отражающих плоскостей. С помощью подхода Дарвина были исследованы важные особенности динамического рассеяния, включая дифракцию в асимметричной геометрии Лауэ [50, 67], многоволновое рассеяние [66, 63], а также свойства дисперсионной поверхности [50]. Рекуррентные соотношения, описывающие амплитуды проходящей и отраженной волны, применялись для исследования дифракции нейтронов в полиатомных кристаллах [62] и рассеянии света в жидких кристаллах [53]. Кроме того, процедура Дарвина была реализована в оптике слоистых сред [58].

Для исследования приповерхностных областей кристалла разработан формализм, получивший название crystal truncation rod (CTR) [85]. Схема динамической теории Дарвина была применена для исследования структуры поверхности кристалла методом CTR [52, 71, 88, 60, 89]. Яширо и Такахаши [93] исследовали коэффициенты отражения и прохождения рентгеновских лучей одной атомной плоскостью кристалла в общем случае для произвольной двумерной решетки Бравэ. Ими получены формулы для коэффициентов, отличающиеся от ранее опубликованных результатов Дурбина [59], но подобные формулам Бори [50]. Выражения коэффициентов отражения и прохождения, полученные Яширо и Такахаши [93], которые справедливы в случае произвольных направлений падающего и отраженного рентгеновского пучка, использованы в теории Дарвина для скользящей геометрии [92]. Известно, что теория Дарвина первоначально была разработана для совершенного кристалла. Детальный анализ был выполнен для полубесконечного кристалла, включая эффекты преломления и поглощения [74]. Точное решение уравнений Дарвина для кристалла с произвольным числом отражающих плоскостей было получено с использованием полиномов Чебышева [73]. Чен и Бхаттачаря [54] показали тождественность алгебраических уравнений Дарвина и дифференциальных уравнений Такаги [87] при переходе от модели массива дискретных атомных плоскостей к континуальной среде. Отметим, что в природе идеальных кристаллов не существует. Поэтому особое внимание следует уделить работам, в которых формализм рекуррентных соотношений был обобщен для описания дифракции на искаженных структурах. Предприняты попытки для описания методом Дарвина дифракции рентгеновских лучей на кристаллах, решетка которых искажена под влиянием тепловых колебаний атомов [55] или из-за присутствия статистически распределенных дефектов [70]. Существенное влияние на дифракцию рентгеновских лучей оказывают деформации кристаллической решетки. Первая попытка численного моделирования рентгеновской

дифракции на кристалле с линейным изменением параметра решетки с использованием уравнений Дарвина была выполнена Фицджеральдом и Дарлингтоном [61]. Результаты численных расчетов кривых дифракционного отражения данной работы согласуются с позже полученными аналитическими решениями [65, 84]. Прудников аналитически обобщил подход Дарвина к описанию рентгеновской дифракции в деформированных кристаллах. В частности, с помощью рекуррентных соотношений исследована дифракция в кристаллах, промодулированных поверхностной акустической волной [75], и в несовершенных гетероструктурах [76]. Рекуррентные соотношения, аналогичные уравнениям Дарвина, получены для описания дифракции в многослойных структурах, при этом коэффициенты отражения и прохождения от атомных плоскостей заменены на соответствующие коэффициенты от отдельных слоев [48]. Такой подход был обобщен на случай многоволновой дифракции [68, 77], резко асимметричной [82] и скользящей геометрии [83]. Все отмеченные выше теории, использующие формулы рекуррентных соотношений Дарвина, разработаны для планарных структур с отражающими атомными плоскостями бесконечных размеров. В последние годы заметно возрастает интерес к дифракции рентгеновских лучей на латеральных структурах [69]. Разные методы динамической дифракции в рамках уравнений Такаги [87] были использованы для вычисления кривых дифракционного отражения от совершенных кристаллов прямоугольного сечения [72, 90, 64]. Кинематическая теория дифракции применялась для описания дифракции в искаженных кристаллах трапецеидального [78, 79] и произвольного поперечного сечения [80]. Цель данной работы состоит в разработке подхода Дарвина для исследования дифракции рентгеновских лучей в латеральных кристаллах. На примере кристалла прямоугольного сечения будут рассчитаны кривые дифракционного отражения и карты распределения интенсивности рассеяния (Reciprocal Space Maps (RSM)) в зависимости от ширины и толщины кристалла.

2.2.2 Дифракция на плоскопараллельном кристалле

Прежде чем исследовать дарвиновский подход к рентгеновской дифракции в латеральном кристалле, сделаем некоторые замечания к решению задачи для плоскопараллельной кристаллической пластинки. В теории Дарвина кристалл рассматривается как совокупность бесконечно тонких атомных плоскостей, отстоящих друг от друга на расстоянии d . В отличие от теории Лауэ [1], в модели Дарвина вся электронная плотность вещества сосредоточена в этих плоскостях. Амплитудные коэффициенты отражения q , $\bar{q}$ и прохождения $1 - iq_0$ отдельной атомной плоскостью вычисляются с использованием теории дифракции Френеля [50, 93]. С другой стороны, переходя от дискретной модели Дарвина к континуальной среде [54] амплитудные коэффициенты отражения и прохождения атомной плоскостью можно выразить через Фурье-коэффициенты рентгеновской поляризуемости $\chi_g = -r_0\lambda^2 F_g/(\pi V_c)$, где F_g — структурный фактор ($g = 0, h, \bar{h}$), λ — длина волны падающего излучения, V_c — объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2)$ — классический радиус электрона, e , m — заряд и масса электрона.

В результате коэффициенты, описывающие симметричное отражение и прохождение одной атомной плоскостью в рекуррентных соотношениях Дарвина запишутся как $q_0 = \pi d\chi_0/(\lambda \sin \theta_B)$, $q = \pi d\chi_h/(\lambda \sin \theta_B)$, $\bar{q} = \pi d\chi_{-h}/(\lambda \sin \theta_B)$, где θ_B — угол Брэгга.

Рассмотрим плоскопараллельный кристалл, имеющий конечную толщину $L_z = Nd$, где N — число отражающих атомных плоскостей. Пусть на этот кристалл падает плоская рентгеновская волна под углом $\theta = \theta_B + \Delta\theta$, где $\Delta\theta$ — отклонение от точного брэгговского положения. Согласно теории Дарвина выражения для амплитуд прошедшей и отраженной рентгеновских волн для атомной плоскости с номером n запишутся в виде следую-

щих рекуррентных соотношений [57, 1]

$$\begin{aligned} T_n &= (1 - iq_0)e^{i\varphi}T_{n-1} - i\bar{q}e^{i2\varphi}S_n, \\ S_n &= (1 - iq_0)e^{i\varphi}S_{n+1} - iqT_n. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Здесь T_{n-1} , S_{n+1} — соответствующие амплитуды волн, относящиеся к плоскостям с номерами $n - 1$ и $n + 1$, соответственно. Экспоненциальные множители в (2.18) учитывают набег фазы при распространении рентгеновского поля между соседними атомными плоскостями. Поскольку поле может распространяться под углом не равным углу Брэгга θ_B , то фаза $\varphi = (2\pi d/\lambda) \sin \theta$ при распространении рентгеновской волны от одной атомной плоскости до другой получает приращение, пропорциональное угловой отстройке. Из-за малости отстройки $\Delta\theta$, фаза волны может быть представлена в виде $\varphi = (2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \Delta\theta$. Решение системы (2.18) с граничными условиями $T_0 = 1$ и $S_N = 0$ ищем в виде $S_n = \alpha u^n$ и $T_n = \beta u^n$. Амплитуды отражения и прохождения рентгеновских волн в пространстве расположения атомной плоскости с номером n описываются следующими аналитическими решениями:

$$\begin{aligned} S_n &= -B \frac{u_2^N u_1^n - u_1^N u_2^n}{(Au_1 - 1)u_2^N - (Au_2 - 1)u_1^N}, \\ T_n &= \frac{(Au_1 - 1)u_2^N u_1^n - (Au_2 - 1)u_1^N u_2^n}{(Au_1 - 1)u_2^N - (Au_2 - 1)u_1^N}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

где $u_{1,2} = x \pm \sqrt{x^2 - 1}$, $x = \frac{1 + (1 - iq_0)^2 e^{i2\varphi} + q\bar{q}e^{i2\varphi}}{2(1 - iq_0)e^{i\varphi}}$, $A = (1 - iq_0)e^{i\varphi}$, $B = -iq$. Из решения (2.19) при значениях $n = 0$ и $n = N$ получаем амплитудные коэффициенты отражения S_0 и прохождения T_N рентгеновских волн от кристаллической пластины

$$\begin{aligned} S_0 &= -B \frac{u_2^N - u_1^N}{(Au_1 - 1)u_2^N - (Au_2 - 1)u_1^N}, \\ T_N &= A \frac{u_1 - u_2}{(Au_1 - 1)u_2^N - (Au_2 - 1)u_1^N}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

Выражения (2.20) согласуются с точными аналитическими решениями, полученными ранее с использованием матричного подхода [73]. Учитывая,

что для всех n в (2.19), $u_1^n u_2^n = 1$, получаем

$$\begin{aligned} S_0 &= \frac{-iq}{1 - (1 - iq_0)e^{i\varphi} \sin((N-1) \arccos x) / \sin(N \arccos x)}, \\ T_N &= \frac{(1 - iq_0)e^{i\varphi} 2\sqrt{x^2 - 1}}{\sin(N \arccos x) - (1 - iq_0)e^{i\varphi} \sin((N-1) \arccos x)}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Формулы (2.21) совпадают с решением, полученным ранее в работе Perkins and Knight, 1984 [73].

Введя новый угловой параметр $y = \frac{1 - (1 - iq_0)^2 e^{i2\varphi} - q\bar{q}e^{2i\varphi}}{2q\bar{q}e^{i\varphi}}$ и обозначив $\chi = \arccos x$, $\psi = \arccos y$, амплитудные коэффициенты отражения и прохождения можно записать в виде

$$\begin{aligned} S_0 &= \sqrt{\frac{q}{\bar{q}}} \frac{\sin N\chi}{\sin(N\chi + \psi)} \exp(-i\varphi), \\ T_N &= \frac{\sin \psi}{\sin(N\chi + \psi)} \exp(-iN\varphi). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Решения в виде (2.22) являются компактными и по форме совпадают с решениями для идеальной одномерной сверхрешетки [91].

2.2.3 Дифракция Дарвина на кристалле прямоугольного сечения

Используем подход Дарвина для описания дифракции от латерально ограниченного кристалла. Обозначим ширину кристалла L_x , а ее толщину L_z (рис. 2.6).

Выберем следующую систему координат: ось x направлена вдоль входной поверхности кристалла, ось z — вглубь кристалла. Для простоты рассмотрим симметричную дифракцию Брэгга. Левая грань кристалла, на которую падает рентгеновская волна под углом θ к оси x , проходит через начало координат (рис. 2.6). Рентгеновский пучок, исходящий из начала координат, проходит расстояние $d \cos \theta$ и дифракционно отражается от ближайшей атомной плоскости. Проекция этого расстояния на латеральное направление равна $\Delta x = d \operatorname{ctg} \theta$. Нанесем на атомные плоскости вдоль

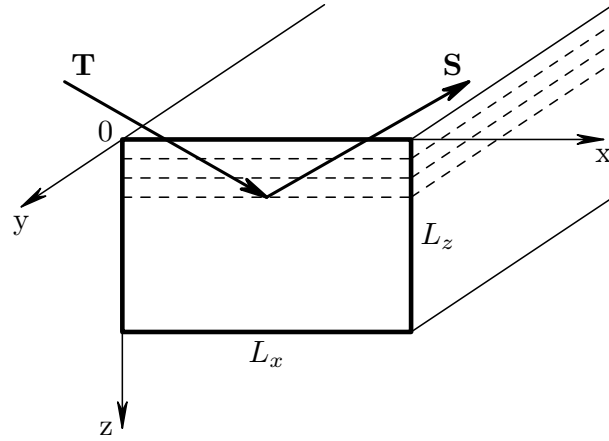


Рис. 2.6. Схематическое изображение дарвиновской рентгеновской дифракции на кристалле прямоугольного сечения.

оси x разностную сетку с узлами $x_m = m\Delta x$, в которых рентгеновская волна частично отражается и частично проходит к следующей плоскости. Пусть T_n^m — значение амплитуды проходящей волны непосредственно перед узлом $(m; n)$, S_n^m — соответствующее значение амплитуды отраженной волны (рис. 2.8). С учетом динамического рассеяния для отраженных S и проходящих T волн можно записать следующие рекуррентные соотноше-

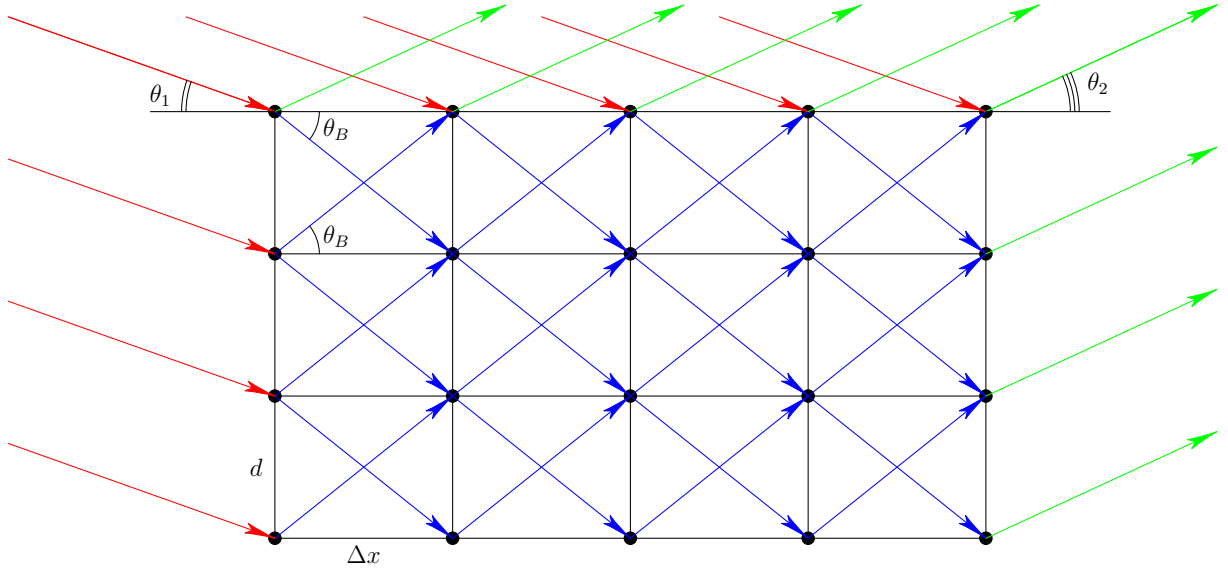


Рис. 2.7. Проходящие и отражённые лучи вне и внутри сечения кристалла.

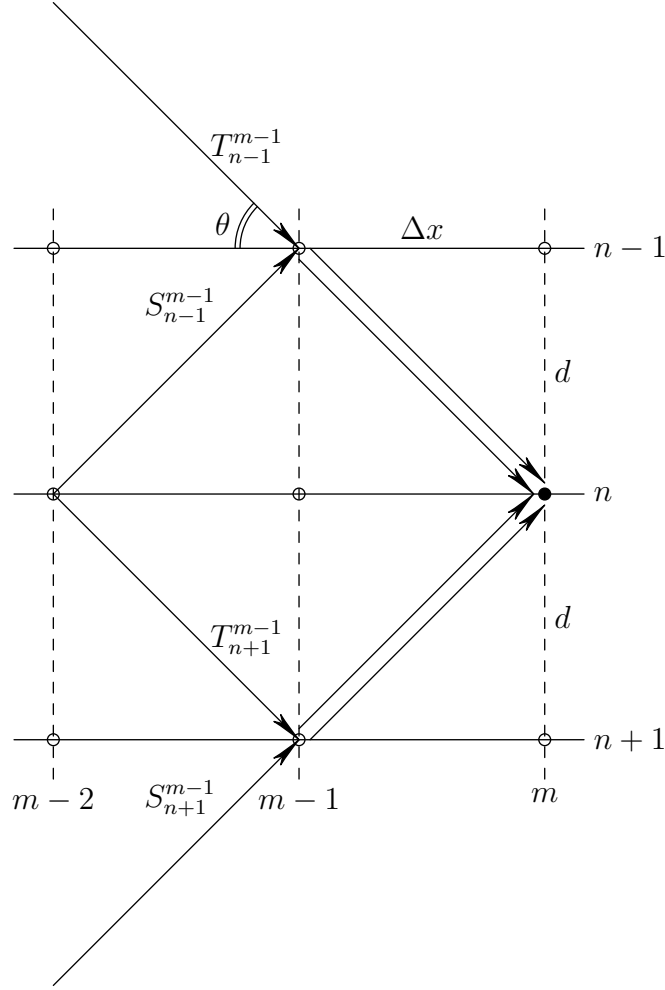


Рис. 2.8. Схематическое изображение отраженных и проходящих рентгеновских пучков в подходе Дарвина.

ния:

$$\begin{aligned} T_{n+1}^m &= aT_n^{m-1} + b_1S_n^{m-1}, \\ S_n^m &= aS_{n+1}^{m-1} + b_2T_{n+1}^{m-1}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

где $a = (1 - iq_0) \exp(i\varphi_l)$, $b_1 = -i\bar{q} \exp(i\varphi_l)$, $b_2 = -iq \exp(i\varphi_l)$. Параметр $\varphi_l = i \frac{2\pi d}{\lambda \sin \theta_B}$, входящий в выражения для коэффициентов a и $b_{1,2}$, учитывает разность фаз, возникающую при распространении рентгеновского пучка в кристалле от одного узла до другого. В системе алгебраических уравнений (2.23) индексы m и n нумеруют координаты узлов в горизонтальном и вертикальном направлениях, соответственно (рис. 2.8)

Число узлов решетки вдоль осей x и z , соответственно равно M_x и N_z ,

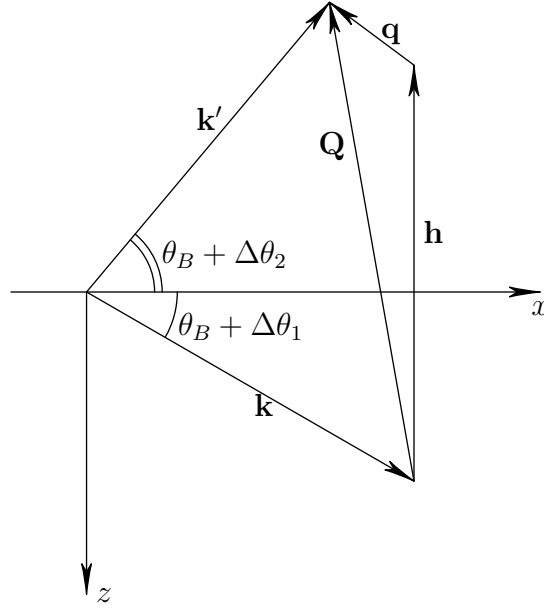


Рис. 2.9. Схематическое изображение рентгеновской дифракции в обратном пространстве.

определяется размерами прямоугольного сечения кристалла $L_x = M_x \Delta x$ и $L_z = N_z d$.

Для кристаллической пластины бесконечного латерального размера распределение дифракционной интенсивности вблизи узла обратной решетки сосредотачивается в виде дельтаобразной линии в вертикальном направлении (вдоль вектора обратной решетки). Для латерального кристалла интенсивность рассеяния может распределяться вокруг узла обратной решетки, как в вертикальном, так и в латеральном направлении. Поэтому анализ распределения дифракционной интенсивности уместно проводить с использованием карт в обратном пространстве.

Пусть на латеральный кристалл в направлении волнового вектора $\mathbf{k}$ падает рентгеновская волна под углом $\theta_1 = \theta_B + \Delta\theta_1$ (рис. 2.9). Отраженная волна фиксируется в обратном пространстве в направлении вектора $\mathbf{k}'$ под углом $\theta_2 = \theta_B + \Delta\theta_2$, причем $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k = 2\pi/\lambda$. Углы $\Delta\theta_1$ и $\Delta\theta_2$ задают отклонение от точного условия Брэгга падающего и отраженного пучка, соответственно. Отклонение вектора дифракции $\mathbf{Q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ от конца вектора обратной решетки $\mathbf{h}$ определяется вектором $\mathbf{q}$. Проекции q_x и q_z вектора $\mathbf{q}$

связаны с угловыми параметрами $\Delta\theta_{1,2}$ следующими соотношениями

$$\begin{aligned} q_x &= k \sin \theta_B \cdot (\Delta\theta_1 - \Delta\theta_2), \\ q_z &= -k \cos \theta_B \cdot (\Delta\theta_1 + \Delta\theta_2). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Обозначив $\Delta\theta_1 = \omega$ и $\Delta\theta_2 = \varepsilon - \omega$, соотношения (2.24) преобразуются в выражения, используемые в трехкристальной рентгеновской дифрактометрии

$$\begin{aligned} q_x &= k \sin \theta_B \cdot (2\omega - \varepsilon), \\ q_z &= -k \cos \theta_B \cdot \varepsilon, \end{aligned} \quad (2.25)$$

где ω и ε — параметры, определяющие угловое положение образца и анализатора.

При прохождении и отражении рентгеновских лучей в кристалле происходит изменение фаз рентгеновских волн. За начало отсчета фазовых изменений выберем начало системы координат ($x = 0; z = 0$), совмещенный с верхним левым углом прямоугольного сечения кристалла. Для рентгеновских волн, падающих на левую боковую грань кристалла ($x = 0$), разность хода растет с глубиной z по закону $z \sin \theta_1$ (рис. 2.10). Разность фаз для дискретных значений $z_n = nd$ вдоль вертикального направления равна $\varphi_{z,in}^n = (2\pi/\lambda)nd \sin \theta_1$. Граничное условие на левой боковой поверхности латерально ограниченного кристалла ($x = 0$) запишется как $T_n^0 = \exp(i\varphi_{z,in}^n)$.

Для рентгеновских лучей, падающих на верхнюю поверхность латерального кристалла ($z = 0$), разность хода растет с ростом координаты x как $m\Delta x \cos \theta_1$. Следовательно, имеет место изменение фазы падающей рентгеновской волны в горизонтальном направлении. Граничное условие на верхней поверхности кристалла задается выражением $T_0^m = \exp(i\varphi_{x,in}^m)$, где $\varphi_{x,in}^m = (2\pi/\lambda)m\Delta x \cos \theta_1$.

Для выходящей рентгеновской волны необходимо учитывать разность фаз $\varphi_{x,ex}^m = -(2\pi/\lambda)m\Delta x \cos \theta_2$ на верхней поверхности кристалла (рис.

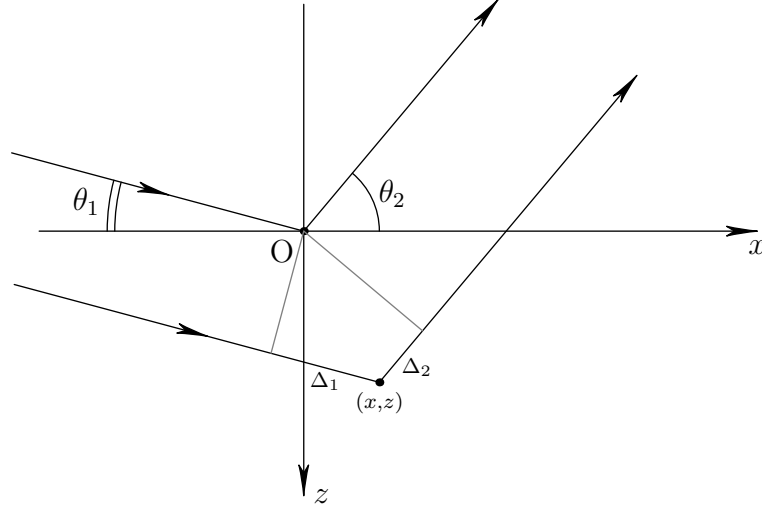


Рис. 2.10. К выводу фазовых изменений рентгеновских лучей в произвольной точке (x, z) за счет возникновения разности хода $\Delta_1 = x \cos \theta_1 + z \sin \theta_1$ и $\Delta_2 = -x \cos \theta_2 + z \sin \theta_2$.

2.10). Амплитуда рентгеновской волны, выходящей из правой боковой поверхности кристалла, приобретает фазовый набег $\varphi_{z,ex}^n = (2\pi/\lambda)(nd \sin \theta_2 - M_x \Delta x \cos \theta_2)$. Слагаемое $M_x \Delta x \cos \theta_2$ учитывает изменение фазы из-за смещения правой грани кристалла на расстояние $L_x = M_x \Delta x$ от начала координат.

Угловые параметры $\Delta\theta_{1,2}$, согласно (2.24), связаны проекциями вектора $\mathbf{q}$ следующими соотношениями: $\Delta\theta_{1,2} = (2k \cos \theta_B)^{-1}(q_x \operatorname{ctg} \theta_B \mp q_z)$.

Поскольку в рассматриваемой геометрии (рис. 2.6) дифракционная волна выходит из верхней и правой боковой грани кристалла, граничные условия для отраженной волны S запишутся как $S_n^0 = 0$, $S_{N_z}^m = 0$.

Амплитудный коэффициент отражения рентгеновской волны от кристалла прямоугольного сечения находится суммированием рентгеновских волн:

$$S(q_x, q_z) = \sum_{m=0}^{M_x} S_0^m \exp(i\varphi_{ex,x}^m) + \sum_{n=1}^{N_z} S_n^{M_x} \exp(\varphi_{z,ex}^n), \quad (2.26)$$

где амплитуды рентгеновских волн S_0^m и $S_n^{M_x}$ находятся с использованием рекуррентных соотношений (2.23).

Отметим, что решение (2.26) позволяет рассчитывать карты распреде-

ления интенсивности рассеяния в обратном пространстве(RSM). Кривые дифракционного отражения (q_z -сканы или CTR) могут непосредственно получены на основе решения (2.26) при условии $\theta_1 = \theta_2$ ($2\omega = \varepsilon$).

2.2.4 Численное моделирование

Численное моделирование кривых дифракционного (КДО, CTR) и RSM проводилось на основе решения (2.26) с использованием рекуррентных соотношений (2.23). Расчеты выполнены с использованием параметров, соответствующих (111) отражению $\text{CuK}_{\alpha 1}$ излучения от монокристалла германия. Для всех вычислений толщина латерального кристалла L_z соответствовала 10000 межплоскостных расстояний ($L_z = 10000d_{111} = 3,27\mu m$). Латеральный размер кристалл выбирался с учетом числа узлов N_x вдоль горизонтального направления ($N_x = 1000, 4000, 10000, 40000$; что соответствует латеральным размерам $L_x = 1,35\mu m, 5,39\mu m, 13,5\mu m, 53,9\mu m$). Максимумы кривых дифракционного отражения нормировались на величину максимума кривой Дарвина для плоскопараллельной пластинки той же толщины.

Кривые дифракционного отражения, изображенные на рис. 2.13, вычислялись на основе решения (2.26) для случая $\omega-2\theta$ -сканирования ($\theta_1 = \theta_2$). Поскольку в этом режиме сканирования полная разность хода $\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 = 2z \sin \theta$ ($\theta = \theta_1 = \theta_2$) (рис.4), не зависит от координаты x , то и полная разность фаз на верхней поверхности кристалла равна нулю: $\varphi_x^m = \varphi_{x,in}^m + \varphi_{x,ex}^m$.

Отметим, что длина экстинкции на отражении (111) для полубесконечного кристалла кремния равна $0,67\mu m$, полуширина дарвиновской кривой — 15,4 угл. сек. [86] (and the address of the "X-Ray Server"site). Для малой латеральной ширины кристалла ($L_x = 1,35\mu m$) кривая отражения соответствует кинематической дифракции (рис. 2.13 а). С увеличением латеральной ширины наблюдается постепенный переход к динамической ди-

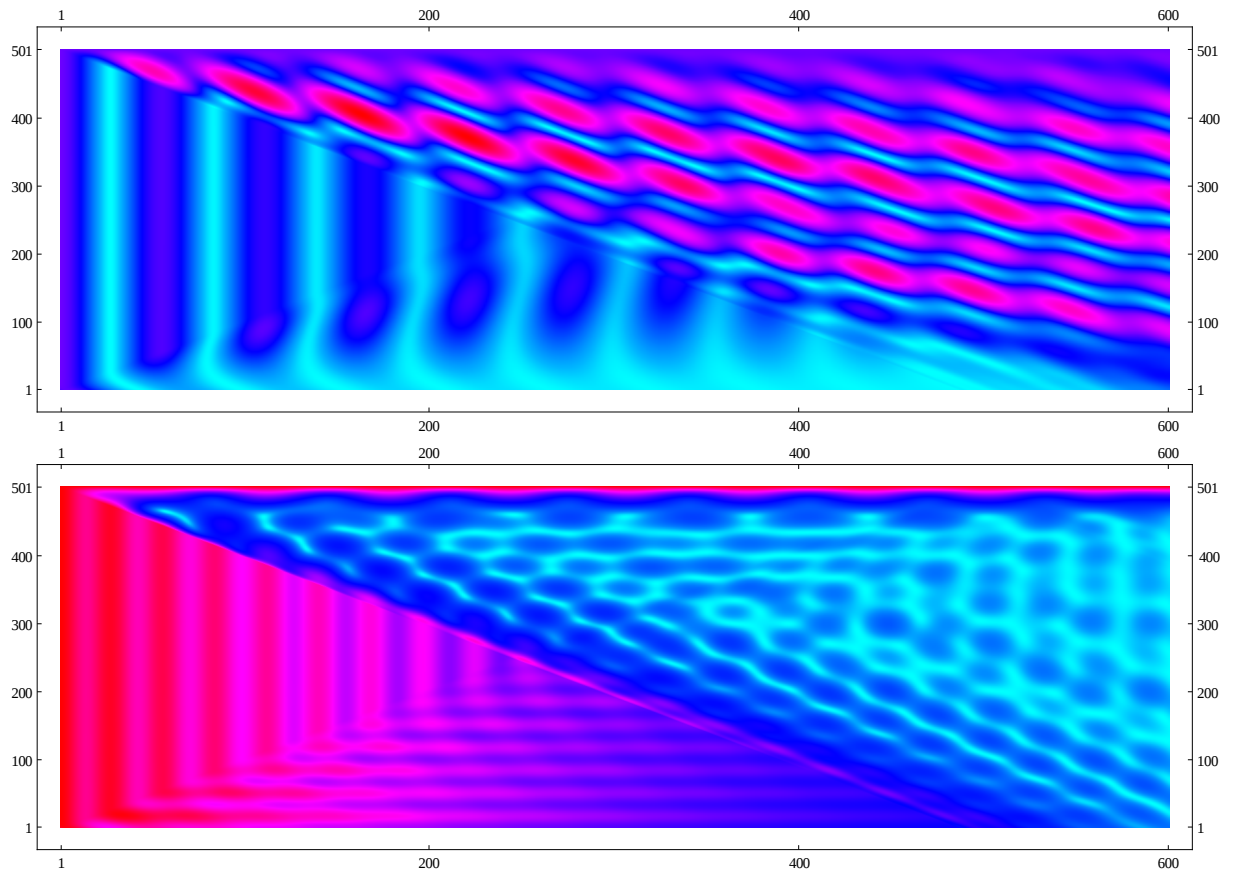


Рис. 2.11. Поле проходящей волны внутри сечения кристалла шириной $L_x = 300 \mu m$ и толщиной $L_z = 100 \mu m$. Верхний рисунок для $\Delta\theta = 0$, нижний — для угла θ , соответствующего максимуму кривой КДО.

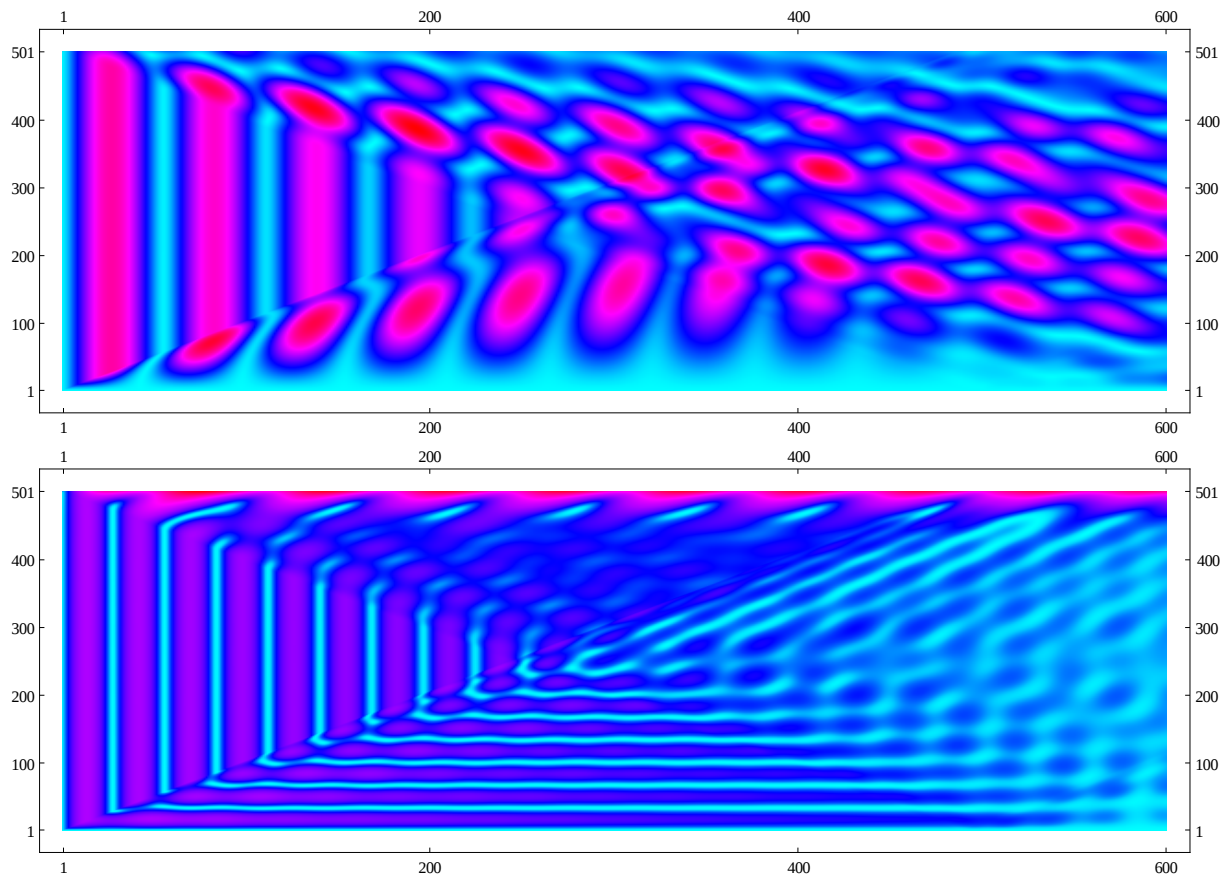


Рис. 2.12. Поле проходящей волны внутри сечения кристалла шириной $L_x = 300 \mu m$ и толщиной $L_z = 100 \mu m$. Верхний рисунок для $\Delta\theta = 0$, нижний — для угла θ , соответствующего максимуму кривой КДО.

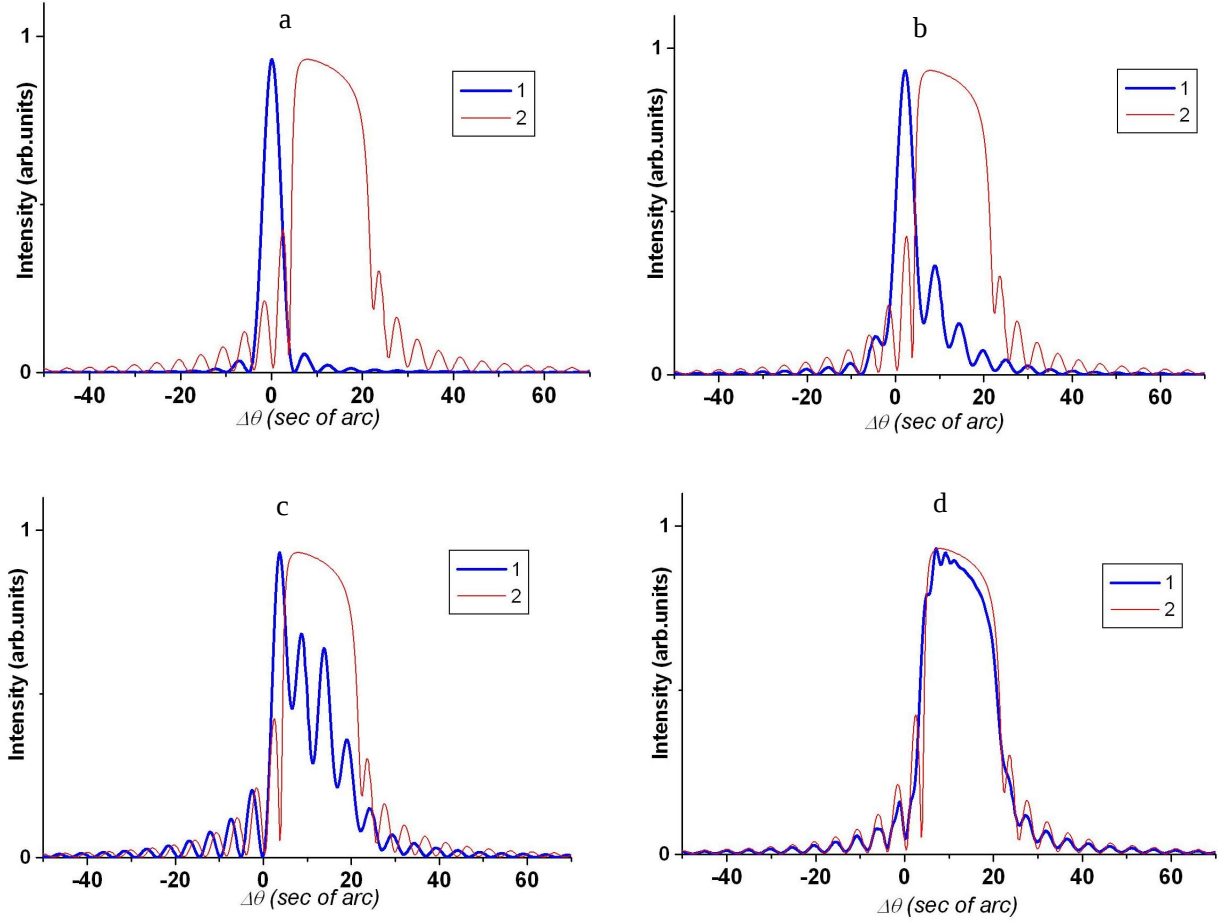


Рис. 2.13. Кривые дифракционного отражения для кристалла прямоугольного сечения толщиной $L_z = 3,27 \mu m$ и разной ширины L_x : а) $1,35 \mu m$, б) $5,39 \mu m$, в) $13,5 \mu m$, г) $53,9 \mu m$. Для сравнения тонкой линией изображена кривая дифракционного отражения от плоскопараллельной пластинки ($L_x = \infty$) той же толщины L_z .

фракции (рис. 2.13 б,в), при этом толщинные осцилляции накладываются на профиль КДО даже в области полного отражения. Для большой ширины кристалла с $L_x = 53,9 \mu m$ имеет место достаточно близкое совпадение с дифракцией от плоскопараллельной пластинки (рис. 2.13 г).

На рис. 2.14. представлены RSM от кристаллов разной ширины. В случае кристалла с малым латеральным размером RSM имеет вид, отвечающий кинематической дифракции (рис. 2.14 а), и распределение дифракционной интенсивности соответствует известному закону

$$I(q_x, q_z) = |S(q_x, q_z)| \sim \left| \frac{\sin q_x L_x / 2}{q_x L_x / 2} \right|^2 \left| \frac{\sin q_z L_z / 2}{q_z L_z / 2} \right|^2. \quad (2.27)$$

С увеличением латерального размера кристалла угловое распределение ин-

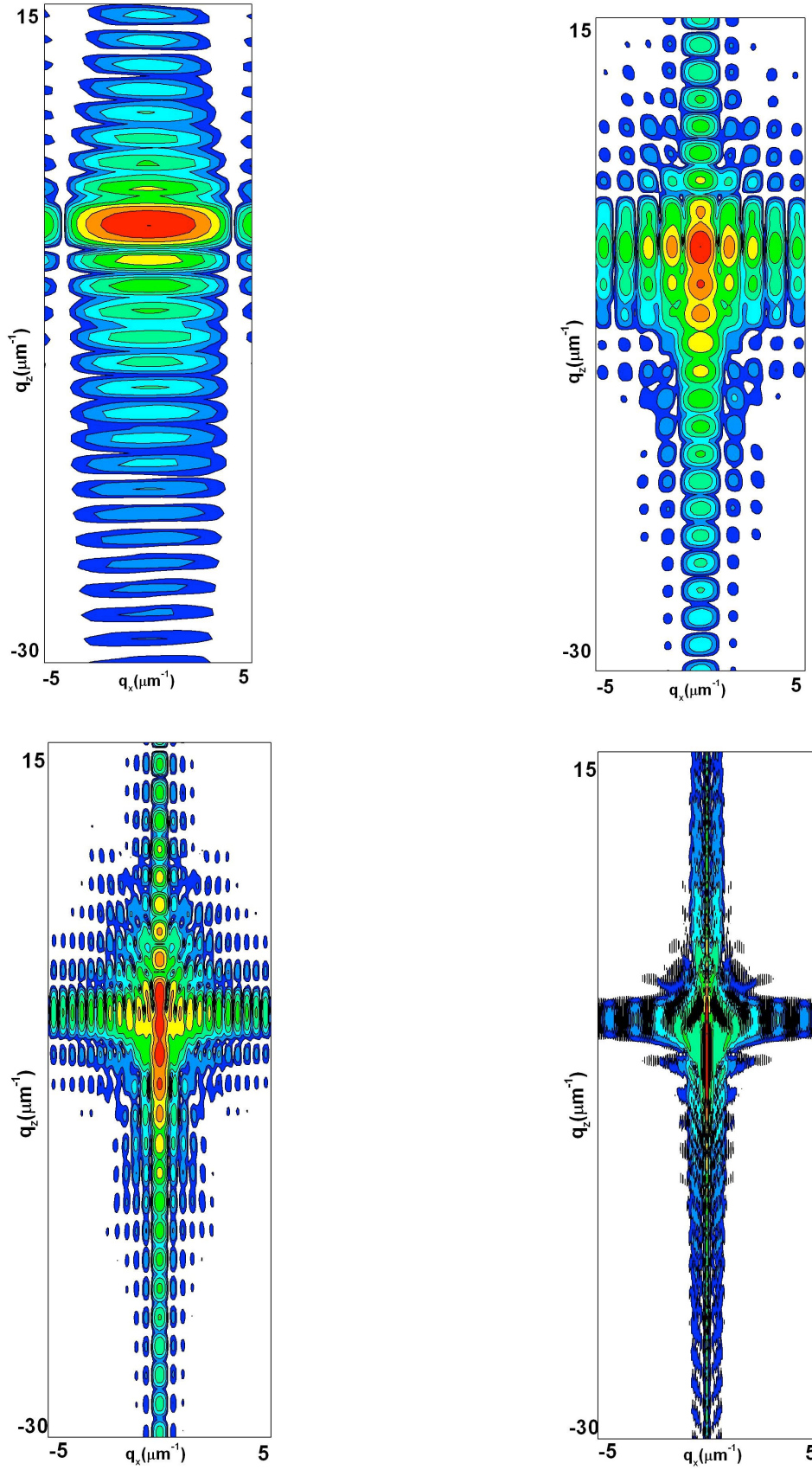


Рис. 2.14. Карты интенсивностей (RSM) для кристалла прямоугольного сечения толщиной $L_z = 3,27 \mu\text{m}$ и разной ширины L_x : а) $1,35 \mu\text{m}$, б) $5,39 \mu\text{m}$, в) $13,5 \mu\text{m}$, д) $53,9 \mu\text{m}$.

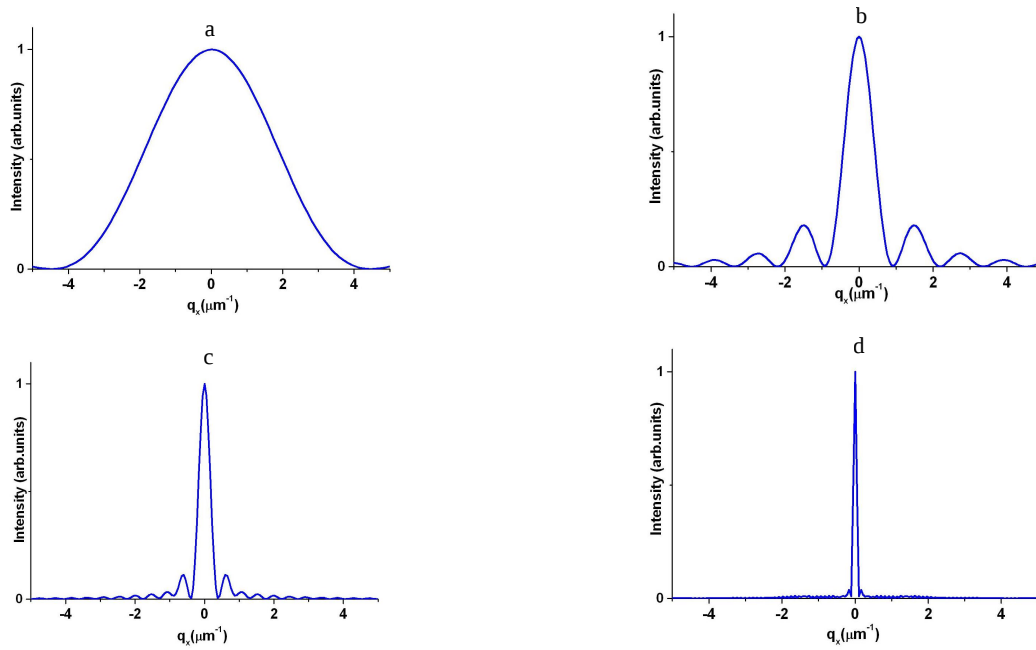


Рис. 2.15. Кривые качания (q_x -сканирования) от кристалла прямоугольного сечения толщиной $L_z = 3,27 \mu m$ и разной ширины L_x : а) $1,35 \mu m$, б) $5,39 \mu m$, в) $13,5 \mu m$, д) $53,9 \mu m$.

тенсивности рассеяния на RSM в q_x -направлении становится все более узким, уменьшается также период латеральных осцилляций. Этот период обратно пропорционален латеральному размеру кристалла. На это непосредственно указывают q_x -сканы RSM для значений q_z , соответствующих максимальному значению дифракционной интенсивности (рис. 2.15). Полученные результаты полностью согласуются с теми, что получены решением данной задачи путем интегрирования уравнений Такаги-Топена.

Таким образом, мы показали, что теория Дарвина, в основе которой лежат алгебраические рекуррентные соотношения, в геометрии Брэгга может описывать не только дифракцию на плоскопараллельных пластинках, но и на латерально ограниченных кристаллах. Рассмотренный подход является не только наиболее простым и наглядным, но и требует существенно меньших временных затрат на вычисления кривых дифракционного отражения и RSMs. Поскольку в настоящее время латеральные структуры, создаваемые методами литографии и электрохимического травления, широко применяются в приборах микро- и оптоэлектроники, энергонезави-

симых запоминающих устройствах (nonvolatile memory devices), элементах рентгеновской оптики и т.д., разработанный подход может быть эффективно использован для неразрушающего рентгенодифракционного анализа таких материалов.

2.3 Дифракция на кристалле с металлической поверхностной решеткой

2.3.1 Введение

Нетривиальную дифракционную картину углового распределения интенсивности рассеяния наблюдали в [107], исследуя методом высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии кристалл Si(111), на поверхности которого была сформирована фазосдвигающая решетка (ФСР) из вольфрама с периодом 1 мкм. Необычность полученной карты интенсивности в обратном пространстве заключалась в том, что помимо ожидаемых латеральных сателлитов присутствовали дополнительные вертикальные и диагональные дифракционные порядки. Следует отметить, что ранее подобное, но менее отчетливое распределение дифракционной интенсивности регистрировалось на решетке с периодом 2 мкм [108]. Для объяснения этого явления в [109] предложена феноменологическая дифракционная модель, на основе которой выполнено численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния и проведено сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными. Однако формирование сегментальной структуры рентгеновских полей в объеме кристалла в рамках феноменологической модели [109] являлось лишь предположением. Поэтому данная работа посвящена прямому численному расчету распределения интенсивности в объеме кристалла с ФСР.

2.3.2 Теория

Рассматривая динамическую дифракцию рентгеновских лучей на кристаллической системе с фазосдвигающей решеткой, следует исходить из уравнений Такаги-Топена. Пусть поглотители рентгеновского излучения представляют собой полосы шириной в полпериода поверхностной решетки и направлены вдоль оси y , то есть перпендикулярно плоскости дифракции

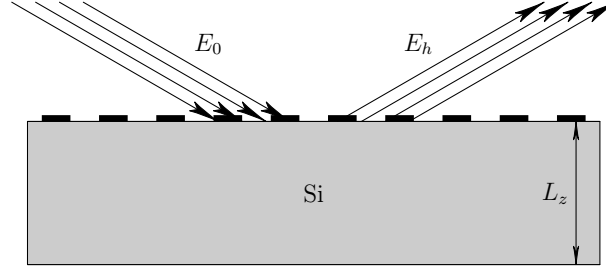


Рис. 2.16. Геометрия системы.

(рис. 2.16). Наличие металлических полос уменьшает рентгеновское поле в направлении прохождения и дифракции.

Уравнения Такаги-Топена запишем в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0}{\partial x} + \frac{\partial E_0}{\partial z} &= a_1 E_0(x, z) + b_1 E_h(x, z), \\ \frac{\partial E_h}{\partial x} - \frac{\partial E_h}{\partial z} &= b_2 E_0(x, z) + a_2 E_h(x, z). \end{aligned} \quad (2.28)$$

То есть используется приведенная система единиц: $x' = x \operatorname{tg} \theta_B / L_z$, $z' = z / L_z$. Штрихи в формулах опущены. Параметры a_1 , a_2 , b_1 , b_2 определены следующим образом:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} \chi_0, & a_2 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} (\chi_0 - \alpha), \\ b_1 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} \chi_{-g}, & b_2 &= \frac{i\pi L_z}{\lambda \sin \theta_B} \chi_g, \end{aligned}$$

где $\alpha = -2 \sin 2\theta_B \Delta\theta$, $\chi_{0,\pm g}$ — фурье-компоненты поляризуемости кристалла.

Граничные условия для нашей задачи: $E_0(x, 0) = f(x)$, $E_h(x, 1) = 0$. Функция $f(x)$ модулирует плоскую падающую волну единичной амплитуды. Эта функция определяется пропускающей способностью решетки из металлических полос на поверхности кристаллической пластины. Модельный вид этой функции показан на рис. 2.17.

Если ширина засветки поверхности фазовой решетки составляет NL , где N — число полос решетки, засвеченных падающей волной, то можно

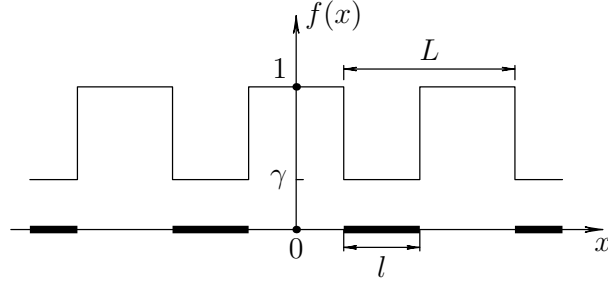


Рис. 2.17. Функция пропускания излучения решеткой. γ – доля излучения, пропущенного металлической полосой, l – ширина полосы, L – период решетки.

перейти от функции $f(x)$ к её фурье-образу

$$\begin{aligned}
 g(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx = \int_{-NL/2-l/2}^{NL/2+l/2} f(x) e^{-i\omega x} dx = \\
 &= \frac{\sin(N\omega L/2)}{\sin(\omega L/2)} \left[(1 - \gamma) \frac{\sin(\omega(L-l)/2)}{\omega/2} + \gamma \frac{\sin(\omega L/2)}{\omega/2} \right]. \quad (2.29)
 \end{aligned}$$

Тогда решение системы уравнений (2.28) удобно искать в виде

$$\begin{aligned}
 E_0(x, z) &= \int_{-\infty}^{\infty} t(\omega, z) e^{i\omega x} \frac{d\omega}{2\pi}, \\
 E_h(x, z) &= \int_{-\infty}^{\infty} r(\omega, z) e^{i\omega x} \frac{d\omega}{2\pi}
 \end{aligned}$$

с граничными условиями $t(\omega, 0) = g(\omega)$ и $r(\omega, 1) = 0$.

Решение для величин $t(\omega, z)$ и $r(\omega, z)$ есть

$$\begin{aligned}
 t(\omega, z) &= \frac{1}{Q} e^{(a_1 - a_2)z/2} [(s + p)e^{p(1-z)} - (s - p)e^{-p(1-z)}] g(\omega), \\
 r(\omega, z) &= \frac{b_2}{Q} e^{(a_1 - a_2)z/2} [e^{p(1-z)} - e^{-p(1-z)}] g(\omega),
 \end{aligned}$$

где $Q = (s + p)e^p - (s - p)e^{-p}$, $p = \sqrt{s^2 - b_1 b_2}$, $s = i\omega - (a_1 + a_2)/2$.

Поле дифрагированной волны при $z = 0$:

$$E_h(x, 0) = b_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^p - e^{-p}}{Q} g(\omega) e^{i\omega x} \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (2.30)$$

Вычисляя амплитуду отражения, учтем, что дифрагированная волна на выходной поверхности пластины должна ещё раз пройти через решетку, то есть, амплитуда $E_h(x, 0)$ из (2.30) умножается на $f(x)$ и интегрируется по выходной поверхности пластины:

$$\begin{aligned}
 R &= \int_{-NL/2-l/2}^{NL/2+l/2} E_h(x, 0) e^{-iq_x x} f(x) dx = \\
 &= b_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^p - e^{-p}}{Q} g(\omega) \int_{-NL/2-l/2}^{NL/2+l/2} e^{i(\omega - q_x)x} f(x) dx.
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Множитель $e^{-iq_x x}$ учитывает изменение фазы волны при смещении вдоль оси x . Окончательно

$$R = b_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^p - e^{-p}}{Q} g(\omega) g(\omega'), \tag{2.32}$$

где $\omega' = -(\omega - q_x)$.

2.3.3 Численное моделирование

На рис. 2.18-2.19 представлены результаты расчетов рентгеновской дифракции на кристалле Si с ФСР. Отметим, что в рамках рассматриваемой модели на карте углового распределения интенсивности рассеяния (рис. 2.19) отсутствуют некоторые дифракционные порядки, присутствующие в экспериментальных измерениях. Очевидно, это связано с более сложной структурой исследуемых образцов. На рис. 2.20 показано наилучшее согласование расчетных результатов в рамках феноменологической дифракционной модели [109] и экспериментальных данных.

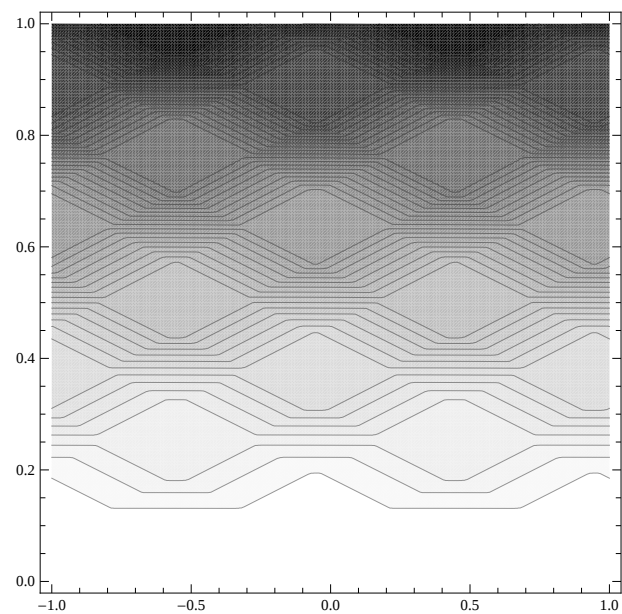


Рис. 2.18. Структура рентгеновского поля в объеме кристалла.

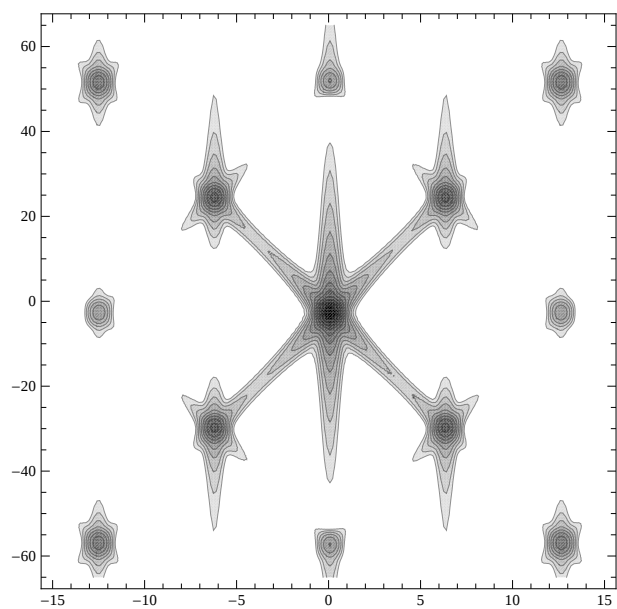


Рис. 2.19. Расчетная карта распределения интенсивности рассеяния от фазовой решетки.

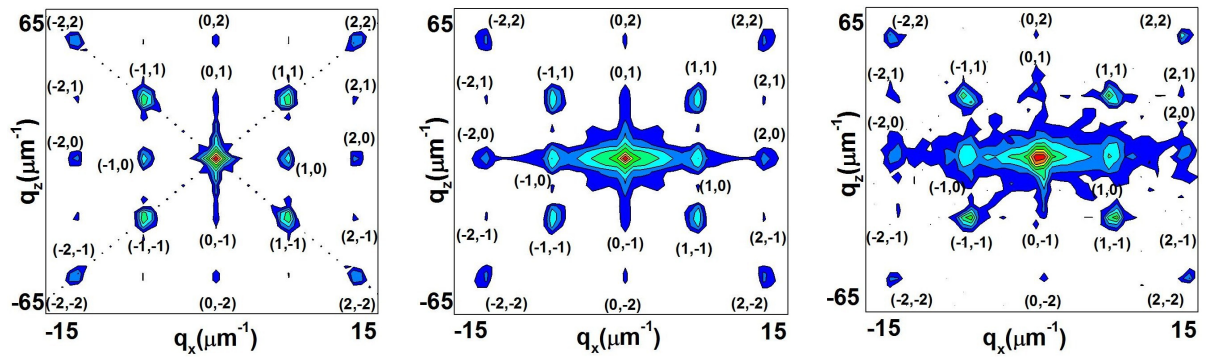


Рис. 2.20. Карты распределения интенсивности рассеяния: а) расчетная когерентная составляющая; б) расчетная карта с учетом диффузного рассеяния; с) экспериментальная карта.

Глава 3

Кинематическая теория дифракции на латеральных структурах

3.1 Кинематическая теория дифракции на неидеальных структурах

3.1.1 Основные уравнения

Так как размеры эпитаксиальных латеральных структур, как правило, от нескольких микрон до нескольких десятков нанометров, рассмотрение рентгеновской дифракции проведем в рамках кинематического приближения. Более трудоемкий подход к проблеме динамического рассеяния на латеральных структурах для двухкристальной геометрии предложен в [94]. Сам факт наличия латеральных границ кристалла является в определенном смысле простейшим типом нарушения идеальности структуры. Конечные размеры приводят к размытию δ -образных распределений интенсивности, характерных для бесконечного кристалла.

В кинематическом приближении для амплитуды волны когерентного рассеяния от кристаллического объекта толщиной l в обратном пространстве получено решение, которое с учетом пренебрежения эффектами преломления и поглощения рентгеновских лучей в среде, а также конечных латеральных размеров кристалла, может быть преобразовано и записано в

виде

$$E_h^c(\mathbf{q}) = \frac{i}{2\pi} \int_0^l dz \int dx \int dy a_h(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \Omega(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

где $a_h(\mathbf{r}) = \frac{C\pi\chi_h(\mathbf{r})}{\lambda\gamma_h}$, $f(\mathbf{r})$ — статистический фактор Дебая–Валлера, $\gamma_h = \sin \theta$, $\theta = \theta_B + \varphi$ — угол, определяющий направление дифракционного пучка относительно входной поверхности кристалла, φ — угол скоса отражающих плоскостей к поверхности образца, θ_B — угол Брегга, C — поляризационный фактор, $\chi_h(\mathbf{r}) = -\frac{r_0\lambda^2}{\pi V_c} F_h(\mathbf{r})$ — фурье-компонента рентгеновской поляризуемости, V_c — объем элементарной ячейки, $r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$ — классический радиус электрона, e , m — заряд и масса электрона соответственно. В выражении для рентгеновской поляризуемости присутствует $F_h(\mathbf{r})$ — структурный фактор кристалла, химический состав которого неоднороден по объему. Фазовый фактор кристалла $\Phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\langle\mathbf{u}(\mathbf{r})\rangle)$ зависит от функции неслучайных (непрерывных) атомных смещений $\langle\mathbf{u}(\mathbf{r})\rangle$, характеризующих конкретный вид деформаций решетки в результате, например, внешних воздействий (ультразвук, температурный градиент и т. д.) или структурных (композиционных) особенностей самого кристалла. Здесь $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки, $|\mathbf{h}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$, где d_{hkl} — межплоскостное расстояние. Вектор $\mathbf{q}$ определяет отклонение вектора рассеяния $\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ от узла обратной решетки $\mathbf{h}$, где $\mathbf{k}_{0,h}$ — волновые векторы падающего и дифракционного рентгеновского пучка. Отметим, что проекция вектора $\mathbf{q}$ в латеральном q_x и вертикальном q_z направлениях в схеме трехкристальной рентгеновской дифрактометрии связаны с угловым положением исследуемого кристалла ω и анализатора ε . Поэтому значения этих проекций используют в качестве угловых переменных в обратном пространстве. В формуле (3.1) параметр $\Omega(\mathbf{r})$ введен как функция формы кристалла и задает пределы интегрирования по осям x и y , ось z направлена в глубь кристалла. Интенсивность когерентного рассеяния вычисляется по известному соотношению

$$I_h^c(\mathbf{q}) = |E_h^c(\mathbf{q})|^2.$$

Распределение интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве задается следующим выражением

$$I_h^d(\mathbf{q}) = \int_0^l dz \int dx \int dy |a_h(\mathbf{r})|^2 (1 - f(\mathbf{r})^2) \Omega(\mathbf{r}) \tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}). \quad (3.2)$$

Здесь

$$\tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho} G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) \exp(i(\mathbf{q}\boldsymbol{\rho} + \mathbf{h}[\langle \mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \rangle - \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle])) \quad (3.3)$$

является корреляционным объемом, зависящим от корреляционной функции

$$G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \frac{\langle \exp(i\mathbf{h}[\delta \mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) - \delta \mathbf{u}(\mathbf{r})]) \rangle - f(\mathbf{r})^2}{1 - f(\mathbf{r})^2}. \quad (3.4)$$

Выражения (3.1–3.4) описывают когерентное и диффузное рассеяние от латеральных структур произвольной формы, которая задается функцией $\Omega(\mathbf{r})$.

В трехкристальной схеме измерений интенсивность когерентной дифракционной волны может быть получена интегрированием по переменной q_y :

$$I_h^c(q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y I_h^c(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y |E_h^c(q_x, y, q_z)|^2, \quad (3.5)$$

где $E_h^c(q_x, y, q_z)$ — фурье преобразование $E_h^c(\mathbf{q})$ по переменной q_y .

Аналогичная процедура применима и к выражению для интенсивности диффузного рассеяния

$$I_h^d(q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y I_h^d(\mathbf{q}) = \int_0^l dz \int dx \int dy |a_h(\mathbf{r})|^2 (1 - f(\mathbf{r})^2) \Omega(\mathbf{r}) \tau(\mathbf{r}, q_x, q_z). \quad (3.6)$$

В результате корреляционный объем трансформируется в корреляционную площадь:

$$\tau(\mathbf{r}, q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}). \quad (3.7)$$

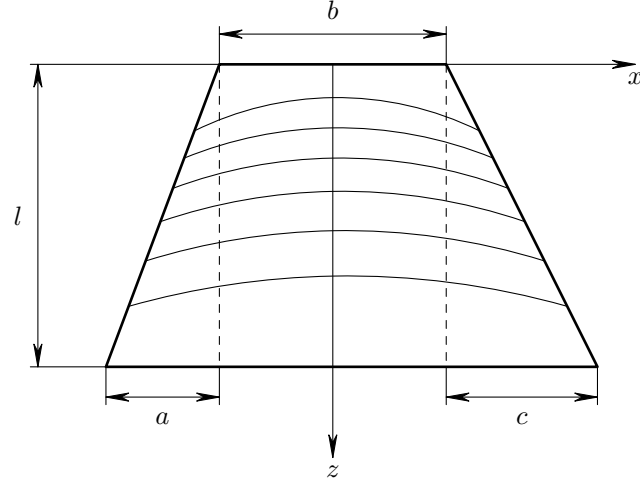


Рис. 3.1.

3.1.2 Когерентное рассеяние

Рассмотрим дифракцию на кристалле трапецеидального сечения толщиной l . Химический (композиционный) состав и хаотически распределенные дефекты внутри кристалла однородны в пределах всего его объема. В этом случае рассеивающая способность $a_h(\mathbf{r}) = a_h$ и статистический фактор Дебая–Валлера $f(\mathbf{r}) = f$ не зависит от пространственных координат.

Для трехкристальной дифракционной схемы угловое распределение интенсивности когерентного рассеяния имеет вид $I_h^c(q_x, q_z) = |E_h^c(q_x, q_z)|^2$, где с учетом нормировки в (3.5) амплитуда дифракционной волны

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{ia_h f}{\sqrt{2\pi}} \int_0^l dz e^{iq_z z} \int_{\Omega_1(z)}^{\Omega_2(z)} dx e^{iq_x x} \Phi(x, z). \quad (3.8)$$

Под интегралом в (3.8) присутствует двумерный фазовый фактор $\Phi(x, z) = \exp(i\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(x, z))$, определяемый видом деформации кристаллической решетки в латеральном вдоль x и вертикальном вдоль z направлениях. Пределы интегрирования для трапеции с верхним основанием b , нижним основанием $a + b + c$ и высотой l (рис. 3.1) для произвольной координаты z запишутся как $\Omega_1(z) = -\left(\frac{az}{l} + \frac{b}{2}\right)$ и $\Omega_2(z) = -\left(\frac{cz}{l} + \frac{b}{2}\right)$.

Примем модель латерального кристалла в виде, в котором поле атом-

ных смещений $\mathbf{h}\langle\mathbf{u}(x, z)\rangle = \mathbf{h}\langle\langle\mathbf{u}_b(x)\rangle + \langle\mathbf{u}_l(z)\rangle\rangle$ формируется за счет изгиба отражающих плоскостей $\mathbf{h}\langle\mathbf{u}_b(x)\rangle = -\pi x^2/b_1^2$ и линейного изменения межплоскостного расстояния в глубь кристалла $\mathbf{h}\langle\mathbf{u}_l(z)\rangle = -\pi z^2/l_1^2$. По аналогии с оптикой [102] мы ввели характерные параметры $b_1 = \sqrt{R d_{hkl}/2}$ и $l_1 = \sqrt{l d_{hkl}/\varepsilon_z}$, которые представляют размеры первых зон Френеля в латеральном и вертикальном направлениях. Здесь R — радиус кривизны атомных плоскостей и $\varepsilon_z = \frac{\Delta d}{d_{hkl}}$ — максимальная деформация кристаллической решетки по толщине кристалла. Введенная модель нарушений кристаллической решетки соответствует постоянному градиенту деформации вдоль осей x и z . Согласно приведенной в [101] трактовке, в кристалле с постоянным по глубине градиентом деформации решетки формируются фазовые слои, аналогичные полосчатым зонам Френеля в оптике [102]. В нашем рассмотрении этот формализм распространяется на случай упруго изогнутых атомных плоскостей. Действительно, если в (3.8) подставить фазовый фактор с указанными атомными смещениями, то нетрудно видеть, что в дифракционной волне в латеральном направлении на расстоянии $x_1 = \pm b_1$ от начала координат происходит фазовый сдвиг на π . На расстоянии $x_2 = \pm\sqrt{2}b_1$ этот сдвиг составляет величину 2π и т. д. Следовательно, в горизонтальном направлении формируются полосы размерами $b_1, (\sqrt{2}-1)b_1, (\sqrt{3}-\sqrt{2})b_1, \dots, (\sqrt{n}-\sqrt{n-1})b_1$, которые являются зонами Френеля в рентгеновской оптике кристалла с упруго изогнутыми атомными плоскостями.

Амплитуда волны когерентного рассеяния от деформированного кристалла с трапецеидальным сечением вблизи узла обратной решетки запишется в виде

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{ia_h f b_1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{iq_x^2 b_1^2}{4\pi}\right) (g_2(q_x, q_z) - g_1(q_x, q_z)). \quad (3.9)$$

Здесь $g_{1,2}(q_x, q_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iq_z z} U_{1,2}(z, q_x)$ — фурье-образы функций

$$U_{1,2}(z, q_x) = \theta(l - z)\theta(z)e^{-i\pi z^2/l_1^2}F(u_{1,2}), \text{ где } F(u) = \int_0^u e^{i\frac{\pi}{2}\tau^2} d\tau \text{ и } \theta(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases}$$

интеграл Френеля и функция Хевисайда соответственно. Переменные $u_{1,2} = \frac{\sqrt{2}}{b_1} \left(\Omega_{1,2}(z) - \frac{q_x b_1^2}{2\pi} \right)$ зависят от значения q_x , радиуса изгиба атомных плоскостей (размера первой латеральной зоны Френеля) и формы поперечного сечения кристалла.

Предельный переход к случаю дифракции на латеральном кристалле с эквидистантно изогнутыми плоскостями реализуется при условии $l_1 \rightarrow \infty$. Вид решения (3.2) сохранится, однако в функциях $U_{1,2}(z, q_x)$ исчезнет множитель $\exp(-i\pi z^2/l_1)$, описывающий постоянный градиент деформации вдоль z .

Решение для случая дифракции рентгеновских лучей от кристалла при наличии лишь линейного изменения межплоскостного расстояния следует из (3.9) при условии $b_1 \rightarrow \infty$ ($R \rightarrow \infty$). Амплитудный коэффициент отражения запишется с помощью интегралов Френеля в следующем виде:

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{a_h f l_1}{2q_x \sqrt{\pi}} \left(e^{i\varphi_c} [F(\nu_{c,1}) - F(\nu_{c,0})] - e^{i\varphi_a} [F(\nu_{a,1}) - F(\nu_{a,0})] \right), \quad (3.10)$$

$$\text{где } \varphi_{a,c} = -i \left[\pi \left(\frac{q_{a,c} l_1}{2\pi} \right)^2 \pm \frac{q_x b}{2} \right], \quad \nu_{a,c,1} = \frac{\sqrt{2}}{l_1} \left(l - \frac{q_{a,c} l_1^2}{2\pi} \right), \quad \nu_{a,c,0} = \frac{\sqrt{2} q_{a,c} l_1}{2\pi}.$$

Введение новых угловых переменных $q_a = q_z - \frac{q_x a}{l}$, $q_c = q_z + \frac{q_x c}{l}$ обусловлено наличием наклона боковых сторон латерального кристалла. В отсутствие этого наклона, например, для кристалла прямоугольного сечения, когда $a = c = 0$, угловые переменные $q_{a,c}$ заменяются переменной q_z . Далее, если $a = c = 0$ и $b \rightarrow \infty$, то мы получим решение для планарного кристаллического слоя с линейным изменением межплоскостного расстояния.

В отсутствие деформаций кристаллической решетки ($b_1 \rightarrow \infty$, $l_1 \rightarrow \infty$) для амплитуды когерентно отраженной рентгеновской волны от кристалла

с трапецидальным сечением получаем

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{fa_h l}{\sqrt{2\pi}q_x} e^{i\varphi_0} \left(e^{i\varphi_t} \text{sinc}\left(\frac{q_z l}{2}\right) - \text{sinc}\left(\frac{q_a l}{2}\right) \right), \quad (3.11)$$

где $\text{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x}$, $S_t = \left(\frac{a+c}{2} + b\right)l$ — площадь сечения трапецидального кристалла, $\varphi_0 = \frac{1}{2}(q_z l - q_x(a+b))$ — фазовый множитель амплитуды дифракционной волны, зависящий от выбора начала координат. В отличие от фазы φ_0 , значение которой не изменяет дифракционную картину, другой фазовый множитель $\varphi_t = \frac{q_x S_t}{l}$, определяемый формой сечения латерального кристалла, влияет на угловое распределение интенсивности дифракционного рассеяния. Из вида (3.11) следует, что при $q_x = 0$ и $q_z = 0$ имеются устранимые особые точки. Для выполнения численных расчетов полезно знать решения для амплитуды когерентного рассеяния в этих особых точках

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{ia_h f}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \frac{(a+c+b)e^{iq_z l} - b}{iq_z} + \frac{(a+c)(e^{iq_z l} - 1)}{lq_z^2}, & q_x = 0 \\ \exp\left(-iq_x \frac{a+b}{2}\right) \left[e^{i\varphi_t} \text{sinc}\left(\frac{q_z l}{2}\right) - \text{sinc}\left(\frac{q_x a}{2}\right) \right], & q_z = 0 \\ S_t, & q_x = 0, \quad q_z = 0. \end{cases}$$

Из этого выражения следует, что при $q_x = q_z = 0$ получаем максимальное значение интенсивности когерентного рассеяния, пропорциональное квадрату площади сечения трапецидального кристалла $I_{h,\max}^c = \frac{|a_h|^2 f^2 S_t^2}{2\pi}$.

Решение (3.11) при $b = 0$ описывает амплитуду дифракционной волны от латерального кристалла с треугольным сечением. Если $a = -c$, сечение кристалла имеет форму параллелограмма, и решение (3.11) может быть записано в виде

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{fa_h lb}{\sqrt{2\pi}} e^{iq_a} \text{sinc}\left(\frac{q_a l}{2}\right) \text{sinc}\left(\frac{q_x b}{2}\right).$$

В случае кристалла с прямоугольным сечением ($a = c = 0$) это выражение преобразуется в известный результат

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{fa_h lb}{\sqrt{2\pi}} e^{i(q_z l + q_x b)/2} \text{sinc}\left(\frac{q_z l}{2}\right) \text{sinc}\left(\frac{q_x b}{2}\right).$$

Отметим, что решение (3.11) при $q_z = 0$ согласуется с результатом для случая двухкристальной рентгеновской дифрактометрии [103].

3.1.3 Диффузное рассеяние

Для принятой модели кристалла площадь корреляции (3.7) в выражении для интенсивности диффузного рассеяния имеет вид

$$\begin{aligned} \tau(x, z; q_x, q_z) = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_z e^{i(q_z - 2\pi z/l_1^2)\rho_z} \times \\ & \times e^{-i\pi\rho_z^2/l_1^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_x e^{i(q_x - 2\pi x/b_1^2)\rho_x} e^{-i\pi\rho_x^2/b_1^2} G(\rho_x, 0, \rho_z). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Строго говоря, в выражении (3.12) корреляционная функция $G(\rho_x, 0, \rho_z)$ зависит от типа дефектов [16]. В данном рассмотрении не будем задавать конкретную модель дефектов, предполагая, что хаотически распределенные структурные нарушения по объему кристалла описываются корреляционной функцией вида

$$G(\rho_x, 0, \rho_z) = \exp \left[-\pi \left(\left(\frac{\rho_x}{\tau_x} \right)^2 + \left(\frac{\rho_z}{\tau_z} \right)^2 \right) \right], \quad (3.13)$$

где τ_x и τ_z имеют смысл корреляционных длин Като [104] в латеральном и вертикальном направлениях соответственно. Такой выбор корреляционной функции удобен, поскольку, с одной стороны, она соответствует модели “случайных деформаций” [22], с другой стороны, позволяет получить аналитическое выражение для корреляционной площади. Действительно, подставляя (3.13) в (3.12) и беря в расчет вещественную часть, получаемую в результате интегрирования (3.12), для корреляционной площади запишем выражение в виде произведения корреляционных длин

$$\tau(x, z; q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi} \tau(x; q_x) \tau(z; q_z),$$

где $\tau(x, q_x) = \tau_x \exp \left[-\left(q_x - \frac{2\pi x}{b_1^2} \right)^2 \frac{\tau_x^2}{4\pi} \right]$ и $\tau(z, q_z) = \tau_z \exp \left[-\left(q_z - \frac{2\pi z}{l_1^2} \right)^2 \frac{\tau_z^2}{4\pi} \right]$. Поскольку корреляционная площадь ответственна за угловое распределе-

ние интенсивности некогерентного рассеяния в обратном пространстве, то ее зависимость от пространственных координат указывает на более сильное размытие диффузионной компоненты при наличии непрерывной деформации кристаллической решетки.

Интенсивность диффузионного рассеяния для выбранной модели корреляционной функции запишется как

$$I_h^d(q_x, q_z) = \frac{|a_h|^2}{4\pi} (1-f^2) \tau_z b_1^2 \int_0^l dz \exp \left(- \left(q_z - \frac{2\pi z}{l_1^2} \right)^2 \frac{\tau_z^2}{4\pi} \right) [\operatorname{erf}(\beta_2) - \operatorname{erf}(\beta_1)], \quad (3.14)$$

где $\operatorname{erf}(b) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^b d\beta e^{-\beta^2}$ — интеграл вероятностей, который связан с интегралом Френеля соотношением $F(u) = \frac{1+i}{2} \operatorname{erf} \left(\sqrt{\pi} \frac{(1-i)u}{2} \right)$.

Параметры $\beta_{1,2} = \frac{\tau_x}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi\Omega_{1,2}(z)}{b_1^2} - q_x \right)$ зависят от формы поперечного сечения кристалла, радиуса изгиба отражающих плоскостей, размеров хаотически распределенных дефектов в латеральном направлении и угловой переменной q_x .

В отсутствие непрерывных (неслучайных) деформаций кристаллической решетки для углового распределения интенсивности диффузного рассеяния приходим к следующему простому аналитическому решению

$$I_h^d(q_x, q_z) = |a_h|^2 (1-f^2) \tau(q_x, q_z) S_t, \quad (3.15)$$

где корреляционная площадь $\tau(q_x, q_z) = \frac{\tau(q_x)\tau(q_z)}{2\pi}$ теряет зависимость от пространственных координат. Корреляционные длины в латеральном $\tau(q_x) = \tau_x \exp \left(-\frac{q_x^2 \tau_x^2}{2\pi} \right)$ и вертикальном $\tau(q_z) = \tau_z \exp \left(-\frac{q_z^2 \tau_z^2}{2\pi} \right)$ направлениях полностью определяются размерами хаотически распределенных дефектов $\tau_{x,z}$.

Отметим еще одну существенную деталь. В случае когерентного рассеяния форма сечения латерального кристалла, независимо от того, имеются или отсутствуют непрерывные деформации кристаллической решетки, всегда играет определяющую роль в формировании дифракционной

картины. Угловое распределение интенсивности диффузионного рассеяния при наличии непрерывных деформаций решетки также зависит от формы сечения. С другой стороны, в отсутствие этих деформаций, как это следует из (3.15), такая зависимость теряется. Действительно, при значении $\langle \mathbf{u}(x, z) \rangle = 0$ интенсивность диффузного рассеяния пропорциональна площади сечения кристалла S_t , но никак не связана с его формой.

3.1.4 Численное моделирование

Для выявления закономерностей формирования дифракционной картины от неидеального латерального кристалла были проведены численные расчеты карт распределения интенсивностей когерентного и диффузного рассеяний вблизи узла обратной решетки. В расчетах использованы параметры (004)-отражения перпендикулярно поляризованного CuK_α излучения для кристалла InP. В процессе численного моделирования в качестве постоянных характеристик приняты: толщина кристалла $l = 100$ нм, размеры первых зон Френеля в латеральном $b_1 = 80$ нм и вертикальном $l_1 = 80$ нм направлении, корреляционные длины Като $\tau_x = 10$ нм, $\tau_z = 50$ нм, статистический фактор Дебая–Валлера $f = 0.9$, а также площадь поперечного сечения кристалла S_t .

На рис. 3.2 представлены карты распределения интенсивности когерентного (рис. а, в, д) и полного (когерентного и диффузного (рис. б, г, е)) рассеяний от кристалла трапецеидального сечения ($a = c = 100$ нм, $b = 200$ нм). Карты (а) и (б) соответствуют модели кристалла, в котором отсутствуют непрерывные деформации решетки. Наличие линейного изменения межплоскостного расстояния по толщине кристалла (рис. в, г) приводит к незначительному изменению дифракционной картины. В данном случае из-за деформаций решетки наблюдаются смещения карты интенсивности вдоль оси q_z на величину $\Delta q_z = \pi l / l_1^2$. Добавление деформаций, вызванных упругим изгибом атомных плоскостей (рис. д, е), сильно видоизменяет рас-

пределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Похожие по виду дифракционные картины наблюдались при исследовании с использованием синхротронного излучения нанокристаллических островков SiGe, когерентно выращенных на кремниевой подложке [105].

Как отмечалось выше, форма сечения латерального кристалла с непрерывными деформациями решетки влияет на картину диффузного рассеяния. Рис. 3.3 демонстрирует угловые распределения интенсивности диффузного рассеяния от сильно деформированных кристаллов с сечениями одной и той же площади в форме треугольника (рис. а), прямоугольника (рис. б) и параллелограмма (рис. г).

Карты распределения интенсивностей с учетом когерентного и диффузного рассеяний от кристаллов с сечениями в виде прямоугольника ($b = 300$ нм) и параллелограмма ($a = -c = 100$ нм, $b = 300$ нм) показаны на рис. 3.4 (а и б соответственно). Как видно из рисунков, дифракционные картины имеют характерные особенности в зависимости от формы сечения. В случае дифракции на кристалле равнобедренного трапецеидального сечения (рис. 3.2 е) и прямоугольного (рис. 3.4 а) сечений распределения интенсивности рассеяния имеют вертикальную ось симметрии. Более того, для прямоугольного сечения существует и горизонтальная ось симметрии, смещенная в вертикальном направлении на величину Δq_z . Симметрия когерентного и диффузного рассеяния нарушается в случае кристалла с сечением в виде параллелограмма (рис. 3.3в, 3.4б).

Кривые дифракционного отражения от латеральных кристаллов в режимах q_x - и q_z -сканирования показаны на рис. 3.5. Профили отраженной интенсивности в случае кристалла прямоугольного сечения для обоих видов сканирования имеют симметричный вид (рис. 3.5 а,б). Дифракция на кристалле с сечением в форме равнобедренной трапеции сохраняет симметричную картину лишь для q_x -сканирования (рис. 3.5г). Для кристалла с сечением в форме параллелограмма симметрия кривых дифракционного

отражения нарушается для обоих видов сканирования (рис. 3.5 в,е). Эти выводы согласуются с распределениями интенсивности рассеяния на соответствующих картах в обратном пространстве.

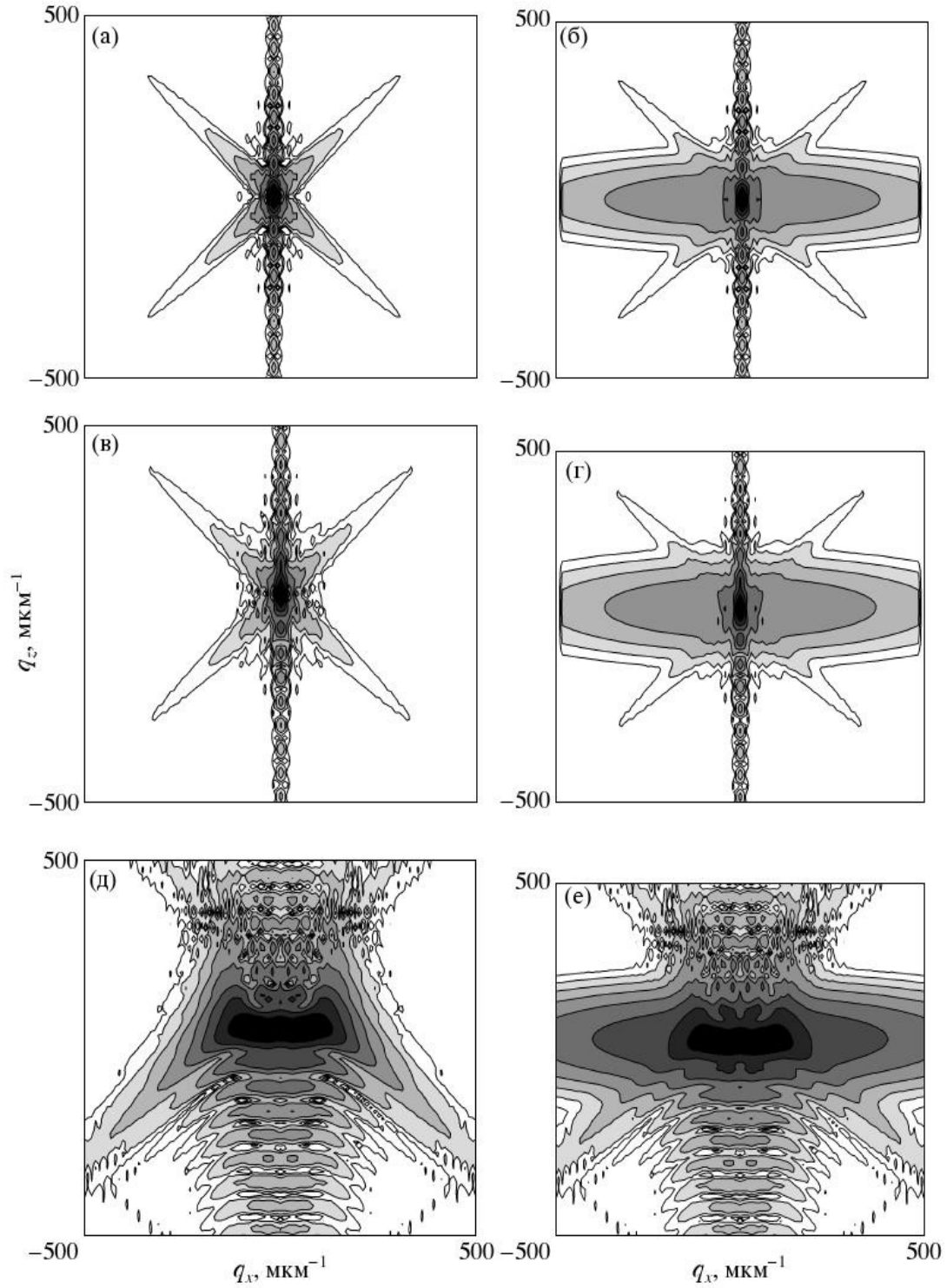


Рис. 3.2. Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла трапецеидального сечения ($a = c = 100$ нм, $b = 200$ нм). Контуры равной интенсивности представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей I между соседними линиями составляет 0.316. Слева (а, б, д) — когерентное рассеяние; справа (б, г, е) — когерентное и диффузное рассеяние. а, б — кристалл с идеальной решеткой; в, г — кристалл с линейным изменением межплоскостного расстояния; д, е — кристалл с линейным изменением межплоскостного расстояния и упруго изогнутыми атомными плоскостями.

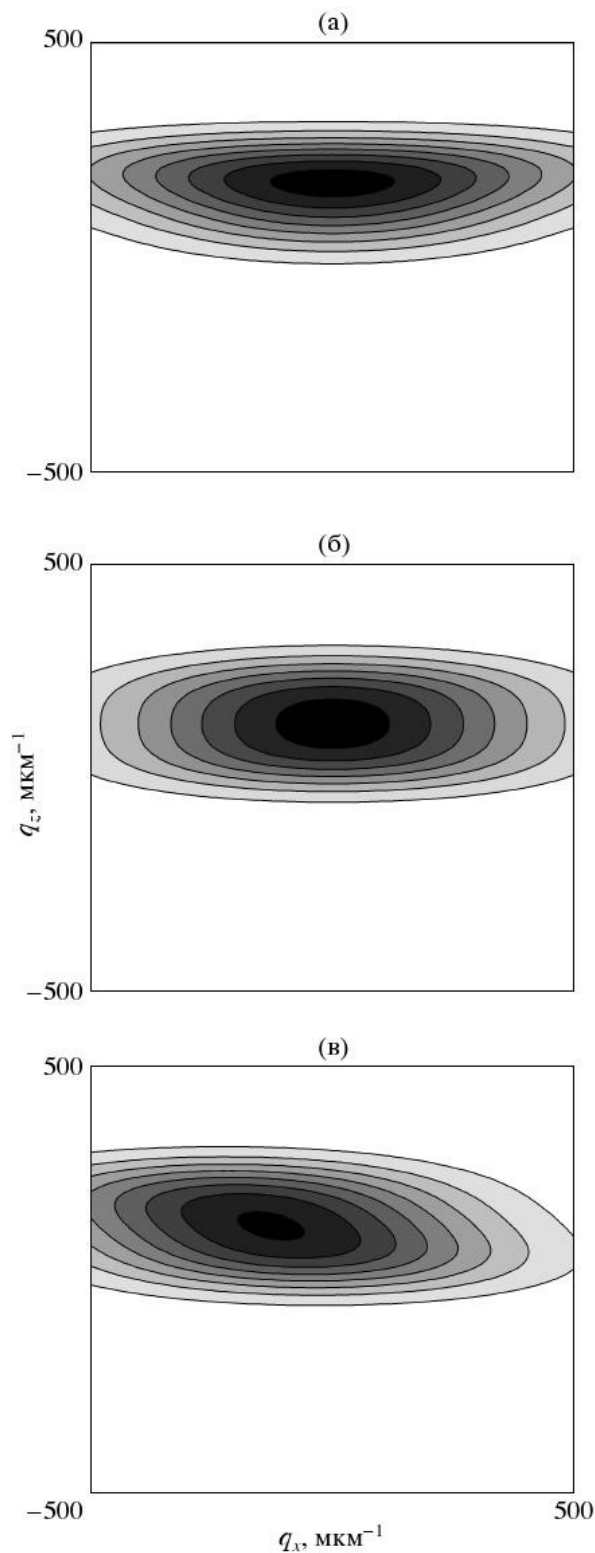


Рис. 3.3. Распределение интенсивностей диффузного рассеяния от сильно деформированных кристаллов в форме треугольника (а), прямоугольника (б) и параллелограмма (в). Контуры равной интенсивности представлены в линейном масштабе, различие в интенсивностях между соседними линиями составляет 0.02.

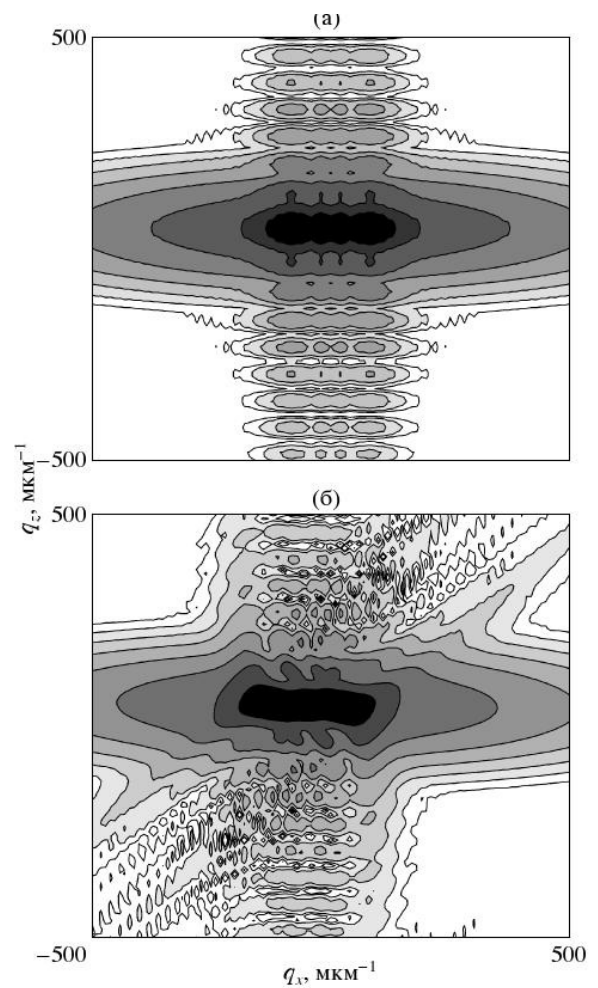


Рис. 3.4. Карты распределения интенсивностей полного (когерентного и диффузного) рассеяния от кристаллов с сечениями в виде прямоугольника (а) и параллелограмма (б). Отношение интенсивностей между соседними линиями, как на рис. 3.3.

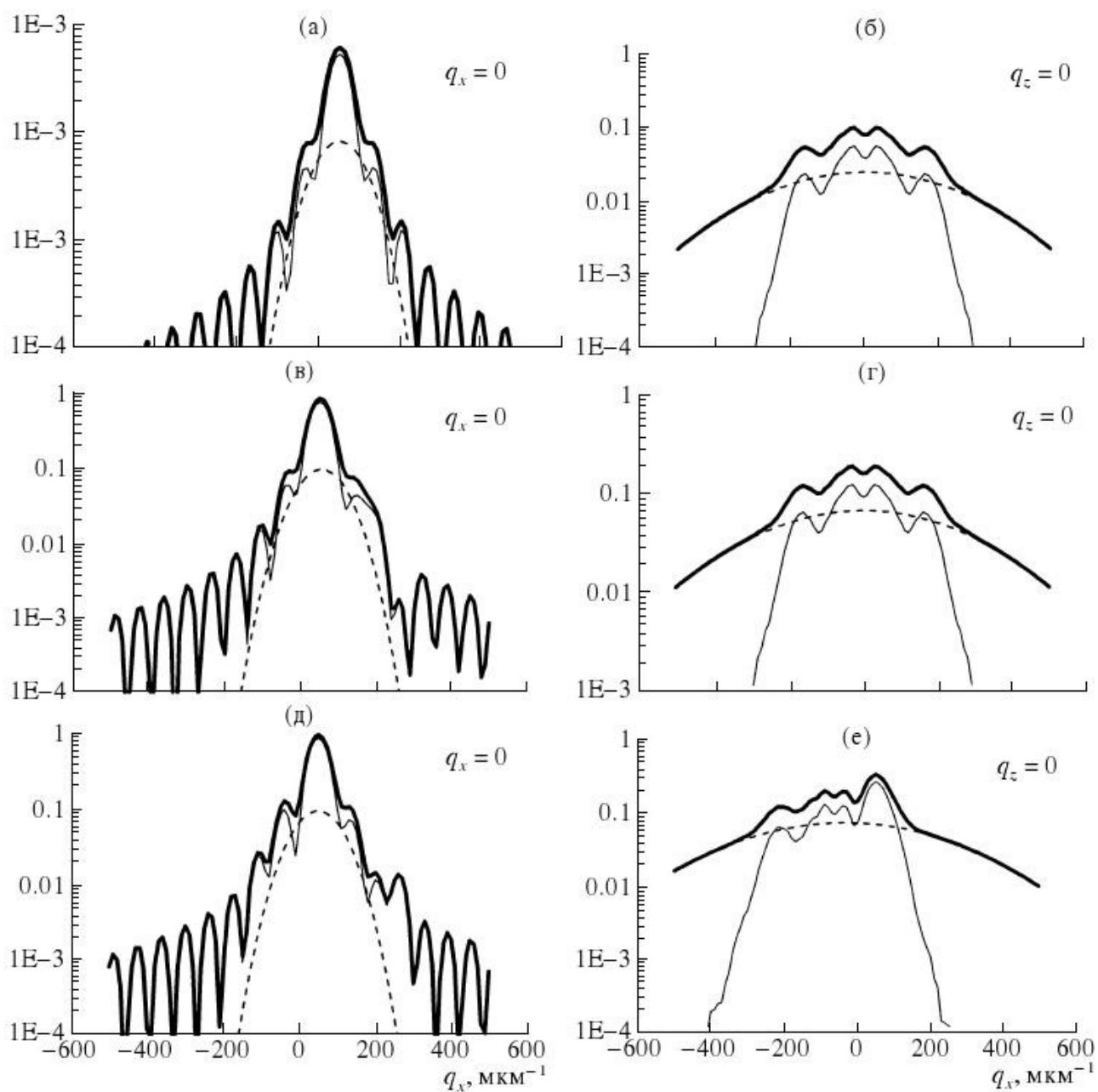


Рис. 3.5. Кривые дифракционного отражения от латеральных кристаллов в режимах q_z -сканирования (справа) с формой в виде прямоугольника (а,б), равнобедренной трапеции (в,г) и параллелограмма (д,е). Штриховая линия — диффузная, тонкая — когерентная составляющая, жирная — суммарная интенсивность рассеяния.

Заключение

Основные результаты диссертационной работы состоят в следующем:

1. Разработан метод расчета кривых дифракционного отражения для латеральных структур в условиях динамической дифракции. Для кристаллов прямоугольного сечения метод разработан в двух вариантах:
 - численное решение уравнений Такаги-Топена на разностной сетке,
 - решение уравнений Такаги-Топена с использованием преобразования Лапласа.

Выяснено, что численный метод на разностной сетке обладает большой гибкостью и может быть применен к более сложным задачам, как: кристаллы с трапецеидальным сечением, слоистые латеральные структуры.

2. На основе теории Дарвина разработан метод расчета динамической дифракции для кристаллов прямоугольного сечения.
3. Получены уравнения Такаги-Топена, пригодные для расчета карт интенсивности дифракционного рассеяния. На основе этих уравнений проведены расчеты для кристаллов прямоугольного сечения.

Литература

- [1] Authier, A. Dynamical Theory of X-Ray Diffraction / A. Authier. — Oxford University Press. New York. 2001. — 661 p.
- [2] Fewster, P.F. X-Ray diffraction from low-dimensional structures / P.F. Fewster // Semicond. Sci. Technol. B. — 1992. — V.8. — P. 1915-1934.
- [3] Pietsch, U. High resolution X-ray Scattering from Thin Films to Lateral Nanostructures / U. Pietsch, V. Holy, T. Baumbach. — Springer-Verlag. New York. 2004. 408 p.
- [4] Darwin, C.G. The Theory of X-Ray Reflexion / C.G. Darwin // Philos. Mag.— 1914.— V.27.— P.315-333.
- [5] Darwin, C.G. The Theory of X-Ray Reflexion. Part II / C.G. Darwin // Philos. Mag.— 1914.— V.27.— P.315-333.
- [6] Пинскер, З.Г. Рентгеновская кристаллооптика/ З.Г. Пинскер — М.:Наука, 1992. — 391 с.
- [7] Takagi, S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion/ S. Takagi // Acta Cryst.— 1962.— V.15.— P.1581-1591.
- [8] Taupin, D. Theorie dynamique de la diffraction des rayons x par les cristaux deformes / D. Taupin // Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist.— 1964.— V.87.— P.469-511.

- [9] Afanas'ev, A.M. Dynamical theory of X-ray diffraction in crystals with defects / A.M. Afanas'ev, V.G. Kohn // *Acta Cryst.*– 1971.– A27.– P.421-430.
- [10] Caciuffo, R. Monochromators for X-ray Synchrotron radiation / R. Caciuffo, S. Melone, F. Rustichelli // *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)*. North-Holland. Amsterdam.– 1987.– V.153. №1. 71 p.
- [11] Bonse, U. Tailless x-ray single-crystal reflection curves obtained by multiple reflection / U. Bonse, M. Hart // *Appl. Phys. Lett.*– 1965.– V.7.– P.238-240.
- [12] Compton, A.H. X-ray in theory and experiment / A.H. Compton, S.K. Allison — New York: D. Van Nostrand Company.– 1935.– 740 p.
- [13] Eisenberger, P. X-ray brillouin scattering / P. Eisenberger, N.G. Alexandropoulos, P.M. Platzman // *Phys. Rev. Lett.*– 1972.– V.28.– №23.– P.1519-1522.
- [14] Larson, B.C. Huang diffuse scattering from dislocation loops and cobalt precipitates in copper / B.C. Larson, W. Schmatz // *Phys. Rev. B.*– 1974.– V.10.– №6.– P. 2307-2314.
- [15] Iida, A. Separate Measurements of Dynamical and Kinematical X-Ray Diffrations from Silicon Crystals with a Triple Crystal Diffractometer / A. Iida, K. Kohra // *Phys. Stat. Sol. (a)*.– 1979.– V. 51.– P. 533-542.
- [16] Nesterets, Ya.I. The statistical kinematical theory of X-ray diffraction as applied to reciprocal-space mapping / Ya.I. Nesterets, V.I. Punegov // *Acta. Cryst. A.*– 2000.– V. A56.– №6.– P. 540-548.
- [17] Fewster, P.F. Applications of multiple-crystal diffractometry / P.F. Fewster, N.L. Andrew // *J. Phys. D.: Appl. Phys.*– 1995.– V. 28.– P. A97-A103.

- [18] X-ray triple-crystal diffractometry of defects in epitaxial layers / V. Holy, M. Kastner, H. Stanzl, W. Gebhardt // J. Appl. Cryst.— 1994.— V. 27.— P. 551-557.
- [19] Кривоглаз, М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах / М.А. Кривоглаз — Киев: Наук. Думка.— 1983.— 408 с.
- [20] Kaganer V.M., Köhler R., Schmidbauer M., Opitz R. & Jenichen B. (1997) Phys. Rev. B 55, p. 1793-1810.
- [21] A semikinetical approach to x-ray diffraction of real crystals with small defects / M. Li [et al.] // J. Appl. Phys.— 1997.— V. 81.— №5.— P. 2143-2147.
- [22] Kato, N. // Statistical dynamical theory of crystal diffraction. I. General formulation / N. Kato // Acta Cryst. A.— 1980.— V.36.— №5.— P.763-769.
- [23] Бушуев, В.А. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах с учетом углового распределения интенсивности / В.А. Бушуев // Кристаллография.— 1989.— Т. 34.— №3.— С. 279–287.
- [24] Пунегов, В.И. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на кристаллах с непрерывно изменяющимся по толщине параметром решетки / В.И. Пунегов // Кристаллография.— 1990.— Т. 35.— №3.— С. 576-583.
- [25] Пунегов, В.И. Динамическая теория дифракции на неидеальной гетероструктуре / В.И. Пунегов // Физика твердого тела.— 1991.— Т. 33.— №1.— С. 234-243.
- [26] Павлов, К.М. Рентгенодифракционная диагностика лазерных структур / К.М. Павлов, В.И. Пунегов, Н.Н. Фалеев // ЖЭТФ.— 1995.— Т. 106.— №6.— С. 1967-1983.

- [27] Пунегов, В.И. Определение структурных параметров градиентного эпитаксиального слоя методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии. 1. Начальное приближение решения обратной задачи дифракции / В.И. Пунегов, Н.Н. Фалеев // Физика твердого тела.– 1996.– Т. 38.– №1.– С. 255-263.
- [28] Определение структурных параметров градиентного эпитаксиального слоя методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии. 3. Решение обратной задачи в рамках кинематической и статистической динамической теории дифракции / В.И. Пунегов, К.М. Павлов, С.Г. Подоров, Н.Н. Фалеев // Физика твердого тела.– 1996.– Т. 38.– №1.– С. 264-271.
- [29] Бушуев, В.А. Угловое распределение интенсивностей динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами в геометриях Лауэ и Брегга. / В.А. Бушуев — М.: ВИНТИ.– 1988.– №486-B88.– 51 с.
- [30] Pavlov, K.M. Statistical Dynamical Theory of X-ray Diffraction in the Bragg Case: Application to Triple-Crystal Diffractometry / K.M. Pavlov, V.I. Punegov // Acta Cryst. A.– 2000.– V. A56.– №3.– P. 227-234.
- [31] Бушуев, В.А. Статистическая динамическая теория вторичных процессов в условиях дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с нарушенным поверхностным слоем / В.А. Бушуев // ФТТ.– 1995.– Т. 37.– №1.– С. 249-260.
- [32] Пунегов, В.И. Влияние многократного диффузного рассеяния на динамическую дифракцию рентгеновских лучей в слоисто-неоднородных кристаллах с микродефектами / В.И. Пунегов, А.В. Харченко // Кристаллография.– 1998.– Т.43.– Вып. 6.– С. 1078-1084.

- [33] Diffraction grating transmission efficiencies for XUV and soft x rays / H. W. Schnopper [et al.]. // Applied Optics, 16.– 1977.– P. 1088-1091.
- [34] Nano-resolution profiling of micro-structures using quantitative X-ray phase retrieval from Fraunhofer data / A.V. Darahyanau [et al.]. // Physics Letters A 335.– 2005.– P. 494-498.
- [35] Fabrication of diffraction gratings for hard X-ray phase contrast imaging / C. David [et al.]. // Microelectronic Engineering, 84.– 2007.– P. 1172–1177.
- [36] Nikulin, A.Y. Phase-retrieval in hard X-ray diffraction imaging: Can we quantitatively reconstruct a “real” transmission function? / A.Y. Nikulin, R.A. Dilanian, A.V. Darahanau // Physics Letters A, 337.– 2008.– P. 4333-4336.
- [37] Dense plasma diagnostics with an amplitude-division soft-x-ray laser interferometer based on diffraction gratings / J. Filevich [et al.]. // Opt. Lett. 25.– 2000.– P. 356–358.
- [38] Characterization of diffraction gratings by use of a tabletop soft-x-ray laser / M. Seminario [et al.]. // Applied Optics, 40.– 2001.– P. 5539-5544.
- [39] Multilayer grating efficiency: numerical and physical experiments / A.I. Erko [et al.]. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 333.– 1993.– P. 599-606.
- [40] Comparision of modal and differential methods for multilayer gratings / V. Martynov [et al.]. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 339.– 1994.– P. 617-625.
- [41] Experimental Investigation of X-Ray Bragg diffraction on the Periodic Surface Relief of a Perfect Crystal / V. V. Aristov, A. Yu. Nikulin, A. A. Snigirev, P. Zaumseil // Phys. Stat. Sol. (a), 958.– 1986.– P. 81-865.

- [42] Observation of X-ray Bragg Diffraction on the Periodic Surface Relief of a Perfect Silicon Crystal / V.V. Aristov, A.I. Erko, A.Yu. Nikulin, A.A. Snigirev // Optics Communications, 58.– 1986.– P. 300-302.
- [43] Interference Thickness Oscillation of an X-Ray Wave on Periodically Profiled Silicon / V.V. Aristov [et al.]. // Phys. Stat. Sol. (a), 108.– 1988.– P. 651-655.
- [44] X-ray space modulation by diffraction on an ultrasonic superlattice / D.V. Roshchupkin, M. Brunel, F. de Bergevin, A.I. Erko // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B72.– 1992.– P. 471-476.
- [45] X-ray diffraction on a multilayer mirror modulated by surface acoustic waves / D.V. Roshchupkin, I.A. Schelokov, R. Tucoulou, M. Brunel // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B129.– 1997.– P. 414-418.
- [46] X-ray diffraction from perfect silicon crystals distorted by surface acoustic waves / R. Tucoulou [et al.]. // Journal of Applied Crystallography, 33.– 2000.– P. 1019-1022.
- [47] X-ray diffraction analysis of the surface acoustic wave propagation in langatate crystal / D.V. Roshchupkin, A.I. Erko, L. Ortega, D.V. Irzhak // Applied Physics A, 94.– 2009.– P. 477-484.
- [48] Belyaev, Yu.N. On the theory of x-ray diffraction in a perfect crystal with distorted surface layer / Yu.N. Belyaev, A.V. Kolpakov // Phys.Stat.Sol.(a).– 1983.– Vol. 76.– P. 641-645
- [49] Безирганян, П.А. Теория эффекта Бормана для конечного кристалла / П.А. Безирганян, М.А. Навасардян // Изв. АН Арм. ССР, Физика.– 1969.– Т. 3.– С. 269-274.

- [50] Borie, B. The Darwin Dynamical Theory of X-ray Diffraction / B. Borie // Acta Cryst.– 1967.– Vol. 23.– P. 210-216.
- [51] Borie, B. The Theory of the Borrmann Effect in Terms of Difference Equations / B. Borie // Acta Cryst.– 1966.– Vol. 21.– P. 470-472.
- [52] Caticha, A. Diffraction of x rays at the far tails of the Bragg peaks. II. Darwin dynamical theory / A. Caticha // Phys. Rev. B.– 1994.– Vol. 49.– №1.– P. 33-38.
- [53] Chandrasekhar, S. Optical rotatory power of Liquid crystals / S. Chandrasekhar, R.K.N. Srinivasa // Acta Cryst.– A24.– 1968.– P. 445-451.
- [54] Chen, Y.C. Determination of critical layer thickness and strain tensor in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum-well structures by x-ray diffraction / Y.C. Chen, P.K. Bhattacharya // Journal of Applied Physics.– 1993.– Vol. 73.– №11.– P. 7389-7394.
- [55] Chung, J.S. Temperature-dependent X-ray dynamical diffraction: Darwin theory simulations / J.S. Chung, S.M. Durbin // Acta Cryst.– 1999.– A55.– P. 14-19.
- [56] Darwin, C.G. The Theory of X-Ray Reflexion / C.G. Darwin // Philos. Mag.– 1914.– Vol. 27.– P. 315-333.
- [57] Darwin, C.G. The Theory of X-Ray Reflexion. Part II / C.G. Darwin // Philos. Mag.– 1914.– Vol. 27.– P. 675-691.
- [58] Dub, P. The Darwin procedure in optics of layered media and the matrix theory / P. Dub, O. Litzman // Acta Cryst.– 1999.– Vol. A55.– P. 613-620.
- [59] Durbin, S.M. Darwin spherical-wave theory of kinematic surface diffraction / S.M. Durbin // Acta Cryst.– 1995.– A51.– P. 258-268.

- [60] Durbin, S.M. Darwin theory of heterostructure diffraction / S.M. Durbin, G.C. Follis // Phys. Rev. B.– 1995.– Vol. 41.– №15.– P. 10127-10133.
- [61] Fitzgerald, W.J. A numerical study of the dynamical theory of scattering from a distorted crystal / W.J. Fitzgerald, C.N.W. Darlington // Acta Cryst.– 1976.– A32.– P. 671-672.
- [62] Игнатович, В.К. Алгебраическое описание динамической дифракции на многоатомных идеальных кристаллах / В.К. Игнатович // ЖЭТФ.– 1990.– Т. 97.– №5.– С. 1616-1625.
- [63] Игнатович, В.К. Многоволновой алгебраический метод Дарвина в динамической теории дифракции / В.К. Игнатович // Кристаллография.– 1992.– Т. 37.– №5.– С. 1100-1112.
- [64] Колосов, С.И. Методы численного интегрирования уравнений Такаги-Топена для кристалла прямоугольного сечения / С.И. Колосов, В.И. Пунегов // Кристаллография.– 2005.– Т. 50.– Вып. 3.– С. 401-406.
- [65] Kolpakov, A.V. X-ray diffraction in a crystal with a linear lattice parameter variation. / A.V. Kolpakov, V.I. Punegov // Solid State Communications.– 1985.– Vol. 54.– №7.– P.573-578.
- [66] Kuznetsov, A.V. On the equivalence of methods of Darwin and Ewald-Laue / A.V. Kuznetsov, A.D. Fofanov // Soviet Physics Journal.– 1972.– Vol. 15.– №4.– P. 559-563. (Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Fizika.– №. 4.– P. 108–113.– April.– 1972)
- [67] Kuznetsov, A.V. The Darwin theory for scattering by an ideal crystal in the asymmetric case / A.V. Kuznetsov, A.D. Fofanov // Soviet Physics Journal.– 1970.– Vol. 13.– №10.– P. 1269-1274 (Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii Fizika.– №10.– P. 12–18.– October.– 1970)

- [68] Ladanov, A.V. A new approach to the problem of multiple X-ray diffraction in multilayer crystals / A.V. Ladanov, V.I. Punegov // Twelfth European Crystallographic meeting.- Moscow, USSR, August 20-29.- 1989.- / Collected Abstracts. Moscow.- 1989.- Vol.3.- P.137.
- [69] Lateral size effects on domain structure in epitaxial PbTiO₃ thin films / K. Lee [et al.]. // J. Appl. Phys.- 2006.- Vol. 100.- P.051615 (1-10)
- [70] A semi-kinematic approach to x-ray diffraction of real crystals with small defects / M. Li [et al.]. // J. Appl. Phys.- 1997.- V. 81.- P. 2143-2147.
- [71] Nakatani, S. Dynamical treatment of X-ray reflection from crystal surface / S. Nakatani, T. Takahashi // Sur. Sci.- 1994.- Vol. 311.- P. 433-439.
- [72] Olekhnovich, N.M. Primary Extinction for Finite Crystals. Square-Section Parallelepiped / N.M. Olekhnovich, A.I. Olekhnovich // Acta Cryst.- 1978.- Vol. A34.- №2.- P. 321-326.
- [73] Perkins, R.T. An exact analytic solution of Darwin's difference equations / R.T. Perkins, L.V. Knight // Acta Cryst.- 1984.- A40.- P. 617-619.
- [74] Prins, J.A. Die Reflexion von Röntgenstrahlen an absorbierenden idealen Kristallen / J.A. Prins // Zeitschrift für Physik.- 1930.- Vol. 63.- №7-8.- P. 477-493
- [75] Prudnikov, I.R. Darwin's approach to X-ray dynamical diffraction in distorted crystals / I.R. Prudnikov // Acta Cryst.- 1998.- Vol. A54.- P. 1034-1036.
- [76] Prudnikov, I.R. X-Ray Diffraction in Distorted Crystals and Imperfect Multilayered Structures. A Theoretical Approach Based on Resursion Equations / I.R. Prudnikov // Phys. Stat. Sol. (b).- 2000.- Vol. 217.- P. 725-735.

- [77] Punegov, V.I. X-ray diffraction from multilayer structures with statistically distributed microdefects / V.I. Punegov // *Physica status solidi (a)*.– 1993.– Vol. 136.– №1.– P. 9-19.
- [78] Punegov, V.I. Theory of X-Ray Diffraction on a Lateral Crystal with Elastically Bent Lattice Planes / V.I. Punegov, S.I. Kolosov, K.M. Pavlov // *Technical Physics Letters*.– 2006.– Vol. 32.– №9.– P. 809-812.
- [79] Punegov, V.I. Theory of x-ray diffraction from a nonideal crystal with a trapezoidal cross section / V.I. Punegov, S.I. Kolosov // *Crystallography Reports*.– 2007.– Vol. 52.– №2.– P. 191-198.
- [80] Calculating x-ray diffraction from multilayer lateral structures with arbitrary shapes and composition profiles / V.I. Punegov, A.I. Maksimov, S.I. Kolosov, K.M. Pavlov // *Tech. Phys. Lett.*– 2007.– Vol. 33.– №2.– P. 125-127.
- [81] Пунегов, В.И. О дифракции рентгеновских лучей на многослойной пленочной структуре в скользящей геометрии / В.И. Пунегов, А.В. Ладанов // *Журнал технической физики*.– 1989.– Т. 59.– №11.– С.188-189.
- [82] Пунегов, В.И. Теория дифракции рентгеновских лучей в многослойных кристаллах в условиях полного внешнего отражения / В.И. Пунегов, А.В. Ладанов // *Поверхность. Физика. Химия. Механика*.– 1990.– №4.– С.45-50.
- [83] Punegov, V.I. X-ray diffraction under specular reflection conditions on multilayers / V.I. Punegov, A.V. Ladanov // *Twelfth European Crystallographic meeting*.– Moscow. USSR. August 20-29, 1989. / *Collected Abstracts Moscow*.– 1989.– V.3.– P.93.
- [84] Punegov, V.I. Dynamical theory of X-ray diffraction from damaged epitaxial layers with constant strain gradient. / V.I. Punegov,

- Yu.V. Vishnjakov // J.Phys. D: Appl. Phys. 1995.– Vol. 28.– №4A.– P. A184-A188.
- [85] Robinson, I.K. Crystal truncation rods and surface roughness / I.K. Robinson // Phys. Rev. B.– 1986.– Vol. 33.– №6.– P. 3830-3836.
- [86] Stepanov, S. Fitting dynamical X-ray diffraction data / S. Stepanov, R. Forrest // Journal of Applied Crystallography, 41.– 2008.– P. 958–962.
- [87] Takagi, S. A Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion / S. Takagi // Acta Cryst.– 1962.– V. 15.– №12.– P. 1311-1312.
- [88] Takahashi, T. Dynamical theory of X-ray diffraction for the study of crystal surfaces / T. Takahashi, S. Nakatani // Surface science.– 1995.– Vol. 326.– P.347-360.
- [89] Effect of surface structure on crystal-truncation-rod scattering under the Bragg condition / T. Takahashi, W. Yashiro, M. Takahasi, S. Kusano // Physical Review B.– 2000.– Vol. 62.– P. 3630-3638.
- [90] Thorkildsen, G. X-ray diffraction in perfect crystals. Rocking curves / G. Thorkildsen, H.B. Larsen // Acta Cryst.– 1999.– Vol. A55.– P. 840-854.
- [91] Vardanyan, D.M. The Dynamic Theory of X-ray Diffraction by the One-dimensional Ideal Superlattice. I. Diffraction by the Arbitrary Superlattice / D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan., H.M. Petrosyan // Acta Cryst.– 1985.– Vol. A41.– P. 212-217.
- [92] Darwin's theory for the grazing incidence geometry / W. Yashiro, Y. Ito, M. Takahasi, T. Takahashi // Surface science.– 2001.– Vol. 490.– P. 394-408.
- [93] Yashiro, W. X –ray diffraction from an atomic plan / W. Yashiro, T. Takahashi // Acta Cryst.– 2000.– Vol. A56.– P. 163-167.

- [94] Колосов, С.И. Методы численного интегрирования уравнений Такаги-Топена для кристалла прямоугольного сечения / С.И. Колосов, В.И. Пунегов // Кристаллография.– 2005.– Т.50.– №1.– С. 28-33.
- [95] Пунегов, В.И. К теории дифракции рентгеновских лучей на латеральном кристалле с упруго изогнутыми атомными плоскостями / В.И. Пунегов, С.И. Колосов, К.М. Павлов // Письма в ЖТФ.– 2006.– Т. 32.– Вып. 18.– С.65-72.
- [96] Пунегов, В.И. Теория дифракции рентгеновских лучей на неидеальном кристалле трапецеидального сечения / В.И. Пунегов, С.И. Колосов // Кристаллография.– 2007.– Т.52.– N 1.– С. 15-23.
- [97] К расчету дифракции рентгеновских лучей от многослойных латеральных кристаллических структур произвольных композиционного состава и формы. / В.И. Пунегов, А.И. Максимов, С.И. Колосов, К.М. Павлов // Письма в ЖТФ.– 2007.– Т. 33.– Вып. 3.– С.64-71.
- [98] Пунегов, В.И. Теория дифракции рентгеновского излучения от многослойного зеркала с синусоидальным поверхностным рельефом / В.И. Пунегов, А.В. Карпов, С.И. Колосов // Материалы международного симпозиума "Нанопизика и наноэлектроника Нижний Новгород.– 13-17 марта 2006 г. / ИФМ РАН.– Т. 2.– С. 392-393.
- [99] Пунегов, В.И. Теория рассеяния рентгеновских лучей на многослойной дифракционной решетке со случайным расположением штриха в периоде / В.И. Пунегов, А.В. Карпов, С.И. Колосов // Материалы международного симпозиума "Нанопизика и наноэлектроника Нижний Новгород, 13-17 марта 2006 г. / ИФМ РАН.– Т. 2.– С. 394-395.
- [100] Колосов, С.И. Динамическая теория Дарвина для латеральных структур / С.И. Колосов, В.И. Пунегов // Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электрон-

- ная микроскопия) / Материалы международного научного семинара, 22-25 мая 2006 г. / Великий Новгород, НовГУ.– С.170-172
- [101] Колпаков, А.В. Развитие оптических принципов дифракции рентгеновских лучей в непрерывно-слоистых кристаллах / А.В. Колпаков, В.И. Пунегов // Вестн. Моск. ун-та. Сер.2 Физика. Астрономия.– 1986.– Т.27.– №5.– С. 85-87.
- [102] Шустер А. Введение в теоретическую оптику / А. Шустер — Л.М.:ОНТИ, 1935.– 376 с.
- [103] De Caro, L. Double-crystal x-ray diffraction from periodically corrugated crystalline semiconductor surfaces / L. De Caro, P. Sciacovelli, L. Tapfer // Appl.Phys.Lett.– 1994.– Vol. 64.– №1.– P.34-26.
- [104] Пунегов, В.И. Кинематическая теория дифракции на дефектной эпитаксиальной пленке с постоянным градиентом деформации / В.И. Пунегов // ЖТФ.– 1991.– Т.61.– №12.– С.71.
- [105] Strain and composition in SiGe nanoscale islands studied by x-ray scattering / Th. Wiebach [et al.]. // Phys. Rev. B.– 2000.– V.61.– P.5571-5578
- [106] Градштейн, И.С Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений И.С. Градштейн, И.М. Рыжик М., Физматгиз, 1963.– 1100 стр.
- [107] Дифракционная решетка с фазосдвигающим металлическим слоем / Д.В. Иржак [и др.]. // Нанопфизика и наноэлектроника, Н. Новгород, ИФМ РАН.– 2011.– Т.2.– С. 602.
- [108] Erko, A. Investigation of the properties of Bragg-Fresnel gratings / A. Erko, A. Firsov // Proc. SPIE.– 2004.– 5539.– P. 148.
- [109] Пунегов, В.И. Особенности рентгеновской дифракции на кристалле с металлической фазосдвигающей решеткой / В.И. Пунегов, Д.В. Иржак, Д.В. Рощупкин // Рентгеновская оптика, ИПТМ РАН.– 2012.– С. 96.