

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

На правах рукописи

СИВКОВ Данил Викторович

**ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ
В КРИСТАЛЛАХ С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ**

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

Научный руководитель
д. ф.-м. н., проф.
Пунегов Василий Ильич

Сыктывкар – 2015

Оглавление

| | |
|--|-----|
| Введение | 4 |
| Глава 1. Литературный обзор | 11 |
| 1.1. Физические основы формирования систем с КТ | 11 |
| 1.2. Методы расчета упругих деформаций в кристалле с КТ | 24 |
| 1.3. Развитие теории рассеяния РЛ в кристаллах с дефектами | 31 |
| 1.4. Трехосевая рентгеновская дифрактометрия кристаллов | 46 |
| Глава 2. Диффузное рассеяние РЛ в кристалле с КТ сфероидальной формы. Аналитическое решение | 59 |
| 2.1. Поле деформаций от КТ сфероидальной формы | 59 |
| 2.2. Аналитическое решение для диффузного рассеяния в кристалле со сфероидальными КТ | 66 |
| 2.3. Анализ теоретических расчетов карт распределения интенсивности диффузного рассеяния | 72 |
| Глава 3. Диффузное рассеяние РЛ в кристалле с КТ. Метод функции Грина | 74 |
| 3.1. Метод функции Грина для расчета поля упругих смещений от массива КТ | 74 |
| 3.2. Фурье-преобразование характеристической функции КТ различной формы | 82 |
| 3.3. Диффузное рассеяние в кристалле с массивом КТ | 87 |
| 3.4. Численное моделирование диффузного рассеяния на основе метода функции Грина | 91 |
| 3.5. Сравнение двух подходов | 101 |

| | |
|---|------------|
| Глава 4. Учет пространственного распределения КТ | 107 |
| 4.1. Основы паракристаллической модели распределения КТ | 108 |
| 4.2. Вертикальная корреляция КТ | 114 |
| 4.3. Численное моделирование с учетом пространственной корреля- ции КТ | 119 |
| Глава 5. Основные результаты и выводы | 128 |
| Список литературы | 130 |

Введение

Актуальность темы

Наблюдающийся в настоящее время стремительный прогресс полупроводниковых технологий тесно связан с развитием нанофизики и наноэлектроники. Современные технологии изготовления наноструктур оперируют размерами, которые сравнимы с расстояниями между атомами. Широкий спектр применения таких структур ставит перед исследователями новые задачи по выращиванию и исследованию строения этих объектов. Следовательно, развитие неразрушающих методов тестирования и ростового контроля наноструктур является актуальной задачей.

Наноструктурированные материалы представляют собой сложные для изучения объекты. Сложность заключается в малых размерах структурных элементов и, как следствие, в специфике их физических и химических свойств, в неоднородности гетерограниц, в присутствии разупорядоченных и аморфных составляющих. При этом первостепенное значение имеет неразрушающий контроль качества изготовления наноструктурированных материалов. Это связано с получением достоверной и максимально точной информации об атомно-кристаллической структуре объектов, их форме и плотности, общем состоянии интерфейса, а также о распределении упругих деформаций кристаллической решетки в матрице. На этом этапе важным фактором является развитие теоретических моделей и связанных с ними методов анализа экспериментальных данных, полученных с использованием высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии (ВРД). Многие традиционные методы изучения кристаллических структур не применимы для количественного анализа наноразмерных систем. Часто используемые методы электронной микроскопии являются разрушаемыми и локальными, то есть позволяют исследовать

весьма малую часть образца.

Эффективным методом исследования наноразмерных кристаллических структур является метод ВРД. Применение аппаратуры с высоким угловым разрешением, а также использование новых методов регистрации рентгеновского излучения делает ВРД одним из самых перспективных и информативных методов исследования нанообъектов [1]. Ее отличительными особенностями являются экспрессность измерений, отсутствие необходимости в специальной подготовке образцов, высокая прецизионность в определении параметров кристаллической структуры и чувствительность к наличию различного рода структурных искажений.

По этой причине рентгеновская дифрактометрия стала активно использоваться для исследования объектов квантовой инженерии, которые имеют характерные размеры порядка нескольких нанометров. В центре внимания оказались неоднородные полупроводниковые структуры (гетероструктуры), ограничивающие движение электрона за счет образования потенциального барьера на границе контакта двух полупроводников (гетеропереходе), с разными уровнями валентности и проводимости в области изгиба энергетических зон. Последовательный рост двух гетеропереходов приводит к образованию так называемой квантовой ямы (КЯ). В такой КЯ в зависимости от размеров возникает один или несколько уровней энергии. Если ограничить движение двумерных электронов по оставшимся двум направлениям, формируется структура, получившая название квантовой точки (КТ) [2]. Метод высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии был успешно использован для исследования Ge/Si [3], InAs/GaAs [4], PbSe/PbEuTe [5] и EuTe/SnTe citeDiaz01 многослойных систем с массивами КТ.

При создании наноразмерных полупроводниковых приборов, содержащих КТ, неизбежны искажения кристаллической решетки совершенного кристалла под воздействием напряжений, возникающих на границе КТ/среда

основной матрицы, что существенным образом влияет на их физические свойства и границы применимости. Локальные нарушения кристаллической матрицы содержат уникальную информацию о структуре, форме и состоянии границ КТ.

Среди подобных объектов упорядоченные массивы полупроводниковых КТ, сформированных в объеме другого полупроводникового материала, привлекают особое внимание и имеют широкий спектр применения в нано- и оптоэлектронике, включая лазеры, солнечные элементы, транзисторы, эмиттеры, инфракрасные фотоприемники и т.д. [7]. При этом механические напряжения и дефекты в полупроводниковых наноструктурах оказывают определяющее влияние на их уникальные функциональные свойства и вместе с тем тесно связаны со структурой одиночных КТ, а также степенью упорядоченности их в кристалле. Вследствие этого получение упорядоченных ансамблей КТ требует разработки методов расчета полей напряжений и энергий таких наноструктур, теоретического анализа механизмов их самоорганизации, а также построения моделей КТ с учетом композиционного состава и степени неоднородности. Несмотря на малый размер КТ, формируемые ими упругие поля деформаций кристаллической решетки можно эффективно рассчитывать в рамках формализма классической теории упругости с использованием не только различных подходов, основанных на численных методах, таких как метод конечных элементов [8, 9], но и аналитических решений, применяя как метод функции Грина [10–12], так и аналогии между задачами электростатики и теории упругости [13]. Поля деформации, возникающие в матрице от упорядоченного массива КТ, является эффективным источником информации о форме, размерах и степени упорядоченности КТ. Эта информация может быть с высокой достоверностью получена из экспериментальных измерений углового распределения интенсивности рассеяния в виде карт в обратном пространстве (reciprocal space mapping – RSM). Следует отметить, что

для количественного анализа экспериментальных данных помимо таких параметров, как размеры, форма КТ и возникающие вокруг них упругие деформации среды [14], необходимо учитывать и пространственное расположение КТ в вертикальном [15] и латеральном направлениях [16].

Цель работы

Целью настоящей диссертационной работы является развитие теории диффузного рассеяния рентгеновских лучей (РЛ) от кристаллической среды с массивом КТ с учетом как структурных параметров самих КТ, так и их пространственного расположения в рамках статистической теории дифракции.

Научная новизна

1. Разработан метод расчета полей упругих атомных смещений от КТ сфероидальной формы с использованием аналогии между задачами теории упругости и электростатики. Впервые получено аналитическое выражение для расчета интенсивности диффузного рассеяния РЛ в виде мультипольного разложения.
2. С использованием функции Грина разработан метод расчета полей упругих атомных смещений от КТ, имеющих форму сфероида, цилиндра, усеченного конуса и усеченной пирамиды в кубическом кристалле. Впервые показано влияние размеров, пространственной корреляции КТ, а также рассогласования параметров решетки КТ/матрица на характер диффузного рассеяния.
3. Проведено сравнение разработанных методов расчета полей упругих атомных смещений для КТ сфероидальной формы. Показано, что, несмотря на принципиальные различия, оба подхода дают совпадающие результаты.

4. Проведен количественный анализ структурных характеристик сверхрешетки InGaAs/GaAs с КТ InAs на основе углового распределения диффузного рассеяния вблизи узла обратной решетки (004) с учетом пространственной корреляции КТ. Определены параметры исследуемой структуры (средний размер КТ, среднее расстояние между КТ в вертикальном направлении и латеральной плоскости, рассогласование решетки КТ/матрица, латеральный и вертикальный порядок в расположении КТ в сверхрешетке).

Практическая значимость

Результаты диссертации могут быть использованы для неразрушающего количественного анализа полупроводниковых структур с КТ. Такой анализ позволяет получать информацию о форме, размерах, объемной и поверхностной плотности КТ, а также их пространственной корреляции.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Теория диффузного рассеяния от полупроводниковых структур со сфероидальными КТ в рамках метода мультипольного разложения упругих атомных смещений.
2. Теория диффузного рассеяния от систем с массивами КТ с использованием метода функции Грина для расчета упругих деформаций.
3. Численное моделирование углового распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве от полупроводниковых структур с КТ в форме сфероида, цилиндра, усеченного конуса и усеченной пирамиды.

4. Анализ диффузного рассеяния от КТ разной формы с учетом пространственной корреляции в их расположении.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на XIII Международном симпозиуме «Наноп физика и нанoeлектроника» (Россия, Н. Новгород, 2009), рабочем совещании «Рентгеновская оптика – 2010» (Россия, Черноголовка, 2010), V Международном научном семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных» (Россия, Великий Новгород, 2011), The Youth International School-Conference «Modern Methods of Diffraction Data Analysis and Topical Problems of X-ray Optics» (Россия, Санкт-Петербург, 2012), XVII Международном симпозиуме «Наноп физика и нанoeлектроника» (Россия, Н. Новгород, 2013), VI Международном научном семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных» (Россия, Великий Новгород, 2013), в Международной балтийской школе по физике твердого тела (Россия, Калининград, 2013), на конференции «Рентгеновская оптика – 2014» (Россия, Черноголовка, 2014), а также семинарах отдела математики Коми научного центра Уральского отделения РАН.

Диссертационная работа была выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты №10-02-00445-а, №12-02-00088-а, №13-02-00272-а и №14-02-31778), программы Президиума РАН 12-П-1-1014 и программы фундаментальных исследований УрО РАН 12-У-1-1010.

Публикации

Материалы диссертации опубликованы в 15 печатных изданиях, 5 из которых представлены в журналах, рекомендованных ВАК, 8 – в тезисах докладов.

Структура диссертации

Первая глава посвящена обзору литературы по проблеме исследования кристаллов с КТ методами РД. Основные оригинальные результаты представлены в II – IV главах. Во второй главе проведен анализ диффузного рассеяния РЛ в кристалле со скрытыми некоррелированными КТ сфероидальной формы. Получено аналитическое решение для диффузного рассеяния. Представлены результаты расчетов карт распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве. В третьей главе приведены основные уравнения для поля упругих смещений от массива скрытых некоррелированных КТ в кристалле в рамках формализма метода функции Грина, а также результаты численного моделирования диффузного рассеяния. Проведен сравнительный анализ двух разработанных подходов к расчету интенсивности диффузного рассеяния. В четвертой главе содержится описание подхода, позволяющего проводить учет пространственного распределения КТ. Проведено сравнение результатов численного моделирования рентгеновской дифракции на сверхрешетке $\text{GaAs}(001)\text{-Al GaAs-}\{\text{InAs QDs-GaAs}\}_{\times 20}\text{SL}$ с экспериментальными данными. В заключении представлены основные результаты работы.

Глава 1

Литературный обзор

1.1. Физические основы формирования систем с КТ

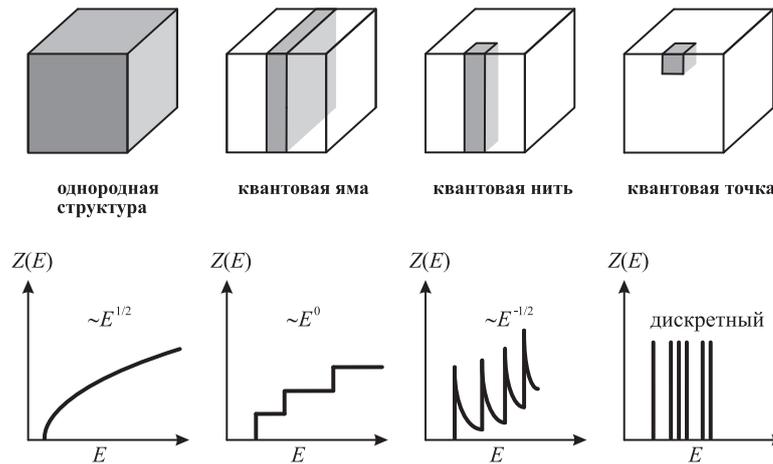


Рис. 1.1. Различные типы квантово – размерных структур и соответствующие спектры плотности состояний

Простейшей моделью системы, ограничивающей движение частицы, является квантовая яма (КЯ) с бесконечно высокими барьерами в одном измерении. В реальных квантовых ямах, построенных с использованием полупроводниковых гетероструктур, конечная высота барьера приводит к возникновению дискретных состояний для носителей заряда с энергией, меньше потенциального барьера, но при этом носители с большими энергиями могут свободно передвигаться [17, 18]. Дальнейшее уменьшение размерности на единицу приводит к созданию квантовых нитей (КН) (движение электронов и, соответственно, «дырок» ограничено в двух направлениях) [17]. Ограничение движения по всем трем направлениям приводит к образованию квантовых точек (КТ) [19].

При последовательном ограничении направлений движения заряда элек-

тронная структура преобразуется из непрерывных зон в дискретные энергетические уровни (рис. 1.1). В массивных полупроводниках плотность электронных состояний (ПЭС) увеличивается с ростом энергии от границы запрещенной зоны пропорционально $E^{1/2}$. В КЯ возможные энергетические состояния квантуются в одном направлении, поэтому ПЭС ведет себя как ступенчатая функция (зависимость E^0). Квантование в двух направлениях (для КН) приводит к изменению ПЭС пропорционально $E^{-1/2}$, и в конечном счете для КТ возможные энергии полностью квантуются, что соответствует дискретной ПЭС [20]. Из-за этих квантованных энергетических состояний КТ были названы «искусственными атомами» [21]. В отличие от отдельных атомов, энергетический спектр КТ может быть подобран искусственно путем регулирования ее геометрических размеров, формы и величины удерживающего потенциала.

Если размеры наноструктуры по крайней мере в одном измерении меньше диапазона длины волны де Бройля для носителей заряда, свободное движение носителей заряда в кристалле (в соответствии с зонной структурой) нарушается и квантовые эффекты для этой структуры становятся доминирующими [22]. Длина волны де Бройля λ_B зависит от эффективной массы носителей заряда m_{eff} и температуры T [23]:

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2m_{eff}k_B T}}.$$

При комнатной температуре длина волны де Бройля не превышает 30 нм для электронов в GaAs [19]. А, например, для полупроводниковой наноструктуры, представляющей собой КТ SiGe в Si, максимальный диаметр КТ для наблюдения размерного квантования составляет примерно 7 нм [24]. Таким образом, характерные размеры наноструктур составляют не более нескольких десятков нм.

Для максимально эффективной работы устройств на основе КТ при нор-

мальных условиях помимо необходимости того, что (1) КТ должны иметь малый размер, чтобы локализация энергетических состояний была высокой, (2) массив КТ должен быть достаточно однородным, с высокой плотностью распределения КТ, и (3) система не должна содержать дефектов, таких как дислокации [25]. Эти условия, как правило, труднодостижимы, поэтому уделяется много внимания разработке методик получения КТ, удовлетворяющих указанным требованиям.

Выращивание КТ является одной из быстроразвивающихся областей. Первые попытки изготовления КТ проводились еще в начале 1980-х годов [26]. Принципиально можно выделить два пути: (1) химический синтез наноразмерных полупроводниковых кристаллитов [27] и (2) методы основанные на процессе эпитаксиального роста и обработке полупроводниковых гетероструктур. В рамках второго подхода изначально усилия были сосредоточены на селективном травлении структур с КЯ [26]. Сюда же входят методы селективного перемешивание КЯ [28], а также использование стрессовых факторов [29]. Помимо этого применялся рост на профилированных подложках [30] и на сколах [31]. Также в рамках этого подхода одной из возможностей для создания КТ является структурирование после роста на литографии с использованием химического травления (см., например, [32, 33]). Методы, использующие химическое травление, довольно сложны и дорогостоящи, часто страдают недостаточным разрешением и могут вызывать повреждение гетерограницы в процессе травления. Помимо указанных методов для изготовления наноструктур с высокой точностью применялось прямое манипулирование атомами с использованием сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) [34, 35]. КТ (ограничиваясь только одним типом носителей) также создавались путем применения модулированных электрических полей к двумерным (2D) газам-носителям [36].

Качественный прорыв в данной области связан с использованием эф-

фактов самоорганизации полупроводниковых наноструктур в гетероэпитаксиальных полупроводниковых системах. Главной причиной образования самоорганизованных КТ является феномен релаксации напряжений в кристаллической структуре. Напряжения могут быть частично сняты перестроением атомной структуры поверхности, перемешиванием атомов, возникновением морфологической неустойчивости, образованием островков, формированием гетероперехода, возникновением дислокаций и т.д.

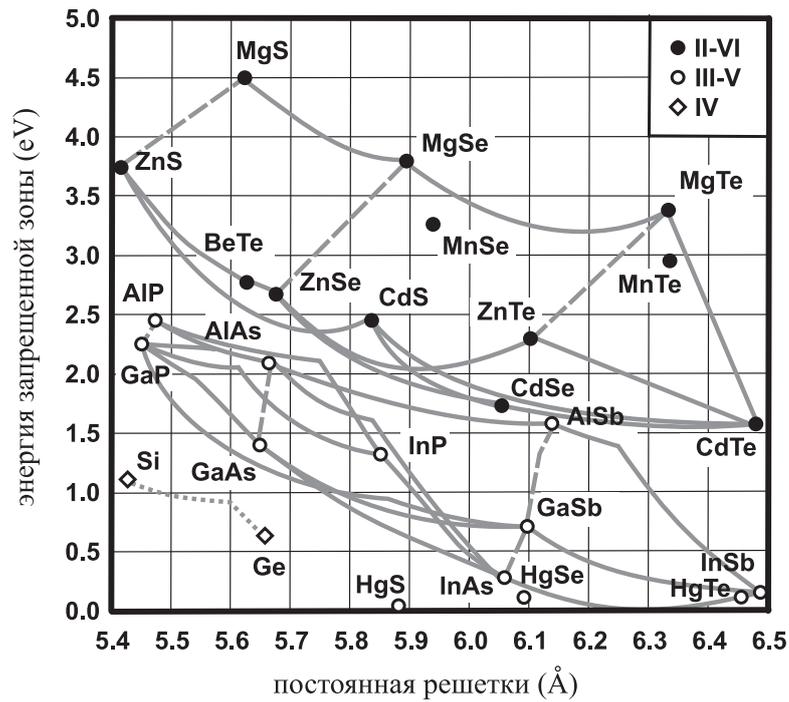


Рис. 1.2. Связь энергии запрещенной зоны и постоянной решетки для полупроводников IV, III-V и II-VI групп. Кривые, соединяющие полупроводниковые бинарные соединения, показывают все возможные тройные сплавы

Метод самосборки во время гетероэпитаксиального роста полупроводников в течение последних 20 лет наиболее выгодно показал себя для изготовления больших ансамблей КТ. Успех этого подхода заключается в удачном сочетании двух фундаментальных физических свойств большинства технологически важных полупроводниковых материалов. Внутри каждой из групп (IV, III – V и II – VI) полупроводников ширина запрещенной энергетической

зоны материала тем ниже, чем больше его постоянная решетки. Это видно из рис. 1.2 для полупроводников, принадлежащих ко всем трем группам [37]. В связи с этим для определенных комбинаций полупроводниковых материалов выполняются два основных условия, необходимые для гетероэпитаксиальной самосборки КТ: (1) КТ должны быть выполнены из материала с более низкой запрещенной зоной и встроены в материал с более высокой запрещенной зоной (энергетическое условие) и (2) образующий КТ материал должен иметь постоянную решетки больше, чем у материала матрицы, в которую будут встроены КТ. Это условие является необходимым, так как формированием островков в гетероэпитаксии движет наличие деформации сжатия, которая накапливается во время гетероэпитаксиального роста. Самоорганизация может также возникать в металлах и молекулярных веществах [38].

К настоящему времени разработаны различные методы для организации регулярных ансамблей КТ, как с использованием спонтанной, так и принудительной самоорганизации на природных [39–42] или предварительно искусственно структурированных [43–45] подложках. При создании КТ основное внимание уделяется тщательному выбору условий роста для достижения более высокой степени латеральной упорядоченности и меньшего разброса по размерам.

Понятие эпитаксии впервые в 1928 году ввел Royer [46], оно означает рост кристаллического слоя на поверхности (epi) кристаллической подложки, где ориентация подложки определяет порядок (taxis) ориентации осаждающегося слоя. Если подложка и осаждаемый слой состоят из одного материала, процесс роста называется гомоэпитаксией. Если они отличаются по своему составу и/или величине постоянной решетки, используется термин гетероэпитаксия. Когда постоянная решетки подложки отличается от постоянной осаждаемого материала, деформации накапливаются в растущем эпитаксиальном слое (далее – эпи-слой). Это происходит потому, что эпи-слой иска-

жается в начальной стадии роста, чтобы согласоваться с постоянной решетки подложки. Характер деформации определяется несоответствием решеток подложки и слоя (также называемым рассогласованием решетки), задаваемым выражением

$$m = (a_{epi} - a_{sub})/a_{sub},$$

где a_{epi} и a_{sub} – постоянные решеток эпи-слоя и подложки соответственно. Положительное (отрицательное) значение m означает деформацию сжатия (растяжения) внутри растущего эпи-слоя. Эта накопленная упругая энергия приводит к самоорганизации различных наноструктур.

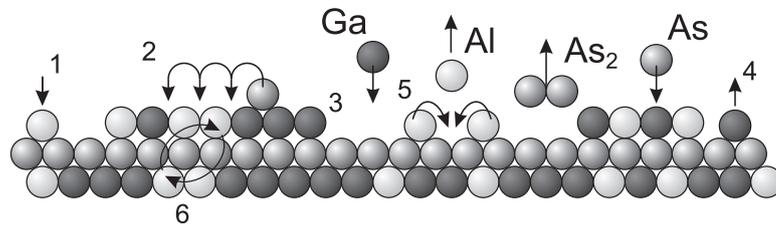


Рис. 1.3. Элементарные процессы на поверхности роста при эпитаксиальном росте (на примере формирования структуры GaAs/AlAs). 1 – адсорбция атомов на поверхности, 2 – миграция адсорбированных атомов, 3 – встраивание адсорбированных атомов в решетку, 4 – термическая десорбция, 5 – образование поверхностных зародышей, 6 – взаимная диффузия

Некоторые элементарные процессы, происходящие во время эпитаксии, представлены на рис. 1.3. Они включают в себя адсорбцию осаждаемого материала или хемосорбцию молекул прекурсора с последующей диссоциацией (для химического осаждения из газовой фазы), диффузию атомов на подложке, частичную десорбцию подложки и образование зародышей в энергетически выгодных областях на поверхности в виде ступеней и площадок или в качестве нового центра нуклеации. Реальные физические процессы, лежащие в основе явления эпитаксиального роста, являются гораздо более сложными даже для случая гомоэпитаксии (см., например, [47] и ссылки в ней), а тем

более гетероэпитаксии [19, 48, 49].

Наиболее распространенными эпитаксиальными методами являются: метод жидкофазной эпитаксии [50], гидридной газофазной эпитаксии [51], газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений [52], химического осаждения из паровой фазы в сверхвысоком вакууме [53], химической лучевой эпитаксии [54] и молекулярно-лучевой эпитаксии [55].

В зависимости от величины деформации рост может привести к различным морфологиям поверхности. Можно выделить три основных режима роста (рис. 1.4).

(1) Режим роста Франка – Ван-дер-Мерве [56] представляет собой процесс, при котором слои растут равномерно друг над другом (двумерный рост). Когда сумма поверхностной свободной энергии для эпитаксиального слоя γ_s и свободной энергии интерфейса γ_{sf} меньше свободной энергии поверхности подложки γ_f , для эпитаксиального слоя энергетически выгодно полностью покрыть поверхность. В этом случае справедливо

$$\gamma_s + \gamma_{sf} < \gamma_f.$$

Если постоянная решетки эпи-слоя не соответствует решетке подложки, двумерный рост может продолжаться, так как определенное количество напряжений всегда может присутствовать в эпи-слое. Затем происходит упругая деформация эпи-слоя, в результате чего его постоянная решетки в плоскости, перпендикулярной направлению роста, принимает значение постоянной решетки подложки. Слои, испытывающие деформации сжатия ($m > 0$), растягиваются в направлении роста, в то время как слои, испытывающие деформации растяжения ($m < 0$), сжимаются в направлении роста. Накопленная энергия деформации возрастает линейно с толщиной осажденного слоя, и при некоторой критической толщине она не может больше вмещать напряжения за счет упругой деформации. В этом случае напряжение может быть снято

через формирование дислокаций несоответствия в результате пластической деформации. Такая ситуация характерна для толстых слоев с небольшим несоответствием решеток.

(2) Для комбинации материалов с более высоким значением несоответствия решеток один из путей релаксации – режим роста Странского-Крастанова [57], в случае, когда сумма поверхностной свободной энергии и свободной энергии интерфейса примерно равна величине свободной энергии подложки. Несопответствие решеток КТ и матрицы при этом обычно составляет несколько процентов. Слой, который выращивается в двумерном режиме, испытывает фазовый переход к трехмерному росту, поскольку размещение упругой деформации в псевдоморфной пленке меняет баланс между свободной энергией поверхности и интерфейса в процессе роста. Это приводит к образованию когерентных (бездислокационных) островков на поверхности тонкого смачивающего слоя:

$$\gamma_s + \gamma_{sf} \approx \gamma_f.$$

(3) В случае, когда свободная энергия поверхности эпи-слоя и свободная энергия интерфейса в сумме больше свободной энергии поверхности подложки, атомам осаждаемого материала энергетически более выгодно образовывать трехмерные кластеры на её поверхности. Такой процесс называется ростом Волмера-Вебера [58], он, как правило, наблюдается для напряженных слоев с несоответствием решеток $> 10\%$.

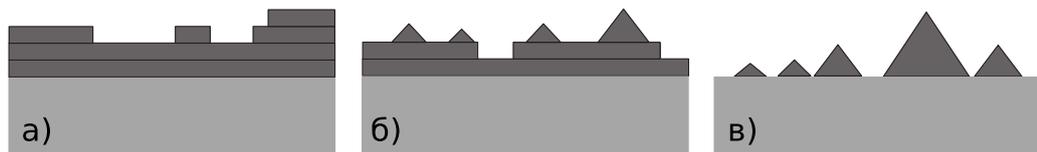


Рис. 1.4. Режимы роста КТ: а) Франка – Ван-дер-Мерве, б) Странского-Крастанова, в) Волмера-Вебера

Первое наблюдение формирования самоорганизующихся островков (част-

ный случай роста Странского-Крастанова) было сделано в 1985 году [59]. При эпитаксии осаждение материала островка начинается с полного смачивания подложки. Продолжая осаждение, накопленная энергия деформации линейно возрастает с толщиной смачивающего слоя. Когда толщина смачивающего слоя превышает толщину его равновесного состояния, система входит в метастабильное состояние. Существует потенциальная возможность формирования островков, но необходимо преодолеть энергию, запускающую процесс их образования. Когда достигнута критическая толщина смачивающего слоя начинается зарождение островков и смачивающий слой начинает распадаться. Мобильные адатомы (атомы, адсорбированные на поверхности кристалла), отделившиеся от разрушающегося смачивающего слоя, соединяются с адатомами, осажденными на поверхности, формируя ядра будущих островков. Когда эти ядра становятся больше определенного критического размера, определяемого энергиями поверхности и интерфейса и силой связи, наступает фаза устойчивого роста.

Для формирования КТ самоорганизованные островки должны быть покрыты материалом подложки (или каким-либо другим материалом с более высоким запрещенным барьером). Покрытие также оказывает сильное влияние на форму островков [60–62]. Основной эффект заключается в вертикальном усечении и боковом расширении островков. В крайнем случае островок «коллапсирует» полностью в неоднородную структуру, подобную КЯ [61]. Явления вертикального усечения и сопутствующего латерального расширения островков непосредственно наблюдались при помощи методов сканирующей туннельной микроскопии (scanning tunneling microscopy, STM) и атомной силовой микроскопии (atomic force microscopy, AFM) [61, 62].

В частности, для структур InAs/GaAs усечение самоорганизованных островков, вызванное покрытием, объясняется следующим образом [63, 64]. Во время покрытия рост GaAs возникает преимущественно в областях между

островками InAs. Это происходит потому, что GaAs невыгодно расти на поверхности или в непосредственной близости от ненапряженных островков InAs в связи с большим значением рассогласования решетки. Поэтому адатомы, осажденные недалеко от островков, быстро мигрируют в области между ними (рис. 1.5(а)). В процессе покрытия области вокруг островков InAs в конечном итоге заполняются, в связи с чем деформация сжатия накапливается на границе островков, где вызывает латеральную сегрегацию в системе в непокрытых областях островков (рис. 1.5(б)). Сегрегированные атомы In затем мигрируют на большие расстояния на поверхности GaAs и образуют сплошной слой. Это приводит к наблюдаемому усечению/разрушению островков.

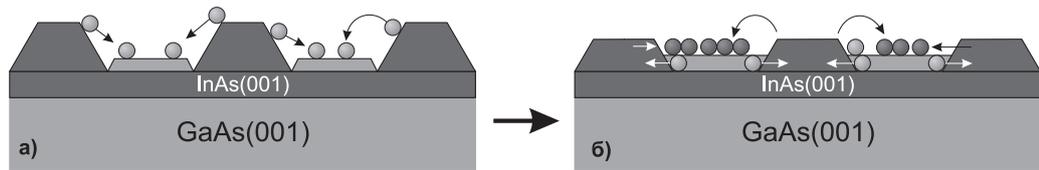


Рис. 1.5. Иллюстрация (а) роста GaAs между островками в начальной стадии покрытия и (б) сегрегации In и взаимной диффузии In и Ga на границе островков в последней стадии

После частичного покрытия GaAs энергия эпи-системы понижается, тогда атомы In отделяются от островков и образуют сплошной слой (второй смачивающий слой) на поверхности GaAs. Это происходит потому, что InAs по природе имеет тенденцию покрывать поверхности GaAs (001) (из-за более низкой поверхностной энергии InAs (001) по сравнению с поверхностной энергией GaAs (001) [65]). Кроме того, возможность релаксации деформации путем легирования приводит к наличию примеси Ga в островках, и корректнее говорить о конечной структуре как о содержащей КТ $\text{InGa}_{1-x}\text{As}_x$.

Важным фактором, влияющим на оптические характеристики самоорганизующихся КТ, является однородность их размера, формы и состава. На размер растущего трехмерного островка оказывает влияние область, из кото-

рой островок «собирает» адатомы. Таким образом, однородность островков по размеру усиливается, когда островки периодически расположены на ростовой поверхности. Как правило, межплоскостное пространственное распределение гетероэпитаксиальных самоорганизующихся островков в отдельном островковом слое лишено дальнего порядка. Однако при последовательном выращивании нескольких слоев таких островков (в КТ-сверхрешетках) положение островков в последовательных слоях, как правило, демонстрирует определенную корреляцию. Это, в частности, справедливо для КТ-сверхрешеток InAs/GaAs (001) и Ge/Si (001), где островки нового слоя зарождаются непосредственно над островками предыдущего слоя, как показано на рис. 1.6.

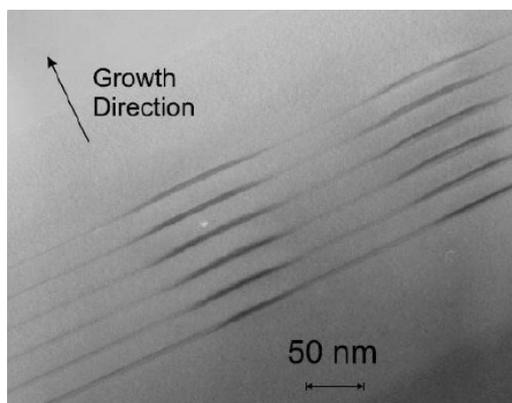


Рис. 1.6. Профиль гетероструктуры, состоящей из самоупорядоченных стеков КТ Ge, в многослойной структуре $6 \times (8 \text{ ML Ge}/30 \text{ nm Si})$, выращенной на (001) Si-подложке, полученный методом X-ТЕМ [66].

Вертикальная корреляция происходит также в результате релаксации упругой деформации в островках. Например, в КТ-сверхрешетке Ge/Si (001) последовательные слои островков Ge разделены слоями Si (см. рис. 1.6). В непосредственной близости от ненапряженных островков Ge промежуточный слой Si испытывает упругое напряжение (растяжения). С другой стороны, в областях, удаленных от островков, верхний слой является ненапряженным или даже слабо сжатым.

В дальнейшем деформация в развивающемся островковом слое Ge не является деформацией равномерного сжатия, но представляет собой локальные минимумы в положениях прямо над скрытыми островками предыдущего слоя. Tersoff *et al.* исследовали эволюцию КТ-сверхрешетки с двумя островковыми слоями в рамках теории упругости [67]. В модели Терсоффа подробно рассмотрены вертикальная корреляция и наведенная латеральная упорядоченность островков. Однако эта модель не принимает во внимание случай невертикальной, или наклонной, корреляции. Наклонная корреляция была изучена Springholz *et al.* [68–70]. Согласно их модели все формы меж- и внутриплоскостного упорядочения самоорганизующихся островков можно объяснить с учетом упругой анизотропии решетки-матрицы, в которой расположены островки.

Методы, традиционно используемые при исследовании КТ, представляют собой различные виды микроскопии и метод ВРД. Микроскопию используют для изучения непокрытых КТ (островков), к ней относятся такие методы, как AFM [71] и STM [72]. AFM является одним из ведущих инструментов для получения изображений поверхности, измерения и манипуляции с веществом на наноуровне. Информацию при этом получают, сканируя поверхность при помощи механического зонда и измеряя силу, возникающую между зондом и поверхностью согласно закону Гука. Метод STM базируется на квантовомеханическом эффекте туннелирования через барьер в вакууме между зондом и поверхностью образца. Эти методы также можно использовать для анализа сечений структур со скрытыми КТ в режиме сканирования поперечного сечения (cross-sectional, X-AFM, X-STM), в частности, этими методами эффективно исследовались КТ InGaAs в матрице GaAs [73–75]. Данные методы наряду с методом высокоразрешающей трансмиссионной электронной микроскопии (high resolution transmission electron microscopy, TEM) [76, 77] позволяют напрямую получать информацию о структуре скрытых КТ, такую, как

распределение концентраций материала КТ в структуре матрицы.

К недостаткам указанных методов, прежде всего, следует отнести необходимость в разрушении образца (поскольку исследуется скол кристаллической структуры), при этом невозможен точный выбор сечения, для одного объекта (в данном случае КТ или их массив) можно получить только одно сечение. Поэтому для большей достоверности данных и эффективной интерпретации результатов исследований надо использовать большое количество образцов. Получаемый профиль объекта точно соответствует его форме и структуре в выбранной плоскости, таким образом, исследователь имеет возможность напрямую «заглянуть» внутрь структуры.

В свою очередь, методы анализа при помощи ВРД более трудоемки и требуют применения сложного математического аппарата и обширной теории. Суть этих методов состоит в необходимости решать обратную задачу по определению параметров структуры из данных по угловому распределению интенсивности рассеяния РЛ, которые зависят от большого числа параметров (распределение полей упругих деформаций, форма и размеры КТ, распределение концентрации вещества КТ и матрицы, взаимное расположение КТ, флуктуация размеров КТ). Подробнее на теории рассеяния РЛ и применении их к структурам с КТ мы остановимся в разделе 2.1.

1.2. Методы расчета упругих деформаций в кристалле с КТ

Существует большое количество методов расчета распределения деформаций в кристаллической среде, содержащей КТ [78]. Однако можно выделить два принципиальных подхода: (1) атомистический, заключающийся в описании состояния каждого атома в кристалле, (2) континуальный, состоящий в рассмотрении кристалла в качестве упругой сплошной среды (СС).

Примером первого подхода может служить метод, использующий модель валентно-силового поля (ВСП) [79, 80]. В его основе лежит задание начального энергетического потенциала в каждой точке деформированной кристаллической среды как функции координат атомов. Затем позволяют положениям атомов смещаться до достижения минимума потенциала (ненапряженное состояние решетки). К атомистическим относится и метод молекулярной динамики (МД) [81], в котором каждой частице приписывается масса, задаются динамические начальные условия, а также начальная величина межатомного потенциала и производится расчет межатомных сил. Деформации пересчитываются многократно с изменением времени с фиксированным шагом до тех пор, пока изменение между последующими шагами по времени не будет пренебрежимо мало.

Атомистический подход обладает рядом преимуществ, как то: (1) высокая точность расчетов для всех областей, включая углы и грани КТ, где концентрация атомов мала (за счет учета каждого атома); (2) начальные положения атомов могут быть выбраны произвольно, так что КТ может обладать любой геометрией и составом; (3) данный подход является более строгими в сравнении с континуальным, что особенно критично для определения деформации на границе матрицы и КТ.

С другой стороны, методы в рамках атомистического подхода требо-

вательны к вычислительным ресурсам, поскольку, чтобы обеспечить хорошую точность расчетов, необходимо учесть, что система содержит порядка нескольких миллиардов атомов. Кроме того, их принципиальное отличие состоит в невозможности получить аналитическое решение.

Второй подход был впервые предложен Эшелби [82]. Он предполагает, что деформации, испытываемые КТ и материалом матрицы, малы, что позволяет применять обычную линейную теорию упругости второго порядка. В рамках этого подхода включения в нанокompозитах описываются с помощью тензора ε_{ij}^* , отвечающего за собственные (неупругие) деформации, которые связаны с несоответствием кристаллических решеток включения и матрицы. Полная деформация e_{ij} в материале представима в виде суммы упругой и собственной деформации $e_{ij} = \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ij}^*$ [83]. При наличии в материале (матрице) включения, занимающего трехмерную область Ω , собственную деформацию можно представить в виде $\hat{\varepsilon}_{ij}^* = \varepsilon_{ij}^* \chi(\mathbf{r})$, где $\chi(\mathbf{r}) = 1$, если точка \mathbf{r} расположена в области Ω , и $\chi(\mathbf{r}) = 0$ в противном случае. Тогда напряжения в кристалле σ_{ij} выражаются через e_{ij} с помощью закона Гука:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} = C_{ijkl} (e_{kl} - \hat{\varepsilon}_{kl}^*). \quad (1.1)$$

Компоненты тензора деформации e_{ij} выражаются через компоненты вектора смещения u_i по формуле

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.2)$$

Для нахождения неизвестных u_i уравнения (1.1) – (1.2) следует дополнить граничными условиями относительно неизвестных компонент вектора смещений.

Упругие поля деформаций в кристалле, содержащем включения, рассчитываются с помощью аналитических (метод функции Грина [10–12], метод поверхностных петель [85], метод бесконечно малых включений [86–88],

интегрирование уравнений равновесия [89]) и численных методов (метод конечных элементов (МКЭ) [9, 80, 90–93], метод граничных интегралов [94], метод конечных разностей [95]).

В отличие от атомистических методов, континуальные более быстрые и позволяют получить решение для систем с большим количеством КТ [10]. Однако при использовании этих методов не учитывается разница упругих констант матрицы и КТ. Особенно это отражается на расчете деформации внутри КТ. Также ограничением этих методов является необходимость рассматривать бесконечный [10] или полубесконечный [84] кристалл.

Рассмотрим два наиболее широко используемых метода для реализации подхода СС: метод конечных элементов, предполагающий дискретизацию пространства, и аналитический метод функции Грина.

1.2.1. Метод конечных элементов

Интенсивная разработка метода конечных элементов [96] была инициирована появлением вычислительных машин в начале 50-х годов прошлого века. Ключевая идея метода заключается в следующем: сплошная среда моделируется путем разбиения ее на области, взаимодействующие между собой только в узловых точках, в каждой из которых поведение среды описывается с помощью отдельного набора выбранных функций, представляющих напряжения и смещения в указанной области. Поиск решения для каждой отдельной области осуществляется посредством наложения граничных условий и за счет обеспечения непрерывности решения на границах ячеек сетки.

Для сокращения времени вычислений метод позволяет в некоторых случаях использовать геометрическую симметрию задачи. Кроме того, к плюсам данного метода можно отнести то, что в настоящее время существует большое количество готовых коммерческих вычислительных программных

пакетов (MSC/MARC, MSC-NASTRAN, ANSYS и т.д.) с возможностью визуализации результатов расчетов, что делает их очень гибким и эффективным инструментом анализа.

Однако этот метод обладает существенными недостатками: (1) требователен к вычислительным ресурсам аналогично методу МД и модели ВСП; (2) основывается на дискретизированной сетке, следовательно, деформации при общих координатах не могут быть получены без интерполяции значений сетки, что допускает возможность ошибок; (3) часто проблематично определить точные деформации во всех регионах КТ и окружающем материале, в результате чего возникает необходимость использовать очень мелкие сетки для получения результатов достаточной точности вблизи граней или угловых областей КТ.

Рассмотрим решение трехмерной задачи с использованием МКЭ [97]. Разобьем рассматриваемую область на элементы и выберем узлы интерполирования. Предположим, что соседние элементы соединяются одноименными частями (грань с гранью, ребро с ребром, вершина с вершиной) и имеют в местах соединения общие узлы. На рис. 1.7 приведен пример такой разбивки.

Рассмотрим элемент e_r с принадлежащими ему узлами i, j, m, \dots

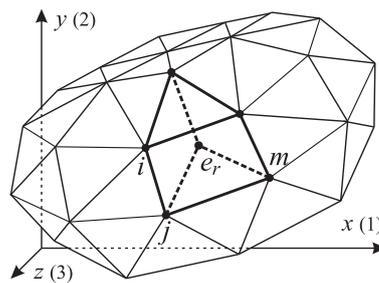


Рис. 1.7. Разбивка рассматриваемой области на элементы, жирными линиями выделен элемент e_r с принадлежащими ему узлами i, j, m, \dots [97].

Вектор смещений в пределах элемента e_r записывается в виде

$$\mathbf{u}^r = \mathbf{U}^r \mathbf{q}^r. \quad (1.3)$$

Здесь $\mathbf{q}^r = \{\mathbf{q}_i^r, \mathbf{q}_j^r, \mathbf{q}_m^r, \dots\}$ – вектор смещений всех узлов элемента e_r , где $\mathbf{q}_i^r = \{u_{1i}^r, u_{2i}^r, u_{3i}^r\}$ – вектор смещения некоторого узла i элемента e_r . Матрица \mathbf{U}^r носит название интерполирующей матрицы для элемента e_r . При одинаковых смещениях в общих узлах для смежных элементов она обеспечивает непрерывное поле смещений в пределах всего тела.

Вектор смещений \mathbf{u} во всей области, занятой телом, определен на каждом элементе в форме $\mathbf{u}^r = \{\mathbf{u}_1^r \ \mathbf{u}_2^r \ \mathbf{u}_3^r \dots\}$. Предполагается, что узловые смещения в общих узлах для смежных элементов одинаковы. Для N узлов вектор смещений во всем теле имеет вид

$$\mathbf{u} = \mathbf{U}\mathbf{q} = \sum_{k=1}^N \sum_{t=1}^3 \mathbf{u}_{tk} \varphi_{tk}. \quad (1.4)$$

Матрица \mathbf{U} и векторы φ_{tk} определяются матрицами \mathbf{U}^r для отдельных элементов, аналогично \mathbf{q} и \mathbf{u}_{tk} определяются векторами \mathbf{q}^r . Неопределенными коэффициентами в (1.4) являются смещения узлов u_{tk} ($k = 1, \dots, N_n; t = 1, 2, 3$), образующие вектор \mathbf{q} , а координатными вектор-функциями – φ_{tk} ($k = 1, \dots, N; t = 1, 2, 3$), составляющие интерполирующую матрицу \mathbf{U} для всего тела. Таким образом, \mathbf{q} можно назвать вектором коэффициентов, а матрицу \mathbf{U} – матрицей координатных функций.

Дополним выражения (1.1) – (1.2) еще одним уравнением теории упругости $\partial\sigma_{ij}/\partial x_i = 0$, тогда справедливо

$$C_{ijkl} \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial u_k}{\partial x_i} = C_{ijkl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}^*}{\partial x_i}. \quad (1.5)$$

Поиск неизвестных коэффициентов u_{tk} осуществляется путем подстановки компонент вектора \mathbf{u} из (1.4) в полученное выражение (1.5).

1.2.2. Метод функции Грина

Наиболее общим аналитическим методом расчета полей напряжений и деформаций включений различной формы в изотропных и анизотропных бес-

конечных и полубесконечных средах является метод функций Грина. Он широко применяется при расчете упругих полей, действующих в нанокompози- тах.

Метод функций Грина позволяет по заданной собственной деформации ε_{ij}^* внутри включения, а также по его форме и размеру (характеризуемыми функцией $\chi(\mathbf{r})$) рассчитать создаваемые им упругие поля. Согласно [98], смещения u_i , создаваемые включением, рассчитываются по формуле:

$$u_i(\mathbf{r}) = \int_V \lambda_{jlmn} \hat{\varepsilon}_{mn}^*(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial r'_i} G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (1.6)$$

Здесь V – область, занимаемая материалом (включением и матрицей), λ_{jlmn} – тензор упругих модулей, а $G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – тензор Грина среды. В случае, если собственная деформация включения однородна (то есть $\varepsilon_{mn}^* = const$), правую часть в (1.6) можно представить в виде интеграла по поверхности Ω включения [98]:

$$u_i(\mathbf{r}) = \lambda_{jlmn} \varepsilon_{mn}^* \int_{\Omega} G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n_l(\mathbf{r}') dS(\mathbf{r}'), \quad (1.7)$$

где \mathbf{n} обозначает внешнюю нормаль к поверхности Ω .

Величины функций Грина G_{ij} , входящих в формулы (1.6) – (1.7), численно равны смещениям \hat{u}_i , создаваемым в точке \mathbf{r} единичной сосредоточенной силой, приложенной в точке \mathbf{r}' в направлении оси r_j .

Для изотропного случая тензоры Грина получены также для двухфазной среды с когерентной границей [99] и проскальзывающей границей [100]. Выражения для тензоров Грина таких сред приведены в книге [98].

В средах, для которых существуют точные аналитические выражения для функций Грина, смещения, деформации и напряжения, создаваемые включением, можно рассчитывать непосредственно по формулам (1.6), (1.2) и (1.1). Однако такие выражения для функций Грина имеются только для изо-

тропных и трансверсально изотропных материалов (см. [98]). Для бесконечных кубических кристаллов существуют лишь приближенные аналитические выражения для функций Грина [101–104], полученные с помощью представления тензора Грина для произвольной анизотропной бесконечной среды в виде ряда [98]. Поэтому во многих случаях, особенно для анизотропных материалов, более удобным оказывается использование выражений для Фурье-образов функций Грина.

Для бесконечной среды тензор Грина зависит только от разности координат $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, что позволяет применить к правой части формулы (1.6) теорему о свертке функций, тогда трехмерные Фурье-образы \tilde{u}_p и \tilde{e}_{pq} смещений и деформаций, создаваемых включением, можно выразить через трехмерные Фурье-образы \tilde{G}_{pq} функций Грина $G_{pq}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Учитывая (1.2) и равенство $\varepsilon_{pq} = e_{pq} - \varepsilon_{pq}^* \chi(\mathbf{r})$, из выражения (1.6) получаем:

$$\begin{aligned}\tilde{u}_p(\boldsymbol{\xi}) &= -i\xi_l C_{jlmn} \hat{\varepsilon}_{mn}^* G_{pj}, \\ \tilde{e}_{pq}(\boldsymbol{\xi}) &= -\frac{i}{2}(\xi_q \tilde{u}_p + \xi_p \tilde{u}_q) - \hat{\varepsilon}_{pq}^*.\end{aligned}\tag{1.8}$$

Величины u_p и ε_{pq} находятся с помощью обратного преобразования Фурье

$$\begin{aligned}u_p(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V_k} \tilde{u}_p(\boldsymbol{\xi}) e^{-i\boldsymbol{\xi}\mathbf{r}} dV'_k, \\ \varepsilon_{pq}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V_k} \tilde{e}_{pq}(\boldsymbol{\xi}) e^{-i\boldsymbol{\xi}\mathbf{r}} dV'_k,\end{aligned}\tag{1.9}$$

где интегрирование проводится по всему бесконечному объему Фурье-пространства V_k .

Для заданной среды, характеризуемой тензором \tilde{G}_{pq} , выражения для смещений и упругих деформаций, создаваемых включениями различного размера и формы, рассчитываются единым образом по формулам (1.8) и (1.9).

1.3. Развитие теории рассеяния РЛ в кристаллах с дефектами

1.3.1. Кинематическая теория диффузного рассеяния

Впервые диффузное рассеяние в кристалле, содержащем дефекты с упругими полями атомных смещений, рассмотрено Экстейном [105]. Автором проанализирован случай малых флуктуационных смещений $\delta\mathbf{u}$, который оставался справедливым в решении дифракционной задачи учет первых членов разложения:

$$\exp(i\mathbf{Q}\delta\mathbf{u}) \approx 1 + i\mathbf{Q}\delta\mathbf{u} - (1/2)(\mathbf{Q}\delta\mathbf{u})^2,$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ – вектор рассеяния (разность волновых векторов рассеянного и падающего рентгеновских пучков). Поля локальных случайных атомных смещений, вызванных дефектами, имели сферическую симметрию и изменялись с расстоянием \mathbf{r} по кулоновскому закону $A\mathbf{r}/r^3$.

Хуанг [106] исследовал эту проблему более детально и указал на ослабление рассеянных пучков для геометрий Лауэ и Брэгга, тем самым проводя аналогию с тепловым диффузным рассеянием.

В [107] Китингом сделана попытка дать более общую формулировку теории рассеяния на структурах со случайно распределенными дефектами, в которой, в отличие от [105], для малых концентраций дефектов не требуется ограничений на атомные поля смещений. Однако Холлом [108] указано на некорректность приближений, сделанных в [107].

Позднее Дедериксом в рамках кинематической теории рассеяния был разработан метод расчета диффузного рассеяния от дефектов с сильными полями смещений [109, 110] (характерных для дефектов в виде кластеров). Метод Дедерикса согласуется с подходом Кривоглаза [111], основанным на Фурье-представлении статических смещений (метод флуктуационных волн),

дополняя его более подробным рассмотрением мнимого поля смещений (возникающего в конечно протяженном кристалле и удовлетворяющего граничным условиям). Для рассмотрения было взято только рассеяние на смещенных атомах матрицы. В основе кинематической теории Кривоглаза – Дедекса лежит выражение для функции рассеяния, позволяющее получить интенсивность диффузного рассеяния:

$$I(\mathbf{Q}) = \sum_{m,m'} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^{m'})} \left(\langle \langle e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{u}^m - \mathbf{u}^{m'})} \rangle \rangle - \langle e^{i\mathbf{Q}\mathbf{u}^m} \rangle \langle e^{i\mathbf{Q}\mathbf{u}^{m'}} \rangle \right), \quad (1.10)$$

где \mathbf{R}^m – положение атома m в *идеальной* решетке и \mathbf{u}^m – суммарное статическое смещение m -го атома под действием всех дефектов кристалла, $\langle \dots \rangle$ – означает усреднение по статистическому ансамблю конфигурации дефектов. В выражении (1.10) первое слагаемое в скобках задает полную интенсивность, вычитая из него когерентную составляющую (второе слагаемое) получаем выражение для расчета диффузного рассеяния. Смещение \mathbf{u}^m может быть представлено в следующем виде:

$$\mathbf{u}^m = \sum_n s^n \mathbf{t}^{m,n}, \quad \text{где} \quad \begin{cases} s^n = 1, & \text{если в} \\ & \text{положении } n \text{ есть дефект;} \\ s^n = 0, & \text{если в} \\ & \text{положении } n \text{ дефекта нет.} \end{cases} \quad (1.11)$$

Здесь $\mathbf{t}^{m,n}$ – смещение m -го атома от n -го дефекта. Данное суперпозиционное представление довольно точно для малых концентраций дефектов, т.е. $c \ll 1$, где $c = \langle s^n \rangle$. В рассматриваемом подходе предполагается хаотическое распределение дефектов (отсутствует корреляция в их расположении), случайные величины s^n являются статистически независимыми.

С учетом (1.11) можно записать

$$\begin{aligned}
\langle e^{i\mathbf{Q}\mathbf{u}^m} \rangle &= \prod_n \langle e^{is^n \mathbf{Q}\mathbf{t}^{m,n}} \rangle = \prod_n [1 + c (e^{i\mathbf{Q}\mathbf{t}^{m,n}} - 1)] \\
&= \exp \left\{ \sum_n \ln [1 + c (e^{i\mathbf{Q}\mathbf{t}^{m,n}} - 1)] \right\} \approx \exp \left\{ c \sum_n (e^{i\mathbf{Q}\mathbf{t}^{m,n}} - 1) \right\}.
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Смещение можно разложить на два слагаемых:

$$\mathbf{t}^{m,n} = \mathbf{t}^{m-n} + \boldsymbol{\tau}^{m,n},$$

где \mathbf{t}^{m-n} – смещение, возникающее под воздействием «реальных» сил, представляющее собой точное смещение для бесконечного кристалла. Оно имеет максимальное значение для $m = n$, зависит только от $\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n$ и обратно пропорционально $|\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n|^2$ на больших расстояниях. Слагаемое $\boldsymbol{\tau}^{m,n}$ представляет собой вклад «мнимых» сил и удовлетворяет граничным условиям для конечного кристалла. Оно слабо меняется на протяжении кристалла и имеет величину $\sim \Delta V / R_{cryst}^2$, где ΔV – изменение объема под воздействием дефекта, а R_{cryst} – характеристические размеры кристалла.

В дальнейшем при рассмотрении бесконечного кристалла Дедериксом показано, что вкладом «мнимых» сил $\boldsymbol{\tau}^{m,n}$ при учете смещения (1.11) можно пренебречь. Полученное решение имеет вид

$$\begin{aligned}
I(\mathbf{Q}) &= \sum_{m,m'} e^{i\mathbf{Q}(\langle \mathbf{R}^m \rangle - \langle \mathbf{R}^{m'} \rangle)} \\
&\times \left[\exp \left\{ c \sum_n [e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{t}^{m-n} - \mathbf{t}^{m'-n})} - 1 - i\mathbf{Q}(\mathbf{t}^{m-n} - \mathbf{t}^{m'-n})] \right\} \right. \\
&\left. - \exp \left\{ c \sum_n [e^{i\mathbf{Q}\mathbf{t}^{m-n}} + e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{t}^{m'-n}} - 2 - i\mathbf{Q}(\mathbf{t}^{m-n} - \mathbf{t}^{m'-n})] \right\} \right],
\end{aligned} \tag{1.13}$$

где

$$\langle \mathbf{R}^m \rangle = \mathbf{R}^m + \langle \mathbf{u}^m \rangle = c \sum_n (\mathbf{t}^{m-n} + \boldsymbol{\tau}^{m,n})$$

– положение m -го атома в расширенной «усредненной» решетке. Решение Дедерикса подтверждает подход Кривоглаза [111], где изначально для расчета

вводятся «мнимые» силы, а затем учитываются только «реальные» смещения.

Далее, Дедериксом вводится вектор обратной решетки \mathbf{h} , для которого справедливо выражение $e^{i\mathbf{h}\langle\mathbf{R}^m\rangle} = 1$ и $\mathbf{Q} = \mathbf{h} + \mathbf{q}$, где \mathbf{q} задает отклонение вектора рассеяния \mathbf{Q} от угла обратной решетки и лежит в первой зоне Бриллюэна. Используя теорию непрерывности и тот факт, что поле смещений $\mathbf{t}^{m-n} = \mathbf{t}(\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n)$ медленно меняется от атома к атому, суммирование по n может быть заменено интегрированием. Аналогично для m . В итоге получим:

$$I(\mathbf{Q}) = I_{\mathbf{h}}(\mathbf{q}) = N \int \frac{d\mathbf{R}}{V_c} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} (e^{\phi(\mathbf{R})} - e^{\phi(\infty)}), \quad (1.14)$$

где

$$\phi(\mathbf{R}) = c \int \frac{dr}{V_c} \{e^{i(\mathbf{h}+\mathbf{q})[\mathbf{t}(\mathbf{R}+\mathbf{r})-\mathbf{t}(\mathbf{r})]} - 1 - i(\mathbf{h} + \mathbf{q})[\mathbf{t}(\mathbf{R} + \mathbf{r}) - \mathbf{t}(\mathbf{r})]\} \quad (1.15)$$

и

$$\phi(\infty) = -2c \int \frac{dr}{V_c} [1 - i \cos(\mathbf{h} + \mathbf{q})\mathbf{t}(\mathbf{r})]. \quad (1.16)$$

L – величина, определяющая статический фактор Дебая – Валлера ($f = e^{-L}$), возникающая в результате статических смещений и оказывающая влияние на снижение брэгговского рассеяния [111]. Для смещение выполняются условия обратной симметрии $\mathbf{t}(\mathbf{r}) = -\mathbf{t}(-\mathbf{r})$.

Уравнение (1.13) представляет собой общее выражение для диффузного рассеяния РЛ от структуры, содержащей дефекты, в рамках кинематической теории. Для больших кластеров дифференциальная интенсивность диффузного рассеяния согласно (1.13) достаточно сильна, и рассеяние концентрируется в малых угловых областях вблизи брэгговских отражений.

Дальнейший детальный анализ Дедериксом диффузного рассеяния для малых и больших \mathbf{q} показал, что для малых $q = |\mathbf{q}| \ll 1/R_0$ (R_0 – средний радиус дефекта) преобладает хуанговское рассеяние, при котором интенсивность спадает, как $1/q^2$. Это рассеяние дает информацию о симметрии де-

фектов. Для больших q ($q \ll 1/R_0$) интенсивность диффузного рассеяния уменьшается быстрее, чем $1/q^4$ (рассеяние Стокса – Вильсона). Это рассеяние существенно зависит от поля смещений внутри кластера.

В отличие от подхода Дедерикса [109, 110], метод Кривоглаза удобен при рассмотрении высоких концентраций дефектов и при исследовании корреляций в их расположении. Согласно классификации дефектов, приведенной в [111], различного типа дефекты можно разделить на два класса. К дефектам первого класса относятся такие, для которых L конечно. Наличие таких дефектов в кристалле не изменяет профиль брэгговского (дифракционного) пика, а может приводить лишь к его ослаблению за счет статического фактора. Для дефектов второго класса величина L обращается в бесконечность [111], и, следовательно, статический фактор равен нулю. В этом случае рассеяние полностью является некогерентным.

1.3.2. Статистическая теория дифракции

В рамках динамической теории дифракции существует несколько подходов для описания процессов когерентного и диффузного рассеяний в кристаллах с дефектами [112–117].

В известной статистической динамической теории дифракции Като [112, 113] наряду с традиционной длиной экстинкции основными параметрами, характеризующими процесс рассеяния РЛ в дефектном кристалле, являются статический фактор Дебая – Валлера – f , корреляционная функция – $g(\xi)$ и длина корреляции – τ . Базой для разработки теории [112, 113] является рассмотренный Като подход на основе случайных блужданий волновых полей в кристалле [118–121].

Фундаментальные уравнения этой теории выводятся из уравнений Такаги [122, 123]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_0}{\partial s_0} &= ia_{\bar{h}}\phi E_h, \\ \frac{\partial E_h}{\partial s_h} &= ia_h\phi^* E_h.\end{aligned}\tag{1.17}$$

Здесь E_0 – амплитуда проходящей волны, E_h – амплитуда дифрагированной волны, $a_{h,\bar{h}} = C\pi\chi_{h,\bar{h}}/(\lambda\gamma_{h,0})$, где λ – длина волны падающего рентгеновского излучения в вакууме, C – коэффициент поляризации, $\chi_{h,\bar{h}}$ – Фурье компоненты рентгеновской восприимчивости кристалла, $\gamma_{0,h} = \sin(\theta_{1,2})$, где $\theta_{1,2} = \theta_B \pm \varphi$ – углы, определяющие направление падающего и дифрагированного пучков относительно входной поверхности кристалла, φ – угол скоса отражающих плоскостей к поверхности образца. Фазовый фактор кристалла $\phi = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}))$ зависит от функции атомных смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, вид которой определяется в каждой точке \mathbf{r} нарушениями кристаллической решетки.

Уравнения (1.17) представлены в косоугольной системе координат (s_0, s_h) , оси которой совпадают с направлениями распространяющихся в кристалле рентгеновских пучков. В случае дифракции Лауэ для сферической рентгеновской волны формальное решение (1.17) записывается в виде интегральных уравнений:

$$E_0(s_0, s_h) = \delta(s_h) + ia_{\bar{h}} \int_0^{s_0} \phi(s_0 - \xi, s_h) E_h(s_0 - \xi, s_h) d\xi, \tag{1.18}$$

$$E_h(s_0, s_h) = ia_h \int_0^{s_h} \phi^*(s_0, s_h - \eta) E_0(s_0, s_h - \eta) d\eta. \tag{1.19}$$

Слагаемое $\delta(s_h)$ обозначает падающую волну единичной интенсивности. Поскольку интерес представляет область положительных значений (s_0, s_h) , это выражение следует опустить. Статистическое усреднение уравнений (1.17)

приводит к следующей записи:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle E_0 \rangle}{\partial s_0} &= ia_{\bar{h}} \langle \phi E_h \rangle, \\ \frac{\partial \langle E_h \rangle}{\partial s_h} &= ia_h \langle \phi^* E_0 \rangle.\end{aligned}\tag{1.20}$$

При использовании обозначения $\partial\phi = \phi - \langle\phi\rangle$ корреляция в (1.20) представляема в виде

$$\langle \phi E_h \rangle = \langle \phi \rangle \langle E_h \rangle + \langle \partial\phi E_h \rangle.$$

Рассматривая только собственную корреляцию второго порядка (корреляция между флуктуационными компонентами фазового фактора решетки $\partial\phi$ и $\partial\phi^*$ в соседних точках оптического пути) и пренебрегая корреляцией между $\partial\phi(s_0, s_h)$ и $E_0(s_0, s_h - \eta)$, с учетом $\langle\partial\phi\rangle = 0$ формальное решение (1.19) имеет вид

$$\begin{aligned}\langle \phi E_h \rangle &= \langle \phi \rangle \langle E_h \rangle \\ &+ ia_h \int_0^{s_h} \langle \partial\phi(s_0, s_h) \partial\phi^*(s_0, s_h - \eta) \rangle \langle E_0(s_0, s_h - \eta) \rangle d\eta.\end{aligned}\tag{1.21}$$

Введем ряд обозначений:

$$g(z) = \langle \phi(0) \phi^*(z) \rangle / (1 - f^2)\tag{1.22}$$

– собственная корреляционная функция, где z – расстояние между соседними точками, $\langle \phi(0) \phi^*(z) \rangle = \langle \phi(0) \rangle \langle \phi^*(z) \rangle + \langle \partial\phi(0) \partial\phi^*(z) \rangle$, $f = \langle \phi \rangle$ – статический фактор Дебая – Валлера. Он характеризует дальний порядок совершенства кристаллической структуры.

$$\tau = \int_0^{\infty} g(z) dz\tag{1.23}$$

– корреляционная длина, характеризующая ближний порядок.

С учетом (1.21) и (1.22) для случая, когда пространственные изменения усредненных полей $\langle E_0 \rangle$ и $\langle E_h \rangle$ пренебрежимо малы в пределах расстояния τ , уравнения из (1.20) принимают вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle E_0 \rangle}{\partial s_0} &= ia_{\bar{h}} f \langle E_h \rangle - a^2(1 - f^2)\tau \langle E_0 \rangle, \\ \frac{\partial \langle E_h \rangle}{\partial s_h} &= ia_h f \langle E_0 \rangle - a^2(1 - f^2)\tau \langle E_h \rangle,\end{aligned}\tag{1.24}$$

где $a^2 = a_h a_{\bar{h}}$. Полученные выражения представляют собой замкнутую систему дифференциальных уравнений для когерентных амплитуд.

Для получения уравнений для интенсивностей запишем:

$$\frac{\partial \langle I_0 \rangle}{\partial s_0} = \left\langle E_0^* \frac{\partial E_0}{\partial s_0} \right\rangle + \left\langle E_0 \frac{\partial E_0^*}{\partial s_0} \right\rangle = ia_{\bar{h}} \langle E_0^* (\phi E_h) \rangle + c.c.,\tag{1.25}$$

где *c.c.* означает комплексное сопряжение. Предполагается, что флуктуационная часть фазового фактора $\partial\phi$ в данной точке коррелирует только с соответствующей величиной в соседней точке вдоль оптического пути проходящей и дифракционной волны. Поэтому корреляционное соотношение имеет вид

$$\begin{aligned}\langle E_0^* (\phi E_h) \rangle &= \langle \phi \rangle \langle E_0^* E_h \rangle \\ &+ ia_h \int_0^{s_h} \langle \partial\phi(s_h) \partial\phi^*(s_h - \eta) \rangle \langle E_0^*(s_h) E_0(s_h - \eta) \rangle d\eta \\ &+ ia_{\bar{h}} \int_0^{s_0} \langle \partial\phi^*(s_0 - \xi) \partial\phi(s_0) \rangle \langle E_h^*(s_0 - \xi) E_h(s_0) \rangle d\xi.\end{aligned}\tag{1.26}$$

С учетом того, что рентгеновские поля слабо изменяются в пределах корреляционной длины τ , получим систему уравнений для интенсивностей:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle I_0 \rangle}{\partial s_0} &= ia_{\bar{h}} f \langle E_0^* E_h \rangle - a^2(1 - f^2)\tau \langle I_0 \rangle \\ &+ |a_{\bar{h}}|^2(1 - f^2)\tau \langle I_h \rangle + c.c., \\ \frac{\partial \langle I_h \rangle}{\partial s_h} &= ia_h f \langle E_h^* E_0 \rangle - a^2(1 - f^2)\tau \langle I_h \rangle \\ &+ |a_h|^2(1 - f^2)\tau \langle I_0 \rangle + c.c.\end{aligned}\tag{1.27}$$

Разделяя амплитуды на усредненную и флуктуационную компоненты $E_{0,h} = \langle E_{0,h} \rangle + \partial E_{0,h}$, для интенсивностей $I_{0,h} = \langle E_{0,h} E_{0,h}^* \rangle$ получаем:

$$\begin{aligned} \langle I_{0,h} \rangle &= I_{0,h}^c + I_{0,h}^d = \langle E_{0,h} \rangle \langle E_{0,h}^* \rangle + \langle \partial E_{0,h} \partial E_{0,h}^* \rangle, \\ \langle E_0 E_h^* \rangle &= \langle E_0 \rangle \langle E_h^* \rangle + \langle \partial E_h \partial E_h^* \rangle. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Первые и вторые слагаемые этих соотношений являются когерентной и некогерентной (диффузной) интенсивностями соответственно. Уравнения для когерентных интенсивностей получаются непосредственно из уравнений (1.24) для когерентных полей $E_{0,h}^c = \langle E_{0,h} \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_0^c}{\partial s_0} &= ia_{\bar{h}} f E_0^{*c} E_h^c - a^2(1-f^2)\tau I_0^c + c.c., \\ \frac{\partial I_h^c}{\partial s_h} &= ia_h f E_h^{*c} E_0^c - a^2(1-f^2)\tau I_h^c + c.c. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Подставляя эти соотношения в (1.27), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_0^d}{\partial s_0} &= ia_{\bar{h}} f \langle \partial E_0^* \partial E_h \rangle + |a_{\bar{h}}|^2 (1-f^2)\tau I_0^c \\ &\quad - a^2(1-f^2)\tau I_0^d + |a_{\bar{h}}|^2 (1-f^2)\tau I_h^d + c.c., \\ \frac{\partial I_h^d}{\partial s_h} &= ia_h f \langle \partial E_h^* \partial E_0 \rangle + |a_h|^2 (1-f^2)\tau I_0^c \\ &\quad - a^2(1-f^2)\tau I_h^d + |a_h|^2 (1-f^2)\tau I_0^d + c.c. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Первые члены в правой части обоих выражений (1.30) вместе со своими комплексно сопряженными величинами могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} ia_{\bar{h}} f \langle \partial E_0^* \partial E_h \rangle + c.c. &= -2\text{Re}(a^2) f^2 \Gamma I_0^d + 2|a_{\bar{h}}|^2 f^2 \Gamma I_h^d, \\ ia_h f \langle \partial E_h^* \partial E_0 \rangle + c.c. &= -2\text{Re}(a^2) f^2 \Gamma I_h^d + 2|a_h|^2 f^2 \Gamma I_0^d. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Здесь Γ – корреляционная длина флуктуационных волновых полей $\partial E_{0,h}$ и $\partial E_{0,h}^*$. Предполагается, что эта корреляционная длина одинакова в проходящем и дифракционном направлениях. Точный вид Γ не известен и может зависеть от совершенства кристалла.

Уравнения для интенсивностей диффузного рассеяния в окончательной форме могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial I_0^d}{\partial s_0} &= -\mu_e I_0^d + \sigma_{\bar{h}}^e I_h^d + \sigma_{\bar{h}}(1 - f^2) I_h^c, \\ \frac{\partial I_h^d}{\partial s_h} &= -\mu_e I_h^d + \sigma_h^e I_0^d + \sigma_h(1 - f^2) I_0^c.\end{aligned}\tag{1.32}$$

Здесь $\sigma_{h,\bar{h}}^e = 2|a_{h,\bar{h}}|^2 \tau_e$, $\sigma_{h,\bar{h}} = 2|a_{h,\bar{h}}|^2 \tau$, $\mu_e = \mu + 2\text{Re}(a^2)[(1 - f^2)\tau + f^2\Gamma]$, где $\mu = \frac{2\pi C}{\lambda} \text{Im}(\chi_0)$ – линейный коэффициент фотопоглощения.

Уравнения для когерентных (1.29) и диффузных интенсивностей (1.32) при решении конкретных задач должны быть дополнены граничными условиями. Присутствие когерентных интенсивностей в уравнениях для диффузных компонент соответствует принципу причинности. В данном случае когерентные поля являются источниками интенсивностей диффузного рассеяния. Отметим также, что из общих соображений Като приводит оценку корреляционной длины Γ для диффузно рассеянной интенсивности $\Gamma \approx l_{ext}/f$, где l_{ext} – длина экстинкции.

Изложенная выше теория Като впоследствии была модифицирована [124–128] и переформулирована с учетом граничных условий [129, 130] рядом авторов. В частности, в [131] представлена статистическая динамическая теория в случае больших корреляционных длин.

1.3.3. Учет углового распределения интенсивности рассеяния

Рассмотренная выше теория Като оперирует интегральными по углам интенсивностями. Следовательно, данная теория не позволяет анализировать результаты измерений, полученных с помощью двух- и трехосевых многокристальных дифрактометров. Поэтому получила свое развитие теория динамической дифракции в случае плоской рентгеновской волны с учетом углового распределения интенсивностей в рамках статистического формализма Като.

В частности, Бушуевым в рамках этого подхода описана дифракция в несовершенных кристаллах с равномерно распределенными дефектами [116, 132], а в работе [117] рассмотрен случай кристалла с микродефектами, период решетки которого непрерывно меняется по толщине.

Следуя [117], остановимся на ключевых моментах плосковолновой теории. Будем рассматривать кристалл, содержащий хаотически распределенные дефекты, межплоскостное расстояние $d(z)$ изменяется с глубиной z . Для простоты пространственная вариация электронной плотности не учитывается. Рассмотрим вывод уравнений для случая дифракции Брэгга.

В рамках двухволнового приближения динамической теории дифракции для рассматриваемой модели кристалла для падающей плоской волны амплитуды волновых полей $E_{0,h}$ описываются одномерными уравнениями Такаги [122, 123] (аналогично выражениям (1.17) для сферической волны):

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_0}{\partial z} &= ia_0 E_0 + ia_{\bar{h}} \phi(z) E_h, \\ \frac{\partial E_h}{\partial z} &= i(ba_0 + \eta) E_h + ia_h \phi^*(z) E_0,\end{aligned}\tag{1.33}$$

где помимо параметров, указанных в описании (1.17), добавятся $a_0 = \pi\chi_0/(\lambda\gamma_0)$, $\eta = (2\pi/(\lambda\gamma_0) \sin 2\theta_B \omega -$ угловой параметр, используемый в двухкристальной дифрактометрии в режиме $\theta - 2\theta$ сканирования, $\omega = \theta - \theta_B -$ отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга θ_B , $b = \gamma_0/\gamma_h -$ фактор асимметрии, $\chi_{0,1} = -r_0\lambda^2/(\pi V_c)F_{0,h} -$ Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, $V_c -$ объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2) -$ классический радиус электрона, $e, m -$ заряд и масса электрона, $F_{0,h} -$ структурные факторы в направлении прохождения и дифракции рентгеновской волны. Одномерный фазовый фактор кристалла $\phi(z) = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(z))$.

Заменим выражения для волновых амплитуд на

$$\begin{aligned}E_0 &= \hat{E}_0 \exp[ia_0 z], \\ E_h &= \hat{E}_h \exp[-i(ba_0 + \eta)z]\end{aligned}\tag{1.34}$$

и введем обозначение для фазовой функции

$$\Phi(z) = \phi(z) \exp[-i(ba_0 + \eta)z]. \quad (1.35)$$

Получим уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_0}{\partial z} &= ia_{\bar{h}} \Phi(z) E_h, \\ \frac{\partial \hat{E}_h}{\partial z} &= ia_h \Phi^*(z) E_0. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Эти уравнения по своей структуре идентичны (1.17). Следуя процедуре, изложенной выше, включая статистическое усреднение и представление $\Phi(z) = \langle \Phi(z) \rangle + \delta\Phi(z)$, получим уравнения для когерентных полей:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_0^c}{\partial z} &= ia_{\bar{h}} f \langle \Phi(z) \rangle E_h^c - a^2 (1 - f^2) \int_z^l \langle \delta\Phi(z) \delta\Phi^*(z') \rangle \hat{E}_0^c(z') dz', \\ \frac{\partial \hat{E}_h^c}{\partial z} &= ia_h f \langle \Phi^*(z) \rangle E_0^c - a^2 (1 - f^2) \int_0^z \langle \delta\Phi^*(z) \delta\Phi(z') \rangle \hat{E}_0^c(z') dz', \end{aligned} \quad (1.37)$$

где $a^2 = a_h a_{\bar{h}}$. При выводе (1.37) поле атомных смещений $\mathbf{u}(z)$ и, следовательно, фазовая функция $\phi(z)$ представили в виде усредненной и флуктуационной части $\mathbf{u}(z) = \langle \mathbf{u}(z) \rangle + \delta\mathbf{u}(z)$; $\phi(z) = \langle \phi(z) \rangle + \delta\phi(z)$. Можно также записать $\phi(z) = \bar{\phi}(z) \tilde{\phi}(z)$, где $\bar{\phi}(z) = \exp(i\mathbf{h} \langle \mathbf{u}(z) \rangle)$ – описывает неслучайные крупномасштабные деформации в объеме кристалла. Случайные атомные смещения, вызванные, например, хаотически распределенными в объеме кристалла дефектами, задаются фазовой функцией $\tilde{\phi}(z) = \exp(i\mathbf{h} \delta\mathbf{u}(z))$, при этом ее статистическое усреднение $f(z) = \langle \tilde{\phi}(z) \rangle$ определяется как статический фактор Дебая – Валлера [112].

Аналогично (1.22), (1.23) запишем комплексную корреляционную длину:

$$\tau(\omega, z) = \int_0^\infty d\xi (1 - f^2(z))^{-1} \langle \delta\Phi^*(z) \delta\Phi^*(z - \xi) \rangle, \quad (1.38)$$

которая зависит от угловой отстройки ω и координаты z . Здесь введена новая переменная $\xi = z - z'$. Согласно (1.35) явный вид усредненной и флуктуационной частей фазовой функции $\Phi(z)$ запишется как

$$\langle \Phi(z) \rangle = f(z) \exp(i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(z) \rangle - i(ba_0 + \eta)z),$$

$$\delta\Phi(z) = \left(\tilde{\phi}(z) - f(z) \right) \exp(i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(z) \rangle - i(ba_0 + \eta)z).$$

Полагая, что на расстоянии длины корреляции значения статических факторов слабо отличаются и этим отличием можно пренебречь, введем в рассмотрение парную корреляционную функцию

$$G(\xi, z) = (\langle \exp(i\mathbf{h}[\delta\mathbf{u}(z + \xi) - \delta\mathbf{u}(z)]) \rangle - f^2(z)) / (1 - f^2(z)). \quad (1.39)$$

Положим, что на длине корреляции фазового фактора фотоэлектрическим поглощением можно пренебречь, тогда соотношение (1.38) примет вид

$$\tau(\omega, z) = \int_0^{\infty} d\xi G(\xi, z) \exp(i(\eta z - \mathbf{h}[\delta\mathbf{u}(z + \xi) - \delta\mathbf{u}(z)])). \quad (1.40)$$

Если одномерные искажения в кристалле отсутствуют и дефекты в нем распределены однородно (т.е. справедливо: $G(\xi, z) = G(\xi, 0) = g(\xi)$, где $g(\xi)$ – собственная корреляционная функция Като), то (1.40) трансформируется в корреляционную длину Бушуева [116, 132]:

$$\tau(\omega) = \int_0^{\infty} d\xi g(\xi) \exp(i\eta z). \quad (1.41)$$

При переходе к интегральным по углам выхода интенсивностям из (1.41) непосредственно следует определение корреляционной длины Като (1.22, 1.23).

При условии, что корреляционная длина по модулю меньше длины экстинкции $|\tau(\omega, z)| \ll l_{ext}$, амплитуды полей в (1.37) можно вынести за знак

интеграла, и система дифракционных уравнений для когерентных полей в геометрии Брэгга примет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{E}_0^c}{\partial z} &= ia_{\bar{h}}f \langle \Phi(z) \rangle E_h^c - \rho(\omega, z) E_0^c, \\ -\frac{\partial \hat{E}_h^c}{\partial z} &= ia_h f \langle \Phi^*(z) \rangle E_0^c - \rho(\omega, z) E_h^c,\end{aligned}\tag{1.42}$$

где $\rho(\omega, z) = a^2(1-f^2)\tau(\omega, z)$ – параметр, отвечающий в статистической динамической теории дифракции за диффузное поглощение когерентно рассеянных волн. Проведем обратное преобразование к исходным волновым полям, используя (1.34):

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_0^c}{\partial z} &= i(a_0 + i\rho(\omega, z)) + ia_{\bar{h}}f(z) \exp(i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(z) \rangle) E_h^c, \\ -\frac{\partial E_h^c}{\partial z} &= i(ba_0 + \eta + i\rho(\omega, z)) + ia_h f(z) \exp(-i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(z) \rangle) E_0^c.\end{aligned}\tag{1.43}$$

Уравнения (1.43) несколько отличаются от известных одномерных уравнений Такаги. Присутствующий в этих уравнениях коэффициент $\rho(\omega, z)$ определяется типом искажений кристаллической решетки. В случае малых размеров и больших градиентов деформации решетки этим коэффициентом можно пренебречь. Если же речь идет о дефектах больших размеров, то вклад диффузного поглощения когерентно рассеянных волн может быть значительным и даже равным фотопоглощению.

Процедура получения уравнений для интенсивностей мало отличается от приведенного выше формализма Като. Поэтому, избегая промежуточных выкладок, запишем уравнения для интенсивностей диффузного рассеяния:

$$\begin{aligned}\frac{\partial I_0^d}{\partial z} &= -\mu_0 I_0^d + \sigma_{\bar{h}} I_h^d + \sigma_{\bar{d}} I_h^c, \\ -\frac{\partial I_h^d}{\partial z} &= -\mu_h I_h^d + \sigma_h I_0^d + \sigma_d I_0^c,\end{aligned}\tag{1.44}$$

где

$$\begin{aligned}
\sigma_{h,\bar{h}} &= 2|a_{h,\bar{h}}|^2[(1-f^2)\tau_r + f^2\text{Re}(\Gamma_{0,h})], \\
\sigma_{d,\bar{d}} &= 2|a_{h,\bar{h}}|^2(1-f^2)\tau_r, \\
\mu_{0,h} &= \frac{\mu}{\gamma_0} + 2\text{Re}[a^2((1-f^2)\tau + f^2\Gamma_{0,h})].
\end{aligned}$$

В этих выражениях присутствуют корреляционные длины когерентно рассеянных диффузных волн, которые имеют вид

$$\Gamma_{o,h} = \int_0^\infty d\xi \Delta_{0,h}(\xi, z) \exp(i(\eta z - \mathbf{h}[\langle \mathbf{u}(z+\xi) \rangle - \langle \mathbf{u}(z) \rangle])). \quad (1.45)$$

Здесь $\Delta_0(z, \xi) = \langle \delta_0(z+\xi)\delta_0^*(z) \rangle$, $\Delta_h(z, \xi) = \langle \delta_h^*(z+\xi)\delta_h(z) \rangle$ – корреляционные функции флуктуационных волн $\delta E_{0,h}$, нормированные на соответствующие значения интенсивностей диффузного рассеяния $I_{0,h}^d$. Индексы r при соответствующих параметрах указывают на вещественные части этих величин.

1.4. Трехосевая рентгеновская дифрактометрия кристаллов

1.4.1. Трехкристальная дифрактометрия. Обратное пространство

Практически все теоретические разработки в области рентгеновской дифракции основываются на предположении о падении на кристалл идеально плоской монохроматической волны, не имеющей латеральных ограничений. Однако в реальном эксперименте излучение имеет спектральную и угловую расходимость. Использование совершенных монокристаллов в качестве монохроматоров и устройств для формирования пучков в дифрактометрах позволило достичь высокой коллимации и монохроматизации ($\Delta\lambda/\lambda 10^{-5}$) излучения. В частности, расходимость хорошего синхротронного пучка может быть менее одной угловой секунды. Монохроматор позволяет значительно снизить влияние спектрального состава излучения и создавать монохроматичный, с малой угловой расходимостью, линейно поляризованный пучок плоской рентгеновской волны.

В измерениях с использованием высокоразрешающей 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 (рис. 1.8). Такая схема с учетом вращения образца и анализатора получила название трехкристальной (трехосевой) рентгеновской дифрактометрии.

Прежде чем начать рассмотрение поведения РЛ при взаимодействии с несовершенными кристаллами, содержащими дефекты, необходимо ввести понятие «обратное пространство», которое будет широко использовано в дальнейших рассуждениях. Для этого рассмотрим схему трехосевого рентгенов-

ского дифрактометра (рис. 1.8), используемого для исследования взаимодействия РЛ с веществом. Впервые такая схема была реализована при изучении теплового диффузного рассеяния в кристаллах кремния, германия и алмаза в 1972 году [133]. Годом позже трехосевая схема применялась для исследования структурных дефектов в меди методом хуанговского рассеяния [134]. Методика трехосевой дифрактометрии в современной интерпретации изложена в работе [135].

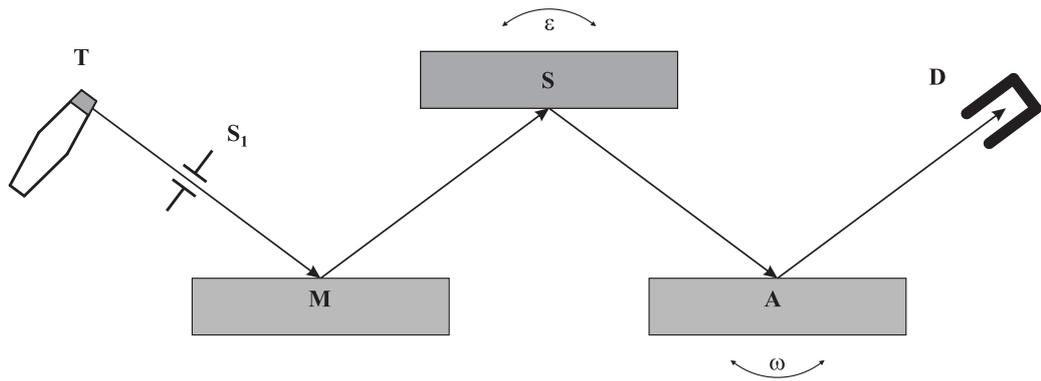


Рис. 1.8. Схема трехосевого рентгеновского дифрактометра

Трехосевой рентгеновский дифрактометр состоит из источника РЛ T , щели S_1 , монохроматора M , исследуемого образца S , анализатора A и детектора D . В качестве монохроматора и анализатора в методе трехосевой дифрактометрии обычно используют высокосоввершенные монокристаллы при параллельном бездисперсионном их расположении ($n - n + n$). Регистрируемые кривые дифракционного отражения в методе трехосевой дифрактометрии в зависимости от относительного вращения образца и анализатора получили название «сканы» в режиме $\omega-$, $\varepsilon-$, $\theta/2\theta-$ сечений обратного $\mathbf{q}(\omega, \varepsilon)$ -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 $I(q) = I(\omega, \varepsilon) = const$.

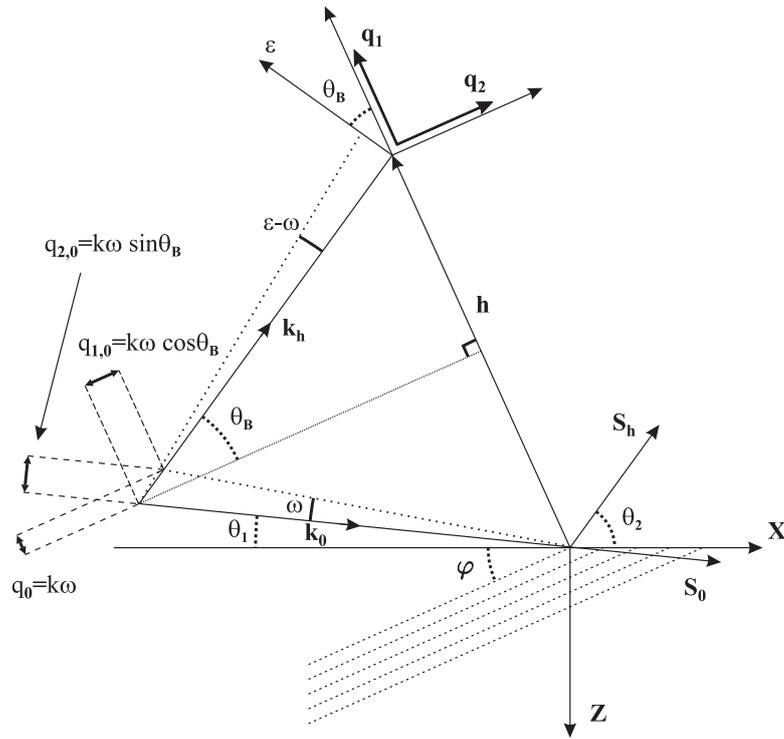


Рис. 1.10. Геометрическая иллюстрация к вычислению величин векторов $\mathbf{q}_{1,2}$ в обратном пространстве через значения угловых параметров вращения образца ω и анализатора ε \mathbf{q}_2 перпендикулярен ему (рис. 1.10). Тогда проекции вектора \mathbf{q}_1 связаны с угловыми смещениями ω и ε следующими выражениями:

$$q_{1,h} = k(\varepsilon - \omega) \cos \theta_B,$$

$$q_{1,0} = k\omega \cos \theta_B,$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число рентгеновского излучения в вакууме. Величина вектора \mathbf{q}_1 равна

$$q_1 = q_{1,0} + q_{1,h} = k\varepsilon \cos \theta_B.$$

Аналогично для вектора \mathbf{q}_2 :

$$q_{2,h} = k(\varepsilon - \omega) \sin \theta_B,$$

$$q_{2,0} = k\omega \sin \theta_B,$$

величина которого равна

$$q_2 = k(2\omega - \varepsilon) \sin \theta_B.$$

Заметим, что величина вектора \mathbf{q}_1 зависит только от величины отворота анализатора ε . Проекции вектора \mathbf{q} в вертикальном q_z и горизонтальном q_x направлениях связаны с величинами $q_{1,2}$ и определяются поворотом системы координат на угол φ (рис. 1.11).

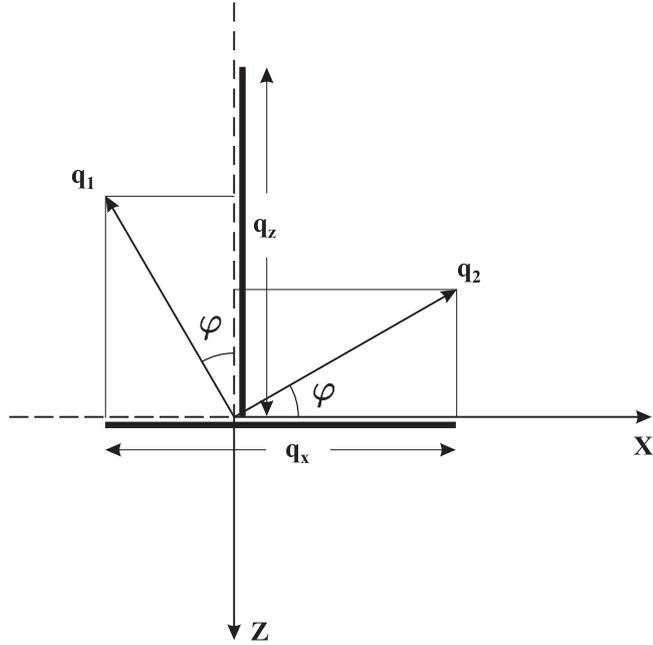


Рис. 1.11. Связь между проекциями q_z , q_x и величинами $\mathbf{q}_{1,2}$

$$q_x = -q_1 \sin \varphi + q_2 \cos \varphi,$$

$$q_z = -q_1 \cos \varphi - q_2 \sin \varphi.$$

Подставляя значения $q_{1,2}$, выраженные через угловые параметры вращения образца ω и анализатора ε , получаем:

$$\begin{aligned} q_x &= k(\omega(\sin \theta_1 + \sin \theta_2) - \varepsilon \sin \theta_2), \\ q_z &= -k(\omega(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) + \varepsilon \cos \theta_2). \end{aligned} \quad (1.46)$$

Построение карт распределения интенсивности рассеянного рентгеновского пучка в обратном пространстве от указанных проекций вектора \mathbf{q} широко используется для анализа атомной структуры кристаллов.

1.4.2. Основные уравнения теории трехосевой рентгеновской дифракции

Сформулируем основные уравнения, описывающие рассеяние для трехосевой схемы рентгеновской дифракции в кристалле. Для этого рассмотрим реальный кристалл, содержащий различные искажения кристаллической решетки. Если эти нарушения носят случайный характер, например, при наличии в объеме кристалла хаотически распределенных дефектов, то процесс дифракции РЛ сопровождается выходом диффузного рассеяния [111]. С другой стороны, нарушения идеальной периодичности кристаллической решетки могут иметь неслучайный характер. Такие нарушения описываются полем атомных смещений, и, следовательно, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и фазовая функция $\phi(\mathbf{r})$ представляется в виде усредненной и флуктуационной части $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle + \delta \mathbf{u}(\mathbf{r})$; $\phi(\mathbf{r}) = \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle + \delta \phi(\mathbf{r})$. Можно также записать $\phi(\mathbf{r}) = \bar{\phi}(\mathbf{r})\tilde{\phi}(\mathbf{r})$, где $\bar{\phi}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle)$ – описывает неслучайные крупномасштабные деформации в объеме кристалла. Случайные атомные смещения, вызванные, например, хаотически распределенными в объеме кристалла дефектами, задаются фазовой функцией $\tilde{\phi}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}))$, при этом ее статистическое усреднение $f(\mathbf{r}) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{r}) \rangle$ определяется как статический фактор Дебая – Валлера [112].

Далее, следуя [112], нам необходимо провести статистическое усреднение преобразованных особым образом уравнений Такаги. Для этого запишем уравнения Такаги (1.33) в декартовой системе координат [122, 123]:

$$\begin{aligned} (\operatorname{ctg} \theta_1 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}) E_0(\mathbf{r}) &= ia_0 E_0(\mathbf{r}) + ia_{\bar{h}} \phi(\mathbf{r}) E_h(\mathbf{r}), \\ (\operatorname{ctg} \theta_2 \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z}) E_h(\mathbf{r}) &= i(ba_0 + \eta) E_h(\mathbf{r}) + ia_h \phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.47)$$

где все обозначения соответствуют обозначениям в (1.33). Фазовый фактор кристалла $\phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}))$.

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

Тогда система уравнений (1.47) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= i[a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1]E_0(q_x, y, z) \\
&\quad + i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi(\mathbf{r}) \exp(iq_x x) E_h(\mathbf{r}), \\
-\frac{\partial E_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= i[ba_0 + \eta - q_x \operatorname{ctg} \theta_2]E_h(q_x, y, z) \\
&\quad + i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^*(\mathbf{r}) \exp(iq_x x) E_0(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{1.48}$$

Далее, введем угловую переменную в обратном пространстве, которая используется при измерении карт интенсивности рассеяния с использованием трехосевого дифрактометра и определена соотношениями (1.46):

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

Для следующих преобразований проведем фазовую перенормировку волновых полей:

$$\begin{aligned}
\hat{E}_h(q_x, y, z) &= E_h(q_x, y, z) \exp[i(ba_0 - q_z)z], \\
\hat{E}_0(q_x, y, z) &= E_0(q_x, y, z) \exp[-i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z],
\end{aligned} \tag{1.49}$$

благодаря которой система уравнений (1.48) запишется в более простом виде

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{E}_0(q_x, y, z)}{\partial z} &= i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi(\mathbf{r}) \exp(i[q_x x - (a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z]) E_h(\mathbf{r}), \\
-\frac{\partial \hat{E}_h(q_x, y, z)}{\partial z} &= i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^*(\mathbf{r}) \exp(i[q_x x + (ba_0 - q_z)z]) E_0(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{1.50}$$

Полученные уравнения (1.50) не совсем удобны для практического использования, поскольку под интегралами находятся изначальные амплитуды $E_{0,h}(\mathbf{r})$. Используя перенормировку (1.49) и Фурье-преобразование для амплитуд проходящей и дифрагированной волны, получим выражения, обе части которых

включают только преобразованные амплитуды $\hat{E}_{0,h}(\mathbf{q}_x, y, z)$. Тем не менее для дальнейшего вывода выражений отдельно для когерентной и диффузной составляющей амплитуды рассеяния удобно использовать выражения (1.50).

1.4.3. Когерентное рассеяние

Далее, в уравнениях (1.50) разделим амплитуды полей и их Фурье-образы на когерентную и диффузную составляющие: $E_{0,h}(\mathbf{r}) = \langle E_{0,h}(\mathbf{r}) \rangle + \delta E_{0,h}(\mathbf{r})$, $E_{0,h}(\mathbf{q}) = \langle E_{0,h}(\mathbf{q}) \rangle + \delta E_{0,h}(\mathbf{q})$. Выражения (1.50) примут вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \hat{E}_0(q_x, y, z) \rangle}{\partial z} &= i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \exp[-i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z] \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \langle \phi(\mathbf{r}) E_h(\mathbf{r}) \rangle, \\ -\frac{\partial \langle \hat{E}_h(q_x, y, z) \rangle}{\partial z} &= i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \exp[i(ba_0 - q_z)z] \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \langle \phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Можно записать формальные решения этих уравнений:

$$\begin{aligned} \langle \hat{E}_0(q_x, y, z) \rangle &= i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp[-i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z] \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(iq_y y) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \langle \phi(\mathbf{r}) E_h(\mathbf{r}) \rangle + const, \\ \langle \hat{E}_h(q_x, y, z) \rangle &= -i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp[i(ba_0 - q_z)z] \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(iq_y y) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \langle \phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}) \rangle + const, \end{aligned} \quad (1.52)$$

в которых постоянные величины в правых частях находятся из граничных условий. Такая запись удобна в процедуре получения уравнений диффузного рассеяния. В правой части уравнений (1.51) присутствуют корреляторы, которые с учетом процедуры усреднений запишутся как

$$\begin{aligned}\langle \phi(\mathbf{r}) E_h(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle \langle E_h(\mathbf{r}) \rangle + \langle \delta\phi(\mathbf{r}) E_h(\mathbf{r}) \rangle, \\ \langle \phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \phi^*(\mathbf{r}) \rangle \langle E_0(\mathbf{r}) \rangle + \langle \delta\phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}) \rangle.\end{aligned}\tag{1.53}$$

Здесь пренебрегли корреляциями между фазовыми $\delta\phi(\mathbf{r})$ и амплитудными $\delta E_{0,h}$ флуктуациями, положив

$$\langle \delta\phi(\mathbf{r}) \delta E_h(\mathbf{r}) \rangle = \langle \delta\phi^*(\mathbf{r}) \delta E_0(\mathbf{r}) \rangle = 0.$$

Согласно известной процедуре статистической динамической теории дифракции [112] в корреляторах $\langle \delta\phi(\mathbf{r}) E_h(\mathbf{r}) \rangle$ и $\langle \delta\phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}) \rangle$ волновые поля следует представить в виде формального решения типа (1.48). Далее, введя понятие корреляционной функции и корреляционной площади $\tau(q_x, q_z)$, получим коэффициент

$$\rho(q_x, q_z) = a_h a_{\bar{h}} (1 - f^2) \tau(q_x, q_z),$$

отвечающий за диффузное поглощение и диффузное преломление когерентно рассеянных волн в кристалле с хаотически распределенными дефектами. Влияние этого коэффициента на угловое распределение интенсивности рассеяния детально проанализировано в [116] применительно к двухкристальной дифрактометрии. В данном рассмотрении ситуация аналогична, то есть диффузное поглощение и преломление в статистической теории дифракции являются дополнительными процессами к обычному преломлению РЛ и фотоэлектрическому поглощению.

Пренебрежем вторыми слагаемыми в правых частях уравнений (1.53). С точки зрения физики это означает пренебрежение диффузным поглощением

и диффузным преломлением когерентно рассеянных волн. Учитывая, что в настоящее время интерес для исследования представляют объекты с размерами порядка или даже меньше длины экстинкции, это приближение справедливо. При рассмотрении некогерентной компоненты данное приближение повлечет за собой также пренебрежение многократным перерассеянием (вторичной экстинкцией) и брэгговской дифракцией диффузно рассеянных волн. Эти эффекты в рамках нашего рассмотрения также пренебрежимо малы [136]

Введя обозначения для когерентно рассеянных волн $E_{0,h}^c = \langle E_{0,h} \rangle$ и учитывая определение фактора Дебая – Валлера $f(\mathbf{r}) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{r}) \rangle$, и указанное приближение вместо (1.51) будем рассматривать уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_0^c(q_x, y, z)}{\partial z} &= i \frac{a_{\bar{h}}}{\sqrt{2\pi}} \exp[-i(a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1)z] \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\phi}(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \exp(iq_x x) E_h^c(\mathbf{r}), \\ -\frac{\partial \hat{E}_h^c(q_x, y, z)}{\partial z} &= i \frac{a_h}{\sqrt{2\pi}} \exp[i(ba_0 - q_z)z] \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\phi}^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \exp(iq_x x) E_0^c(\mathbf{r}). \end{aligned} \tag{1.54}$$

Данная система уравнений является базовой при решении многих задач рентгеновской дифракции на низкоразмерных структурах.

Усредненный фазовый фактор решетки $\bar{\phi}(\mathbf{r})$ представим в виде интегра-

ла Фурье. Воспользовавшись определением δ -функции, получаем

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_0^c(q_x, y, z)}{\partial z} &= i[a_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_1] E_0^c(q_x, y, z) \\
&+ i \frac{a_{\bar{h}} f}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' E_h^c(q_x - q', y, z) \bar{\phi}(q', y, z), \\
-\frac{\partial E_h^c(q_x, y, z)}{\partial z} &= i[ba_0 + \eta - q_x \operatorname{ctg} \theta_2] E_h^c(q_x, y, z) \\
&+ i \frac{a_h f}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' E_0^c(q_x - q', y, z) \bar{\phi}^*(q', y, z).
\end{aligned} \tag{1.55}$$

где $\bar{\phi}(q', y, z)$ и $\bar{\phi}^*(q', y, z)$ – Фурье-образы функций $\bar{\phi}(\mathbf{r})$ и $\bar{\phi}^*(\mathbf{r})$ соответственно. Уравнения дифракции для когерентных полей в виде (1.55) являются полезными при решении дифракционных задач в рамках трехосевой рентгеновской дифрактометрии.

1.4.4. Диффузное рассеяние

Хаотически распределенные в объеме кристалла дефекты, как известно, вызывают диффузное рассеяние [111]. Такими дефектами, в частности, будут являться КТ, расположение которых в кристалле не обладает пространственным порядком.

Рассмотрим выход некогерентно рассеянных волн вблизи узла обратной решетки \mathbf{h} . Диффузное рассеяние рассмотрим в кинематическом (борновском) приближении без учета явлений вторичной экстинкции. Как показано в [136, 137], эффекты вторичной экстинкции в указанных пределах применимости рассматриваемой теории пренебрежимо малы.

Интенсивность диффузного рассеяния на поверхности кристалла определяется выражением [111]

$$\mathbf{I}_h^d(\mathbf{q}) = \left\langle \hat{E}_h(\mathbf{q}) \hat{E}_h^*(\mathbf{q}) \right\rangle - \left\langle \hat{E}_h(\mathbf{q}) \right\rangle \left\langle \hat{E}_h^*(\mathbf{q}) \right\rangle. \tag{1.56}$$

Запишем формальное решение для дифракционной волны из (1.50):

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0^c(q_x, y, z)}{\partial z} = & i \frac{a_h}{2\pi} \int dz \exp(i(ba_0 - q_z)) \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(iq_y y) \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \phi^*(\mathbf{r}) E_0(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Подставим в (1.57) соотношение (1.56) и формальное решение для соответствующей когерентной компоненты из (1.52), а также введем вектор $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_h^q(\mathbf{q}) = & \frac{|a_h|^2}{(2\pi)^2} \int_0^l dz \int_{-z}^{l-z} d\rho_z \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \\ & \times \exp(i(ba_0 - q_z)\rho_z) \exp(iq_x \rho_x) \exp(iq_y \rho_y) \\ & \times (\langle \exp\{i\mathbf{h}(\delta\mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) - \delta\mathbf{u}(\mathbf{r}))\} \rangle - f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})f(\mathbf{r})) \\ & \times \exp\{i\mathbf{h}[\langle \mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \rangle] - \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle\} E_0(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) E_0^*(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

где l – толщина приповерхностного слоя, с которым взаимодействует рентгеновская волна.

После несложных преобразований, используемых в статистической динамической теории дифракции [112], получаем окончательное выражение для углового распределения интенсивности диффузного рассеяния как функцию вектора \mathbf{q} :

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_h^d(\mathbf{q}) = & |a_h|^2 \int_0^l dz \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy (1 - f^2(\mathbf{r})) \\ & \times \exp(-[1 + b]\mu z) \tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}) I_0^c(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.58)$$

где μ – линейный коэффициент поглощения РЛ, $I_0^c(\mathbf{r})$ – интенсивность проходящего рентгеновского пучка в объеме кристалла в точке с координатой \mathbf{r} .

Как отмечалось выше, это решение не учитывает многократное перерассеяние некогерентных волн (вторичную экстинкцию) и по своей структуре совпадает с выражением для случая дифракции от одномерно деформированного кристалла в режиме двухкристальной дифрактометрии [117]. Вместо корреляционной длины (1.23) в (1.58) присутствует корреляционный объем [138]:

$$\tau(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\boldsymbol{\rho} G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) \exp\{i(\mathbf{q}\boldsymbol{\rho} + \mathbf{h} [\langle \mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \rangle - \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle])\}. \quad (1.59)$$

Этот параметр характеризует угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния в случае деформированного кристалла. Модель дефектов может быть задана через корреляционную функцию

$$G(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \frac{\langle \exp(i\mathbf{h} [\delta\mathbf{u}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) - \delta\mathbf{u}(\mathbf{r})]) \rangle - f^2(\mathbf{r})}{1 - f^2(\mathbf{r})}. \quad (1.60)$$

Для ряда моделей дефектов выражение для корреляционной функции было получено в [116, 137, 138].

Отметим, что решение (1.58), хотя и получено в кинематическом приближении без учета многократного диффузного рассеяния, то есть без учета вторичной экстинкции, учитывает эффекты первичной экстинкции через присутствующую под интегралами интенсивность проходящей волны.

Глава 2

Диффузное рассеяние РЛ в кристалле с КТ сфероидальной формы. Аналитическое решение

2.1. Поле деформаций от КТ сфероидальной формы

2.1.1. Общий подход

Рассмотрим КТ, расположенную в кристалле. По причине отличия величины постоянной решетки матрицы и включения в кристаллической среде возникают деформации. Для описания поля деформаций от включения воспользуемся хорошо известной аналогией между задачами электростатики и теории упругости [139]. Флуктуационная часть вектора смещений (подробнее см. раздел 1.4.2 на стр. 51), возникающих в среде, в точке \mathbf{r} может быть записана в виде

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \Lambda \int_V \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d\mathbf{r}', \quad (2.1)$$

где множитель Λ представляет собой выражение

$$\Lambda = \frac{\varepsilon_0(1 + \nu)}{4\pi(1 - \nu)},$$

где $\varepsilon_0 = (\alpha_{QD} - \alpha_M)/\alpha_M$ – рассогласование решеток включения α_{QD} и матрицы α_M , ν – коэффициент Пуассона. Интегрирование ведется по объему включения V .

Введем электростатический потенциал, представляющий собой потенциал однородно заряженного включения [12]:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_V \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.2)$$

Тогда согласно (2.1) и (2.2) поле атомных смещений от КТ определяется градиентом потенциала

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}) = -\Lambda \nabla \phi(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Для вычисления $\phi(\mathbf{r})$ воспользуемся методом разложения по мультиполям (разложим выражение под интегралом в (2.2) в ряд Тейлора вблизи нуля):

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2rr' \cos(\gamma) + r'^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{r'^n}{r^{n+1}} P_n(\cos \gamma), \quad (2.4)$$

где $P_n(\cos \gamma)$ – полиномы Лежандра, γ – угол между r и r' . Таким образом, потенциал (2.2) можно представить в виде ряда

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r}) + \phi_1(\mathbf{r}) + \phi_2(\mathbf{r}) + \dots \phi_n(\mathbf{r}) \dots, \quad \text{где} \quad \phi_n(\mathbf{r}) = \frac{\Omega_n}{r^{n+1}}.$$

Здесь $\Omega_n = \int_V P_n(\cos \gamma) r'^n d\mathbf{r}'$.

Окончательное выражение для вектора смещений $\delta \mathbf{u}(\mathbf{r})$ можно по аналогии с $\phi(\mathbf{r})$ представить в виде ряда

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \delta \mathbf{u}_0(\mathbf{r}) + \delta \mathbf{u}_1(\mathbf{r}) + \delta \mathbf{u}_2(\mathbf{r}) + \dots \delta \mathbf{u}_n(\mathbf{r}) \dots, \quad (2.5)$$

где каждое из слагаемых согласно (2.3) выражается как

$$\delta \mathbf{u}_n(\mathbf{r}) = -\Lambda \nabla \phi_n(\mathbf{r}) = -\Lambda \Omega_n \nabla \left(\frac{1}{r^{n+1}} \right) = \Lambda(n+1) \frac{\mathbf{r}}{r^{n+3}} \Omega_n. \quad (2.6)$$

Рассмотрим скалярное произведение $\mathbf{r}\mathbf{r}'$:

$$\begin{cases} \mathbf{r}\mathbf{r}' = rr' \cos \gamma, \\ \mathbf{r}\mathbf{r}' = r_z r'_z + r_\rho r'_\rho \cos \varphi = rr'(\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \varphi), \end{cases}$$

где r_ρ и r'_ρ – проекции векторов r и r' на плоскость xy (рис. 2.1). Отсюда будет справедливо выражение

$$\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \varphi. \quad (2.7)$$

Отметим, что $\int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$. Таким образом, следует учитывать только первое слагаемое в (2.7) и справедливо выражение $\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta'$. Тогда (2.6), принимая во внимание теорему сложения для полиномов Лежандра первого рода [140], перепишем как

$$\delta \mathbf{u}_n(\mathbf{r}) = \Lambda(n+1) \frac{\mathbf{r} P_n(\cos \theta)}{r^{n+3}} \Omega_n, \quad \text{где} \quad \Omega_n = \int_V r'^n P_n(\cos \theta') d\mathbf{r}'. \quad (2.8)$$

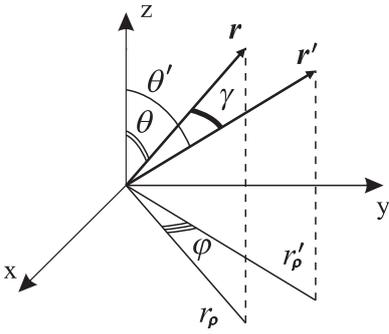


Рис. 2.1. Связь между векторами r и r'

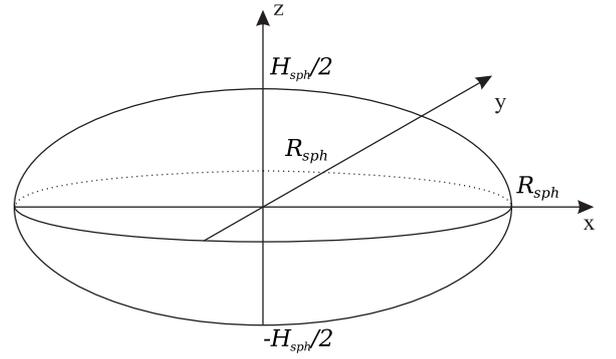


Рис. 2.2. Представление сфероидальной КТ.

R_{sph} , $H_{sph}/2$ – радиус и высота сфероида

2.1.2. Сфероидальная КТ

Рассмотрим модель КТ в форме сфероида (рис. 2.2). Пусть H_{sph} – вертикальная эллиптическая ось, R_{sph} – горизонтальный радиус ($2R_{sph}$ – латеральная эллиптическая ось). В рамках данной модели постараемся получить выражение для вектора упругих смещений. Для этого интегрирование в (2.1) следует проводить по объему сфероида $V_{sph} = \frac{2\pi}{3} H_{sph} R_{sph}^2$. Решение интеграла для Ω_n будем искать в обобщенной сферической системе координат (ОССК):

$$\begin{cases} x = R_{sph} r \sin \theta \cos \phi \\ y = R_{sph} r \sin \theta \sin \phi \\ z = (H_{sph}/2) r \cos \theta \\ J = R_{sph}^2 (H_{sph}/2) r^2 \sin \theta, \end{cases} \quad (2.9)$$

где J – якобиан перехода от декартовой к ОССК. Получим общее выражение для Ω_n , чтобы избежать загромождения формул знак штриха (') опустим:

$$\begin{aligned}
\Omega_n &= \int_V r^n P_n(\cos \theta) d\mathbf{r} \\
&= \frac{R_{sph}^2 H_{sph}}{2} \int_0^\pi d\theta \sin \theta P_n(\cos \theta) [R_{sph}^2 \sin^2 \theta + \left(\frac{H_{sph}}{2}\right)^2 \cos^2 \theta]^{n/2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^1 dr r^{n+2} \\
&= \frac{\pi R_{sph}^{n+2} H_{sph}}{n+3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta P_n(\cos \theta) \left[1 + \left(\frac{(H_{sph}/2)^2}{R_{sph}^2} - 1\right) \cos^2 \theta\right]^{n/2} \\
&= \frac{3}{2} V_{sph} \frac{R_{sph}^n}{n+3} \int_{-1}^1 dx P_n(x) [1 + cx]^{n/2}, \quad \text{где } c = \frac{(H_{sph}/2)^2}{R_{sph}^2} - 1.
\end{aligned}$$

Общее решение для Ω_n для случая четных и нечетных n имеет вид

$$\Omega_n^{\text{неч}} = \sum_{k=0}^{(n-1)/2} a_{nk} \int_{-1}^1 dx x^{2k+1} (1 + cx^2)^{n/2}, \quad (2.10)$$

$$\Omega_n^{\text{чет}} = \sum_{k=0}^{n/2} a_{nk} \int_{-1}^1 dx x^{2k} (1 + cx^2)^{n/2}, \quad (2.11)$$

где a_{nk} – численные коэффициенты полинома Лежандра степени n при слагаемых степени k . Для $\Omega_n^{\text{неч}}$ решение интеграла всегда будет равно нулю, поскольку как первый множитель x^{2k+1} , так и второй множитель вида r^{2p+1} (p – натуральное число, $r = (x^2 + a^2)^{1/2}$) имеет нечетную степень [141]. Таким образом, в указанном разложении вектора смещения $\delta \mathbf{u}_n(\mathbf{r})$ вклад дают только слагаемые с четными номерами n .

Общее решение для четных $\Omega_n^{\text{чет}} = \Omega_m$, где $m = n/2$, представлено ниже:

$$\Omega_m = C_m V_{sph} \left((H_{sph}/2)^2 - R_{sph}^2 \right)^m, \quad (2.12)$$

где значения коэффициентов C_m первых десяти членов суммы

$$\begin{aligned}
C_0 &= 1; & C_5 &= \frac{256}{382109}; \\
C_1 &= \frac{6}{25}; & C_6 &= \frac{1024}{6500375}; \\
C_2 &= \frac{8}{147}; & C_7 &= \frac{2048}{54937455}; \\
C_3 &= \frac{16}{1287}; & C_8 &= \frac{32768}{3694876515}; \\
C_4 &= \frac{384}{133705}; & C_9 &= \frac{65536}{587615010675}.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Из полученной системы уравнений (2.12) при помощи (2.8) можем рассчитать выражения для ненулевых компонент разложения поля упругих смещений $\delta \mathbf{u}_m$. С помощью символьных вычислений в математической среде Matlab было получено общее выражение для ненулевых $\delta \mathbf{u}_m$:

$$\delta \mathbf{u}_m = C_m V_{sph} \Lambda \left((H_{sph}/2)^2 - R_{sph}^2 \right)^m P_{2m}(\cos \theta) \frac{\mathbf{r}}{r^{2m+3}}. \tag{2.14}$$

Здесь, как и в (2.12), $m = n/2$. Таким образом, полученные выражения дают общее решение для поля упругих смещений от КТ сфероидальной формы.

В случае $H_{sph} = 2R_{sph}$ сфероид принимает форму сферы, и поле атомных смещений (2.5) определяется главным членом разложения $\delta \mathbf{u}_0$:

$$\delta \mathbf{u} = \delta \mathbf{u}_0 = V_{sph} \Lambda \frac{\mathbf{r}}{r^3}. \tag{2.15}$$

Это решение хорошо известно как поле атомных смещений «кулоновских дефектов».

2.1.3. Влияние соседних КТ

Для того чтобы учесть влияние соседних КТ на атомное смещение, аналогично работе [142] введем понятие нулевой границы смещения $R_0(\theta)$ – расстояние от центра КТ, на котором величина упругого смещения спадает до нуля (рис. 2.3). Для этого предлагается подход, заключающийся в следующем: в выражении (2.14) для каждого члена разложения с номером m необходимо

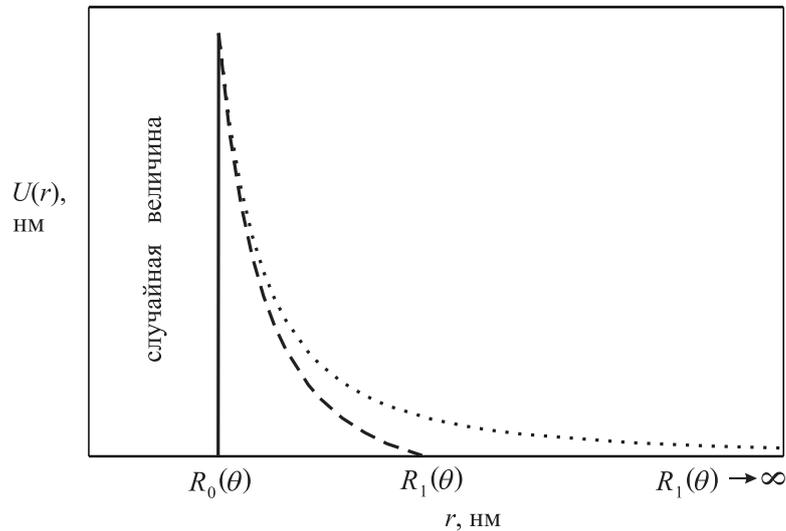


Рис. 2.3. Модель поля атомных смещений от КТ.

произвести замену $\frac{\mathbf{r}}{r^{2m+3}}$ на $\left[1 - \frac{r_0^{2m}(\theta)}{R_0^{2m+3}(\theta)}\right]^{-1} \left[\frac{1}{r^{2m+3}} - \frac{1}{R_0^{2m+3}(\theta)}\right] \mathbf{r}$, в итоге получим:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{u}_m^{lim} &= C_m V_{sph} \Lambda \left((H_{sph}/2)^2 - R_{sph}^2 \right)^m P_{2m}(\cos \theta) \\ &\times \left[1 - \frac{r_0^{2m}(\theta)}{R_0^{2m+3}(\theta)} \right]^{-1} \left[1 - \frac{r^{2m+3}}{R_0^{2m+3}(\theta)} \right] \frac{\mathbf{r}}{r^3}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где $r_0(\theta)$ задает границу КТ. Для поля смещений, спадающего на бесконечность ($R_0(\theta) \rightarrow \infty$), выражение (2.16) преобразуется в (2.14). Предлагается использовать два вида граничных условий, для которых

$$R_0(\theta) = \frac{d_x}{2\sqrt{1 + \cos^2(\theta) \left(\frac{d_x^2}{d_z^2} - 1 \right)}} - \text{граница - сфероид}, \quad (2.17)$$

$$R_0(\theta, \phi) = \begin{cases} \frac{d_z}{2|\cos \theta \cos \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| \leq \frac{d_x}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| \leq \frac{d_y}{d_x}; \\ \frac{d_x}{2|\sin \theta \cos \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| > \frac{d_x}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| \leq \frac{d_y}{d_x}; \\ \frac{d_z}{2|\cos \theta \sin \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| \leq \frac{d_y}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| > \frac{d_y}{d_x}; \\ \frac{d_x}{2|\sin \theta \sin \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| > \frac{d_y}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| > \frac{d_y}{d_x}. \end{cases} \quad (2.18)$$

– граница – параллелепипед, где ϕ – угол поворота вокруг оси z .

Ввиду прямоугольной симметрии в расположении КТ в объеме кристалла и для достаточно большого числа КТ поле деформаций вдали от КТ должно обладать симметрией их расположения, тогда выбор в качестве формы нулевой границы поля деформаций параллелепипеда является более целесообразным.

Для решения (2.16) не удаётся получить аналитическое выражение для амплитуды рассеяния $D(\mathbf{q})$.

Отметим, что выражение для границы в виде параллелепипеда зависит от ϕ . Чтобы избавиться от необходимости численного интегрирования по ϕ , при расчете интенсивности диффузного рассеяния удобно использовать в качестве нулевой границы сдвига цилиндр:

$$R_0(\theta) = \begin{cases} \frac{d_z}{2|\cos \theta|}, & \text{при } |\tan \theta| \leq \frac{d_x}{d_z}; \\ \frac{d_x}{2|\sin \theta|}, & \text{при } |\tan \theta| > \frac{d_x}{d_z}. \end{cases} \quad \text{— граница — цилиндр.} \quad (2.19)$$

2.2. Аналитическое решение для диффузного рассеяния в кристалле со сфероидальными КТ

2.2.1. Общее решение

Рассмотрим кристаллическую структуру, состоящую из подложки, покрытой тонким слоем осажденного вещества. В процессе самосборки в режиме роста Странски – Крастанова в слое формируются КТ, в результате чего трансляционный порядок кристаллической решетки нарушается. Эти нарушения формируют диффузное рассеяние. Общее решение для диффузного рассеяния в кинематическом приближении имеет вид (1.58)–(1.60).

В случае, когда кристалл слабо поглощает интенсивность проходящей рентгеновской волны, величину $I_0 = I_0^c(\mathbf{r}) \exp(-[1 + b] \mu z)$ в (1.58) можно принять равной 1. Рассмотрим малый элемент объема V_0 и в пределах этого объема пренебрежем зависимостью от \mathbf{r} , тогда выражение (1.58) примет вид [142]

$$I_h^d(\mathbf{q}) = |\alpha_h|^2 (1 - f^2) V_0 \text{Re}[\tau(\mathbf{q})], \quad (2.20)$$

где V_0 – засвеченный рентгеновским пучком объем кристаллического слоя с КТ, α_h – характеризует рассеивающую способность кристаллического слоя.

Если пространственная корреляция КТ отсутствует, корреляционный объем отдельной КТ $\tau(\mathbf{q})$ является Фурье-преобразованием собственной корреляционной функции Като $g(\boldsymbol{\rho})$ [112]:

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_0(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\boldsymbol{\rho} g(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}). \quad (2.21)$$

Эта функция ставится в соответствие с формой, размерами КТ [14], а также наведенными упругими деформациями вблизи КТ [143]. Собственная корреляционная функция Като имеет вид [116]

$$g(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{V_{QD}} \int D(\mathbf{r})D^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})d\mathbf{r}, \quad (2.22)$$

где V_{QD} – объем КТ. Подставляя (2.22) в выражение для корреляционного объема (2.21), получаем:

$$\tau(\mathbf{q}) = \frac{|D(\mathbf{q})|^2}{V_{QD}}. \quad (2.23)$$

Здесь $D(\mathbf{q})$ – Фурье-образ функции $D(\mathbf{r})$. Согласно (2.20) и (2.23) параметр $D(\mathbf{q})$ имеет смысл амплитуды диффузного рассеяния.

Рассмотрим диффузное рассеяние РЛ в кристалле с однородно распределенными дефектами. Пусть $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – случайные атомные смещения, вызванные хаотическими нарушениями атомной структуры. Интенсивность диффузного рассеяния, как функцию вектора \mathbf{q} ($\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$, где \mathbf{Q} – вектор рассеяния, \mathbf{h} – вектор обратной решетки), можно с точностью до постоянного множителя представить в виде [142]

$$I(\mathbf{q}) = \left| \int (1 - e^{i\mathbf{h}\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}d\mathbf{V} \right|^2 = |D(\mathbf{q})|^2. \quad (2.24)$$

Удобно разделить $D(\mathbf{q})$ на два слагаемых: $D_{inQD}(\mathbf{q})$ (рассеяние на деформациях внутри КТ, в данном случае QD – quantum dot) и $D_{outQD}(\mathbf{q})$ (рассеяние на деформациях за пределами КТ).

Будем считать, что внутри КТ деформации носят случайный характер, то есть для \mathbf{r} внутри КТ справедливо [142]:

$$D_{inQD}(\mathbf{q}) = \int_{QD} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}d\mathbf{V}, \quad (2.25)$$

где интегрирование ведется по объему КТ. Таким образом, мы получили амплитуду рассеяния от остова включения в форме сфероида (рассеяние Стокса – Вильсона), в дальнейшем будем обозначать ее как $D_{SW}(\mathbf{q})$.

Такое допущение справедливо, поскольку постоянная решетки включения, как правило, значительно больше, чем постоянная решетки матрицы.

Следовательно, можно говорить о том, что рассеяние на структуре внутри КТ не влияет на рассеяние на структуре за ее границей.

Рассмотрим амплитуду диффузного рассеяния для деформаций за пределами КТ. В случае малых деформаций ($\mathbf{h}\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}) \ll 1$) справедливо [142]

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i \int_{outQD} \mathbf{h}\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d\mathbf{V}. \quad (2.26)$$

Используем интегрирование в сферической системе координат (ϕ, θ, r) , и выражение (2.26) примет вид

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_{r_0(\phi, \theta)}^{R_0(\phi, \theta)} dr r^2 \mathbf{h}\delta\mathbf{u}(\phi, \theta, r) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (2.27)$$

где $r_0(\phi, \theta)$ – задает поверхность КТ, а $R_0(\phi, \theta)$ – задает границу распространения смещения от поверхности КТ, обусловленную наличием соседних КТ в массиве (для КТ, значительно удаленных друг от друга, величина $R_0(\phi, \theta) \rightarrow \infty$).

Выберем систему координат (x, y, z) , в которой будем производить интегрирование так, как показано на рис. 2.4. Аналогично (2.7) справедливо $\cos \alpha = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos \varphi$. Поскольку $\int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$, в указанном выражении следует учитывать только первое слагаемое. Принимаем во внимание, что скалярное произведение $\mathbf{h}\mathbf{q} = hq \cos \theta'$, тогда выражение (2.27) примет вид

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta \int_{r_0(\phi, \theta)}^{R_0(\phi, \theta)} dr r^2 \delta u_r(\phi, \theta, r) e^{iqr \cos \theta}. \quad (2.28)$$

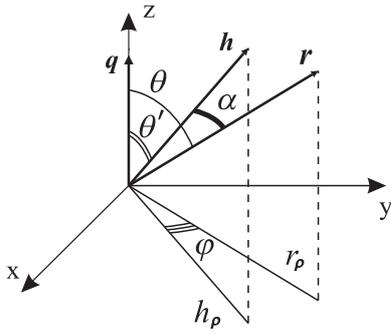


Рис. 2.4. Взаимное расположение векторов \mathbf{h} , \mathbf{q} и \mathbf{r}

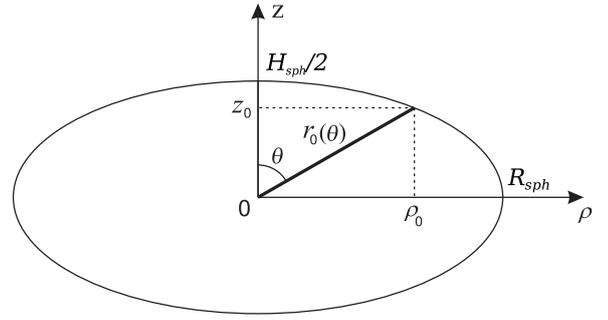


Рис. 2.5. Сечение сфероидальной КТ вдоль оси z через ее центр. R_{sph} – радиус сфероида, $H_{sph}/2$ – высота сфероида

2.2.2. Случай сфероидальной КТ

Рассмотрим КТ сфероидальной формы (рис. 2.2). Выражение для амплитуды рассеяния Стокса – Вильсона (2.25) примет вид

$$D_{SW}(\mathbf{q}) = 2\pi \int_{-H_{sph}/2}^{H_{sph}/2} \frac{R_z}{q_0} J_1(q_0 R_z) e^{iq_z z} dz, \quad (2.29)$$

где $R_z = R_{sph} \sqrt{1 - z^2/(H_{sph}/2)^2}$, $q_0 = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$, $J_0(x)$ – функция Бесселя первого порядка. Вывод данного выражения аналогичен получению выражения Фурье-преобразования характеристической функции сфероидальной КТ, изложенному в разделе 3.2, выражение (3.27).

Определим функцию $r_0(\theta)$, задающую поверхность КТ (рис. 2.5). Из рисунка видно, что $z_0 = r_0(\theta) \cos \theta$ и $\rho_0 = r_0(\theta) \sin \theta$. Следуя уравнению эллипса

$$\frac{\rho_0^2}{R_{sph}^2} + \frac{z_0^2}{(H_{sph}/2)^2} = 1, \quad \text{получаем} \quad \frac{r_0(\theta)^2 \sin^2 \theta}{r^2} + \frac{r_0(\theta)^2 \cos^2 \theta}{(H_{sph}/2)^2} = 1,$$

отсюда

$$r_0(\theta) = R_{sph} \left[1 + \left(\frac{R_{sph}^2}{(H_{sph}/2)^2} - 1 \right) \cos^2 \theta \right]^{-1/2}. \quad (2.30)$$

В силу симметрии сфероида относительно угла ϕ зависимостью $\delta \mathbf{u}$ от ϕ

можно пренебречь, тогда выражение (2.28) примет вид

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i2\pi \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta \int_{r_0(\theta)}^{R_0(\theta)} r^2 \delta u_r(\theta, r) e^{iqr \cos \theta}. \quad (2.31)$$

Далее получим аналитическое выражение для 2.31. Воспользуемся полученным ранее решением для вектора упругих смещений от сфероидальной КТ (2.5) и (2.14), найдем выражение $D(\mathbf{q})$ для случая малых деформаций.

Поскольку $\delta \mathbf{u}(\mathbf{r})$ можно представить в виде ряда (2.5), то амплитуду рассеяния за пределами КТ также можно представить в виде ряда

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = D_0(\mathbf{q}) + D_1(\mathbf{q}) + \dots D_m(\mathbf{q}) \dots \quad (2.32)$$

Слагаемое для амплитуды рассеяния с номером $m = 0$, легко может быть рассчитано из (2.15) и (2.31):

$$D_0(\mathbf{q}) = -i2\pi V_{sph} \Lambda \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta \int_{r_0(\theta)}^\infty dr e^{iqr \cos \theta}.$$

В полученном выражении сделаем замену переменных ($x = \cos \theta$) и раскроем интеграл по dr , в итоге получим:

$$D_0(\mathbf{q}) = 2\pi V_{sph} \Lambda \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_{-1}^1 dx \exp \left\{ iq R_{sph} \left(1 + \left[\frac{R_{sph}^2}{(H_{sph}/2)^2} - 1 \right] x^2 \right)^{-\frac{1}{2}} x \right\}. \quad (2.33)$$

Данное выражение не что иное, как амплитуда хуанговского рассеяния, в дальнейшем будем обозначать ее как $D_H(\mathbf{q})$.

По аналогии с (2.33) получим общее выражение для компонент амплитуды рассеяния с номерами $m \neq 0$:

$$D_m(\mathbf{q}) = -i2\pi C_m V_{sph} \Lambda \left((H_{sph}/2)^2 - R_{sph}^2 \right)^m \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_{-1}^1 dx P_{2m}(x) x \int_{r_0(x)}^\infty dr \frac{e^{iqr x}}{r^{2m}}.$$

Рассмотрим отдельно интеграл по dr , его решение будет иметь вид [141]

$$\int_{r_0(x)}^{\infty} dr \frac{e^{iqr_0(x)x}}{r^{2m}} = e^{iqr_0(x)x} \sum_{k=1}^{2m-1} \frac{(iqx)^{k-1}}{(r_0(x))^{2m-k} \prod_{l=1}^k (2m-l)} + \frac{(iqx)^{2m-1}}{(2m-1)!} \int_{r_0(x)}^{\infty} dr \frac{e^{iqr_0(x)x}}{r},$$

где интеграл во втором слагаемом представляет собой интегральную показательную функцию вида

$$E_1(iR_{sph}) = \int_{R_{sph}}^{\infty} dz \frac{e^{iz}}{z}, \quad \text{где } R_{sph} = -qr_0(x)x.$$

Общее выражение для компонент амплитуды рассеяния с номерами $m \neq 0$ будет иметь вид

$$D_m(\mathbf{q}) = (-1)^{m+1} 2\pi C_m V_{sph} \Lambda \left((H_{sph}/2)^2 - R_{sph}^2 \right)^m \mathbf{h} \mathbf{q} q^{2m-2} \Phi_m(q, R_{sph}, H_{sph}), \quad (2.34)$$

где

$$\Phi_m(q, R_{sph}, H_{sph}) = \int_{-1}^1 dx P_{2m}(x) x^{2m} e^{-iqr_0(x)x} f_m(iqr_0(x)x). \quad (2.35)$$

Здесь $f_m(iqr_0(x)x)$ представляет собой рекуррентную функцию вида

$$f_m(x) = \frac{1}{2m-1} \left(\frac{1}{2^{2m-1}} + \frac{1}{2m-2} \left(\frac{1}{2^{2m-2}} + f_{m-1}(x) \right) \right) \quad (2.36)$$

с начальным элементом $f_1(x) = 1/x + E_1(-x)$, где $E_1(-x)$ – интегральная показательная функция.

В итоге общее решение для амплитуды рассеяния на кристалле со скрытыми некоррелированными КТ сфероидальной формы запишется как

$$D(\mathbf{q}) = D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + \sum_{m=1}^{\infty} D_m(\mathbf{q}), \quad (2.37)$$

где $D_{SW}(\mathbf{q})$ задается (2.29), $D_H(\mathbf{q})$ задается (2.33), а члены суммы $D_m(\mathbf{q})$ определяются через (2.34) и (2.35).

2.3. Анализ теоретических расчетов карт распределения интенсивности диффузного рассеяния

Рассмотрим влияние членов мультипольного разложения на угловое распределение диффузного рассеяния. На рис. 2.6 и 2.7 показан последовательный учет слагаемых в решении (2.37):

$$I(\mathbf{q}) = |D(\mathbf{q})|^2 = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + \sum_m D_m(\mathbf{q})|^2,$$

где слагаемые определяются выражениями (2.26), (2.33) – (2.35).

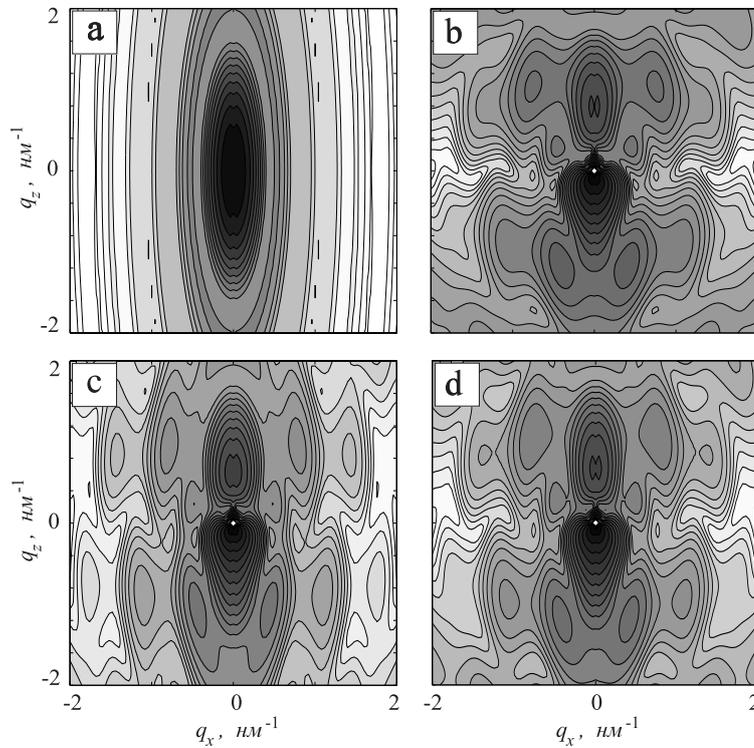


Рис. 2.6. Влияние членов мультипольного разложения на распределение интенсивности диффузного рассеяния от кристаллической среды с КТ в форме сфероида ($R_{sph} = 20$ нм, $H_{sph} = 10$ нм): а) рассеяние Стокса – Вильсона $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q})|^2$; б) $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q})|^2$; в) $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + D_1(\mathbf{q})|^2$; д) $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + D_1(\mathbf{q}) + D_2(\mathbf{q})|^2$. Изодиффузные контуры представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями – 0.2

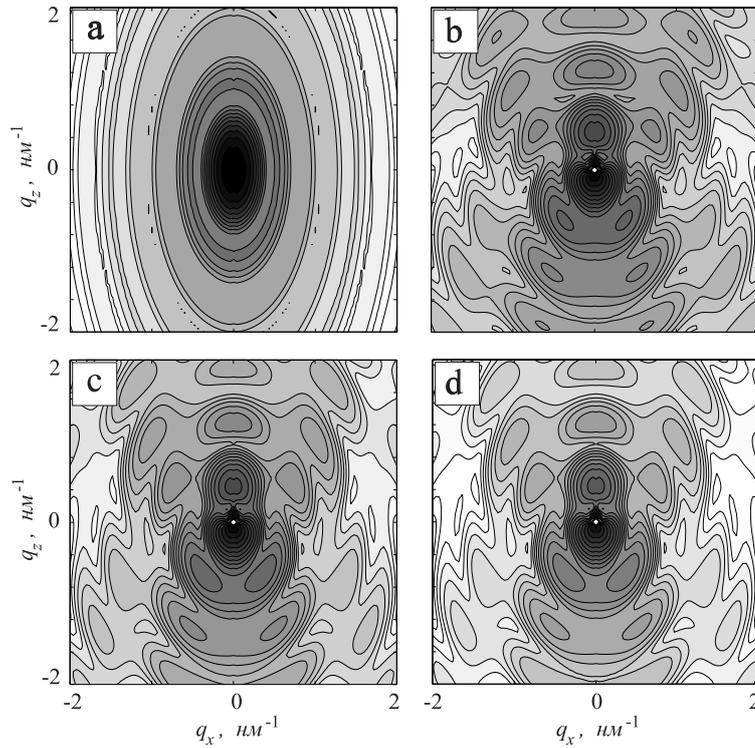


Рис. 2.7. Влияние членов мультипольного разложения на распределение интенсивности диффузного рассеяния от кристаллической среды с КТ в форме сфероида ($R_{sph} = 20$ нм, $H_{sph} = 20$ нм): а) рассеяние Стокса – Вильсона $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q})|^2$; б) $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q})|^2$; в) $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + D_1(\mathbf{q})|^2$; д) $I(\mathbf{q}) = |D_{SW}(\mathbf{q}) + D_H(\mathbf{q}) + D_1(\mathbf{q}) + D_2(\mathbf{q})|^2$. Изодиффузные контуры представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями – 0.2

Следует отметить, что характерный вид карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от сфероидальной КТ в значительной части определяется вторым слагаемым $D_H(\mathbf{q})$ (рис. 2.6, рис. 2.7). Кроме того, из представленных рисунков видно, что чем меньше отношение $R_{sph}/(H_{sph}/2)$ (то есть чем ближе форма сфероида к сферической), тем меньше влияния оказывают слагаемые с большим m . В частности, из рис. 2.7 видно, что при $R_{sph}/(H_{sph}/2) = 1/2$ амплитуда $D_2(\mathbf{q})$, зависящая от компоненты δu_4 , слабо влияет на вид распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве.

Глава 3

Диффузное рассеяние РЛ в кристалле с КТ.

Метод функции Грина

3.1. Метод функции Грина для расчета поля упругих смещений от массива КТ

Смещение \mathbf{u} , возникающее в рассматриваемой среде, под действием приложенной в начало координат силы \mathbf{f} удовлетворяет системе уравнений [10]

$$\lambda_{iklm} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r}) f_i \quad (3.1)$$

с граничными условиями $u_l \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Здесь λ_{iklm} – тензор модулей упругости анизотропной среды.

Тензор Грина G_{ln} определяется соотношением $u_l = G_{ln} f_{ln}$, то есть является решением системы уравнений

$$\lambda_{iklm} \frac{\partial^2 G_{ln}(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_m} = -\delta(\mathbf{r}) \delta_{in} \quad (3.2)$$

с граничными условиями $G_{ln}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

Тензор Грина $G_{ln}(\mathbf{r})$ задает смещение \mathbf{r} в направлении l под воздействием единичной силы, действующей в направлении начала координат n . Здесь и далее подразумевается суммирование по повторяющимся индексам, за исключением случаев, когда это не указано прямо. В качестве первого приближения в работе предполагается, что тензор Грина для материала матрицы и квантовой точки (КТ) совпадает.

Обратное преобразование Фурье для тензора Грина имеет вид

$$G_{ln}(\mathbf{r}) = \int \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.3)$$

где $\tilde{G}_{ln}(\mathbf{r})$ – преобразование Фурье тензора Грина. Подставив выражение для δ -функции

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi} \quad (3.4)$$

и выражение (3.3) в исходное уравнение для тензора Грина (3.2), получим

$$\lambda_{iklm} \frac{\partial^2 \int \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi}}{\partial x_k \partial x_m} = -\frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi}.$$

В полученном выражении внесем все множители под знак интеграла и приравняем подынтегральные выражения:

$$\lambda_{iklm} \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) \frac{\partial^2 (e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}})}{\partial x_k \partial x_m} = -\frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}},$$

где

$$\frac{\partial^2 (e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}})}{\partial x_k \partial x_m} = i\xi_k i\xi_m e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} = -\xi_k \xi_m e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}}.$$

В итоге получим:

$$\lambda_{iklm} \xi_k \xi_m \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3}. \quad (3.5)$$

Смещение в структуре, содержащей одиночную КТ, можно выразить в виде свертки тензора Грина и сил, действующих на поверхность КТ, как

$$u_i^s(\mathbf{r}) = u_i^T \chi_{QD}(\mathbf{r}) + \int_{S_{QD}} G_{in}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_{nk}^T dS'_k, \quad (3.6)$$

где интегрирование ведется по поверхности КТ, $\chi_{QD}(\mathbf{r})$ – характеристическая функция КТ, равная единице внутри КТ и нулю за ее границей; $\sigma_{nk}^T = \lambda_{nkpr} e_{pr}^T$; σ_{nk}^T , e_{pr}^T – компоненты тензоров напряжения и деформации и u_i^T – смещение, возникающее в результате наличия «начальной» деформации, обусловленной рассогласованием плоскостей решетки. Верхний индекс «s» указывает на то, что выражение написано для одиночной КТ. В уравнении (3.6) интегрирование проводится по поверхности КТ. Производная $\partial u_i / \partial x_j$ имеет вид

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

где первое слагаемое образует антисимметрическую матрицу, элементы которой являются компонентами вектора $\text{rot } u$ и характеризуют малый поворот рассматриваемой части среды как целого. Второе слагаемое образует симметрическую матрицу, элементы которой называют компонентами (тензора) деформации (см. (1.2)):

$$e_{ij}(x, t) \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(x, t)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(x, t)}{\partial x_i} \right). \quad (3.7)$$

С учетом (3.7) выражение (3.6) можно преобразовать следующим образом:

$$e_{ij}^s(\mathbf{r}) = e_{ij}^T \chi_{QD}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int_{S_{QD}} \left(\frac{\partial G_{in}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_j} + \frac{\partial G_{jn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_i} \right) \lambda_{nkpr} e_{pr}^T dS'_k. \quad (3.8)$$

Далее, с использованием теоремы Остроградского – Гаусса выражение (3.8) примет вид

$$e_{ij}^s(\mathbf{r}) = e_{ij}^T \chi_{QD}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int_{V_{QD}} \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_i \partial x_k} \right) \lambda_{nkpr} e_{pr}^T dV', \quad (3.9)$$

где интегрирование производится по объему КТ.

Рассмотрим интеграл в выражении (3.9). Поскольку множитель $\lambda_{nkpr} e_{pr}^T$ не зависит от \mathbf{r}' , вынесем его за знак интеграла и для полученного интеграла воспользуемся теоремой о свертке. Получим выражение

$$\begin{aligned} & \int_{V_{QD}} \int_{V_{QD}} \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_i \partial x_k} \right) dV' e^{-i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV \\ &= \int_{V_{QD}} \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_k} \right) e^{-i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV \int_{V_{QD}} e^{-i\mathbf{r}'\boldsymbol{\xi}} dV' \\ &= \int_{V_{QD}} \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_k} \right) e^{-i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) \\ &= \int_{V_{QD}} \tilde{\chi}_{QD}(C\xi) \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_k} \right) e^{-i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV. \end{aligned}$$

В итоге будет справедливо равенство:

$$\int_{V_{QD}} \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial x_i \partial x_k} \right) dV' = \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) \left(\frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_k} \right).$$

Представим выражения под знаком дифференциала в виде обратного преобразования Фурье и внесем дифференциал под знак интеграла:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 G_{in}(\mathbf{r})}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 G_{jn}(\mathbf{r})}{\partial x_i \partial x_k} &= \left(\frac{\partial^2 \left(\int \tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi}) e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV \right)}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 \left(\int \tilde{G}_{jn}(\boldsymbol{\xi}) e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV \right)}{\partial x_i \partial x_k} \right) \\ &= \int \left(\frac{\partial^2 \tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi})}{\partial x_j \partial x_k} \xi_i + \frac{\partial^2 \tilde{G}_{jn}(\boldsymbol{\xi})}{\partial x_i \partial x_k} \xi_j \right) \xi_k e^{i\mathbf{r}\boldsymbol{\xi}} dV. \end{aligned}$$

Затем для выражения (3.9) представим множители $\chi_{QD}(\mathbf{r})$ и $e_{ij}^s(\mathbf{r})$ в виде их обратного преобразования Фурье и избавимся от знака интеграла, получим:

$$\tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}) = e_{ij}^T \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) - \frac{(2\pi)^3}{2} \left(\xi_j \tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi}) + \xi_i \tilde{G}_{jn}(\boldsymbol{\xi}) \right) \lambda_{nkpr} e_{pr}^T \xi_k \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.10)$$

Уравнение (3.10) дает общее выражение для Фурье-преобразования тензора деформации в структуре, содержащей отдельную КТ произвольной формы. Эта общая формула справедлива для кристаллов, обладающих кубической или другой симметрией.

Поскольку упругая задача является линейной, то решением для массива КТ будет являться суперпозиция упругих полей отдельных КТ:

$$e_{ij} = \sum_{n_1, n_2, n_3} e_{ij}^s(x_1 - n_1 d_1, x_2 - n_2 d_2, x_3 - n_3 d_3), \quad (3.11)$$

где d_1, d_2, d_3 – периоды расположения КТ для соответствующих направлений. Также для массива КТ должно выполняться условие минимума упругой энергии, что эквивалентно тому, что тензор напряжений, усредненный по элементарной ячейке, равен нулю ($\overline{e_{ij}} = 0$). Поскольку выражение (3.11) представляет собой трехмерную периодическую функцию (с периодами d_1, d_2, d_3 для соответствующих координат), то коэффициенты при разложении

в ряд Фурье e_{ij} равны $[1/(d_1 d_2 d_3) \tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}_n)]$, где $\boldsymbol{\xi}_n = 2\pi(n_1/d_1, n_2/d_2, n_3/d_3)$. Разложение e_{ij} в ряд Фурье будет иметь вид

$$e_{ij}(\mathbf{r}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} C_{n_1, n_2, n_3} e^{i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{r}},$$

где

$$C_{n_1, n_2, n_3} = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \int_{-d_1/2}^{d_1/2} \int_{-d_2/2}^{d_2/2} \int_{-d_3/2}^{d_3/2} e_{ij}(\mathbf{t}) e^{-i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{t}} d\mathbf{t}.$$

Интеграл, входящий в полученное выражение, представляет собой Фурье-преобразование тензора деформации отдельно взятой КТ \tilde{e}_{ij}^s (интегрирование производится по всей области значений). Таким образом, данное выражение можно переписать для e_{ij}^s как

$$C_{n_1, n_2, n_3} = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}_n).$$

В итоге выражение для тензора деформации массива КТ примет вид

$$e_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{d_1 d_2 d_3} \sum_{n_1, n_2, n_3} \tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}_n) e^{i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.12)$$

где суммирование производится по всем значениям n_1, n_2, n_3 , за исключением случая, когда $n_1 = n_2 = n_3 = 0$.

Рассмотрим случай кристалла, обладающего кубической симметрией. Модули упругости обладают тремя независимыми компонентами и могут быть представлены в форме

$$\lambda_{iklm} = C_{12} \delta_{ik} \delta_{lm} + C_{44} (\delta_{il} \delta_{mk} + \delta_{im} \delta_{kl}) + C_{an} \sum_{p=1}^3 \delta_{ip} \delta_{kp} \delta_{lp} \delta_{mp}, \quad (3.13)$$

где C_{11}, C_{12}, C_{44} – модули упругости, множитель $C_{an} = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$ описывает анизотропную часть тензора.

Подставим выражение (3.13) в выражение (3.5):

$$\left(C_{12} \delta_{ik} \delta_{lm} + C_{44} (\delta_{il} \delta_{mk} + \delta_{im} \delta_{kl}) + C_{an} \sum_{p=1}^3 \delta_{ip} \delta_{kp} \delta_{lp} \delta_{mp} \right) \xi_k \xi_m \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3},$$

$$\left(C_{12}\xi_i\xi_l + C_{44}(\xi^2 + \xi_i\xi_l) + C_{an} \sum_{p=1}^3 \delta_{ip}\delta_{lp}\xi_p^2 \right) \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3},$$

$$\{(C_{12} + C_{44})\xi_i\xi_l + C_{44}\delta_{il}\xi^2 + C_{an}\delta_{il}\xi_i^2\} \tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3}.$$

Введя понятие скалярного произведения $(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n \equiv \xi_i\tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi})$, перепишем полученное уравнение:

$$\tilde{G}_{ln}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\delta_{in}/(2\pi)^3 - (C_{12} + C_{44})\xi_i(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n}{C_{44}\delta_{il}\xi^2 + C_{an}\delta_{il}\xi_i^2},$$

произведем замену $l \rightarrow i$, получим:

$$\tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\delta_{in}/(2\pi)^3 - (C_{12} + C_{44})\xi_i(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_i^2}. \quad (3.14)$$

Используя скалярное произведение, преобразуем уравнение (3.14):

$$(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n \left\{ (C_{12} + C_{44})\xi_i + C_{44}\delta_{il}\frac{\xi^2}{\xi_l} + C_{an}\delta_{il}\frac{\xi_i^2}{\xi_l} \right\} = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3},$$

проведем суммирование по l :

$$(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n \left\{ (C_{12} + C_{44})\xi_i + C_{44}\frac{\xi^2}{\xi_i} + C_{an}\xi_i \right\} = \frac{\delta_{in}}{(2\pi)^3},$$

помножим полученное выражение на $\xi_i/(C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_i^2)$:

$$(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n \left\{ 1 + (C_{12} + C_{44})\frac{\xi_i^2}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_i^2} \right\} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\delta_{in}\xi_i}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_i^2},$$

проведем суммирование по i и запишем выражение относительно $(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n$:

$$(\boldsymbol{\xi}\tilde{G})_n = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\xi_n}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_n^2} \left\{ 1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{\xi_p^2}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_p^2} \right\}^{-1}. \quad (3.15)$$

Чтобы получить выражение для Фурье-преобразования тензора Грина, объединим уравнения (3.14) и (3.15):

$$\tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\delta_{in}}{C_{44}\xi^2 + C_{an}} - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{(C_{12} + C_{44})\xi_i\xi_n}{(C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_i^2)(C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_n^2)}$$

$$\times \left\{ 1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{\xi_p^2}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_p^2} \right\}^{-1}. \quad (3.16)$$

Для случая $C_{an} = 0$ выражение (3.16) сводится к хорошо известному изотропному результату [82].

Тензор деформации может быть получен из уравнения (3.10) путем подстановки в него выражения (3.16). Начальная деформация имеет вид

$$e_{ij}^T = \frac{a_M - a_{QD}}{a_{QD}} \delta_{ij} \equiv \epsilon_0 \delta_{ij}, \quad (3.17)$$

где a_M и a_{QD} – постоянные решетки для материала матрицы и КТ соответственно. С учетом выражения для тензора упругости (3.13) найдем, что

$$\lambda_{nkpr} e_{ij}^T = \epsilon_0 \delta_{pr} \left(C_{12} \delta_{nk} \delta_{pr} + C_{44} (\delta_{np} \delta_{kr} + \delta_{nr} \delta_{kp}) + C_{an} \sum_{f=1}^3 \delta_{nf} \delta_{kf} \delta_{pf} \delta_{rf} \right).$$

С учетом выражения $C_{an} = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$, проведя суммирование по всем индексам, получим:

$$\lambda_{nkpr} e_{ij}^T = \epsilon_0 (3C_{12} + 2C_{44} + C_{an}) \delta_{nk} = \epsilon_0 (C_{11} + 2C_{12}) \delta_{nk}. \quad (3.18)$$

Воспользовавшись выражениями (3.17) и (3.18), упростим выражение (3.10) для случая кубического кристалла:

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}) &= \epsilon_0 \delta_{ij} \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) - \frac{(2\pi)^3}{2} \left[\xi_j \tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi}) + \xi_i \tilde{G}_{jn}(\boldsymbol{\xi}) \right] \epsilon_0 (C_{11} + 2C_{12}) \delta_{nk} \xi_k \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) \\ &= \epsilon_0 \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) \left\{ \delta_{ij} - \frac{(2\pi)^3}{2} (C_{11} + 2C_{12}) \left[\xi_j \tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi}) + \xi_i \tilde{G}_{jn}(\boldsymbol{\xi}) \right] \xi_n \right\}. \end{aligned}$$

С учетом того, что скалярное произведение $(\boldsymbol{\xi} \tilde{G})_n \equiv \xi_i \tilde{G}_{in}(\boldsymbol{\xi})$, получим

$$\tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}) = \epsilon_0 \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) \left\{ \delta_{ij} - \frac{(2\pi)^3}{2} (C_{11} + 2C_{12}) \left[\xi_j (\boldsymbol{\xi} \tilde{G})_i + \xi_i (\boldsymbol{\xi} \tilde{G})_j \right] \right\}. \quad (3.19)$$

Используя выражение (3.15) для $(\boldsymbol{\xi} \tilde{G})_i$, получим конечную формулу для преобразования Фурье тензора деформаций от КТ в кристалле с кубической

симметрией:

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{ij}^s(\boldsymbol{\xi}) = \epsilon_0 \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) & \left\{ \delta_{ij} - \frac{(C_{11} + 2C_{12})\xi_i \xi_j / \xi^2}{1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{\xi_p^2}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_p^2}} \right. \\ & \left. \times \frac{1}{2} \left[\frac{1}{C_{44} + C_{an}\xi_i^2 / \xi^2} + \frac{1}{C_{44} + C_{an}\xi_j^2 / \xi^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Данное выражение и формула (3.12) дают аналитическое решение для распределения деформации в структуре с КТ. Отметим, что в выражение (3.20) информация о форме КТ входит только в качестве множителя $\tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi})$.

Выражение для преобразования Фурье тензора деформации кубически симметричной КТ для выделенного направления \mathbf{r} имеет вид

$$\tilde{e}_{rr}^s(\boldsymbol{\xi}) = \epsilon_0 \tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) \left[1 - \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{44}\xi^2 / \xi_r^2 + C_{an})^{-1}}{1 + (C_{12} + C_{44}) \sum_{p=1}^3 \frac{\xi_p^2}{C_{44}\xi^2 + C_{an}\xi_p^2}} \right]. \quad (3.21)$$

Решение для проекции поля упругих смещений на выделенное направление \mathbf{r} имеет вид

$$U_r(\mathbf{r}) = \int_0^r e_{rr}(r') dr' + U_{r0}, \quad \text{где} \quad U_{r0} = - \int_{r_0(\phi, \theta)}^{R_0(\phi, \theta)} e_{rr}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (3.22)$$

Здесь $e_{rr}(r')$ выражается в виде Фурье-разложения (3.12) по тензорам деформации отдельных КТ (3.21), U_{r0} – начальное смещение на поверхностной границе КТ и основной матрицы.

С учетом (3.12) и (3.22) окончательное выражение для проекции поля упругих смещений на \mathbf{r} имеет вид

$$U_r(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_L} \sum_{n_x, n_y, n_z} \tilde{e}_{rr}^s(\boldsymbol{\xi}_n) \frac{\exp(i\boldsymbol{\xi}_n \mathbf{r})}{(\boldsymbol{\xi}_n)_r} + U_{r0}, \quad (3.23)$$

где $e_{rr}^s(\boldsymbol{\xi}_n)$ задается соотношением (3.21).

Полученное решение может быть использовано для расчета углового распределения интенсивности диффузного рассеяния в кубическом кристалле, содержащем массив КТ.

3.2. Фурье-преобразование характеристической функции КТ различной формы

Фурье-преобразование характеристической функции представляет собой объемный интеграл следующего вида

$$\tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{QD} e^{i\boldsymbol{\xi}\mathbf{r}} dV, \quad (3.24)$$

где интегрирование проводится по всему объему КТ. Для большинства форм КТ функция $\tilde{\chi}_{QD}(\boldsymbol{\xi})$ может быть найдена аналитически.

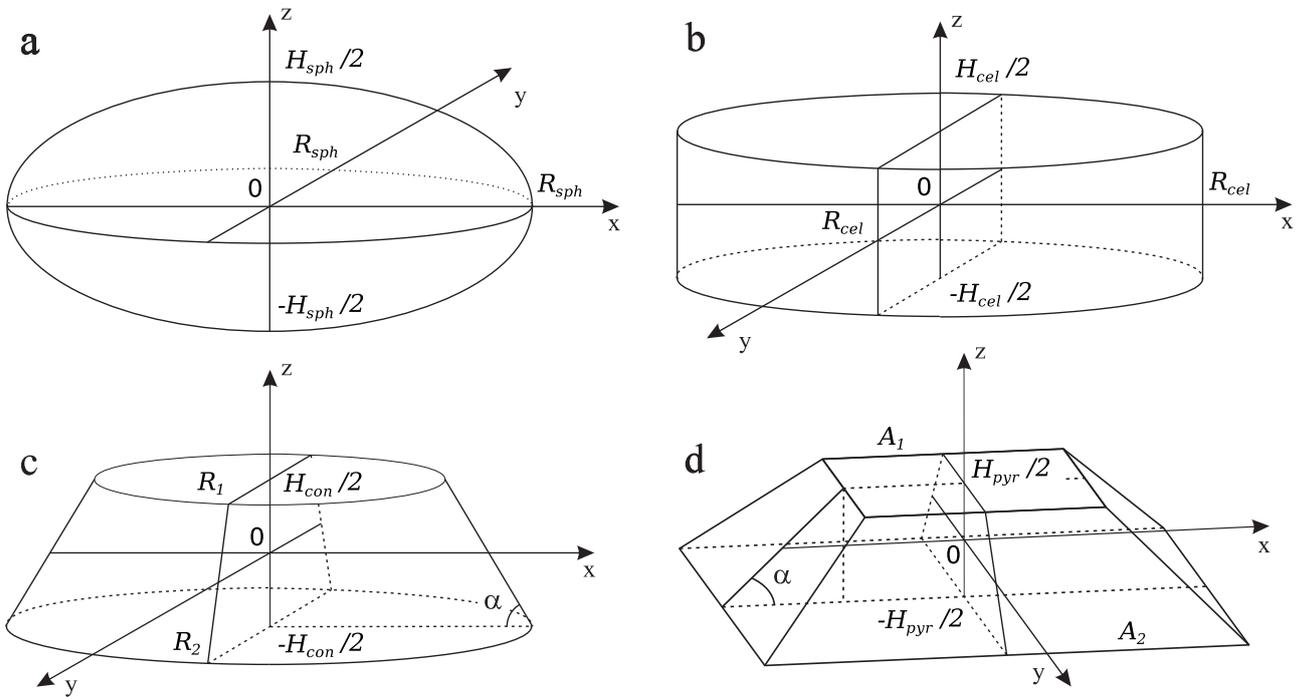


Рис. 3.1. Представления КТ различной формы: а) эллипсоидальная КТ: R_{sph} – радиус сфероида, H_{sph} – высота сфероида; б) цилиндрическая КТ: R_{cel} – радиус цилиндра, H_{cel} – высота цилиндра; в) КТ в форме усеченного конуса: R_1 , R_2 – радиусы оснований конуса, H_{con} – высота конуса и α – угол между основанием и образующей; д) КТ в форме усеченной пирамиды с квадратным основанием: A_1 , A_2 – размеры оснований пирамиды, H_{pyr} – высота пирамиды и α – угол между основанием и одной из сторон

3.2.1. Случай сфероидальных КТ

Распишем выражение (3.24) в цилиндрической системе координат (z, ρ, ϕ) для сфероидальной КТ (рис. 3.1 а):

$$\tilde{\chi}_{QD}^{sph}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{-H_{sph}/2}^{H_{sph}/2} dz \int_0^{R_z} d\rho \rho \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\boldsymbol{\xi}\mathbf{r}}, \quad (3.25)$$

где $R_z = \sqrt{x^2 + y^2}$. Поскольку интегрирование проводится по поверхности сфероида, удовлетворяющего уравнению $(x^2 + y^2)/R^2 + z^2/(H_{sph}/2) = 1$, можно записать $R_z = R\sqrt{1 - z^2/(H_{sph}/2)}$. В этом случае скалярное произведение $\boldsymbol{\xi}\mathbf{r} = \xi_z z + \xi_0 \rho \cos \phi$ и выражение (3.25) примет вид

$$\tilde{\chi}_{QD}^{sph}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{-H_{sph}/2}^{H_{sph}/2} dz e^{i\xi_z z} \int_0^{R_z} d\rho \rho \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\xi_0 \rho \cos \phi} = 2\pi \int_{-H_{sph}/2}^{H_{sph}/2} dz e^{i\xi_z z} \int_0^{R_z} d\rho \rho J_0(\xi_0 \rho), \quad (3.26)$$

где $J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{ix \cos \phi}$ – функция Бесселя нулевого порядка.

Покажем, что $\int_0^{R_z} \rho J_0(\xi_0 \rho) d\rho = \frac{R_z}{\xi_0} J_1(\xi_0 R_z)$, где $J_1(\xi_0 R_z)$ – функция Бесселя первого рода. Для этого воспользуемся разложением функции Бесселя в ряд Тейлора [144]. Рассмотрим интеграл от 0 до R_z :

$$\begin{aligned} \int_0^{R_z} \rho J_0(\xi_0 \rho) d\rho &= \int_0^{R_z} \rho \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+1)} \left(\frac{\xi_0 \rho}{2}\right)^{2m} d\rho \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+1)} \left(\frac{\xi_0}{2}\right)^{2m} \frac{R_z^{2m+1}}{2m+1} \\ &= \frac{R_z}{\xi_0} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+2)} \left(\frac{\xi_0 R_z}{2}\right)^{2m+1} = \frac{R_z}{\xi_0} J_1(\xi_0 R_z). \end{aligned}$$

Окончательно получаем:

$$\tilde{\chi}_{QD}^{sph}(\boldsymbol{\xi}) = 2\pi \int_{-H_{sph}/2}^{H_{sph}/2} \frac{R_z}{\xi_0} J_1(\xi_0 R_z) e^{i\xi_z z} dz. \quad (3.27)$$

3.2.2. Случай цилиндрических КТ

Для цилиндрических КТ достаточно в выражении для сфероидальной КТ (3.27) заменить R_z на радиус цилиндра R (рис. 3.1 b), тогда все множители за исключением экспоненты можно вынести за знак интеграла. Окончательное выражение для Фурье-преобразования характеристической функции цилиндрической КТ после взятия интеграла по экспоненте будет иметь вид

$$\tilde{\chi}_{QD}^{cel}(\boldsymbol{\xi}) = 4\pi \frac{R}{\xi_0 \xi_z} J_1(\xi_0 R) \sin\left(\frac{\xi_z H_{cel}}{2}\right). \quad (3.28)$$

3.2.3. Случай КТ в форме усеченного конуса

По аналогии с решением для сфероида получим:

$$\tilde{\chi}_{QD}^{cel}(\boldsymbol{\xi}) = 2\pi \int_{-H_{con}/2}^{H_{con}/2} \frac{R_z}{q_0} J_1(\xi_0 R_z) e^{i\xi_z z} dz,$$

где $R_z = R_1 \left(\frac{1}{2} + \frac{z}{H_{con}}\right) + R_2 \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_{con}}\right)$, определяется поверхностью КТ.

3.2.4. Случай КТ в форме усеченной пирамиды

Рассмотрим выражение для КТ в форме усеченной пирамиды с квадратным основанием (рис. 3.1 d). Расположим начало координат в центре основания усеченной пирамиды. Решение для $\tilde{\chi}_{QD}^s(\boldsymbol{\xi})$ будем искать в прямоугольной СК. Для упрощения математических выкладок вместо параметра H_{pyr} будем использовать H :

$$\tilde{\chi}_{QD}^{pyr}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{-x_0}^{x_0} dx \int_{-y_0}^{y_0} dy \int_0^H dz e^{-i\xi_x x} e^{-i\xi_y y} e^{-i\xi_z z}, \quad (3.29)$$

где $x_0 = A_1/2 - z \operatorname{ctg} \alpha$, $y_0 = A_2/2 - z \operatorname{ctg} \alpha$.

$$\begin{aligned}
\tilde{\chi}_{QD}^{pyr}(\boldsymbol{\xi}) &= \int_0^H dz e^{-i\xi_z z} \frac{i}{\xi_x} (e^{-i\xi_x x_0} - e^{i\xi_x x_0}) \frac{i}{\xi_y} (e^{-i\xi_y y_0} - e^{i\xi_y y_0}) \\
&= \frac{4}{\xi_x \xi_y} \int_0^H dz \sin(\xi_x [A_1/2 - z \operatorname{ctg} \alpha]) \sin(\xi_y [A_2/2 - z \operatorname{ctg} \alpha]) e^{-i\xi_z z} \\
&= \frac{2}{\xi_x \xi_y} \int_0^H dz [\cos(Q_1 - z \operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y)) - \cos(Q_2 - z \operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y))] e^{-i\xi_z z},
\end{aligned} \tag{3.30}$$

где

$$\begin{aligned}
Q_1 &= (\xi_x A_1 - \xi_y A_2)/2, \\
Q_2 &= (\xi_x A_1 + \xi_y A_2)/2.
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Рассмотрим произведение экспоненты и первого слагаемого в квадратных скобках из (3.30):

$$\begin{aligned}
&\cos(Q_1 - z \operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y)) (\cos(\xi_z z) - i \sin(\xi_z z)) \\
&= [\cos(Q_1 - z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y) - \xi_z]) + \cos(Q_1 - z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y) + \xi_z]) \\
&\quad - i \sin(Q_1 - z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y) - \xi_z]) - i \sin(-Q_1 + z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y) + \xi_z])].
\end{aligned}$$

Аналогично представим произведение экспоненты и второго слагаемого в квадратных скобках из (3.30):

$$\begin{aligned}
&\cos(Q_2 - z \operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y)) (\cos(\xi_z z) - i \sin(\xi_z z)) \\
&= [\cos(Q_2 - z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y) - \xi_z]) + \cos(Q_2 - z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y) + \xi_z]) \\
&\quad - i \sin(Q_2 - z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y) - \xi_z]) - i \sin(-Q_2 + z [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y) + \xi_z])].
\end{aligned}$$

Введем следующий набор переменных:

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y) + \xi_z]/2, \\
\xi_2 &= [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x - \xi_y) - \xi_z]/2, \\
\xi_3 &= [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y) + \xi_z]/2, \\
\xi_4 &= [\operatorname{ctg} \alpha (\xi_x + \xi_y) - \xi_z]/2.
\end{aligned} \tag{3.32}$$

С учетом (3.32) интеграл в (3.30) примет вид

$$\begin{aligned}
& \int_0^H dz [\cos(Q_1 - 2z\xi_1) + \cos(Q_1 - 2z\xi_2) - \cos(Q_2 - 2z\xi_3) - \cos(Q_2 - 2z\xi_4)] \\
& + i \int_0^H dz [\sin(Q_1 - 2z\xi_1) - \sin(Q_1 - 2z\xi_2) + \sin(Q_2 - 2z\xi_3) - \sin(Q_2 - 2z\xi_4)] \\
& = - [\sin(Q_1 - 2H\xi_1) - \sin Q_1 - i \cos(Q_1 - 2H\xi_1) + i \cos Q_1] / (2\xi_1) \\
& \quad - [\sin(Q_1 - 2H\xi_2) - \sin Q_1 + i \cos(Q_1 - 2H\xi_2) - i \cos Q_1] / (2\xi_2) \\
& \quad + [\sin(Q_2 - 2H\xi_3) - \sin Q_2 + i \cos(Q_2 - 2H\xi_3) - i \cos Q_2] / (2\xi_3) \\
& \quad + [\sin(Q_2 - 2H\xi_4) - \sin Q_2 - i \cos(Q_2 - 2H\xi_4) + i \cos Q_2] / (2\xi_4) \\
& = [\sin(H\xi_1) \cos(Q_1 - H\xi_1) - i \sin(H\xi_1) \sin(Q_1 - H\xi_1)] / \xi_1 \\
& \quad + [\sin(H\xi_2) \cos(Q_1 - H\xi_2) + i \sin(H\xi_2) \sin(Q_1 - H\xi_2)] / \xi_2 \\
& \quad - [\sin(H\xi_3) \cos(Q_2 - H\xi_3) + i \sin(H\xi_3) \sin(Q_2 - H\xi_3)] / \xi_3 \\
& \quad - [\sin(H\xi_4) \cos(Q_2 - H\xi_4) - i \sin(H\xi_4) \sin(Q_2 - H\xi_4)] / \xi_4 \\
& = H \{ \sin_c(H\xi_1) \exp[-i(Q_1 - H\xi_1)] + \sin_c(H\xi_2) \exp[i(Q_1 - H\xi_2)] \\
& \quad - \sin_c(H\xi_3) \exp[i(Q_2 - H\xi_3)] - \sin_c(H\xi_4) \exp[-i(Q_2 - H\xi_4)] \},
\end{aligned}$$

где $\sin_c \theta = \sin \theta / \theta$.

Конечное выражение для Фурье-преобразования характеристической функции КТ в форме усеченной пирамиды примет вид

$$\begin{aligned}
\tilde{\chi}_{QD}^{pyr}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{H_{pyr}}{\xi_x \xi_y} & [\sin_c(H_{pyr} \xi_1) e^{-i(Q_1 - H_{pyr} \xi_1)} + \sin_c(H_{pyr} \xi_2) e^{i(Q_1 - H_{pyr} \xi_2)} \\
& - \sin_c(H_{pyr} \xi_3) e^{i(Q_2 - H_{pyr} \xi_3)} - \sin_c(H_{pyr} \xi_4) e^{-i(Q_2 - H_{pyr} \xi_4)}],
\end{aligned} \tag{3.33}$$

где ξ_1, ξ_2, ξ_3 и ξ_4 задаются выражениями (3.32); Q_1 и Q_2 – (3.31).

3.3. Диффузное рассеяние в кристалле с массивом КТ

Рассмотрим КТ, имеющие форму сфероида, цилиндра, усеченного конуса и усеченной пирамиды. Воспользуемся выражением для амплитуды интенсивности диффузного рассеяния от кристаллической структуры с некоррелированными КТ (2.28), полученным в разделе 2.2:

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta \int_{r_0(\phi, \theta)}^{R_0(\phi, \theta)} dr r^2 \delta u_r(\phi, \theta, r) e^{iqr \cos \theta}.$$

В данном выражении форму КТ определяет $r_0(\phi, \theta)$ – нижний предел интегрирования по r . Верхний предел интегрирования $R_0(\phi, \theta)$ согласно (2.18) в разделе 2.1 определяется границами параллелепипеда, описанного вокруг КТ со сторонами d_x, d_y, d_z , равными расстоянию между соседними КТ в массиве для соответствующих направлений, центр которого совпадает с центром КТ:

$$R_0(\theta, \phi) = \begin{cases} \frac{d_z}{2|\cos \theta \cos \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| \leq \frac{d_x}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| \leq \frac{d_y}{d_x}; \\ \frac{d_x}{2|\sin \theta \cos \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| > \frac{d_x}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| \leq \frac{d_y}{d_x}; \\ \frac{d_z}{2|\cos \theta \sin \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| \leq \frac{d_y}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| > \frac{d_y}{d_x}; \\ \frac{d_x}{2|\sin \theta \sin \phi|}, & \text{при } |\tan \theta| > \frac{d_y}{d_z} \text{ и } |\tan \phi| > \frac{d_y}{d_x}. \end{cases}$$

В силу прямоугольной симметрии расположения КТ в массиве, а также симметрии их формы можно сократить диапазон интегрирования по ϕ до $(0; \pi/2)$. Выражение для амплитуды интенсивности рассеяния примет вид

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i4 \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^{\pi/2} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \cos \theta \int_{r_0(\theta)}^{R_0(\phi, \theta)} dr r^2 \delta u_r(\phi, \theta, r) e^{iqr \cos \theta}. \quad (3.34)$$

Будем считать, что внутри дефекта деформации носят случайный характер (2.25). Вывод для амплитуды диффузного рассеяния внутри КТ (2.25) аналогичен выводу Фурье-преобразования характеристической функции КТ и подробно изложен для КТ всех рассматриваемых форм в разделе 3.2.

3.3.1. Случай сфероидальных КТ

Рассмотрим КТ в форме сфероида (эллипсоида вращения) с радиусом R_{sph} и высотой $H_{sph}/2$ (рис. 2.2):

$$D_{inQD}(\mathbf{q}) = 2\pi \int_{-H_{sph}/2}^{H_{sph}/2} \frac{R_z}{q_0} J_1(q_0 R_z) e^{iq_z z} dz,$$

где $R_z = R_{sph} \sqrt{1 - z^2/(H_{sph}/2)^2}$, определяется границами КТ (смотри вывод в разделе 3.2).

Согласно (2.30) нижний предел интегрирования по r определяется границами КТ:

$$r_0(\theta) = R_{sph} \left[1 + \left(\frac{R_{sph}^2}{(H_{sph}/2)^2} - 1 \right) \cos^2 \theta \right]^{-1/2}.$$

В полученном выражении (3.34) в силу симметрии сфероида можно сократить интервал интегрирования по ϕ до $(0; \pi/2)$. Разделим интервал интегрирования по θ на две части $[0; \pi/2]$ и $[\pi/2; \pi]$ (в силу симметрии сфероида относительно латеральной плоскости). Для интеграла по интервалу $[\pi/2; \pi]$ произведем замену переменных $\theta' = \theta - \pi/2$. Рассмотрим, каким образом это отразится на подынтегральном выражении:

$$\begin{aligned} \cos \theta \sin \theta &= -\sin \theta' \cos \theta', \\ e^{iqr \cos \theta} &= e^{-iqr \sin \theta'}, \\ r_0(\theta) &= r_0(\theta' + \pi/2) = r_0'(\theta'), \\ R_0(\phi, \theta) &= R_0(\phi, \theta' + \pi/2) = R_0'(\phi, \theta'), \\ \delta u_r(\phi, \theta) &= u_r(\phi, \theta' + \pi/2) = \delta u_r'(\phi, \theta'). \end{aligned} \tag{3.35}$$

В итоге получим окончательное выражение:

$$D_{outQD}(\mathbf{q}) = -i8 \frac{\mathbf{h}\mathbf{q}}{q} \int_0^{\pi/4} d\phi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta \times \left(\int_{r_0(\theta)}^{R_0(\phi, \theta)} dr r^2 \delta u_r(\phi, \theta, r) e^{iqr \cos \theta} - \int_{r'_0(\theta)}^{R'_0(\phi, \theta)} dr r^2 \delta u'_r(\phi, \theta, r) e^{-iqr \sin \theta} \right). \quad (3.36)$$

3.3.2. Случай цилиндрических КТ

Рассмотрим КТ цилиндрической формы (рис. 3.1 б). По аналогии с решением для сфероида заменив R_z на R_{cel} и проинтегрировав по z , получим:

$$D_{inQD}(\mathbf{q}) = 4\pi \frac{R_{cel}}{q_0 q_z} J_1(q_0 R_{cel}) \sin \frac{q_z H_{cel}}{2} dz.$$

Решение для $D_{outQD}(\mathbf{q})$ аналогично решению для сфероида (3.36) с начальной границей интегрирования по r , равной

$$r_0(\theta) = \begin{cases} \frac{H_{cel}}{2|\cos \theta|}, & \text{при } \theta \in \left[0; \arctan \frac{R_{cel}}{H_{cel}/2}\right] \cup \left[\pi - \arctan \frac{R_{cel}}{H_{cel}/2}; \pi\right]; \\ \frac{R_{cel}}{\sin \theta}, & \text{при } \theta \in \left(\arctan \frac{R_{cel}}{H_{cel}/2}; \pi - \arctan \frac{R_{cel}}{H_{cel}/2}\right). \end{cases}$$

3.3.3. Случай КТ в форме усеченного конуса

Рассмотрим КТ в форме усеченного конуса (рис. 3.1 с). По аналогии с решением для сфероида получим:

$$D_{inQD}(\mathbf{q}) = 2\pi \int_{-H_{con}/2}^{H_{con}/2} \frac{R_z}{q_0} J_1(q_0 R_z) e^{iq_z z} dz,$$

где $R_z = R_1 \left(\frac{1}{2} + \frac{z}{H_{con}}\right) + R_2 \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_{con}}\right)$, определяется границами КТ.

$D_{outQD}(\mathbf{q})$ определяется выражением (3.34) с начальной границей интегрирования по r , равной

$$r_0(\theta) = \begin{cases} \frac{H_{con}}{2|\cos \theta|}, & \text{при } \theta \in \left[0; \arctan \frac{R_1}{H_{con}/2}\right] \cup \left[\pi - \arctan \frac{R_2}{H_{con}/2}; \pi\right]; \\ \frac{R_2 - \frac{H_{con}/2}{\tan \alpha}}{\sin \theta + \frac{\cos \theta}{\tan \alpha}}, & \text{при } \theta \in \left(\arctan \frac{R_1}{H_{con}/2}; \pi - \arctan \frac{R_2}{H_{con}/2}\right). \end{cases}$$

3.3.4. Случай КТ в форме усеченной пирамиды

Рассмотрим КТ в форме усеченной пирамиды с квадратным основанием (рис. 3.1 d):

$$D_{inQD}(\mathbf{q}) = \frac{H}{q_x q_y} [\sin_c(Hq_1)e^{-i(Q_1-Hq_1)} + \sin_c(Hq_2)e^{i(Q_1-Hq_2)} - \sin_c(Hq_3)e^{i(Q_2-Hq_3)} - \sin_c(Hq_4)e^{-i(Q_2-Hq_4)}],$$

где $\sin_c x = \sin x/x$, q_1 , q_2 , q_3 и q_4 задаются выражениями:

$$q_1 = [\text{ctg } \alpha(q_x - q_y) + q_z]/2,$$

$$q_2 = [\text{ctg } \alpha(q_x - q_y) - q_z]/2,$$

$$q_3 = [\text{ctg } \alpha(q_x + q_y) + q_z]/2,$$

$$q_4 = [\text{ctg } \alpha(q_x + q_y) - q_z]/2.$$

Q_1 и Q_2 задаются выражениями:

$$Q_1 = (q_x A_1 - q_y A_2)/2,$$

$$Q_2 = (q_x A_1 + q_y A_2)/2.$$

Вывод решения см. в разделе 3.2. $D_{outQD}(\mathbf{q})$ определяется выражением (3.34) с начальной границей интегрирования по r , равной

$$r_0(\phi, \theta) = \begin{cases} \frac{H_{pyr}}{2 \cos \phi |\cos \theta|}, & \text{при } \theta \in \left[0; \arctan \frac{A_1}{H_{pyr}/2}\right] \cup \left[\pi - \arctan \frac{A_2}{H_{pyr}/2}; \pi\right]; \\ \frac{A_2 - (H_{pyr}/2) / \tan \alpha}{\cos \phi (\sin \theta + \cos \theta / \tan \alpha)}, & \text{при } \theta \in \left(\arctan \frac{A_1}{H_{pyr}/2}; \pi - \arctan \frac{A_2}{H_{pyr}/2}\right). \end{cases}$$

3.4. Численное моделирование диффузного рассеяния на основе метода функции Грина

В рамках предложенного подхода с использованием метода функции Грина проведено численное моделирование полей атомных смещений от КТ и углового распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве в зависимости от концентрации КТ. Расчеты проводились для КТ, имеющих форму сфероида, цилиндра, усеченного конуса и усеченной пирамиды с квадратным основанием.

Отметим, что модель цилиндрической КТ – первая модель, которая использовалась для анализа диффузного рассеяния от сверхрешетки Si/Ge с КТ Ge [3]. В работе [3] рассматривался точечный дефект в изотропном полубесконечном кристалле с учетом упругих релаксаций на свободной поверхности. Рассмотрение сфероидальных КТ продиктовано тем, что эта модель хорошо описывает часто встречающиеся КТ в форме эллипсоида [75]. Также модель КТ сфероидальной формы хорошо аппроксимирует часто встречающиеся линзовидные КТ [146]. Модель усеченного конуса хорошо описывает КТ имеющие форму усеченной пирамиды [147], однако не учитывает ориентацию КТ относительно плоскости дифракции, поэтому также рассматривается более сложная и требовательная к расчетным ресурсам модель пирамидальной КТ.

Моделирование диффузного рассеяния выполнено для симметричного отражения (004) CuK_α - излучения. Карты распределения интенсивности рассеяния представлены в логарифмическом масштабе, отношение значений интенсивности между соседними контурами равно 0.38. Карты распределения упругих смещений показаны в линейном масштабе, значение смещений между соседними линиями составляет 10^{-3} нм. Высота для сфероидальных КТ равна $H_{sph} = 5$ нм, латеральный диаметр $2R_{sph} = 20$ нм.

Для других моделей КТ параметры, задающие вертикальные и латеральные размеры, определяются таким образом, чтобы они были оптимально вписаны в вышеуказанный сфероид с учетом равенства объемов.

Для цилиндрической КТ:

$$\text{высота: } H_{cel} = H_{ell}(2/3)^{1/3};$$

$$\text{диаметр: } 2R_{cel} = 2R_{ell}(2/3)^{1/3}.$$

Для КТ в форме усеченного конуса:

$$\text{высота: } H_{con} = H_{ell}(2/3)^{1/3};$$

$$\text{диаметр основания: } 2R_1 = \sqrt{4R_{ell}^2 \left(\frac{2}{3}\right)^{1/3} - \frac{H_{ell}^2}{3 \tan^2 \alpha} - \frac{H_{ell}}{\tan \alpha}};$$

$$\text{диаметр основания: } 2R_2 = 2R_1 + 2H_{con} \tan \alpha,$$

где α – угол между образующей конуса и его нижним основанием.

Для КТ в форме усеченной пирамиды:

$$\text{высота: } H_{pyr} = H_{ell}(2/3)^{1/3};$$

$$\text{длина стороны основания: } A_1 = \sqrt{R_{ell}^2 \left(\frac{2\pi}{3}\right)^{2/3} - \frac{H_{ell}^2}{3 \tan^2 \alpha} - \frac{H_{ell}}{\tan \alpha}};$$

$$\text{длина стороны основания: } A_2 = A_1 + 2H_{pyr} \tan \alpha,$$

где α – угол между основанием и боковой стороной.

Согласно этому выбраны вертикальные $H_{cel} = H_{con} = H_{pyr} = 4.37$ нм и латеральные размеры $2R_{cel} = 17.47$ нм, $2R_1 = 14.15$ нм, $2R_2 = 22.89$ нм, $A_1 = 7.46$ нм, $A_2 = 16.2$ нм. Здесь нижний индекс указывает на форму КТ; R_1 , R_2 – радиусы верхнего и нижнего оснований усеченного конуса; A_1 , A_2 – длины сторон верхнего и нижнего оснований усеченной пирамиды. На рисунках для моделей КТ в форме усеченного конуса и усеченной пирамиды углы α между боковой стороной (образующей) и основанием равны и составляют 45 угловых градусов.

Карты распределения поля упругих смещений и интенсивности диффузного рассеяния в случае малой объемной плотности КТ в кристаллической матрице представлены на рис. 3.2. Этот случай предполагает распространение поля атомных смещений от КТ на достаточно большие расстояния.

На рис. 3.3, 3.5 показаны карты распределения упругих смещений и диффузного рассеяния для КТ большой объемной плотности. Вертикальное расстояние между стекированными КТ составляет 20 нм, расстояние в латеральном направлении – 30 нм. Такое пространственное расположение КТ характерно для наноструктурированных сверхрешеток. В данном случае поля упругих атомных смещений быстро затухают с расстоянием. Следовательно, форма КТ слабо влияет на угловое распределение диффузного рассеяния (рис. 3.3 b). Поэтому основным фактором при анализе диффузного рассеяния от сверхрешеток с КТ является не сама форма нановключений, а отношение высоты КТ к ее латеральному размеру [146]. Несмотря на то, что различия в угловом распределении диффузного рассеяния, связанные с формой КТ, существуют (рис. 3.3 b), эти различия малозаметны при учете флуктуации размеров КТ и их пространственной корреляции.

Атомные смещения вблизи поверхности КТ оказывают влияние на формирование распределения интенсивности диффузного рассеяния вдали от узла обратной решетки. В частности, контуры равной интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с конусообразными КТ имеют характерный наклон, связанный с величиной угла α (рис. 3.2 b).

Угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с пирамидальными КТ зависит от ориентации наноструктур относительно плоскости дифракции. На рис. 3.4–3.6 показаны два случая положения плоскости дифракции относительно конфигурации КТ для азимутальных углов в 45 (a) и 0 (b) угловых градусов. На рис. 3.4 представлены поля упругих смещений (c, d) для случая малой объемной плотности пирамидальных КТ в

кристаллической матрице. Среднее расстояние между соседними КТ составляет 250 нм в вертикальном и латеральном направлениях. Соответствующие карты распределения диффузного рассеяния изображены на рис. 3.4 e, f.

Поведение упругих деформаций, а следовательно, и угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния сильно зависят от несоответствия параметров решетки КТ и кристаллической матрицы. Для относительно больших рассогласований параметров решетки ($\varepsilon_0^{(1)} = 0.016$) существенным становится вклад хуанговского рассеяния, что подтверждается проявлением «нулевой линии» при $q_z = 0$ на картах диффузного рассеяния (рис. 3.5; 3.6 c, d, e, f). Отметим, что в случае больших рассогласований параметров влияние формы КТ на диффузное рассеяние менее выражено (рис. 3.7). Для слабых деформаций ($\varepsilon_0^{(2)} = 0.003$) преобладает рассеяние Стокса – Вильсона, обусловленное формой остова КТ, при этом четкость «нулевой линии» пропадает.

Таким образом, в методе высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии при анализе диффузного рассеяния от сверхрешеток с КТ достаточно использовать наиболее простую для численных расчетов модель квантовых точек. Наиболее предпочтительной является модель сфероидальной КТ.

Проведенные исследования показали, что разработанный метод численного расчета углового распределения диффузного рассеяния может быть использован для неразрушающего количественного рентгенодифракционного анализа полупроводниковых систем с КТ разной формы.

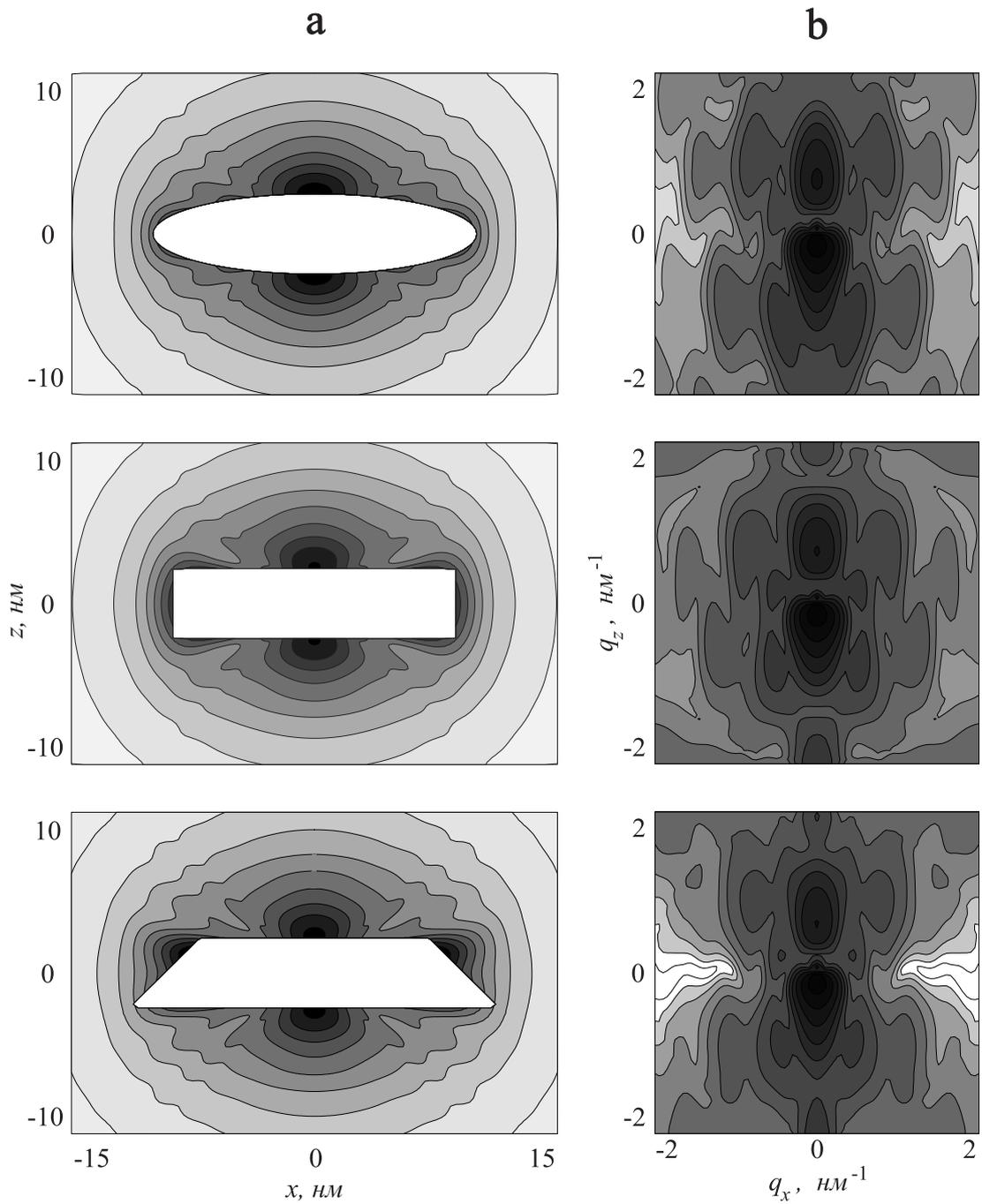


Рис. 3.2. Двумерные карты распределения упругих смещений (а) и диффузного рассеяния (б) от кристаллической матрицы GaAs с КТ InGaAs в форме эллипсоида, цилиндра, и усеченного конуса (сверху вниз). Расстояние между соседними КТ в вертикальном и латеральном направлениях – 250 нм. Рассогласование решеток КТ и матрицы $\varepsilon = 0.003$

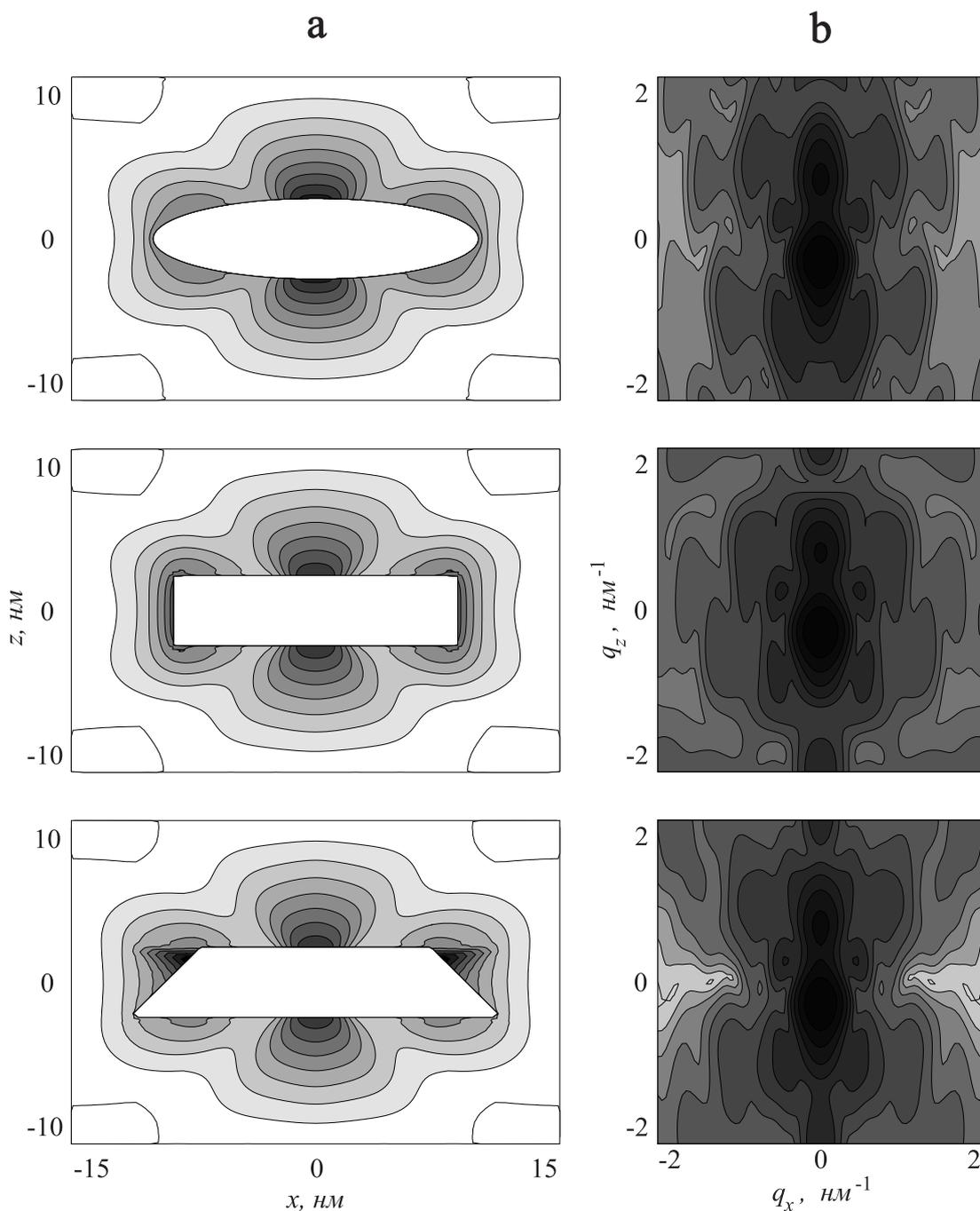


Рис. 3.3. Двумерные карты распределения упругих смещений (а) и диффузногорассеяния (б) от сверхрешетки InAs/InGaAs с некоррелированными КТ InAs в форме эллипсоида, цилиндра и усеченного конуса (сверху вниз). Расстояние между соседними КТ в вертикальном направлении – 20 нм, в латеральном направлении – 30 нм. Рассогласование решеток КТ и матрицы $\varepsilon = 0.003$

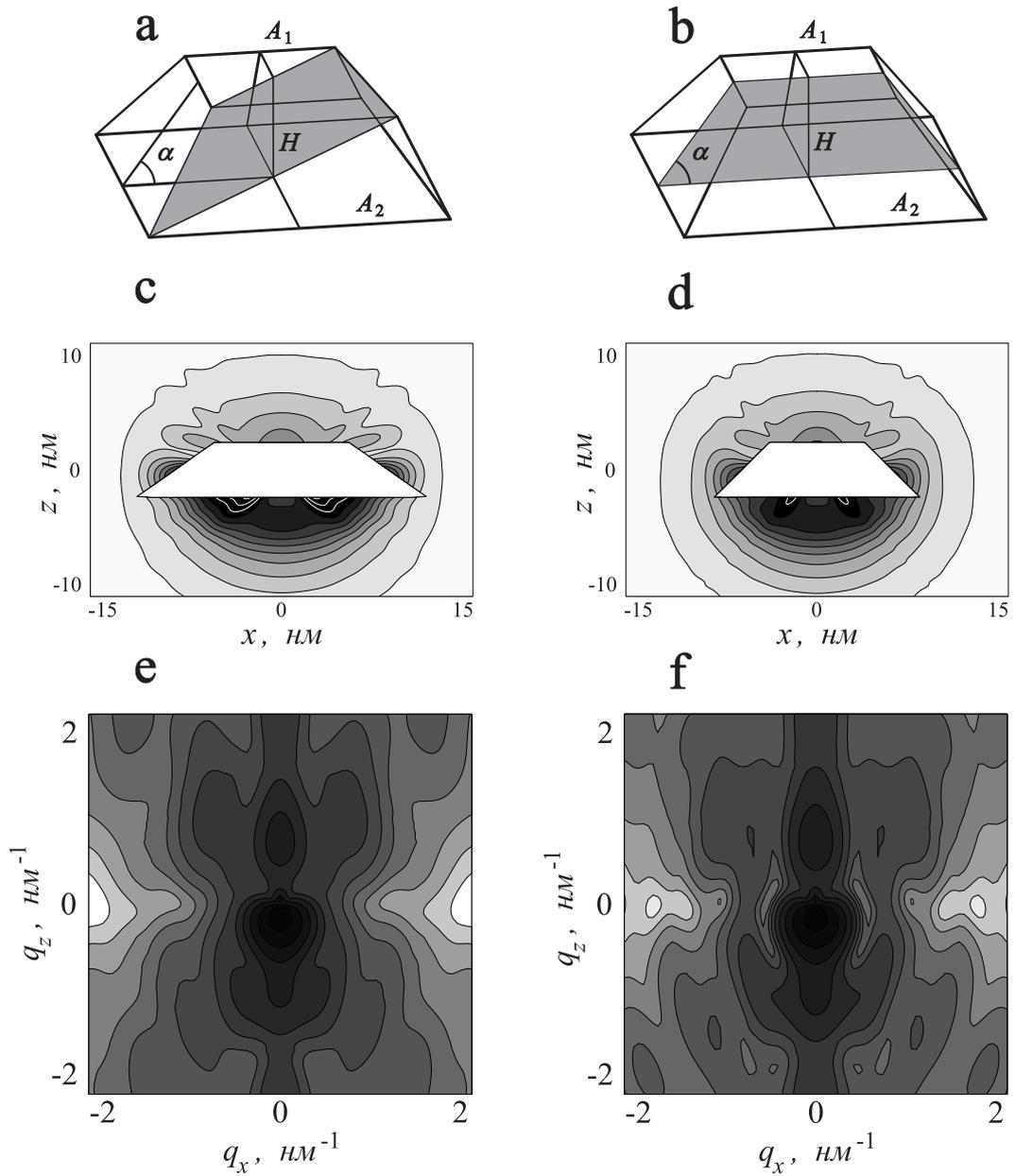


Рис. 3.4. Ориентация плоскости дифракции (показана серым цветом) относительно конфигурации КТ (а, б) и соответствующие двумерные карты упругих деформаций (с, d) и углового распределения диффузного рассеяния (е, f). Расстояние между соседними КТ в вертикальном и латеральном направлениях – 250 нм.

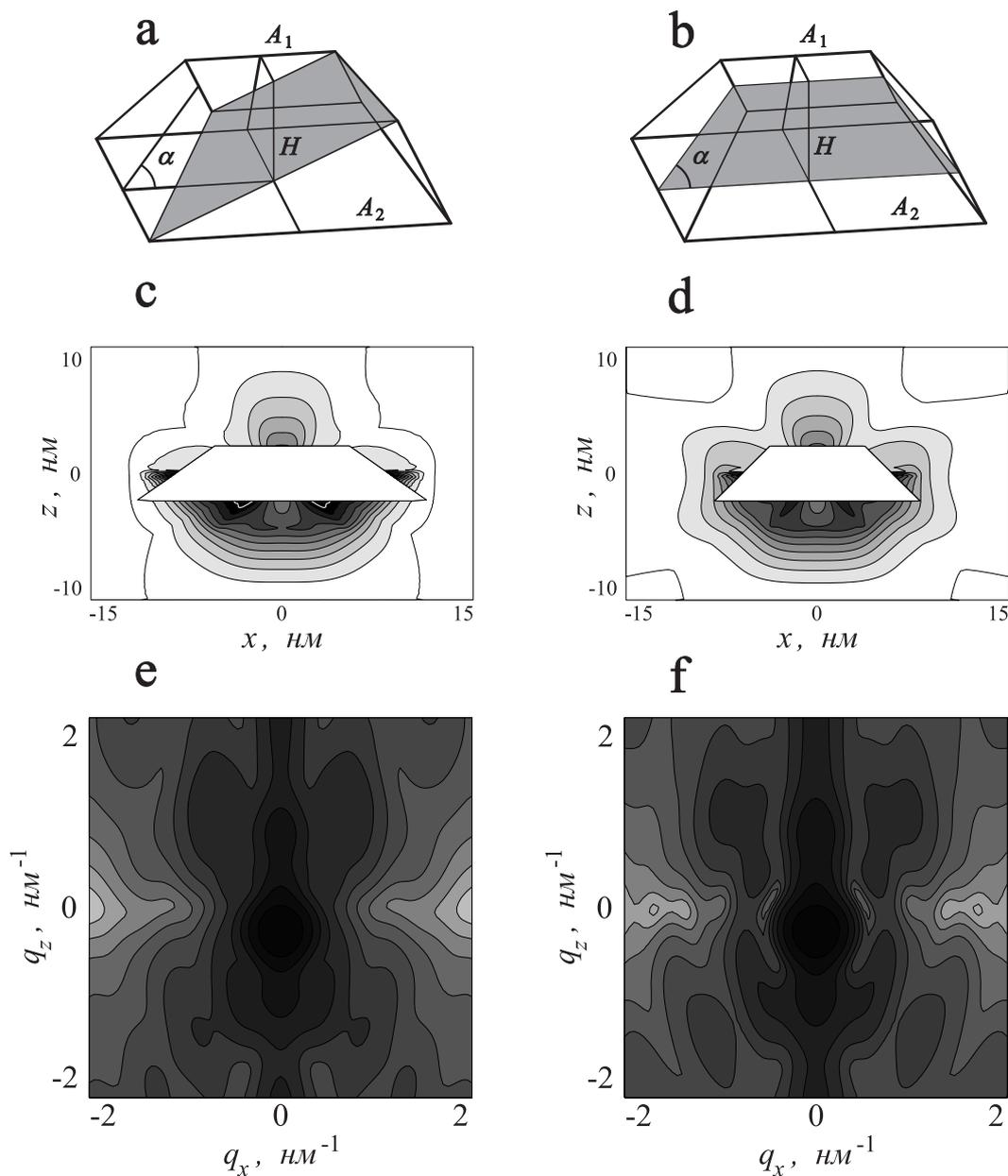


Рис. 3.5. Ориентация плоскости дифракции (показана серым цветом) относительно конфигурации КТ (а, б) и соответствующие двумерные карты упругих деформаций (с, д) и углового распределения диффузного рассеяния (е, ф). Расстояние между соседними КТ в вертикальном направлении – 20 нм, в латеральном направлении – 30 нм

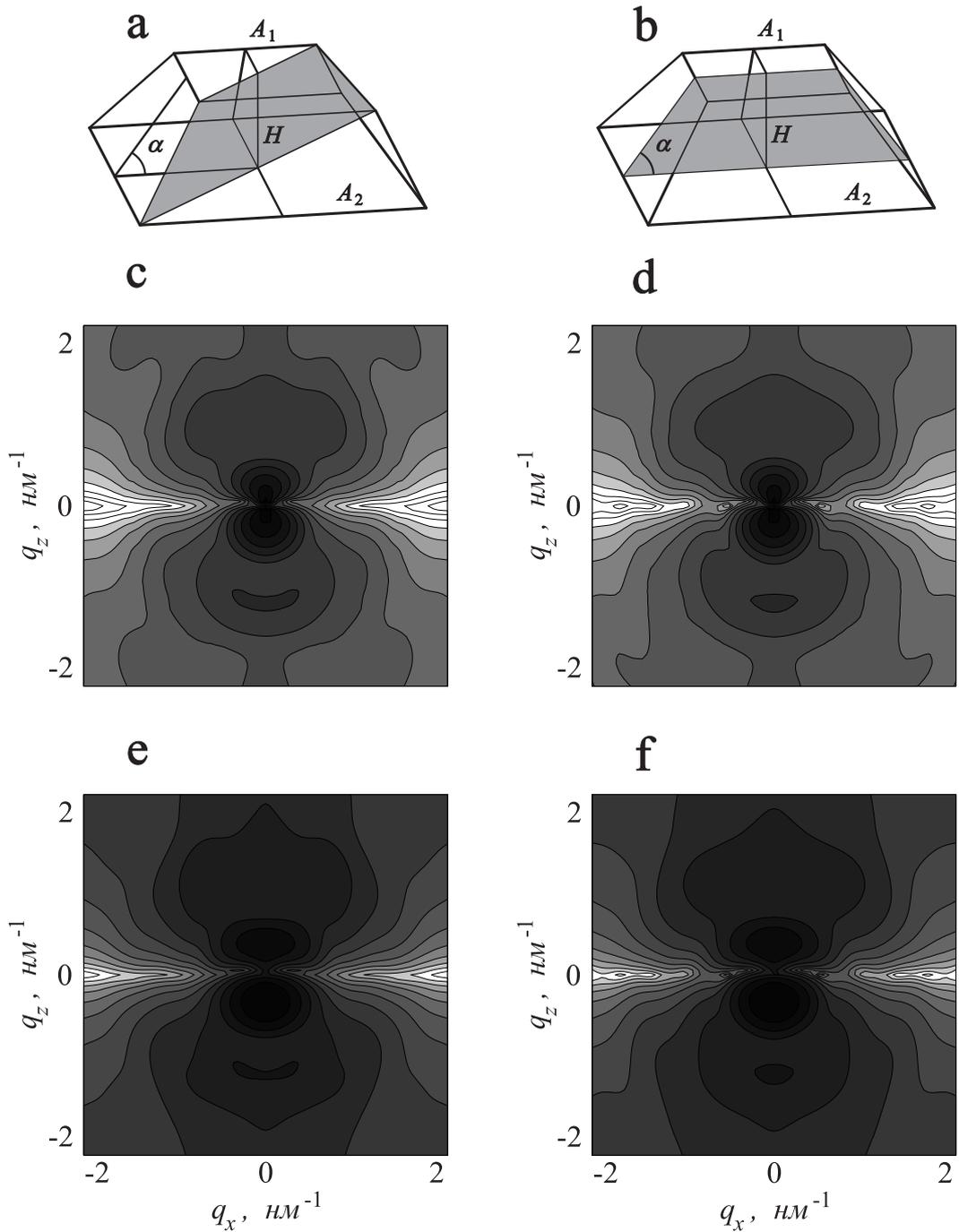


Рис. 3.6. Ориентация плоскости дифракции (показана серым цветом) относительно конфигурации КТ (a, b) и двумерные карты углового распределения диффузного рассеяния (c, d, e, f) от сверхрешетки InAs/GaAs с некоррелированными квантовыми точками InAs в форме усеченной пирамиды. Расстояние между соседними КТ в вертикальном направлении – 20 нм, в латеральном направлении – 30 нм (c, d); в вертикальном и латеральном направлениях – 250 нм (e, f)

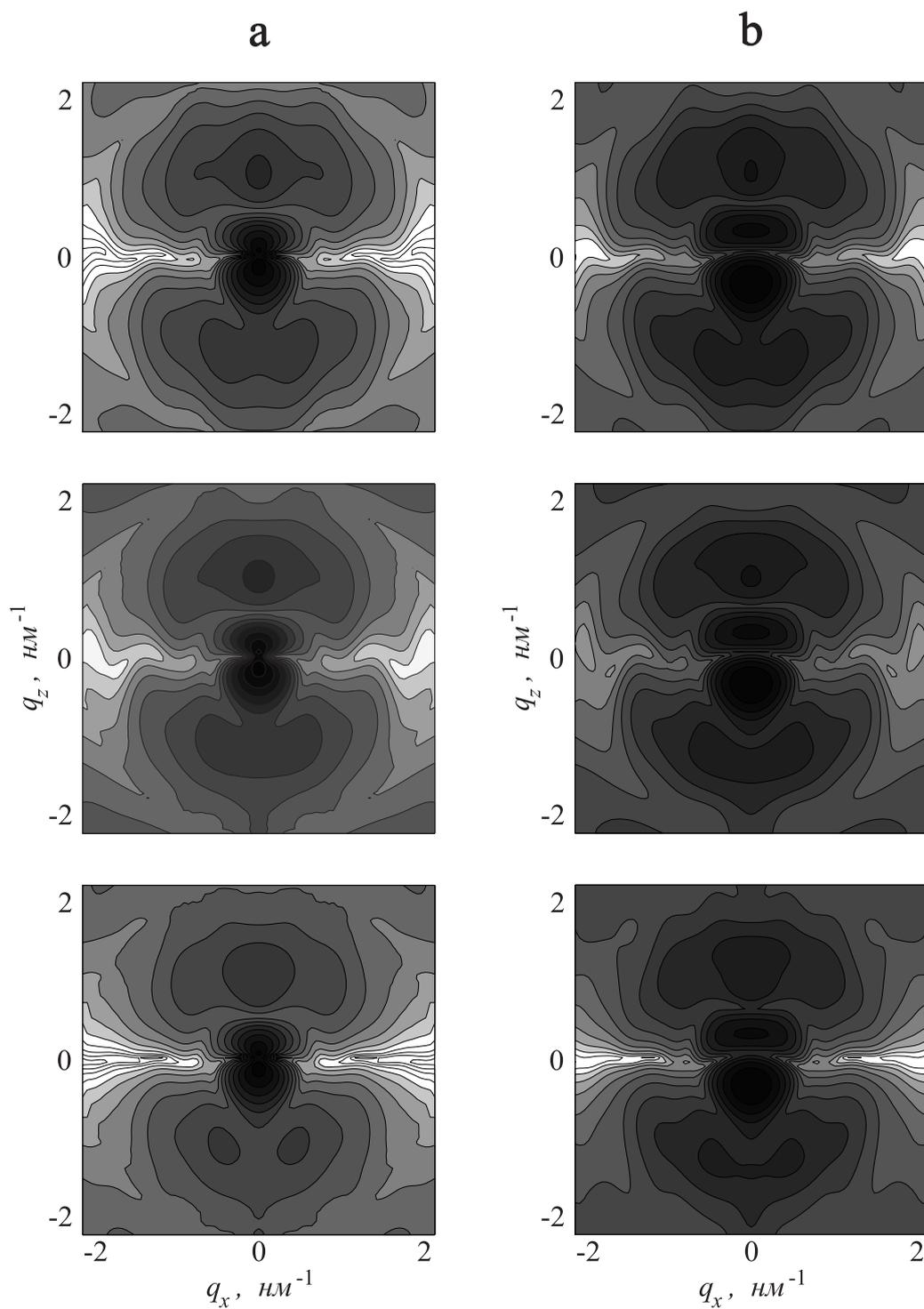


Рис. 3.7. Двумерные карты распределения диффузного рассеяния от сверхрешетки InAs/InGaAs с некоррелированными КТ InAs в форме эллипсоида, цилиндра и усеченного конуса (сверху вниз). Расстояние между соседними КТ в вертикальном и латеральном направлении – 250 нм (а); в вертикальном направлении – 20 нм, в латеральном направлении – 30 нм (б). Рассогласование решеток КТ и матрицы $\varepsilon = 0.016$

3.5. Сравнение двух подходов

С использованием аналитического метода, описанного выше, были построены карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от сфероидных КТ с характерными размерами: высота $l_z = 5$ нм, радиус $R = 10$ нм. Карты представлены в логарифмическом масштабе, расстояние между соседними линиями составляет 0.38. При расчетах в выражении (2.35) мы ограничились шестью первыми членами разложения. При расчетах интенсивности диффузного рассеяния для КТ с учетом влияния соседних КТ (2.16), (2.26) мы ограничиваемся расстоянием d_x, d_y, d_z для соответствующего направления (по сути представляющим собой расстояние между КТ в кристалле, ограничивающим распространение поля смещений). При изменении d_x, d_y, d_z характер диффузного рассеяния меняется следующим образом: при уменьшении расстояния между КТ интенсивность двух главных максимумов уменьшается, и они «размываются» (рис. 3.8, 3.9, 3.11).

Следует отметить, что для значительно удаленных друг от друга КТ вид граничных условий для поля упругих смещений не влияет на характер диф-

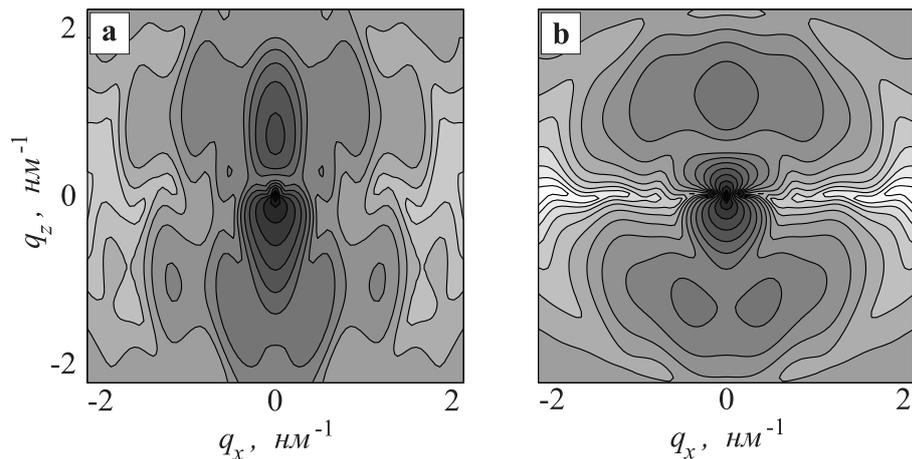


Рис. 3.8. Расчетные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с КТ в форме сфероида, полученные с использованием разложения по мультиполям. Рассогласование решеток КТ и матрицы: а) $\varepsilon = 0.003$, б) $\varepsilon = 0.016$

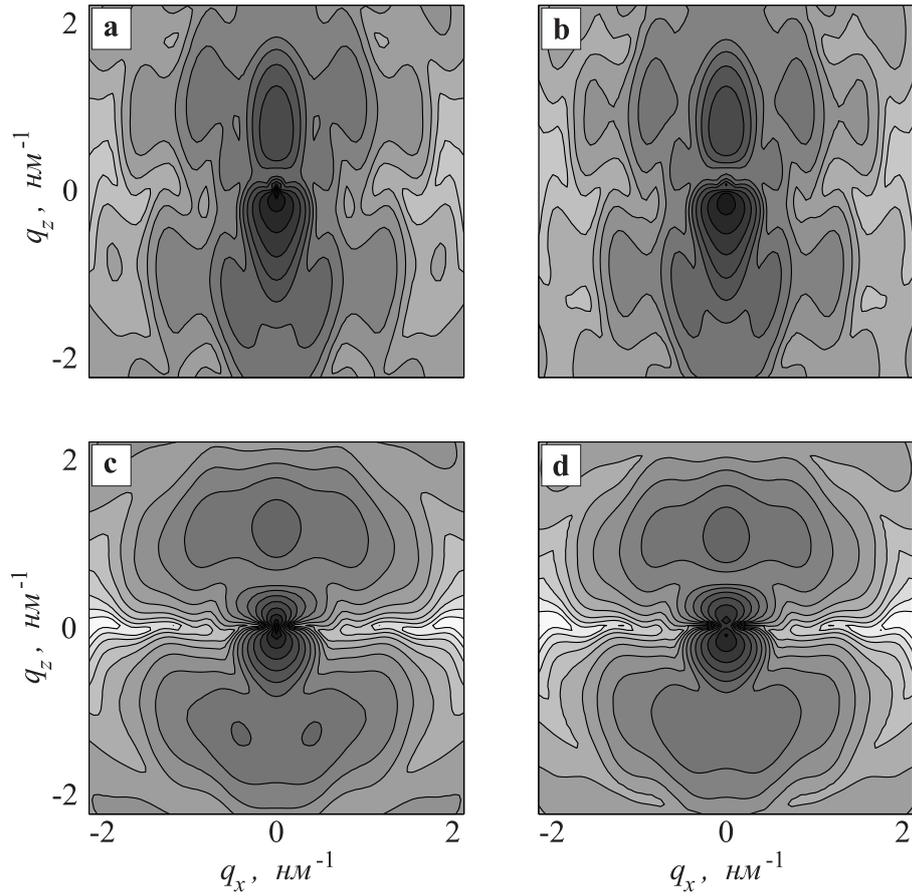


Рис. 3.9. Расчетные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с КТ, имеющими форму сфероида, полученные с использованием разложения по мультиполям (а, с) и метода функции Грина (b, d). Расстояния между соседними КТ $d = 250$ нм; рассогласование решеток КТ и матрицы: а, b) $\varepsilon = 0.003$; с, d) $\varepsilon = 0.016$; число КТ в массиве $n^3 = 161^3$; граница смещения – параллелепипед

фузного рассеяния, однако для близко расположенных в массиве КТ карты существенно отличаются (рис. 3.10 а, 3.11 а – карты диффузного рассеяния в обратном пространстве (q_x, q_z) , рис. 3.12 – сечения в обратном пространстве вдоль оси q_z при $q_x = 0$).

При расчетах с использованием метода функции Грина количество точек в массиве ограничивает скорость расчетов. В частности, при расстоянии между КТ $d = d_x = d_y = d_z = 250$ нм число КТ в массиве $n^3 = 81^3$ недостаточно, при этом на карте возникает искажение, обладающее симметрией

эллипса (рис. 3.13), чего не наблюдается при большем числе точек $n^3 = 161^3$.

Для данного метода, как и для метода с использованием разложения по мультиполям, для значительно удаленных друг от друга КТ вид граничных условий для поля упругих смещений не влияет на характер диффузного рассеяния, однако, для близкорасположенных в массиве КТ карты существенно отличаются (рис. 3.10 б, 3.11 б).

Из данных распределения упругих полей смещений от КТ (рис. 3.14) видно, что поведение вблизи границы КТ для метода функции Грина и аналитического подхода значительно различается. Можно сделать вывод о том, что область равномерного спада вдали от границы КТ вносит основной вклад в характер карт распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве.

Для случая метода функции Грина в картах интенсивности диффузного рассеяния центральный пик не так ярко выражен из-за влияния сосед-

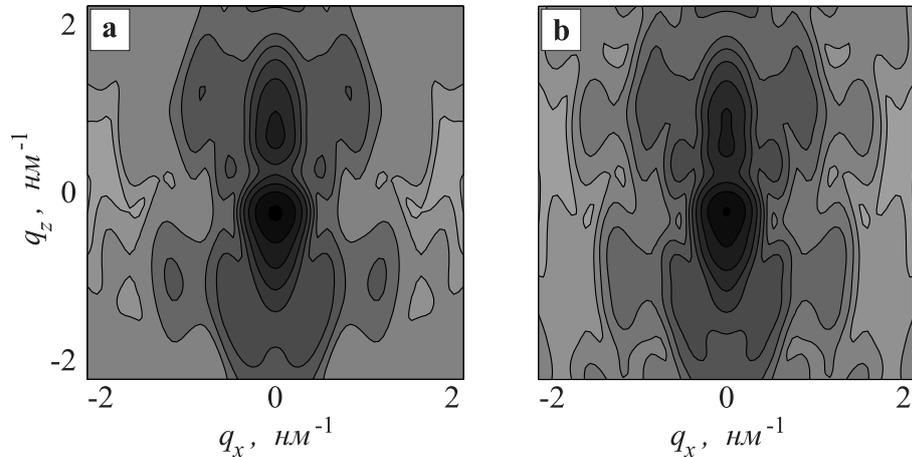


Рис. 3.10. Расчетные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с КТ, имеющими форму сфероида, с использованием разложения по мультиполям (а) и метода функции Грина (б). Расстояния между соседними КТ $d_x = d_y = 30$ нм, $d_z = 20$ нм; рассогласование решеток КТ и матрицы $\varepsilon = 0.003$; число КТ в массиве $n^3 = 161^3$; граница смещения – сфероид

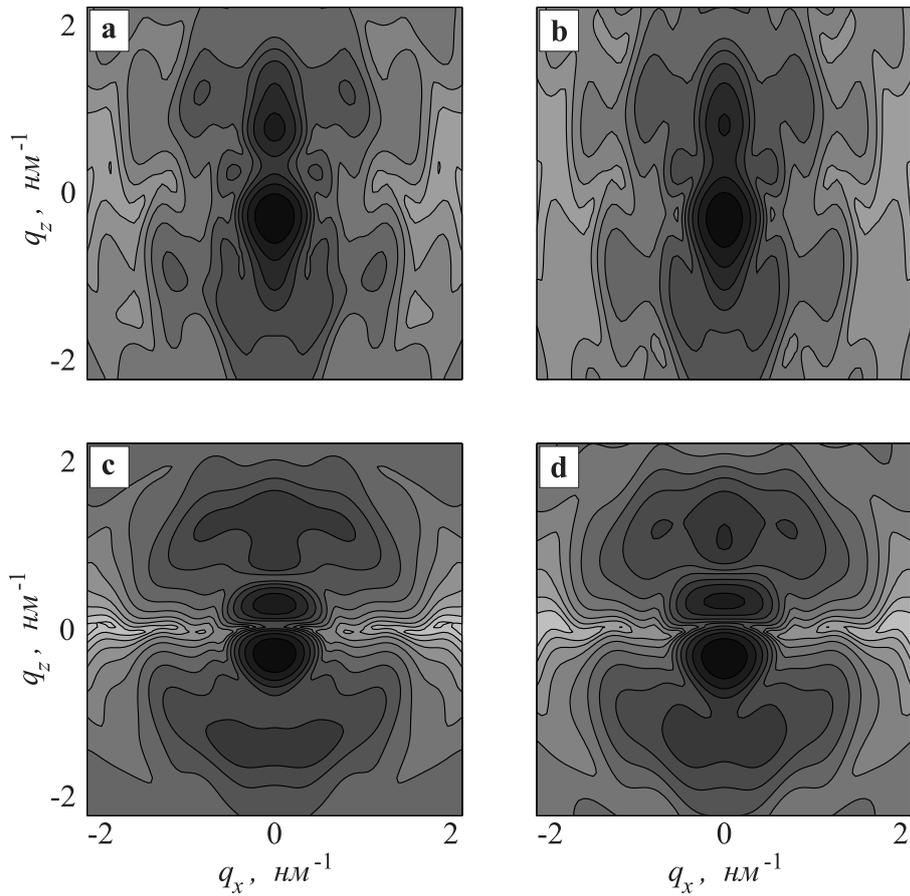


Рис. 3.11. Расчетные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с КТ, имеющими форму сфероида, полученные с использованием разложения по мультиполям (а, с) и метода функции Грина (b, d). Расстояния между соседними КТ $d_x = d_y = 30$ нм, $d_z = 20$ нм; рассогласование решеток КТ и матрицы: а, b) $\varepsilon = 0.003$, с, d) $\varepsilon = 0.016$; число КТ в массиве $n^3 = 161^3$; граница смещения – параллелепипед

них КТ. Этого нет у карт, полученных при помощи метода с использованием разложения по мультиполям, поскольку в них учет влияния упругих полей смещений от соседних КТ происходит через задание нулевой границы смещения (2.16). В обратном пространстве область в центре карты соответствует области реального пространства, максимально удаленного от центра КТ (рис. 3.10, 3.11).

В остальных картах диффузного рассеяния, полученные обоими методами, хорошо согласуются между собой для различных значений рассогласова-

ния постоянной решетки КТ и матрицы ε .

Следует отметить, что метод функции Грина более универсальный и позволяет считать диффузное рассеяние от КТ различной формы [149].

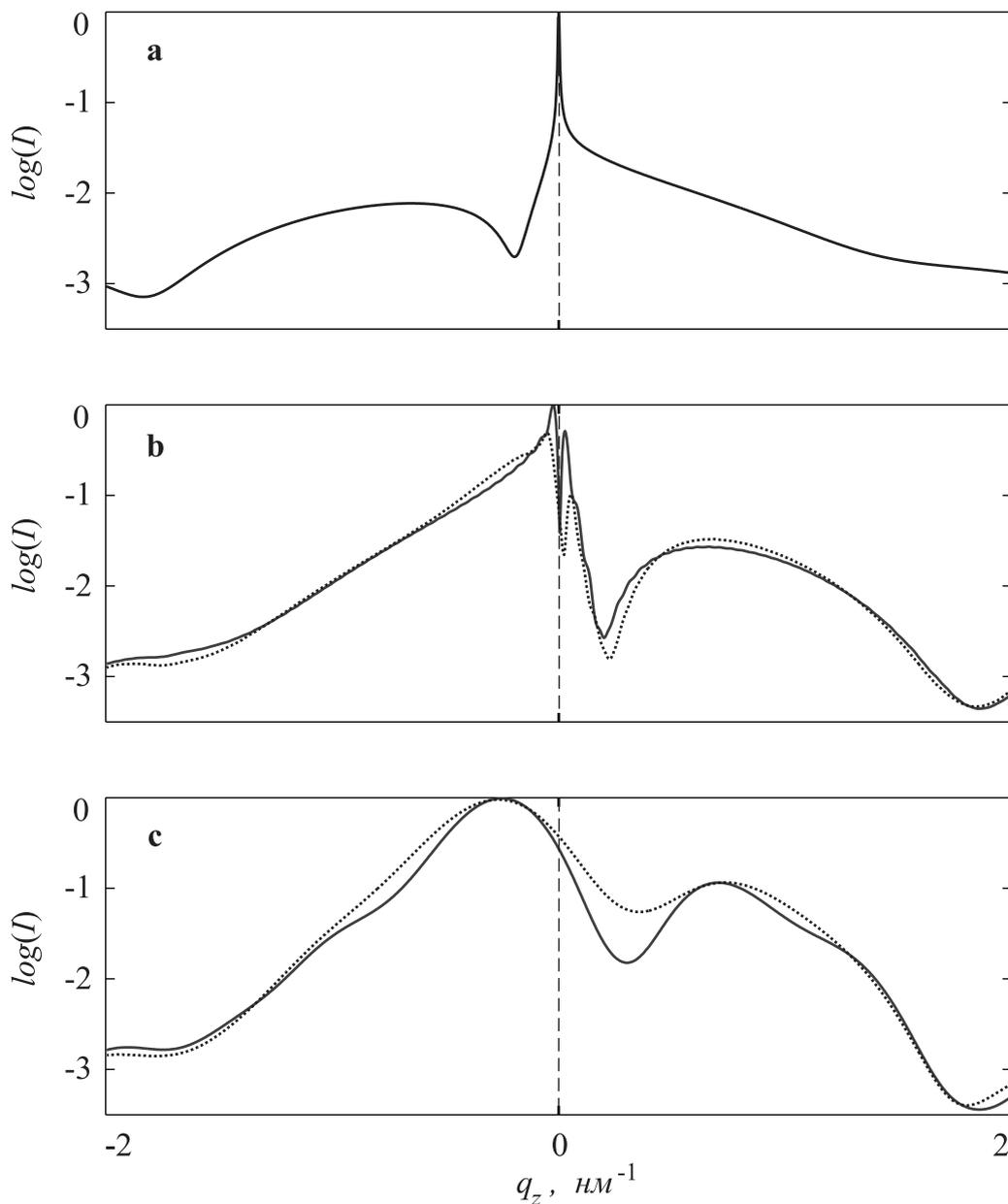


Рис. 3.12. Сечения углового распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве вдоль оси q_z при $q_x = 0$ для соответствующих карт: а) сечение карты на рис. 3.8 а; б) сечения карт на рис. 3.9 а – сплошная кривая, рис. 3.9 б – пунктирная кривая; в) сечения карт на рис. 3.11 а – сплошная кривая, рис. 3.11 б – пунктирная кривая

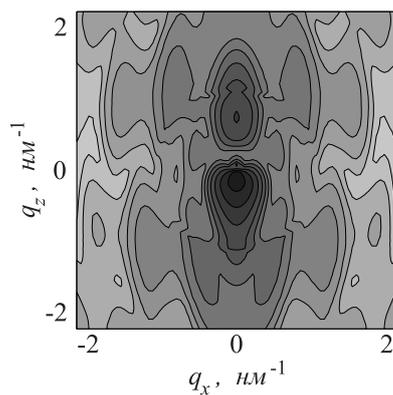


Рис. 3.13. Расчетная карта распределения интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с КТ, имеющими форму сфероида, полученная методом функции Грина. Расстояния между соседними КТ $d = 250$ нм; число КТ в массиве $n^3 = 81^3$; рассогласование решеток КТ и матрицы $\varepsilon = 0.003$; граница смещения – параллелепипед

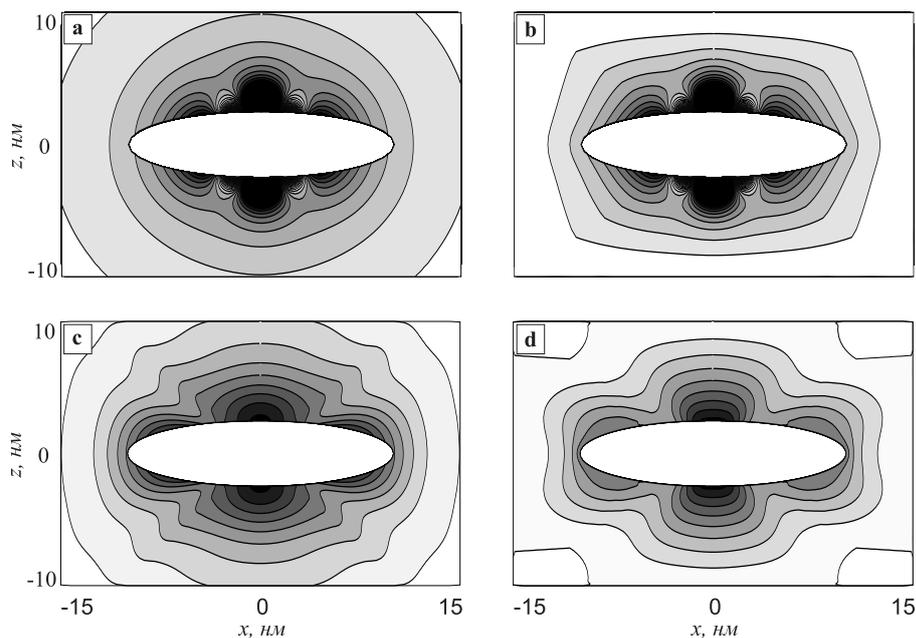


Рис. 3.14. Двумерные карты полей упругих смещений, полученные с помощью разложения по мультиполям (а, б) и метода функции Грина (с, d). Расстояние между соседними КТ в вертикальном и латеральном направлениях: (а, с) $d = 250$ нм; (б, d) $d_x = d_y = 30$ нм, $d_z = 20$

Глава 4

Учет пространственного распределения КТ

Взаимное расположение КТ оказывает влияние на угловое распределение диффузного рассеяния, поэтому для учета этого факта введем в рассмотрение корреляционную функцию $G(\boldsymbol{\rho})$, представляющую собой свертку функций пространственного распределения КТ $W(\boldsymbol{\rho})$ и их собственной корреляционной функции $g(\boldsymbol{\rho})$ [16]:

$$G(\boldsymbol{\rho}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\boldsymbol{\rho}' W(\boldsymbol{\rho}') g(\boldsymbol{\rho}' - \boldsymbol{\rho}). \quad (4.1)$$

Аналогично (2.21) корреляционный объем диффузного рассеяния от пространственно коррелированных КТ определяется как

$$\tau(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\boldsymbol{\rho} G(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}). \quad (4.2)$$

В случае, когда в расположении КТ отсутствует какой-либо порядок, корреляционная функция $G(\boldsymbol{\rho})$ преобразуется в собственную корреляционную функцию $g(\boldsymbol{\rho})$.

Введем понятие интерференционного структурного фактора, описывающего пространственный порядок в расположении КТ:

$$F(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\boldsymbol{\rho} W(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}). \quad (4.3)$$

После использования теоремы о свертке функций и выражения (4.1), а также проведения замены (4.3) корреляционный объем (4.2) примет вид

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_0(\mathbf{q}) F(\mathbf{q}). \quad (4.4)$$

В сверхрешетке расположение КТ в вертикальном направлении вдоль оси z имеет строго выраженный дальний порядок, связанный с периодическим чередованием слоев разного химического состава [15]. В латеральном направлении самоорганизованные КТ в большинстве случаев создают ближний порядок, который можно описать паракристаллической моделью [16]. Функция пространственного распределения КТ $W(\boldsymbol{\rho})$ может быть записана в виде произведения:

$$W(\boldsymbol{\rho}) = W_L(\rho_x, \rho_y)W_V(\rho_z), \quad (4.5)$$

где $W_L(\rho_x, \rho_y)$ описывает латеральное и $W_V(\rho_z)$ – вертикальное распределение КТ.

4.1. Основы паракристаллической модели распределения КТ

Рассмотрим детально функцию $W_L(\rho_x, \rho_y)$, описывающую упорядоченность на расстояниях, сравнимых с расстоянием между ближайшими КТ (ближний структурный порядок). Будем считать, что упорядоченность КТ, повторяющаяся на неограниченно больших расстояниях (дальний порядок), отсутствует. Выберем два характерных направления расположения КТ в латеральной плоскости (x, y) , которые определяются базисными векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} . В качестве функции расположения первых соседей выберем функцию нормального распределения от двух независимых переменных ρ_x и ρ_y следующего вида:

$$H_{\pm 1}^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{(\rho_x - \langle \rho_x \rangle)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(\rho_y - \langle \rho_y \rangle)^2}{\sigma_y^2} \right] \right\}, \quad (4.6)$$

где знак нижнего индекса указывает положительное или отрицательное направление от центра координат (значения, которые принимают ρ_x и ρ_y), верх-

ние индексы a и b указывают на соответствующие латеральные направления, а $\sigma_x^2 = \langle (\rho_x - \langle \rho_x \rangle)^2 \rangle$ и $\sigma_y^2 = \langle (\rho_y - \langle \rho_y \rangle)^2 \rangle$. Степень размытия этой функции ставится в соответствие со степенью латерального разупорядочения КТ. Распределение вторых соседей задается функцией

$$H_{\pm 2}^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = H_{\pm 1}^{a,b}(\rho_x, \rho_y) \otimes H_{\pm 1}^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = H_{\pm 1}^{a,b}(\rho_x, \rho_y)^{\otimes 2},$$

где знаком \otimes обозначена свертка функций. Свертывание функций самими собой (автокорреляция) дает дополнительное размытие, следовательно, результирующее размытие увеличивается, а высота пика уменьшается. Полученное выражение можно обобщить для следующих соседей. Таким образом, выражение распределения соседей с номером m имеет вид

$$H_{\pm m}^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = H_{\pm 1}^{a,b}(\rho_x, \rho_y)^{\otimes m}. \quad (4.7)$$

Покажем, что дисперсия (среднеквадратическое отклонение) пространственного распределения КТ растет с номером m как $\Delta_m^a = \Delta_1^a \sqrt{m}$. Для этого рассмотрим свертку двух функций нормального распределения $H_1(\rho)$:

$$\begin{aligned} H_2(\rho) &= H_1(\rho) \otimes H_1(\rho) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(u-a)^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{(x-u-a)^2}{2\sigma^2}\right) du \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-2a)^2}{\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{u^2}{\sigma^2}\right) du \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-2a)^2}{\sigma^2}\right), \end{aligned} \quad (4.8)$$

где a – математическое ожидание случайной величины. Последний интеграл равен единице, поскольку под интегралом стоит плотность нормального распределения с параметрами $a' = 0$ и $\sigma'^2 = 2\sigma^2$.

Далее рассмотрим свертку $H_1(\rho)$ и функции нормального распределения

с параметрами $a' = na$ и $\sigma'^2 = n\sigma^2$, где n – натуральное число:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\sigma^2\sqrt{n}} \exp\left(-\frac{(u-na)^2}{2n\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{(x-u-a)^2}{2\sigma^2}\right) du \\ &= \frac{1}{\sqrt{(n+1)2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-(n+1)a)^2}{2(n+1)\sigma^2}\right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Пусть в направлении вектора \mathbf{a} число КТ равно N_a , в направлении \mathbf{b} соответственно N_b . При конечном числе КТ функции $H_{\pm m}^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$ должны быть нормированы к $(N_{a,b} - m)$, так как вес пиков $W_L(\rho_x, \rho_y)$ уменьшается с ростом $|m|$. Поэтому следует писать, в частности, для направления \mathbf{a} :

$$W_L^a(\rho_x, \rho_y) = \delta(\rho_x, \rho_y) + \sum_{m=1}^{N_a} \frac{(N_a - m)}{N_a} (H_m^a(\rho_x, \rho_y) + H_{-m}^a(\rho_x, \rho_y)). \quad (4.10)$$

Аналогичная запись справедлива для направления \mathbf{b} ($W_L^b(\rho_x, \rho_y)$), тогда латеральное распределение КТ описывается сверткой этих функций. В результате выражение для интерференционного структурного фактора имеет вид

$$F_L(q_x, q_y) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y W_L^a(\rho_x, \rho_y) \otimes W_L^b(\rho_x, \rho_y) \exp\{i(q_x\rho_x + q_y\rho_y)\}.$$

Откуда, используя теорему о свертке, получим:

$$F_L(q_x, q_y) = F_a(q_x, q_y)F_b(q_x, q_y), \quad (4.11)$$

где структурные факторы разных направлений с учетом (4.10) имеют вид

$$\begin{aligned} F_{a,b}(q_x, q_y) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \exp\{i(q_x\rho_x + q_y\rho_y)\} \\ &\times \left[\delta(\rho_x, \rho_y) + \sum_{m=1}^{N_{a,b}} \frac{(N_{a,b} - m)}{N_a} (H_m^{a,b}(\rho_x, \rho_y) + H_{-m}^{a,b}(\rho_x, \rho_y)) \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Первое слагаемое в квадратных скобках в выражении (4.12), будучи умноженным на экспоненту и с учетом двойного интеграла, представляет собой

преобразование Фурье дельта-функции и равно 1. Рассмотрим двойной интеграл от второго слагаемого и вынесем знак суммы за знак интеграла, воспользовавшись теоремой о свертке, получим:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \sum_{m=1}^{N_{a,b}} \frac{(N_{a,b} - m)}{N_{a,b}} H_m^{a,b}(\rho_x, \rho_y) = \sum_{m=1}^{N_{a,b}} \frac{(N_{a,b} - m)}{N_{a,b}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \exp \{i(q_x \rho_x + q_y \rho_y)\} H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) \right]^m. \quad (4.13)$$

Аналогичное выражение можно получить и для выражения, содержащего третье слагаемое $H_{-m}^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$. Тогда выражение для $F_{a,b}(q_x, q_y)$ примет вид

$$F_{a,b}(q_x, q_y) = 1 + \sum_{m=1}^{N_{a,b}} \frac{(N_{a,b} - m)}{N_{a,b}} \times \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \exp \{i(q_x \rho_x + q_y \rho_y)\} \times \left(H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) + H_{-1}^{a,b}(\rho_x, \rho_y) \right) \right]^m. \quad (4.14)$$

Выражение в квадратных скобках обозначим как $Z_1^{a,b}(q_x, q_y) - Z_{-1}^{a,b}(q_x, q_y)$. Следует отметить, что $Z_1^{a,b}(q_x, q_y) = Z_{-1}^{a,b}(q_x, q_y)$, в силу того, что интегрирование ведется по бесконечным пределам, по этой же причине достаточно взять реальную часть этого выражения, поскольку мнимые части взаимно уничтожаются при интегрировании. С учетом проведенных преобразований выражение (4.12) примет вид

$$F_{a,b}(q_x, q_y) = 1 + \frac{2}{N_{a,b}} \sum_{m=1}^{N_{a,b}} (N_{a,b} - m) \operatorname{Re} \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^m = 1 + \frac{2}{N_{a,b}} \operatorname{Re} \left[N_{a,b} \sum_{m=1}^{N_{a,b}} \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^m - \sum_{m=1}^{N_{a,b}} m \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^m \right]. \quad (4.15)$$

В полученном выражении первое слагаемое в квадратных скобках можно представить как [150]

$$N_{a,b} \sum_{m=1}^{N_{a,b}} \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^m = N_{a,b} \left[\frac{1 - \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^{N_{a,b}+1}}{1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y)} - 1 \right], \quad (4.16)$$

а второе соответственно как

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{N_{a,b}} m \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^m &= \left(1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^{-2} \\ &\times \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) + \left(N_a Z_1^{a,b}(q_x, q_y) - N_a - 1 \right) \left(Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \right)^{N_a+1} \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

В итоге после упрощения получим окончательные выражения для структурных факторов разных направлений [16]:

$$\begin{aligned} F_{a,b}(q_x, q_y) &= 1 + \frac{2}{N_{a,b}} \\ &\times Re \left(\frac{Z_1^{a,b}(q_x, q_y) \left((1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y)) N_{a,b} - (1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y))^{N_{a,b}} \right)}{(1 - Z_1^{a,b}(q_x, q_y))^2} \right), \end{aligned} \quad (4.18)$$

где

$$Z_1^{a,b}(q_x, q_y) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_y \exp \{ i(q_x \rho_x + q_y \rho_y) \} H_1^{a,b}(\rho_x, \rho_y) \quad (4.19)$$

– Фурье-образы единичных функций распределения КТ.

Выражение (4.19) может быть приведено к аналитическому виду, для этого его можно представить как произведение независимых интегралов по переменным ρ_x и ρ_y . Покажем это на примере интеграла по ρ_x :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \exp \{ i(q_x \rho_x) \} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{(\rho_x - \langle \rho_x \rangle)^2}{\sigma_x^2} \right] \right\}.$$

Для получения под интегралом зависимости от $\rho = \rho_x - \langle \rho_x \rangle$ вынесем

множитель $e^{i\langle \rho_x \rangle q_x}$ за знак интеграла, учитывая, что $d\rho = d\rho_x$, имеем:

$$\frac{e^{i\langle \rho_x \rangle q_x}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \exp \left\{ i(q_x \rho) - \frac{\rho^2}{2\sigma_x^2} \right\}.$$

Проведем замену переменных $\rho' = \rho - iq\sigma^2$ и внесем знаменатель множителя перед интегралом под знак интеграла, учитывая, что $d\rho' = d\rho = d\rho_x$, получим:

$$\exp \left\{ i\langle \rho_x \rangle q_x - \frac{q_x^2 \sigma_x^2}{2} \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left\{ -\frac{\rho'^2}{2\sigma_x^2} \right\}.$$

Следует отметить, что выражение под интегралом есть функция нормального распределения, соответственно, интеграл от нее равен единице. Таким образом, окончательное выражение для $Z_1^{a,b}(q_x, q_y)$ запишется как

$$Z_1^{a,b}(q_x, q_y) = \exp \left\{ i(\langle \rho_x \rangle q_x + \langle \rho_y \rangle q_y) - \frac{q_x^2 \sigma_x^2 + q_y^2 \sigma_y^2}{2} \right\}. \quad (4.20)$$

Решение, аналогичное (4.18), однако в рамках другого теоретического подхода было получено для модели рассеивающих элементов с одномерной квазипериодической решеткой [151].

4.2. Вертикальная корреляция КТ

Поскольку способ задания функции $W_L(\rho_x, \rho_y)$ детально рассмотрен в предыдущем разделе, для простоты примем $W_L(\rho_x, \rho_y) = 1$.

Рассмотрим подробно вертикальную корреляционную функцию $W_V(\rho_z)$ из (4.5). Пусть функция $\omega(z)$ задает вероятность расположения наночастицы в точке z , тогда положение другой частицы в точке z' , сдвинутой строго в вертикальном направлении на расстояние $\rho_z = z - z'$, описывается функцией $\omega(z')$. Тогда по определению [152] вертикальная корреляционная функция может быть представлена в виде свертки:

$$W_V(\rho_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \omega(z) \omega(z - \rho_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \omega(z') \omega(z' + \rho_z). \quad (4.21)$$

Обычно вертикальное совмещение (стекирование) КТ формируется в условиях заданной ростовой технологии и зависит от многих параметров, в частности, от распределения упругих деформаций, толщин смачивающего и разделяющего (спейсера) слоев, их композиционного состава, температуры роста и т. д. В результате последовательного осаждения смачивающих и разделяющих слоев формируется сверхрешетка (СР) с массивом КТ, имеющих трансляционную упорядоченность в вертикальном направлении. Трансляционный период соответствует периоду сверхрешеточной модуляции композиционного состава l_{SL} . Поэтому $\omega(z)$, описывающая стекирование КТ, является периодической функцией и $\omega(z) = \omega(z + l_{SL})$. Пусть $l_v = n l_{SL}$ – вертикальное расстояние по толщине СР, на котором КТ выстроены в колонку строго друг над другом. Назовем это расстояние толщиной стекирования КТ, где n – число КТ в стеке. С другой стороны, это расстояние l_v может быть определено как вертикальная длина корреляции. С учетом вышесказанного корреляционный объем (4.2), отвечающий за угловое распределение диффузного

рассеяния от гетероструктур с КТ, может быть записан в виде произведения:

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_0(\mathbf{q})F_V(\mathbf{q}), \quad (4.22)$$

где $\tau_0(\mathbf{q})$ – собственный корреляционный объем (2.21), зависящий от формы, размеров и упругих деформаций КТ [14]. Влияние вертикального совмещения КТ на распределение диффузного рассеяния описывается интерференционным структурным фактором:

$$F_V(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_z \exp(iq_z\rho_z)W_V(\rho_z). \quad (4.23)$$

Подставив (4.21) в выражение (4.23), для интерференционного структурного фактора вдоль вертикального направления z получаем:

$$F_V(q_z) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dz\omega(z) \exp(iq_z z) \right|^2. \quad (4.24)$$

Запишем интерференционный структурный фактор стекированных КТ:

$$F_V(q_z) = \begin{cases} F_V(q_z, l_v), & |z| \leq l_v, \\ 1, & |z| > l_v, \end{cases} \quad (4.25)$$

где

$$F_V(q_z, l_v) = \left| \frac{1}{2l_v} \int_{-l_v}^{l_v} dz\omega(z) \exp(iq_z z) \right|^2. \quad (4.26)$$

Такое представление структурного фактора стекированных КТ означает следующее: интерференционное диффузное рассеяние в вертикальном направлении формируется КТ, периодически расположенными вдоль оси z на расстоянии корреляционной длины. За пределами толщины стекирования корреляционные эффекты отсутствуют, поэтому $F_V(q_z) \equiv 1$. Если в СР нет вертикально совмещенных КТ, то есть корреляционная длина l_v меньше периода СР l_{SL} ,

интерференционный фактор в вертикальном направлении всегда принимает значение 1. Это означает, что в спектре углового распределения интенсивности будут отсутствовать сверхструктурные порядки диффузного рассеяния (сателлиты). Форма изодиффузных линий в этом случае зависит только от усредненных структурных характеристик, случайно распределенных вдоль оси z КТ, и описывается их собственным корреляционным объемом (2.21).

Поскольку $\omega(z)$, как было отмечено выше, является периодической функцией, ее можно рассматривать в рамках модели дальнего порядка и записать в виде ряда Фурье:

$$\omega(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \exp(-inK_{SL}z), \quad (4.27)$$

где $K_{SL} = 2\pi/l_{SL}$ – период модуляции сверхрешетки в обратном пространстве (расстояние между дифракционными сателлитами). Фурье-коэффициенты в (4.27) равны:

$$B_n = \frac{1}{l_{SL}} \int_{-l_{SL}/2}^{l_{SL}/2} \omega(z) \exp(inK_{SL}z) dz. \quad (4.28)$$

Подставляя (4.27) в (4.26), получаем:

$$F_V(q_z, l_v) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left| B_n \frac{\sin([q_z - nK_{SL}]l_v)}{[q_z - nK_{SL}]l_v} \right|^2. \quad (4.29)$$

Интерференционный фактор стекированных КТ в виде (4.29) имеет прозрачный физический смысл. Сверхструктурные максимумы диффузного рассеяния от СР с вертикально совмещенными КТ формируются вблизи узла обратной решетки при значениях $q_z^{SL} = nK_{SL} = 2\pi n/l_{SL}$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ и указывает на порядковый номер диффузного сателлита. Интенсивности диффузных максимумов определяются Фурье-коэффициентами B_n . Согласно (4.28) значения этих коэффициентов зависят от статистического распределения центров КТ. Из-за разного размера КТ эти центры могут смещаться

относительно гетерограницы между смачивающим слоем и спейсером. Ширины диффузных сателлитов в обратном пространстве вдоль вертикального направления зависят от корреляционной длины l_v . Поскольку в СР с самоорганизованными КТ толщины стекирования соседних вертикальных колонок из КТ могут отличаться, то для описания диффузного рассеяния необходимо ввести статистически усредненную корреляционную длину \bar{l}_v , а также соответствующую дисперсию ее вероятностного распределения. Интерференционный фактор стекированных КТ в этом случае может быть записан в виде

$$F_V(q_z, \bar{l}_v) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |B_n|^2 \Psi(q_z, \bar{l}_v, n), \quad (4.30)$$

где $\Psi(q_z, \bar{l}_v, n)$ определяется вероятностной функцией распределения $p(q_z, \bar{l}_v)$ корреляционных длин по толщине СР:

$$\Psi(q_z, \bar{l}_v, n) = \int_0^{\infty} \left| \frac{\sin([q_z - nK_{SL}]l_v)}{[q_z - nK_{SL}]l_v} \right|^2 p(q_z, \bar{l}_v) dz. \quad (4.31)$$

Рассмотрим модель, в рамках которой вертикальная вероятностная функция распределения КТ в промежутке $(-l_{SL}/2; l_{SL}/2)$ имеет вид

$$\omega(z) = \exp(-|z|/a). \quad (4.32)$$

Для этой экспоненциальной функции Фурье-коэффициенты (4.28) имеют аналитическое решение:

$$B_n = \frac{2a/l_{SL}}{1 + 4\pi^2(2a/l_{SL})^2 n^2} (1 - i \exp(-l_{SL}/2a)(-1)^n). \quad (4.33)$$

Окончательное выражение для интерференционного структурного фактора с учетом вертикальной и латеральной корреляций КТ запишется как

$$F(\mathbf{q}) = F_L(q_x, q_y) F_V(q_z), \quad (4.34)$$

где $F_L(q_x, q_y)$ – интерференционный структурный фактор латерально коррелированных КТ – определяется выражениями (4.11), (4.18), (4.20); $F_V(q_z)$ –

интерференционный структурный фактор стекированных КТ – определяется выражениями (4.30), (4.31), (4.33).

В традиционной трехкристальной схеме рентгеновской дифракции угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве зависит от параметров q_x и q_z . Поэтому для этой дифракционной схемы вместо (4.34) в численных расчетах следует использовать

$$\bar{F}(q_x, q_z) = F_V(q_z) \int_{-\infty}^{\infty} dq_y F_L(q_x, q_y). \quad (4.35)$$

Итоговое выражение для интенсивности диффузного рассеяния от сверхрешетки с КТ (2.20) с учетом их пространственного распределения удобно записать в виде [138]

$$I_h^d(\mathbf{q}) = |\alpha_h|^2 (1 - f^2) V_0 F_V(q_z) \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \tau_0(\mathbf{q}) F_L(q_x, q_y). \quad (4.36)$$

Таким образом, разработанная теория позволяет проводить количественный анализ полупроводниковых систем с учетом пространственной корреляции КТ.

4.3. Численное моделирование с учетом пространственной корреляции КТ

В рамках изложенного подхода проведено численное моделирование рентгеновской дифракции на GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs}_{x20}SL сверхрешетке (СР). Результаты расчетов были сопоставлены с экспериментальными данными [153].

4.3.1. Эксперимент

Исследуемая кристаллическая структура, содержащая КТ, была выращена на подложке GaAs (001) с буферным слоем GaAs толщиной 300 нм, покрытым слоем Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной порядка 2 мкм и слоем волновода GaAs толщиной 240 нм. Она представляет собой многослойную периодическую структуру, состоящую из 20 слоев InGaAs толщиной 5, содержащих КТ InAs нм, разделенных слоями GaAs толщиной 15 нм. В дальнейшем указанная структура была покрыта слоем волновода GaAs толщиной 240 нм и слоем Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 450 нм.

Данные по рассеянию РЛ были получены на высокоразрешающем рентгеновском трехкристальном дифрактометре X'Pert MRD (PANalytical) с многослойным фокусирующим зеркалом, Ge(011) монохроматором бартелевского типа и трехкратным Ge(011) анализатором. Были измерены кривые качания для максимумов главных дифракционных пиков от подложки GaAs и слоя AlGaAs и пиков СР от периодической многослойной структуры с КТ ("0SL", "±1SL" и др.) в режиме q_x сканирования, а также карты интенсивности рассеяния в обратном пространстве (q_x, q_z) вблизи отражения (004) для σ -поляризованного $CuK_{\alpha 1}$ - излучения.

Угол Брэгга для выбранного отражения составляет 33.026 угл. град., межплоскостное расстояние подложки $d_{004} = 1.4133$ А, Фурье-компоненты

рентгеновской поляризуемости

$$\begin{aligned}\chi_0^{GaAs} &= (-2.89 + i0.084) \times 10^{-5}, & \chi_h^{GaAs} &= (-1.697 + i0.078) \times 10^{-5}, \\ \chi_0^{InAs} &= (-3.07 + i0.24) \times 10^{-5}, & \chi_h^{GaAs} &= (-1.18 + i0.21) \times 10^{-5}.\end{aligned}$$

4.3.2. Когерентное рассеяние

Процедура расчета когерентного рассеяния на полупроводниковой системе GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs}_{x20}SL подробно изложена в работе [153]. Решение для амплитуды коэффициента отражения когерентной рентгеновской волны от N -периодической СР имеет вид

$$R_{SL}(q_x, q_z) = iF_c(q_z)N_c(q_z)W(q_z) \exp\left(i(N-1) \sum_{p=1}^P A_p(q_z)l_p\right). \quad (4.37)$$

Здесь $W(q_z) = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \exp(iq_x x)$ – параметр, зависящий от размера рентгеновского пучка, где L_x – латеральный размер засветки поверхности СР, d – межплоскостное расстояние кристаллической подложки и d_p – межплоскостные расстояния отдельных слоев периода (с учетом упругой деформации при наличии несоответствия решеток), l_p – толщина отдельного слоя, P – число слоев в периоде СР. Интерференционная функция Лауэ многокомпонентной СР имеет вид

$$N^c(q_z) = \frac{\sin\left(N \sum_{p=1}^P A_p(q_z)l_p\right)}{\sin\left(\sum_{p=1}^P A_p(q_z)l_p\right)}. \quad (4.38)$$

Здесь $A_p(q_z) = (2\pi(d_p - d)/(d_p d) - q_z)/2$ – угловой параметр. Структурная амплитуда многокомпонентной СР запишется как

$$F_{SL} = \sum_{p=1}^P \alpha_h^{(p)} f_p(q_z) l_p \frac{\sin(A_p(q_z)l_p)}{A_p(q_z)} \exp\left(i \sum_{k=1}^{p-1} 2A_k(q_z)l_k + iA_p(q_z)l_p\right). \quad (4.39)$$

Здесь коэффициенты $\alpha_h^{(p)} = C\pi\chi_h^{(p)}/(\lambda\gamma_h)$ определяются взаимодействием рентгеновского поля с электронной плотностью среды чередующихся слоев

СР, где $\gamma_h = |\sin \theta_B|$, θ_B – угол Брэгга, C – поляризационный фактор, λ – длина волны РЛ в вакууме. Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости $\chi_h^{(p)}$ связаны со структурными факторами слоев СР $F_{hkl}^{(p)}$ соотношением $\chi_h^{(p)} = -r_0 \lambda^2 F_{hkl}^{(p)} / (\pi V_c)$, где V_c – объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2 / (mc^2)$ – классический радиус электрона, e , m – заряд и масса электрона.

Интенсивность когерентного рассеяния в терминах обратного пространства выражается через амплитудный коэффициент отражения от СР следующим образом:

$$I_h^c(q_x, q_z) = |R_{SL}(q_x, q_z)|^2. \quad (4.40)$$

4.3.3. Диффузное рассеяние

Решение для интенсивности диффузного рассеяния на кристалле с пространственно коррелированными КТ подробно описано в предыдущем разделе (4.36). При выборе модели КТ для расчетов было решено использовать КТ сфероидальной формы (в рамках мультипольного формализма (2.32) – (2.35)) по следующим причинам:

1. имеет аналитическое решение;
2. учитывает влияние упругих деформаций вблизи границы КТ;
3. в процессе численного моделирования легко варьируются основные параметры КТ;
4. наиболее проста для статистического усреднения по размерам КТ.

При расчете диффузного рассеяния на наноструктурах необходимо учитывать флуктуацию их размеров. Для статистического усреднения по размерам КТ будем использовать логарифмическое нормальное распределение. Пусть L – характерный размер КТ в латеральном или вертикальном направ-

лении, тогда функция распределения имеет вид

$$p_{LN}(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}L\sigma_{LN}} \exp \left\{ -\frac{\left| \ln \left(\frac{L}{\langle L \rangle} \right) + \frac{\sigma_{LN}^2}{2} \right|^2}{2\sigma_{LN}^2} \right\}, \quad (4.41)$$

где $\langle L \rangle = \int_0^\infty dL L p_{LN}(L)$ – средний размер КТ в соответствующем направлении.

Тогда дисперсия размера КТ $\sigma_L^2 = \int_0^\infty dL (L - \langle L \rangle)^2 p_{LN}(L)$ запишется как $\sigma_L^2 = [\exp(\sigma_{LN}^2) - 1] \langle L \rangle^2$ и положение максимума в распределении КТ по размерам будет выражаться как $L_{max} = \exp(-3\sigma_{LN}^2/2) \langle L \rangle^2$.

Распределение такого вида было выбрано для того, чтобы отсесть область отрицательных значений размеров КТ. С другой стороны, малый разброс по размерам включений приводит к совпадению с нормальным распределением: $\sigma_L^2 \cong \sigma_{LN}^2 \langle L \rangle^2$, $L_{max} \cong \langle L \rangle$.

4.3.4. Численное моделирование

Для проведения сравнительного анализа теоретических и экспериментальных кривых качания была проведена процедура минимизации функционала невязки:

$$\rho = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left[\frac{I_{exp}(q_{x,z}^s) - I_{calc}(q_{x,z}^s)}{I_{exp}(q_{x,z}^s)} \right]^2, \quad (4.42)$$

где $I_{exp}(q_{x,z}^s)$ – интенсивность, измеренная экспериментально, $I_{calc}(q_{x,z}^s)$ – полная интенсивность рассеяния, рассчитанная теоретически, S – число точек в обратном пространстве, для которых была измерена интенсивность. Для расчетов $S = 50$ для q_x и $S = 460$ для q_z . Минимизация функционала невязки была выполнена для сканов всех пиков СР (рис. 4.1). Расхождение между расчетными и экспериментальными кривыми составило не более 5%.

На рис. 4.2 приведены расчетная и экспериментальная кривые дифракционного отражения от СР GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs}_{x20SL} для

q_z - сечений.

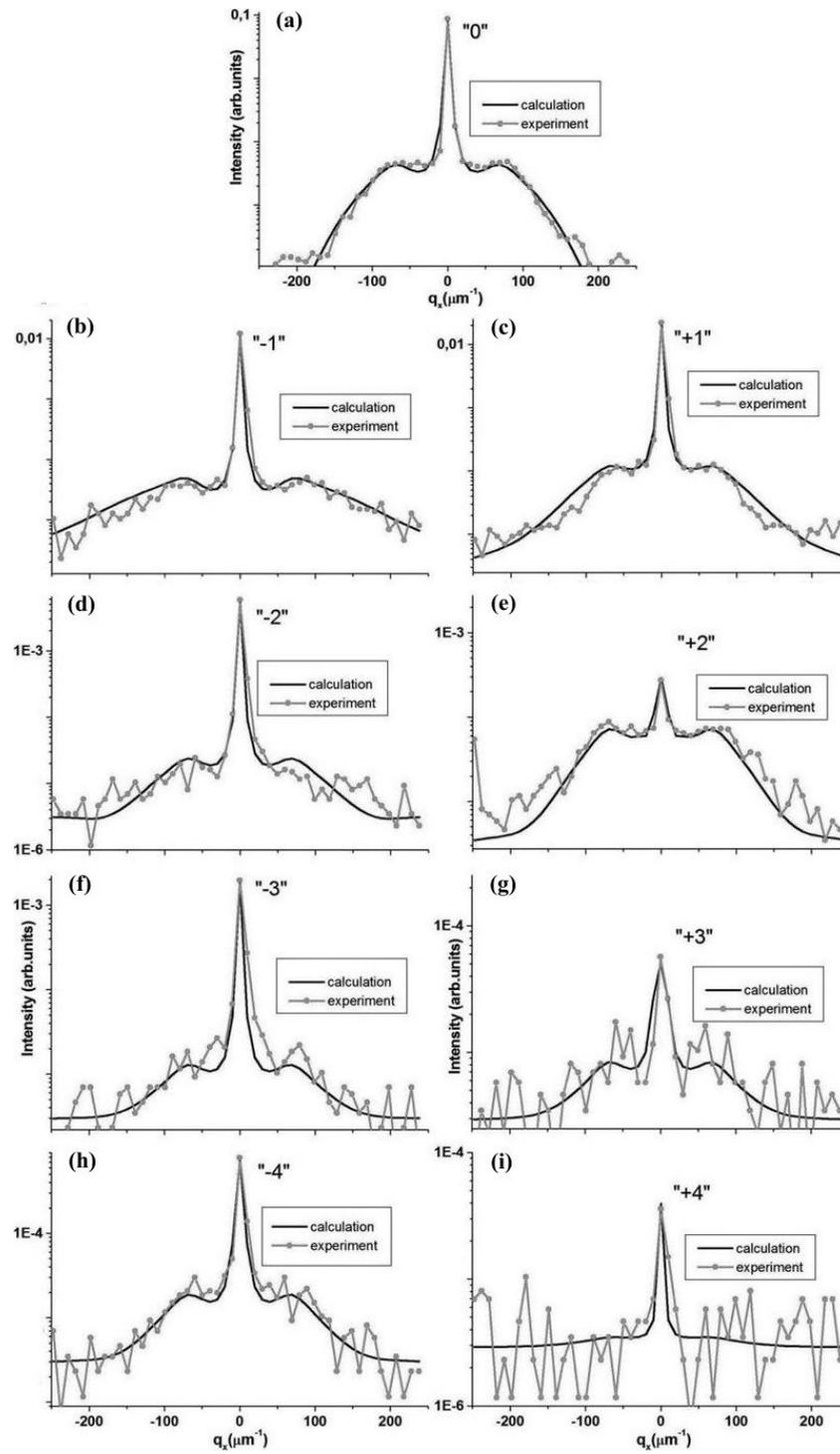


Рис. 4.1. Экспериментальные (светлая линия с точками) и теоретические (сплошная темная линия) сечения углового распределения интенсивности вдоль q_x для 0 (a), -1 (b), $+1$ (c), -2 (d), $+2$ (e), -3 (f), $+3$ (g), -4 (h), $+4$ (i) дифракционных пиков CP GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs} $_{x20}$ SL

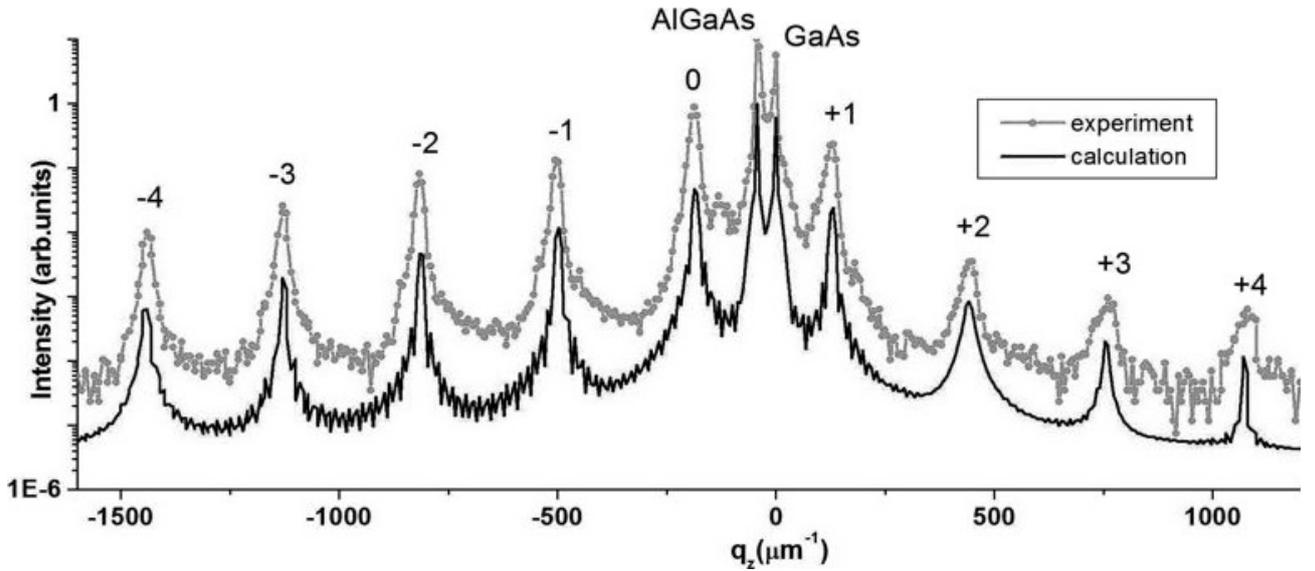


Рис. 4.2. Теоретическое (сплошная темная линия) и измеренное экспериментально (светлая линия с точками) q_z -сечения углового распределения интенсивности рассеяния от CP GaAs(001)-AlGaAs-InAs QDs-GaAsx20 SL вблизи узла обратной решетки GaAs (004)

В ходе расчетов определены параметры, наиболее достоверно описывающие экспериментальные данные: толщина слоя $In_{0.11}Ga_{0.89}As$ $l_{InGaAs} = 5.2$ нм, толщина слоя $GaAs$ $l_{GaAs} = 14.8$ нм, рассогласование параметров решетки $\Delta d = d_{InGaAs} - d_{GaAs} = 2.2 \times 10^{-6}$, деформация $\delta d/d_{GaAs} = 0.016$, статический фактор Дебая-Валлера слоя с КТ $f_{QD} = \exp(-c_{QD}V_{QD}) = 0.85$, где $V_{QD} = (3\pi/2)R^2l_z = 1.6 \times 10^{-6}\mu m^3$ – объем КТ, $R = 12.5$ нм – латеральный радиус КТ; $l_z = 5$ нм – высота КТ, $f_s = 0.95$ – статический фактор Дебая – Валлера для подложки и слоя AlGaAs.

Для описания латеральных корреляций между ближайшими соседними КТ использован формализм паракристаллического распределения наноструктур в горизонтальном направлении [16], детально разобранный в разделе 4.1. Вычислено среднее расстояния между центрами соседних КТ в слое $a = 65$ нм, из которого с учетом объема КТ определена их концентрация в периодическом слое InGaAs в CP $c_{QD} = 9.9 \times 10^4 \nu m^{-3}$.

Рассчитанная функция распределения, описывающая ближний порядок

в расположении КТ $W(\rho_x)$ для $a = 65$ нм и дисперсии $\Delta a = 0.45a = 29$ нм, представлена на рис. 4.3 а. Интерференционный структурный фактор $F_L(q_x) = \int F_L(q_x, q_y) dq_y$, соответствующий этой функции, показан на рис. 4.3 б.

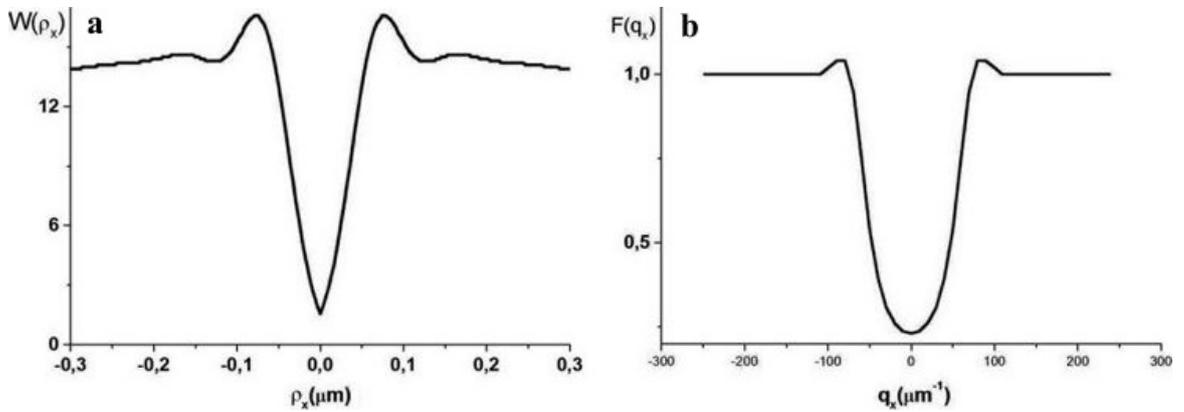


Рис. 4.3. а) – функция латерального распределения КТ $W(\rho_x)$ (без учета центрального δ -видного пика); б) – соответствующий ей интерференционный структурный фактор $F_L(q_x)$. Среднее расстояние между центрами соседних КТ в слое $a = 65$ нм, дисперсия $\Delta a = 29$ нм

Поскольку величина периода СР l_{SL} была технологически задана в процессе роста и составляет 20 нм, вертикальная корреляция описывается в рамках модели дальнего порядка на основе решения [15], подробно описанного в разделе 4.2. С учетом конкретной модели СР нулевой порядок сдвинут на величину $\Delta q_z^{(0)} = 187 \mu\text{m}^{-1}$ относительно подложки. В ходе расчетов определено, что вертикальная корреляционная длина $l_v = 140$ нм. Это означает, что когерентный рост массива КТ выдержан не по всей толщине СР и среднее число КТ в стеке $N = 7$.

Угловое распределение диффузного рассеяния от СР с учетом латеральной и вертикальной корреляций показано на рис. 4.4.

Для более точного количественного анализа экспериментальных данных в рамках выбранной модели необходимо учитывать влияние инструменталь-

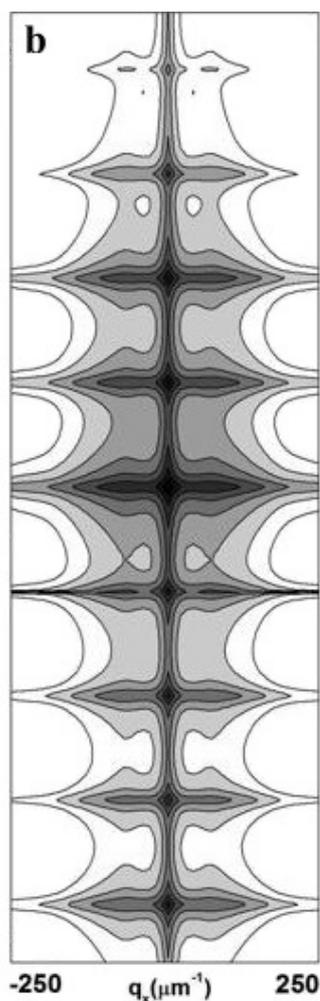
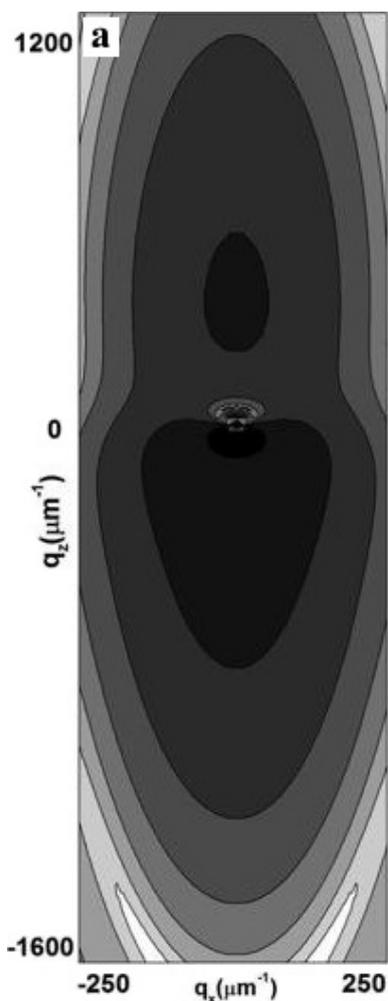


Рис. 4.4. Теоретические карты углового распределения диффузного рассеяния от CP GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs}_{x20SL}: а) без учета и б) с учетом пространственной корреляции КТ

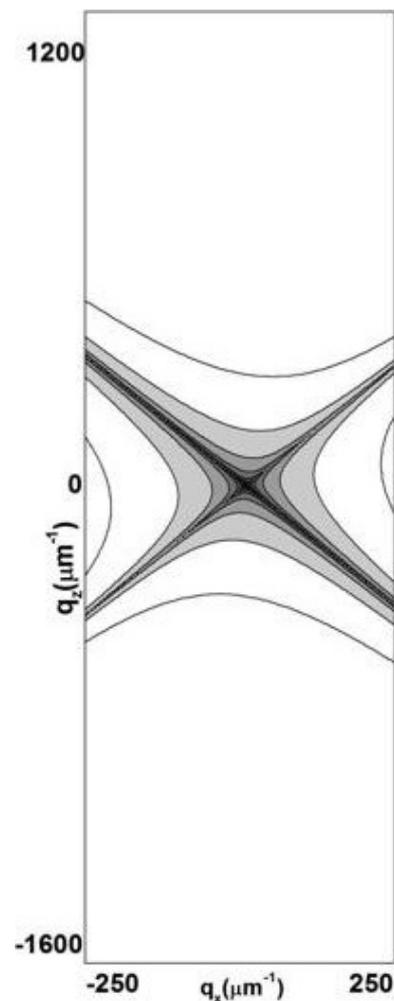


Рис. 4.5. Инструментальная функция дифрактометра

ной функции, вид которой определяется характеристиками используемого дифрактометра, на рассеяние РЛ от полупроводниковых систем с КТ. Инструментальная функция дифрактометра, применявшегося в эксперименте, показана на рис. 4.5.

На рис. 4.6 представлены экспериментальная и расчетная карты распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки GaAs (004) от CP GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs}_{x20SL}.

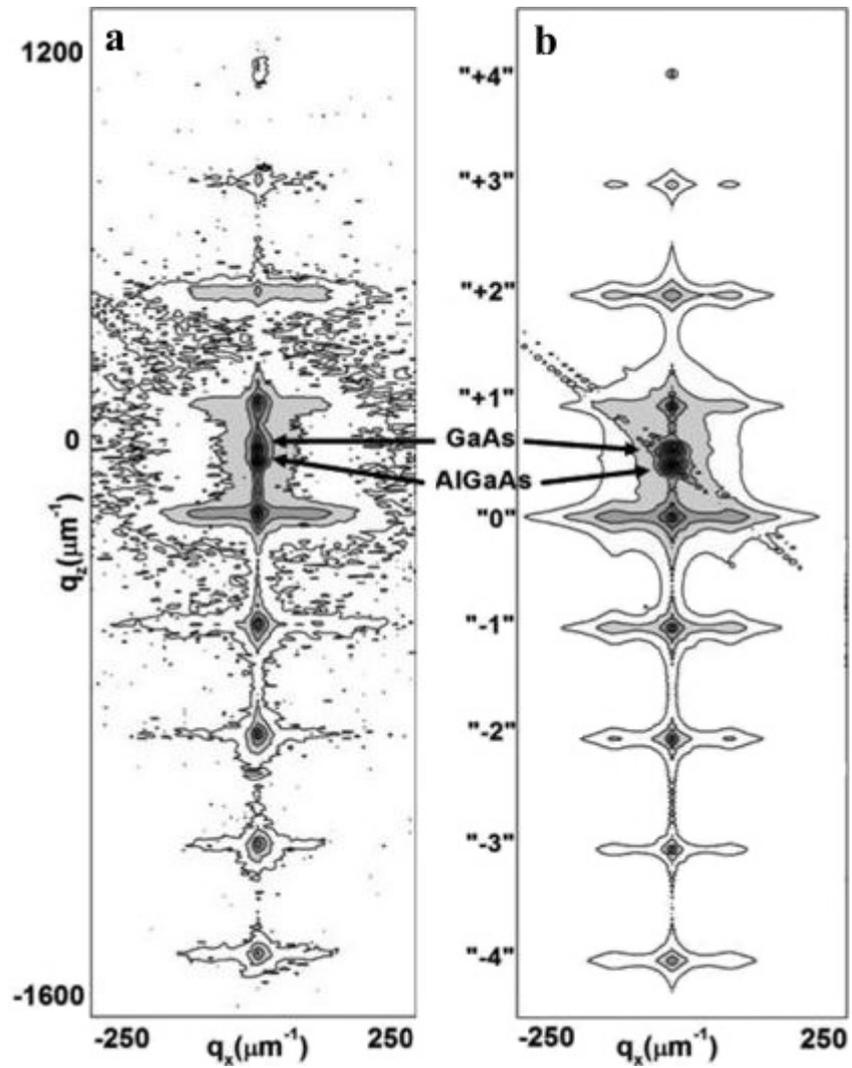


Рис. 4.6. Теоретическая (а) и экспериментальная (б) карты распределения интенсивности рассеяния от CP GaAs(001)-Al GaAs-{InAs QDs-GaAs}_{x20}SL

Глава 5

Основные результаты и выводы

Проведенное в работе рассмотрение диффузного рассеяния РЛ на кристалле, содержащем массив КТ, позволяет выделить ряд конкретных результатов.

Получены и детально проанализированы аналитические выражения для полей упругих смещений от КТ сфероидальной формы в кристаллической матрице при использовании аналогии между задачами теории упругости и электростатики. На их основе выведены выражения для расчета углового распределения интенсивности диффузного рассеяния РЛ в кристаллах с некоррелированными (хаотически распределенными) КТ. Определены границы применимости данного метода.

Получены выражения для Фурье-преобразования характеристической функции КТ различной формы.

На основе метода функции Грина разработан подход, позволяющий получать информацию об интенсивности диффузного рассеяния РЛ в кубическом кристалле, содержащем некоррелированные КТ.

Развита статистическая динамическая теория дифракции РЛ в кристалле с упорядоченным массивом КТ. Рассмотрены случаи наиболее вероятных и физически обоснованных форм КТ.

Выполнено численное моделирование углового распределения интенсивности диффузного рассеяния РЛ в кристаллических структурах с массивом КТ. Проведен сравнительный анализ расчетов на основе аналитического решения (разложения по мультиполям) и метода функции Грина.

Показано влияние латерального ближнего порядка и вертикальной корреляции на формирование диффузного рассеяния.

Проведены расчеты карт распределения интенсивности ДР от системы InAs/GaAs с КТ вблизи угла обратной решетки (004) без учета и с учетом пространственной корреляции КТ. На основе этих расчетов и экспериментальных данных ВРД выполнен количественный анализ структурных характеристик многослойной системы с КТ.

По результатам работы можно сделать следующие выводы.

Развитый подход на основе метода функции Грина, дополненный паракристаллической моделью, позволяет эффективно рассчитывать рассеяние РЛ от массива КТ практически любой сложной формы с различной степенью упорядоченности.

Разработанная теория позволяет проводить количественный анализ полупроводниковых систем с учетом формы, размеров и пространственной корреляции КТ.

Автор выражает глубокую признательность своему научному руководителю, заведующему лабораторией, д.ф. - м.н., профессору В.И. Пунегову за неоценимую помощь при выполнении данной работы.

Список литературы

1. Pietsch, U. High resolution X-ray scattering – from thin films to lateral nanostructures / U. Pietsch, V. Holý, T. Baumbach – New York : Springer-Verlag, 2004. – 408 p.
2. Alhassid, Y. The statistical theory of quantum dots / Y. Alhassid // Reviews of Modern Physics. – 2000. – Vol. 72, № 4. – P.895–968.
3. High-resolution X-ray diffraction from multilayered self-assembled Ge dots / A. A. Darhuber, P. Schittenhelm, V. Holý et al. // Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 55, № 23. – P. 15652–15663.
4. X-Ray diffraction analysis of multilayer InAs–GaAs heterostructures with InAs quantum dots / N. N. Faleev, A. Yu. Egorov, A. E. Zhukov et al. // Semiconductors. – 1999. – Vol. 33, № 11. – P. 1229–1237.
5. Ordering parameters of self-organized three-dimensional quantum-dot lattices determined from anomalous X-ray diffraction / R. T. Lechner, T. U. Schulli, V. Holý et al. // Appl. Phys. Lett. – 2004. – Vol. 84, № 6. – P. 885–887.
6. Vertically ordered magnetic EuTe quantum dots stacks on SnTe matrices / B. Díaz, A. Malachias, L. A. Montoro et al. // Nanotechnology. – 2012. – Vol. 23, № 1. – P. 015604 (1–5).
7. Wang, Z. M. Self-Assembled quantum dots / Z. M. Wang. – Berlin : Springer, 2008. – 463 p.
8. Benabbas, T. A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs / T. Benabbas, Y. Androussi, A. Lefebvre // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol. 86, № 4. – P. 1945–1950.
9. Grundmann, M. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure / M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg // Phys. Rev. B – 1995. – Vol. 52, № 16. – P. 11969–11981.
10. Strain distribution in quantum dots of arbitrary shape / A. D. Andreev, J. R.

- Downes, D. A. Faux, E. P O'Reilly // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol.86, № 1. – P. 297–305.
11. Melezhik, E. Elastic fields of quantum dots in semi-infinite matrices: Green's function analytical analysis / E. Melezhik, O. Korotchenkov // J. Appl. Phys. – 2009. – Vol. 105, № 2. – P. 023525 (1–5).
 12. Nenashev, A. V. Strain distribution in quantum dot of arbitrary polyhedral shape: Analytical solution / A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii // J. Appl. Phys. – 2010. – Vol. 107, № 6. – P. 064322 (1–8).
 13. Pearson, G. S. Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots / G. S. Pearson, D. A. Faux // J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 88, № 2. – P. 730–736.
 14. Пунегов, В. И. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей на системах с квантовыми точками эллипсоидальной формы / В. И. Пунегов, Д. В. Сивков, В. П. Кладько // Письма в ЖЭТФ. – 2011. – Т. 37, Вып. 8. – С. 41–48.
 15. Пунегов, В. И. Влияние вертикальной корреляции квантовых точек на диффузное рассеяние рентгеновских лучей / В. И. Пунегов // Письма в ЖТФ. – 2013. – Т. 39, Вып. 10. – С.54–64.
 16. Пунегов, В. И. Паракристаллическая модель в статистической теории рентгеновской дифракции на эпитаксиальных слоях с квантовыми точками / В. И. Пунегов // Письма в ЖТФ. – 2011. – Т. 37, Вып. 15. – С.8–15.
 17. Grundmann, M. The physics of semiconductors / M. Grundmann. – Berlin : Springer, 2006. – 864 p.
 18. Davies, J. H. The physics of low-dimensional semiconductors / J. H. Davies. – Cambridge : Cambridge University Press, 1998. – 438 p.
 19. Shchukin, V. Epitaxy of nanostructures / V. Shchukin, N. N. Ledentsov, D. Bimberg. – Berlin : Springer, 2003. – 387 p.
 20. Ultranarrow luminescence lines from single quantum dots / M. Grundmann,

- J. Christen, N. N. Ledentsov et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol. 74, № 20. – P. 4043–4046.
21. Zrenner, A. A close look on single quantum dots / A. Zrenner // *J. Chem. Phys.* – 2000. – Vol. 112, № 18. – P. 7790–7798.
22. Vvedensky, D. D. Quantum dots: Self-organized and self-limiting structures / D. D. Vvedensky, in: A. V. Narlikar, Y. Y. Fu (Eds.) // *Oxford Handb. Nanosci. Technol.* – Oxford : Oxford University Press, 2010. – Vol. 3. – P. 205–233.
23. Ландау, Л. Д. Курс теоретической физики: Учеб. пособ. для вузов в 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 800 с.
24. Growth and self-organization of SiGe nanostructures / J.-N. Aqua, I. Berbezier, L. Favre et al. // *Physics Reports.* – 2013 – Vol. 522, № 2. – P. 59–189.
25. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор / Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин и др. // *Физика и техника полупроводников.* – 1998. – Т. 32, № 4. – С. 385–410.
26. Spatial Quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots / M. A. Reed, R. T. Bate, K. Bradshaw et al. // *J. Vac. Sci. Technol. B.* – 1986. – Vol. 4, № 1. – P. 358–360.
27. Murray, C. B. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites / C. B. Murray, D. J. Norris, M. G. Bawendi // *J. Am. Chem. Soc.* – 1993. – Vol. 115, № 19. – P. 8706–8715.
28. Integrated external cavity GaAs/AlGaAs lasers using selective quantum well disordering / J. Werner, E. Kapon, N. G. Stoffel et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 1989. – Vol. 55, № 6. – P. 540–542.
29. Aluminum ion-implantation enhanced intermixing of GaAs-AlGaAs quantum-

- well structures / K. Kash, B. Tell, P. Grabbe et al. // *J. Appl. Phys.* – 1988. – Vol. 63, № 1. – P. 190–194.
30. Optical processes in quantum dots and wires / C. M. Sotomayor Torres, F. D. Wang, N. N. Ledentsov, Y.-S. Tang // *Proc. SPIE.* – 1994. – Vol. 2141. – P. 2–19.
31. Abstreiter, G. Optical properties of low dimensional semiconductors / ed. by G. Abstreiter, A. Aydinli, J.-P. Leburton // *NATO ASI Series. Series E: Applied Sciences.* – Dordrecht : Kluwer Academic Publishers. – 1997. – Vol. 344. – P. 355–373.
32. Kelly, M. J. Low-dimensional semiconductors: materials, physics, technology, devices / Kelly, M. J. – Oxford : Oxford University Press, 1995. – 564 p.
33. Photoluminescence study of deep etched InGaAs/GaAs quantum wires and dots defined by low-voltage electron beam lithography / R. Steffen, Th. Koch, J. Oshinowo et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 1996. – Vol. 68, № 2. – P. 223–225.
34. Eigler, D. M. Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope / D. M. Eigler, E. K. Schweizer // *Nature.* – 1990. – Vol. 344. – P. 524–526.
35. Centimeter scale atomic force microscope imaging and lithography / S. C. Minne, J. D. Adams, G. Yaralioglu et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – Vol. 73, № 12. – P. 1742–1744.
36. Sikorski, Ch. Spectroscopy of electronic states in InSb quantum dots / Ch. Sikorski, U. Merkt // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – Vol. 62, № 18. – P. 2164–2167.
37. High-efficiency p-i-n detectors for the visible spectral range based on ZnTe-ZnTe superlattices / W. Faschinger, M. Ehinger, T. Schallenberg, M. Korn // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – Vol. 74, № 22. – P. 3404–3406.
38. Barth, J. V. Engineering atomic and molecular nanostructures at surfaces / J. V. Barth, G. Costantini, K. Kern // *Nature.* – 2005. – Vol. 437, № 7059. – P. 671–679.
39. Berbezier, I. SiGe nanostructures / I. Berbezier, A. Ronda // *Surf. Sci. Rep.*

- 2009. – Vol. 64, № 2. – P. 47–98.
40. Pierre-Louis, O. Step bunching with general step kinetics: stability analysis and macroscopic models / O. Pierre-Louis // *Surf. Sci.* – 2003. – Vol. 529, № 1-2. – P. 114–134.
41. Controlling the quantum dot nucleation site / N. Motta, A. Sgarlata, F. Rosei, P.-D. Szkutnik et al. // *Mat. Sci. Eng. B.* – 2003. – Vol. 101, № 1-3. – P. 77–88.
42. In situ scanning tunneling microscopy study of C-induced Ge quantum dot formation on Si(100) / O. Leifeld, E. Müller, D. Grützmacher et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – Vol. 74 – P. 994–996.
43. Kim, E. S. Control of Ge dots in dimension and position by selective epitaxial growth and their optical properties / E. S. Kim, N. Usami, Y. Shiraki // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – Vol. 72, № 13. – P. 1617–1619.
44. Homma, Y. Secondary electron imaging of nucleation and growth of semiconductors for nanostructure fabrication / Y. Homma // *Thin Solid Films.* – 1998. – Vol. 332, № 1-2. – P. 262–266
45. Omi, H. Positioning of self-assembling Ge islands on Si(111) mesas by using atomic steps / H. Omi, T. Ogino // *Thin Solid Films.* – 2000. – Vol. 369, № 1-2. – P. 88–91.
46. Royer, R. Recherches expérimentales sur l'épitaxie ou orientation mutuelle de cristaux d'espèces différentes / L. Royer // *Bull. Soc. Fr. Mineral. Crystallogr.* – 1928. – Vol. 51. – P. 7–159.
47. Kratzer, P. Model for nucleation in GaAs homoepitaxy derived from first principles / P. Kratzer, C. G. Morgan, M. Scheffler // *Phys. Rev. B.* – 1999. – Vol. 59, № 23. – P. 15246–15252.
48. Bimberg, D. Quantum dot heterostructures / D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov. – Chichester : John Wiley & Sons, 1999. – 338 p.
49. Herman, M. A. Epitaxy: physical principles and technical implementation / M. A. Herman, W. Richter, H. Sitter. – Berlin : Springer, 2004. – 525 p.

50. Sze, S. M. Semiconductor devices, physics and technology / S. M. Sze – New York : Wiley, 1985. – 523 p.
51. Lourdudoss, S. Hydride vapor phase epitaxy revisited / S. Lourdudoss, O. Kjebon // Ieee Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. – 1997. – Vol. 3, № 3. – P. 749–767 .
52. Stringfellow, G. B. Organometallic vapor-phase epitaxy: theory and practice / G. B. Stringfellow. – London : Academic Press, Inc., 1989. – 572 p.
53. Meyerson, B. S. UHV/CVD growth of Si and Si:Ge alloys: chemistry, physics, and device applications / B. S. Meyerson // Proceedings of the Ieee. – 1992. – Vol. 80, № 10. – P. 1592–1608.
54. Foord, J. S. Chemical Beam Epitaxy and Related Techniques / J. S. Foord, G. J. Davies, W. T. Tsang. – Chichester : John Wiley & Sons Ltd, 1997. – 460 p.
55. Tsao, J. Y. Materials fundamentals of molecular beam epitaxy / J. Y. Tsao. – London : Academic Press, 1992. – 301 p.
56. Frank, F. C. One-dimensional dislocations. I. Static theory / F. C. Frank, J. H. V. d. Merwe // Proc. R. Soc. London Ser. A. – 1949. – Vol. 198. – P. 205–216.
57. Stranski, I. N. Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse IIb / I. N. Stranski, L. Krastanow // Akademie der Wissenschaften. – 1938 – Vol. 146. – P. 797–810.
58. Volmer, M. Nucleus formation in supersaturated systems / M. Volmer, A. Weber // Z. Physik. Chem. – 1926. – Vol. 119. – P. 277–301.
59. Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices / L. Goldstein, F. Glas, J. Y. Marzin et al. // Appl. Phys. Lett – 1985. – Vol. 47, № 10. – P. 1099–1101.
60. Intermixing and shape changes during the formation of InAs self-assembled quantum dots / J. M. García, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt et al. // Appl.

- Phys. Lett. – 1997 – Vol. 71, № 14. – P. 2014–2016.
61. Shape and surface morphology changes during the initial stages of encapsulation of InAs/GaAs quantum dots / P. B. Joyce, T. J. Krzyzewski, P. H. Steans et al. // Surf. Sci. – 2001. – Vol. 492. – P. 345–353.
 62. Songmuang, R. Shape evolution of InAs quantum dots during overgrowth / R. Songmuang, S. Kiravittaya, O. G. Schmidt // J. Cryst. Growth – 2003. – Vol. 249, № 3. – P. 416–421.
 63. Srolovitz, D. J. On the stability of surfaces of stressed solids / D. J. Srolovitz // Acta Metall. – 1989. – Vol. 37, №2. – P. 621–625.
 64. Barabási, A. L. Self-assembled island formation in heteroepitaxial growth / A. L. Barabási // Appl. Phys. Lett. – 1997. – Vol. 70, № 19. – P. 2565–2567.
 65. Wang, L. G. Energetics of InAs thin films and islands on the GaAs(001) substrate / L. G. Wang, P. Kratzer, M. Scheffler // Jpn. J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 39, № 7B. – P. 4298–4301.
 66. Brunner, K. Si/Ge nanostructures / K. Brunner // Rep. Prog. Phys. – 2002. – Vol. 65, № 1. – P. 27–72.
 67. Tersoff, J. Self-organization in growth of quantum dot superlattices / J. Tersoff, C. Teichert, M. G. Lagally // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 76, № 10. – P. 1675–1678.
 68. Self-organized growth of three-dimensional quantum-dot crystals with fcc-like stacking and a tunable lattice constant / G. Springholz, V. Holý, M. Pinczolits, G. Bauer // Science. – 1998. – Vol. 282. – P. 734–737.
 69. Strain induced vertical and lateral correlations in quantum dot superlattices / V. Holý, G. Springholtz, M. Pinczolits, G. Bauer // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 83, № 2. – P. 356–359.
 70. Vertical and lateral ordering in self-organized quantum dot superlattices / G. Springholz, M. Pinczolits, V. Holý et al. // Physica E. – 2001. – Vol. 9, № 1. – P. 149–163.

71. Atomic force microscopy: General aspects and application to insulators / H. Heinzelmann, E. Meyer, P. Grütter et al. // *J. Vac. Sci. Technol. A.* – 1988. – Vol. 6, № 2. – P. 275–278.
72. Binnig, G. Scanning tunneling microscopy / G. Binnig, H. Rohrer // *IBM Journal of Research and Development.* – 1986. – Vol. 30, № 4. – P. 355–369.
73. Determination of the shape and indium distribution of low-growth-rate InAs quantum dots by cross-sectional scanning tunneling microscopy / D. M. Bruls, J. W. A. M. Vugs, P. M. Koenraad et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2002 – Vol. 81, № 9. – P. 1708–1710.
74. Spatial correlation in strain-driven self-assembled InGaAs quantum dots / X.-D. Wang, N. Liu, C. K. Shih et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – Vol. 85, № 8. – P. 1356–1358.
75. Ellipsoidal InAs quantum dots observed by cross-sectional scanning tunneling microscopy / J. H. Blokland, M. Bozkurt, J. M. Ulloa et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – Vol. 94, № 2. – P. 093107 (1–3).
76. Lateral and vertical ordering in multilayered self-organized InGaAs quantum dots studied by high resolution X-ray diffraction / A. A. Darhuber, V. Holý, J. Stangl et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 1996. – Vol. 70, № 8. – P. 955–957.
77. Nature of the stransky-krastanow transition during epitaxy of InGaAs on GaAs / T. Walther, A. G. Cullis, D. J. Norris, M. Hopkinson // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 86, № 11. – P. 2381–2384.
78. Овидько, И. А. Упругие поля наноскопических включений в нанокompозитах / И. А. Овидько, А. Г. Шейерман // *Физика и механика материалов.* – 2010. – Т. 10, № 1/2. – С. 1–29.
79. Yang, M. Influence of capping layer and atomic interdiffusion on the strain distribution in single and double self-assembled InAs/GaAs quantum dots / M. Yang, S. J. Xu, J. Wang // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – Vol. 92, № 8. – P. 083112 (1–3).

80. Strain and band edges in single and coupled cylindrical InAs/GaAs and InP/InGaP self-assembled quantum dots / M. Tadić, F. M. Peeters, K. L. Janssens et al. // J. Appl. Phys. – 2002. – Vol. 92, № 10. – P. 5819–5829.
81. Daruka, I. Molecular-dynamics investigation of the surface stress distribution in a Ge/Si quantum dot superlattice / I. Daruka, A.-L. Barabasi, S. J. Zhou // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 60, № 4. – P. R2150–R2153.
82. Eshelby, J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems / J. D. Eshelby // Proc. R. Soc. London. Ser. A. – 1957. – Vol. 241. – P. 376–396.
83. Кренер, Э. Общая континуальная теория дислокаций и собственных напряжений / Э. Кренер. – М. : Мир, 1965. – 103 с.
84. Vertical correlations and anticorrelations in multisheet arrays of two-dimensional islands / V. A. Schukin, D. Bimberg, V. G. Malyshev, N. N. Ledentsov // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 57, № 19. – P. 12262–12274.
85. F. Kroupa, L. Lejček. Elastic field of cylindrical inclusion // Czech. J. Phys. B. – 1970. – Vol. 20, № 10. – P. 1063–1080.
86. Glass, F. Coherent stress relaxation in a half space: Modulated layers, inclusions, steps, and a general solution / F. Glass // J. Appl. Phys. – 1991. – Vol. 70, № 7. – P. 3556–3571.
87. Glass, F. Elastic relaxation of truncated pyramidal quantum dots and quantum wires in a half space: An analytical calculation / F. Glass // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 90, № 7. – P. 3232–3241.
88. Glass, F. Elastic relaxation of a truncated circular cylinder with uniform dilatational eigenstrain in a half space / F. Glass // Phys. Stat. Sol. B. – 2003. – Vol. 237, № 2. – P. 599–610.
89. Gutkin, M. Yu. Special interaction between quasiperiodic grain boundaries and lattice dislocations in crystalline solids / M. Yu. Gutkin, I. A. Ovid'ko // European Physical Journal B. – 1998. – Vol. 1, № 4. – P. 429–437.

90. Priester, C. Modified two-dimensional to three-dimensional growth transition process in multistacked self-organized quantum dots / C. Priester // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol. 63, № 15. – P. 153303 (1–4).
91. Liu, P. Three-dimensional finite-element simulations of the self-organized growth of quantum dot superlattices / P. Liu, Y. W. Zhang, C. Lu // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 68, № 19. – P. 195314.
92. Pei, Q. X. Effect of elastic anisotropy on the elastic fields and vertical alignment of quantum dots / Q. X. Pei, C. Lu, Y. Y. Wang // *J. Appl. Phys.* – 2003. – Vol. 93, № 3. – P. 1487–1492.
93. Yang, B. Formation of a surface quantum dot near laterally and vertically neighboring dots / B. Yang, V. K. Tewary // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 68, № 3. – P. 035301.
94. Yang, B. Elastic analysis of an inhomogeneous quantum dot in multilayered semiconductors using a boundary element method / B. Yang, E. Pan // *J. Appl. Phys.* – 2002. – Vol. 92, № 6. – P. 3084–3088.
95. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots / C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang et al. // *J. Appl. Phys.* – 1998. – Vol. 83, № 5. – P. 2548–2554.
96. Галлагер, Р. Метод конечных элементов. Основы: Пер. с англ. / Р. Галлагер. – М. : Мир, 1984. – 428 с.
97. Розин, Р. А. Метод конечных элементов в применении к упругим системам / Р. А. Розин. – М. : Стройиздат, 1977. – 129 с.
98. Mura, T. *Micromechanics of defects in solids* / T. Mura. – Dordrecht, Boston, Lancaster : Martinus Nijhoff Publishers, 1987. – 587 p.
99. Rongved, L. Force interior to one of two joined semi-infinite solids / L. Rongved // *Proc. 2nd Midwestern Conf. Solid Mech.* – 1955. – P. 1–13.
100. Dundurs, J. Transmission of force between two semi-infinite solids / J. Dundurs, M. Hetényi // *J. Appl. Mech.* – 1965. – Vol. 32, № 3. – P.

- 671–674.
101. Mann, E. Das Elastische Verschiebungsfeld von Einzel- und Doppelkräften in anisotropen Medien / E. Mann, R. von Jan, A. Seeger // Phys. Stat. Sol. B. – 1961. – Vol. 1, № 1. – P. 17–29.
 102. Lie, K.-H. C. The elastic stress field produced by a point force in a cubic crystal / K.-H. C. Lie, J. S. Koehler // Adv. Phys. – 1968. – Vol. 17, № 67. – P. 421–478.
 103. Bross, H. Zur Theorie bewegter Versetzungen / H. Bross // Phys. Stat. Sol. – 1964. – Vol. 5, № 2. – P. 329–342.
 104. Faux, D. A. Green's tensor for anisotropic elasticity: Application to quantum dots / D. A. Faux, G. S. Pearson // Phys. Rev. B. – 2000. – Vol. 62, № 8. – P. R4798–K4801.
 105. Ekstein, H. Disorder scattering of X-rays by local distortions / H. Ekstein // Phys. Rev. – 1971. – Vol. 68, № 5, 6. – P. 120–124.
 106. Huang, K. X-ray reflections from dilute solid solutions / K. Huang // Proc. Roy. Soc. A. – 1947. – Vol. 190, № 2. – P. 102–117.
 107. Keating, D. T. Scattering of X-rays by structures containing a random distribution of defects / D. T. Keating // J. Phys. Chem. Solids. – 1968. – Vol. 29, № 5. – P. 771–784.
 108. Hall, C. R. On the scattering of X-rays by structures containing a random distribution of defects / C. R. Hall // J. Phys. Chem. Solids. – 1969. – Vol. 30, № 4. – P. 919–921.
 109. Dederichs, P. H. Diffuse scattering from defect cluster near Bragg reflections / P. H. Dederichs // Physical Review B. – 1971. – Vol. 4, № 4. – P. 1041–1050.
 110. Dederichs, P. H. The theory of diffuse X-ray scattering and its application to the study of point defects and their clusters / P. H. Dederichs // J. Phys. F.: Metal Phys. – 1973. – Vol. 3, № 2. – P. 471–496.
 111. Кривоглаз, М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неиде-

- альных кристаллах / М. А. Кривоглаз. – Киев : Наук. думка, 1983. – 408 с.
112. Kato, N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. I. General formulation / N. Kato // Acta Cryst. A. – 1980. – Vol. 36, № 5. – P. 763–769.
113. Kato, N. Statistical dynamical theory of crystal diffraction. II. Intesity distribution and integrated intesity in the Laue cases / N. Kato // Acta Cryst. A. – 1980. – Vol. 36, № 5. – P. 770–778.
114. Holý, V. The coherence description of the dynamical X-ray diffraction from randomly disordered crystals I. General formalism / V. Holý // Phys. Status Solidi B. – 1982. – Vol. 111, № 1. – P. 341–351.
115. Молодкин, В. Б. Динамическая теория диффузного рассеяния в кристаллах с хаотически распределенными дефектами / В. Б. Молодкин // Металлофизика. – 1981. – Т. 3, № 4. – С. 27–38.
116. Бушуев, В. А. Угловое распределение интенсивностей динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами в геометрии Лауэ и Брегга / В. А. Бушуев. – М. : ВИНТИ, 1988. – № 486-B88. – 51 с.
117. 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.
118. Kato, N. On extinction. I. General formulation / N. Kato // Acta Cryst. A. – 1976. – Vol. 32, № 3. – P. 453–457.
119. Kato, N. On extinction. II. The theory of secondary extinction / N. Kato // Acta Cryst. A. – 1976. – Vol. 32, № 3. – P. 458–466.
120. Kato, N. On extinction. III. An improvement of the secondary extinction / N. Kato // Acta Cryst. A. – 1979. – Vol. 35, № 1. – P. 9–16.
121. Kato, N. On extinction. IV. General formulation / N. Kato // Acta Cryst.

- A. – 1980. – Vol. 36, № 2. – P. 171–177.
122. Takagi, S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion / S. Takagi // *Acta Cryst.* – 1962. – Vol. 15, № 12. – P. 1311–1312.
123. Takagi, S. Dynamical theory of diffraction for a distorted crystal / S. Takagi // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1969. – Vol. 27, № 5. – P. 1239–1253.
124. Haddad, M. Al. On the statistical dynamical theory of diffraction: application to silicon / M. Al. Haddad, P. J. Becker // *Acta Cryst. A.* – 1988. – Vol. 44, № 1. – P. 262–270.
125. Becker, P. J. Concerning order parameters in the statistical dynamical theory of diffraction / P. J. Becker, M. Al. Haddad // *Acta Cryst. A.* – 1989. – Vol. 45, № 5. – P. 333–337.
126. Becker, P. Diffraction by randomly distorted crystal. I. The case of short-range order / P. Becker, M. Al. Haddad // *Acta Cryst. A.* – 1990. – Vol. 45, № 2. – P. 123–129.
127. Becker, P. Diffraction by randomly distorted crystal. II. General theory / P. Becker, M. Al. Haddad // *Acta Cryst. A.* – 1992. – Vol. 48, № 2. – P. 121–134.
128. Guigay, J. P. On Integrated Intensities in Kato's statistical diffraction theory / J. P. Guigay // *Acta Cryst. A.* – 1989. – Vol. 45, № 3. – P. 241–244.
129. Guigay, J. P. Reformulation of the dynamical theory of coherent wave propagation by randomly distorted crystal / J. P. Guigay, F. N. Chukovskii // *Acta Cryst. A.* – 1992. – Vol. 48, № 6. – P. 819–826.
130. Guigay, J. P. Statistical dynamical theory in the case of a large correlation length / J. P. Guigay, I. A. Vartanyants // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1999. – Vol. 32, № 10A. – P. A84–A87.
131. Guigay, J. P. Reformulation of the statistical theory of dynamical diffraction in the case $E=0$ / J. P. Guigay, F. N. Chukovskii // *Acta Cryst. A.* – 1992. – Vol. 48, № 3. – P. 288–294.

132. Бушуев В.А. Статистическая динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах с учетом углового распределения интенсивностей / В.А. Бушуев // Кристаллография. – 1989. – Т. 34, № 2. – С. 279–287.
133. Eisenberger, P. X-ray Brillouin scattering / P. Eisenberger, N. G. Alexandropoulos, P. M. Platzman // Phys. Rev. Lett. – 1972. – Vol. 28, № 23. – P. 1519–1522.
134. Larson, B. C. Huang diffuse scattering from dislocation loops and cobalt precipitates in copper / B. C. Larson, W. Shmatz // Phys. Rev. B. – 1974. – Vol. 10, № 6. – P. 2307–2314.
135. Iida, A. Separate measurements of dynamical and kinematical X-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer / A. Iida, K. Kohra // Phys. Stat. Sol. A. – 1979. – Vol. 51, № 2. – P. 533–542.
136. 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, № 6. – С. 1078–1084.
137. 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.
138. 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. – Vol. 56, № 6. – P. 540–548.
139. Davies, J. H. Elastic and piezoelectric fields around a buried quantum dot: A simple picture / J. H. Davies // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol. 84, № 3. – P. 1358–1364.
140. Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений /

- И. С. Градштейн, И. М. Рыжик – Изд. 4-е, перераб. – М. : Физматгиз, 1962. – 1110 с.
141. Двайт, Г. Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы / Г. Б. Двайт – Изд. 4-е. – М. : Наука, 1973. – 228 с.
142. Пунегов, В. И. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей от сферически-симметричных кластеров. Влияние флуктуаций размера дефектов / В. И. Пунегов // Кристаллография. – 2009. – Т. 54, № 3. – С. 423–431.
143. Пунегов, В. И. Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей от эпитаксиального слоя с квантовыми кольцами / В. И. Пунегов // Письма в ЖЭТФ. – 2009. – Т. 35, Вып. 1. – С. 41–47.
144. Некифоров, А. Ф. Общая континуальная теория дислокаций и собственных напряжений / А. Ф. Некифоров, В. Б. Уваров – М. : Наука, 1974. – 304 с.
145. Мессиа, А. Квантовая механика. Т.1 / А. Мессиа – М. : Наука, 1979. – 480 с.
146. Effect of overgrowth on shape, composition, and strain of SiGe islands on Si(001) / A. Hesse, J. Stangl, V. Holý et al. // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66, № 8 – P. 085321 (1–8).
147. Maranganti, R. Handbook of theoretical and computational nanotechnology / R. Maranganti, P. Sharma – New York : Amer. Sci. Publishers, 2005. – Vol. 1. – P. 1–44.
148. 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.
149. Пунегов, В. И. Влияние формы и упругих полей деформаций квантовых точек на диффузное рассеяние рентгеновских лучей / В. И. Пунегов, Д. В. Сивков // Письма в ЖТФ. – 2013. – Т. 39, Вып. 21. – С.54–64.

150. Прудников, А. П. Интегралы и ряды. Элементарные функции / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев – М. : Наука, 1981. – 800 с.
151. Пунегов, В. И. Теория дифракции рентгеновских лучей в нанопористых кристаллах с латеральной квазипериодичностью / В. И. Пунегов, А. А. Ломов // Письма в ЖЭТФ. – 2008. – Т. 34, Вып. 6. – С. 30–35.
152. Steward, E. G. Fourier optics: An Introduction / E. G. Steward – Chichester : John Wiley & Sons, 1983. – 185 p.
153. Пунегов, В.И. Статистическая теория дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетке с коррелированными квантовыми точками сфероидальной формы / В. И. Пунегов, Д. В. Сивков // Известия Коми научного центра УрО РАН. – 2014. – № 2(18). – С. 5–12.