

УДК 548.732

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ ГЕТЕРОМАТЕРИАЛОВ НА ДИФРАКЦИОННУЮ ФОКУСИРОВКУ СФЕРИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ В СВЕРХРЕШЕТКЕ

Л.В. ЛЕВОНЯН, А.М. МАНУКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 21 марта 2019 г.)

Исследовано влияние взаимной диффузии гетероматериалов на дифракционную фокусировку сферической рентгеновской волны в сверхрешетке. Показано, что при динамической дифракции сферической рентгеновской волны в сверхрешетке с малым периодом в зависимости от степени взаимной диффузии гетероматериалов бислоя происходит изменение фокусных расстояний сателлитов. Измерение фокусных расстояний сателлитов позволяет определить структурные факторы сверхрешетки и в итоге вычислить толщину переходного диффузного слоя.

1. Введение

Гетероэпитаксиальные сверхрешетки (СР), которые получают поочередным нанесением друг на друга тонких слоев различных полупроводников с близкими межплоскостными расстояниями, имеют широкое применение в микроэлектронике и вычислительной технике. При этом важное значение имеет рентгеновский неразрушающий контроль параметров СР. Исследования СР различными рентгеновскими методами проведены в работах [1–5].

В работах [6,7] развита динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на одномерной идеальной СР произвольной модели и получены формулы структурных факторов для разных моделей СР. В работах [8,9] исследована динамическая дифракция рентгеновских лучей на СР с дефектом упаковки. В работе [10] проведено исследование динамической дифракции сферической рентгеновской волны на идеальной СР квадратичной модели, которая соответствует раннему этапу после изготовления, когда отсутствует взаимная диффузия полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя.

Целью настоящей работы является исследование влияния взаимной диффузии гетероматериалов бислоя СР на дифракционную фокусировку сферической рентгеновской волны.

2. Дифракционная фокусировка рентгеновского излучения в монокристалле

При динамической дифракции рентгеновских лучей от точечного источника S , находящегося на расстоянии L_1 от кристалла, эффективная область входной поверхности кристалла, участвующая в дифракции (рис.1), определяется геометрическим соотношением:

$$\Delta x = \frac{L_1 \Delta \theta}{\cos \theta}, \quad (1)$$

где θ – угол Брэгга, $\Delta \theta$ – угловая ширина брэгговского отражения, определяемая формулой [11]

$$\Delta \theta = \frac{2C |\chi_h|}{\sin 2\theta}, \quad (2)$$

где C – поляризационный фактор ($C = 1$ для σ -поляризации и $C = \cos 2\theta$ для π -поляризации), χ_h – Фурье компонента комплексной поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$.

Как известно [11], при дифракции в геометрии Лауэ динамическое волновое поле в точке $P(x_0, z_0)$ внутри кристалла (x_0 – координата в направлении вектора дифракции и z_0 – глубина точки в кристалле) определяется участком

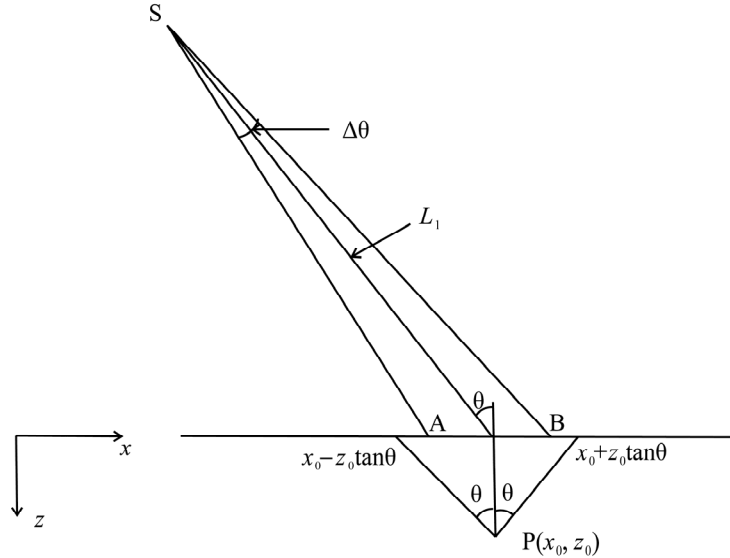


Рис.1. Геометрия расположения точечного источника рентгеновских лучей S относительно точки наблюдения $P(x_0, z_0)$ внутри кристалла: $AB = \Delta x$ – эффективная область входной поверхности кристалла, участвующая в дифракции, $x_0 - z_0 \tan \theta$ и $x_0 + z_0 \tan \theta$ – характеристики для точки наблюдения $P(x_0, z_0)$.

волнового фронта падающей волны, ограниченным на поверхности образца областью $(x_0 - z_0 \tan \theta, x_0 + z_0 \tan \theta)$ (рис.1). Из равенства ширины этой области $2z_0 \tan \theta$ и эффективной ширины падающей волны Δx получаем глубину наибольшей интенсивности в кристалле, которая может рассматриваться как фокусная глубина

$$z_F = L_1 / \Gamma, \quad (3)$$

где

$$\Gamma = \frac{\sin \theta \sin 2\theta}{C |\chi_{hr}|}. \quad (4)$$

Как известно [12–15], при дифракции сферической рентгеновской волны на монокристалле в геометрии Лауэ имеет место явление фокусировки слабопоглощаемой моды дифрагированного волнового поля как внутри кристалла, так и за кристаллом – в вакууме. В работах [14,15] показано, что интенсивность дифрагированной волны на глубине z внутри кристалла вблизи фокальной области для симметричного случая Лауэ, когда отражающие атомные плоскости соответствуют плоскостям $x = \text{const}$, приближенно выражается следующей формулой:

$$I_h(x, z) = \frac{\exp\left(-\frac{\mu z}{\cos \theta} \left(1 - C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}}\right)\right)}{4L_1 \Gamma \left(\left(\frac{L_1}{\Gamma} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{|\chi_{hr}|}\right)^2 \right)^{1/2}} \times \exp\left(-\pi \frac{z C |\chi_{hi}|}{\lambda \cos \theta} \frac{x^2 \cot^2 \theta}{\left(\frac{L_1}{\Gamma} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{|\chi_{hr}|}\right)^2}\right), \quad (5)$$

где λ – длина падающей волны, $\mu = 2\pi\chi_{0i}/\lambda$ – коэффициент линейного поглощения рентгеновских лучей в кристалле, χ_0 и χ_h – коэффициенты Фурье комплексной поляризуемости кристалла. Величина Γ определяется формулой (4).

Поскольку для рентгеновских лучей динамическое поглощение обычно мало, т.е. $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$ ([11]), то, как следует из формулы (5), глубина, на которой распределение интенсивности имеет наиболее узкий и высокий пик, соответствующий дифракционной фокусировке рентгеновских лучей, совпадает с формулой (3).

При распространении излучения за кристаллом дифрагированный пучок еще раз будет стягиваться в фокальное пятно в вакууме на расстоянии кристалл – детектор L_2 , удовлетворяющем условию

$$L_{2F} = \Gamma(D - z_F). \quad (6)$$

Выражение для интенсивности дифрагированной волны в вакууме за кристаллом на расстоянии L_2 имеет вид идентичный формуле (5), в которой произведена замена координаты z на толщину кристалла D , а расстояние источник – кристалл L_1 заменено на суммарное расстояние источник – кристалл – детектор $L_1 + L_2$, что обеспечивает фокусировку на расстоянии, определяемом выражением (6):

$$I_h(x, z) = \frac{\exp\left(-\frac{\mu D}{\cos\theta}\left(1 - C\frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{oi}}\right)\right)}{4(L_1 + L_2)\Gamma\left(\left(\frac{L_1 + L_2}{\Gamma} - D\right)^2 + \left(D\frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2\right)^{1/2}} \times \exp\left(-\pi\frac{DC|\chi_{hi}|}{\lambda\cos\theta}\frac{x^2\cot^2\theta}{\left(\frac{L_1 + L_2}{\Gamma} - D\right)^2 + \left(D\frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2}\right). \quad (7)$$

Как следует из формул (3), (4) и (6), фокусная глубина в кристалле прямо пропорциональна величине $|\chi_{hr}|$, а за кристаллом – обратно пропорциональна этой же величине.

3. Дифракционная фокусировка рентгеновского излучения в сверхрешетке

Как было показано в работе [10], задача дифракции сферической рентгеновской волны на СР с малым периодом $z_0 \ll \bar{\Lambda}$ (z_0 – период СР, $\bar{\Lambda}$ – усредненная по периоду СР экстинкционная длина кристалла) описывается аналогично вышеизложенному для монокристалла. При этом для разных сателлитов разными будут координаты и интенсивности фокусных пятен как внутри, так и вне кристалла, поскольку разными будут углы Брэгга θ_m и модифицированные Фурье-компоненты поляризуемости кристалла χ_{hm} , определяемые выражением [6]

$$\chi_{hm} = M_m \bar{\chi}_h, \quad (8)$$

где m – номер сателлита, $\bar{\chi}_h$ – усредненная по периоду СР Фурье-компонента поляризуемости кристалла, M_m – параметр, зависящий от модели СР. При этом чем меньше значение M_m , тем меньше фокусное расстояние соответствующего сателлита внутри СР и тем дальше от кристалла происходит фокусировка в вакууме за кристаллом.

Согласно вышеизложенному, выражение для интенсивности m -го сателлита в вакууме за кристаллом на расстоянии кристалл – детектор L_{2m}

с учетом (7) и (8) принимает следующий вид:

$$I_{hm}(x, z) = \frac{\exp\left(-\frac{\bar{\mu}D}{\cos\theta_m}\left(1 - CM_m \frac{|\bar{\chi}_{hi}|}{\bar{\chi}_{0i}}\right)\right)}{4(L_{1m} + L_{2m})\Gamma_m \left(\left(\frac{L_{1m} + L_{2m}}{\Gamma_m} - D\right)^2 + \left(D \frac{|\bar{\chi}_{hi}|}{|\bar{\chi}_{hr}|}\right)^2\right)^{1/2}} \quad (9)$$

$$\times \exp\left(-\pi \frac{DCM_m |\bar{\chi}_{hi}|}{\lambda \cos\theta_m} \frac{x^2 \cot^2\theta_m}{\left(\frac{L_{1m} + L_{2m}}{\Gamma_m} - D\right)^2 + \left(D \frac{|\bar{\chi}_{hi}|}{|\bar{\chi}_{hr}|}\right)^2}\right),$$

где L_{1m} – расстояние источник – кристалл для m -го спутника, $\bar{\mu} = 2\pi\bar{\chi}_{0i}/\lambda$ – усредненный по периоду СР коэффициент линейного поглощения рентгеновских лучей в кристалле,

$$\Gamma_m = \frac{\sin\theta_m \sin 2\theta_m}{M_m C |\bar{\chi}_{hr}|}. \quad (10)$$

Как следует из формулы (9) фокусное расстояние m -го спутника в вакууме за кристаллом определяется формулой

$$L_{2mF} = \Gamma_m D - L_{1m}. \quad (11)$$

В работе [10] проведено исследование дифракции сферической рентгеновской волны на СР квадратичной модели. Поскольку в двухкомпонентных сверхрешетках используются гетероматериалы с близкими межплоскостными расстояниями, то со временем происходит их взаимная диффузия, вследствие чего между слоями образуется переходной диффузный слой толщиной z_d . Как показано в работе [7], для такой СР необходимо использовать трапецевидную модель, при которой параметр M_m , входящий в выражение (9), имеет следующий вид:

$$M_m = \left| \frac{\sin(\pi p_{1m} \varepsilon_1)}{\pi p_{1m} \varepsilon_0} + (-1)^m \frac{\sin(\pi p_{2m} \varepsilon_1)}{\pi p_{2m} \varepsilon_0} - F_{1m} - (-1)^m F_{2m} \right|, \quad (12)$$

где введены следующие обозначения:

$$p_{1m} = \frac{m - \varepsilon_1 - \varepsilon_d}{\varepsilon_0}, \quad (13)$$

$$p_{2m} = \frac{m + \varepsilon_1 + \varepsilon_d}{\varepsilon_0}, \quad (14)$$

$$\varepsilon_j = 2kz_j \sin \bar{\theta} \bar{\theta} \Delta d / \bar{d} \quad (j = 0; 1; d), \quad (15)$$

$$F_{jm} = \frac{\sqrt{\varepsilon_d}}{\varepsilon_0} (\sin(\pi p_{jm} \varepsilon_1) U_{3/2}(2q_{jm}^2, 0) - (-1)^j \cos(\pi p_{jm} \varepsilon_1) U_{1/2}(2q_{jm}^2, 0)), \quad (16)$$

$$q_{jm} = \sqrt{\pi \varepsilon_d} p_{jm} \quad (j=1;2), \quad (17)$$

где

$$U_v(2x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{v+2k}}{\Gamma(v+2k+1)} \quad (18)$$

функция Ломмеля двух переменных [16], $k = 1/\lambda$ – волновое число в вакууме, z_1 – толщина каждого из оставшихся после диффузии идеальных слоев, z_d – толщина диффузного слоя, Δd – разность межплоскостных расстояний гетероструктур, $\bar{d}$ и $\bar{\theta}$, соответственно, межплоскостное расстояние и угол Брэгга, усредненные по периоду сверхрешетки.

При малой толщине переходного диффузного слоя ($z_d \ll z_1$) можно пренебречь дифракцией рентгеновской волны в этом слое и воспользоваться приближением $q_{jm} \ll 1$. Оставив только первый член в разложении функции Ломмеля (18) в ряд, из (12) и (16) получаем

$$M'_m = M_m \left(1 - \frac{\pi^2}{6} \varepsilon_d^2 p_{1m} p_{2m} \right), \quad (19)$$

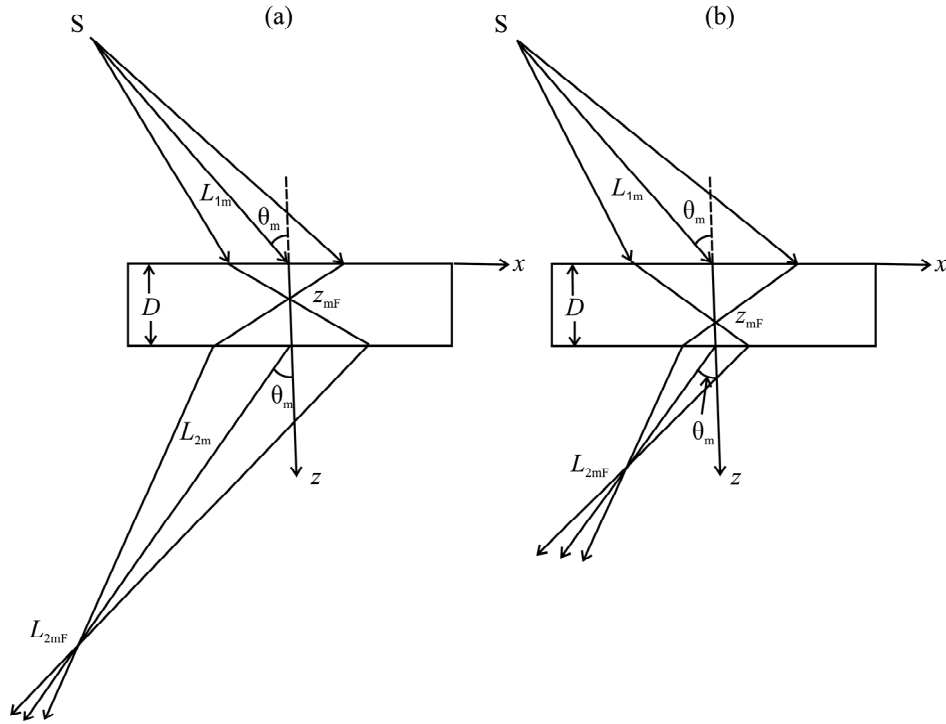


Рис.2. Схематическое изображение геометрии дифракционной фокусировки m -го сателлита в случае возрастания структурного фактора СР в результате взаимной диффузии гетероматериалов бислоя: (а) квадратичная модель, (б) трапецевидная модель.

где M_m – структурный фактор квадратичной модели с толщинами слоев $z_0/2$, а M_m^t – структурный фактор трапецевидной модели.

Относительное изменение структурного фактора в этом случае равно

$$\delta_m = \frac{M_m^t - M_m}{M_m} = -\frac{\pi^2}{6} \varepsilon_d^2 p_{1m} p_{2m}. \quad (20)$$

Из выражения (20) с учетом (13) и (14) следует, что в результате взаимной диффузии гетероматериалов при малой толщине переходного диффузного слоя возрастают структурные факторы сателлитов, номера которых удовлетворяют соотношению $|m| < \varepsilon_0/2$. В частности, структурный фактор основного максимума возрастает, что объясняется тем, что процесс взаимной диффузии стремится преобразовать СР в однородный кристалл с усредненными параметрами.

На рис.2 представлено схематическое изображение геометрии дифракционной фокусировки m -го сателлита в случае возрастания структурного фактора СР.

В работе [17] проведено исследование динамической дифракции сферической рентгеновской волны на идеальной СР треугольной модели, которая соответствует полной взаимной диффузии полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя ($z_d = 0.5z_0$).

Поскольку процесс взаимной диффузии гетероматериалов происходит медленно, то вначале, когда между слоями гетероматериалов образуются диффузные слои, СР описывается трапецевидной моделью. В настоящей работе численные расчеты проведены для СР на основе гетероперехода GaAs–AlAs с периодом 200 нм при излучении CuK_α . В этом случае взаимная диффузия гетероматериалов бислоя приводит к возрастанию структурного фактора основного максимума СР. На рис.3 показана зависимость интенсивности основного максимума от взаимной диффузии гетероматериалов бислоя СР. В отсутствие

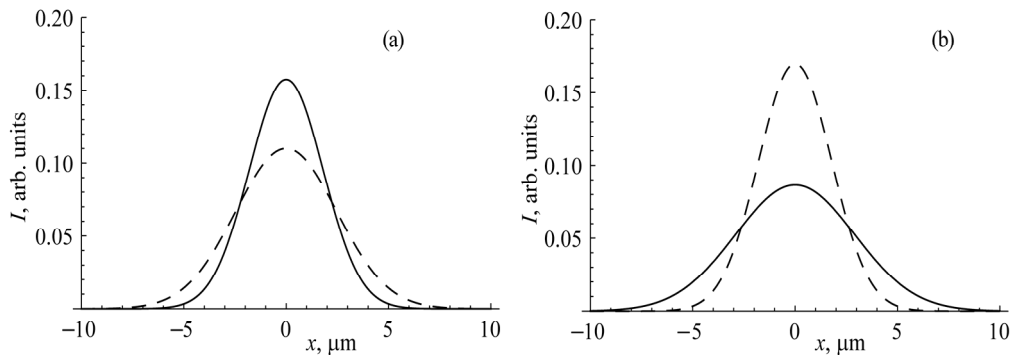


Рис.3. Интенсивность основного максимума ($m = 0$) при $z_d = 0.2z_0$. Сплошная кривая соответствует квадратичной модели, пунктирная – трапецевидной. (а) – интенсивность на расстоянии, соответствующем фокусному расстоянию для $z_d = 0$, (б) – интенсивность на расстоянии, соответствующем фокусному расстоянию для $z_d = 0.2z_0$.

взаимной диффузии ($z_d = 0$) основной максимум фокусируется на расстоянии 2.29 м от выходной поверхности кристалла. Если вследствие взаимной диффузии гетероматериалов бислоя образуется диффузный слой $z_d = 0.2z_0$, то основной максимум фокусируется на расстоянии 2.14 м от выходной поверхности кристалла.

Согласно (10) и (11), измерив фокусные расстояния сателлитов, можно определить соответствующие значения параметра M_m , что позволит вычислить толщину переходного диффузного слоя z_d .

4. Заключение

При динамической дифракции сферической рентгеновской волны на СР с малым периодом в зависимости от структурных факторов сверхрешетки происходит фокусировка сателлитов как на разной глубине внутри кристалла, так и на разном расстоянии от кристалла в вакууме. Вследствие взаимной диффузии между слоями гетероматериалов бислоя образуется переходной диффузный слой, что приводит к изменению структурных факторов сателлитов. В результате фокусные расстояния сателлитов меняются. Измерив фокусные расстояния разных сателлитов можно вычислить толщину переходного диффузного слоя, определив тем самым степень взаимной диффузии гетероматериалов бислоя.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.М. Афанасьев, А.А. Зайцев, Р.М. Имамов. Кристаллография, **43**, 1 (1998).
2. C. Engström, J. Birch, et al. J. Vac. Sci. Technol. A, **17**, 5 (1999).
3. V. Holy, J. Stangl, G. Springholz et al. J. Phys. D: Appl. Phys., **34**, A1 (2001).
4. T. Roch, V. Holy, A. Daniel, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., **34**, A6 (2001).
5. T. Etzelstorfer et al. Applied Cryst., **48**, 262 (2015).
6. D.M. Vardanyan, H.M. Manoukian, H.M. Petrosyan. Acta Cryst., **A41**, 212 (1985).
7. D.M. Vardanyan, H.M. Manoukian, H.M. Petrosyan. Acta Cryst., **A41**, 218 (1985).
8. А.М. Манукян. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 10, 17 (2007).
9. А.М. Манукян. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 360 (2014).
10. Л.В. Левонян, А.М. Манукян. Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 95 (2016).
11. З.Г. Пинскер. Рентгеновская кристаллооптика, Москва, Наука, 1982.
12. А.М. Афанасьев, В.Г. Кон. ФТТ, **19**, 1775 (1977).
13. V.V. Aristov, V.I. Polovinkina, A.M. Afanas'ev, V.G. Kohn. Acta Cryst., **A36**, 1002 (1980).
14. Л.В. Левонян. Письма в ЖТФ, **7**, 269 (1981).
15. L.V. Levonian. Phys. Stat. Sol.(a), **68**, k199 (1981).
16. G.N. Watson. A Treatise on the Theory of Bessel Functions. Cambridge Univ. Press, 1944.
17. L.V. Levonyan, H.M. Manukyan. Proceedings of the Yerevan State University, Physical and Mathematical Sciences, **51**(1), 113 (2017).

ԳԵՐՑԱՆՑՈՒՄ ՓՈԽԱԴԱՐՁ ԴԻՖՈՒԶԻԱՅԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ
ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԳՆԴԱՅԻՆ ԱԼԻՔԻ ԴԻՖՐԱԿՏԱՅԻՆ ԿԻՋԱԿԵՏՄԱՆ ՎՐԱ

Լ.Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Հետազոտված է գերցանցում փոխադարձ դիֆուզիայի ազդեցությունը ռենտգենյան գնդային ալիքի դիֆրակտային կիզակետման վրա: Ցույց է տրված, որ փոքր պարբերությամբ գերցանցում ռենտգենյան գնդային ալիքի դինամիկական դիֆրակցիայի դեպքում կախված երկշերտ հետերոնյութերի փոխադարձ դիֆուզիայի աստիճանից՝ տեղի է ունենում սատելիտների կիզակետային հեռավորությունների փոփոխություն: Սատելիտների կիզակետային հեռավորությունների չափումը թույլ է տալիս որոշել գերցանցի կառուցվածքային գործակիցները և արդյունքում հաշվել անցումային դիֆուզ շերտի հաստությունը:

INFLUENCE OF INTERDIFFUSION OF HETEROMATERIALS
ON DIFFRACTION FOCUSING OF THE SPHERICAL X-RAY WAVE
IN THE SUPERLATTICE

L.V. LEVONYAN, H.M. MANUKYAN

Influence of interdiffusion of heteromaterials on the diffraction focusing of a spherical X-ray wave in a superlattice is investigated. It is shown that there is a change of focal distances of satellites at the dynamical diffraction of spherical X-ray wave on a short period superlattice, depending on extent of interdiffusion of bilayer heteromaterials. Measurement of focal distances of satellites allows to define structural factors of the superlattice and ultimately calculate the thickness of the transition diffuse layer.