

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА СВЕРХРЕШЕТКЕ С ПЕРЕКРЫВАЮЩИМИСЯ ДЕФЕКТАМИ УПАКОВКИ

А.М. МАНУКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 8 мая 2024 г.)

Проведено теоретическое исследование дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетке с перекрывающимися дефектами упаковки. Получены выражения для коэффициента отражения рентгеновских лучей в направлении сателлитов, в зависимости от скачка фазы волны на дефектах упаковки и глубины их залегания. Для сравнения с идеальной сверхрешеткой получено относительное изменение коэффициента отражения.

1. Введение

Сверхрешетки (СР) представляют собой кристаллы, в которых существует периодическая функция смещения с периодом искажений, намного превышающим постоянную решетки. В этом случае на электроны, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, действует дополнительный потенциал с намного большим периодом. Наличие дополнительного потенциала в СР приводит к тому, что кристалл приобретает ряд специфических свойств, отсутствующих у однородного образца. Поскольку длина рентгеновской волны намного меньше периода дополнительного потенциала, то дифракция на нем возможна при малых углах падения. Если же рентгеновские лучи претерпевают брэгговскую дифракцию, то в кристалле возбуждаются модулированные волны с периодом, намного превышающим длину рентгеновской волны, и периодические искажения служат дифракционной решеткой для таких модулированных волн. Следствием этой дифракции является появление сателлитов вокруг основного максимума при дифракции рентгеновских лучей на СР.

Особый интерес представляют искусственные полупроводниковые СР на основе гетеропереходов, которые получают поочередным нанесением друг на друга тонких слоев различных полупроводников с близкими межплоскостными расстояниями. При этом возможно привнесение в СР различных дефектов, ухудшающих ее параметры. В связи с этим, очень важно исследование влияния дефектов на дифракционную картину при дифракции рентгеновских лучей на СР. Исследование гетероэпитаксиальных СР различными рентгеновскими методами проведены в работах [1–7]. В работе [1] для интерпретации экспериментальных результатов проводился учет непостоянства периода СР, а также исследовано диффузное рассеяние на тепловых фонах и несовершенствах СР. Влияние

взаимной диффузии гетероматериалов бислая на дифракционную картину при отжиге идеальной СР исследовано в работе [2]. В работах [3, 4] исследовано образование квантовых точек и проволок в СР. Изучение СР при малоугловом рассеянии рентгеновских лучей проведено в работах [5–7].

Одним из возможных дефектов при получении гетероэпитаксиальных СР является дефект упаковки между слоями. В работе [8] исследована дифракция рентгеновских лучей на одномерной гетероэпитаксиальной СР с дефектом упаковки.

Настоящая работа посвящена дифракции рентгеновских лучей на СР с перекрывающимися дефектами упаковки.

2. Сверхрешетка с перекрывающимися дефектами упаковки

Характерной особенностью дифракции рентгеновских лучей на СР или модулированных структурах является наличие сателлитов вокруг основного дифракционного максимума, положение которого определяется усредненным по периоду СР углом Брэгга. При $z_0 \ll \bar{\Lambda}$ (z_0 – период СР, $\bar{\Lambda} = \cos \bar{\theta} / (kC|\bar{\chi}_h|)$ – усредненная по периоду СР экстинкционная длина кристалла, $\bar{\theta}$ – усредненный по периоду СР угол Брэгга, $\bar{\chi}_h$ – усредненная по периоду СР Фурье-компонента поляризуемости кристалла, $k = 1/\lambda$ – волновое число в вакууме, C – поляризационный множитель) дифракционная картина представляет собой систему перекрывающихся сателлитов, угловое расстояние между которыми обратно пропорционально периоду СР, а их ширины и интенсивности зависят от реальной структуры и толщины СР.

Рассмотрим гетероэпитаксиальную СР толщиной Nz_0 ($N = N_1 + N_2 + N_3$ – число идентичных слоев). Пусть на глубине N_1z_0 и $(N_1 + N_2)z_0$ в СР содержатся дефекты упаковки, на которых волны претерпевают скачок фазы, соответственно, $\alpha_1 = 2\pi\mathbf{h}\mathbf{u}_1$ и $\alpha_2 = 2\pi\mathbf{h}\mathbf{u}_2$, где $\mathbf{h}$ – вектор дифракции, $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{u}_2$ – векторы смещения. Пусть на эту СР падает плоская монохроматическая рентгеновская волна единичной амплитуды. Введем следующие обозначения: $r_{\mathbf{h}(N_1+N_2)}$ и $t_{0(N_1+N_2)}$ – соответственно, амплитуды отражения и прохождения СР толщиной $(N_1 + N_2)z_0$ с дефектом упаковки α_1 ; $r_{\mathbf{h}N_3}$ и t_{0N_3} – соответственно, амплитуды отражения и прохождения идеальной СР толщиной N_3z_0 (черточка соответствует падению волны на обратную сторону отражающих плоскостей). Тогда согласно [9], амплитуда отражения СР толщиной Nz_0 имеет следующий вид:

$$\Phi_h = \exp(-i\alpha_2/2)r_{\mathbf{h}(N_1+N_2)}t_{0N_3} + \exp(i\alpha_2/2)t_{0(N_1+N_2)}r_{\mathbf{h}N_3}. \quad (1)$$

Как показано в работе [9], поскольку в гетероэпитаксиальных СР $z_0 \ll \bar{\Lambda}$, то в пределах m -го сателлита СР можно рассматривать как идеальный кристалл с модифицированной Фурье-компонентой поляризуемости кристалла

$$\chi_{hm} = M_m \bar{\chi}_h, \quad (2)$$

где m – номер дифракционного максимума (сателлита), M_m – структурный фактор СР, значение которого для некоторых моделей приведено в [10].

Если толщина СР $Nz_0 \ll \bar{\Lambda}$, то для амплитуд отражения и прохождения

можно применить кинематические формулы [8, 11]. В этом случае, с учетом (2), коэффициент отражения рентгеновской волны от СР с перекрывающимися дефектами упаковки в направлении m -го сателлита принимает вид

$$R_m = R_{m0} - 4 \left(\frac{\pi k C M_m |\bar{\chi}_h| z_0}{\cos \theta_m} \right)^2 (N_1 N_2 \sin^2 \frac{\alpha_1}{2} + N_2 N_3 \sin^2 \frac{\alpha_2}{2} + N_1 N_3 \sin^2 \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}), \quad (3)$$

где

$$R_{m0} = (\pi k C M_m |\bar{\chi}_h| N z_0 / \cos \theta_m)^2 \quad (4)$$

– кинематический коэффициент отражения рентгеновских лучей от одномерной идеальной СР толщиной $N z_0$, θ_m – брэгговский угол m -го сателлита.

Согласно (3) и (4), относительное изменение интенсивности m -го сателлита

$$R_r = \frac{R_{m0} - R_m}{R_{m0}} = \frac{4}{N^2} (N_1 N_2 \sin^2 \frac{\alpha_1}{2} + N_2 N_3 \sin^2 \frac{\alpha_2}{2} + N_1 N_3 \sin^2 \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}). \quad (5)$$

Как видно из выражения (5), относительное изменение интенсивности отражения рентгеновской волны в направлениях дифракционных максимумов в кинематическом приближении не зависит от номера сателлита. При этом поскольку $R_r \geq 0$, то наличие дефектов упаковки уменьшает интенсивности всех сателлитов.

Современные технологии позволяют выращивать гетероэпитаксиальные СР с достаточно большим числом слоев. При этом толщина СР уже сравнима с экстинкционной длиной так что, хотя в пределах одного периода отражение кинематическое, для всего образца необходимо учитывать многократные отражения рентгеновской волны. В этом случае в выражении (1) необходимо применить формулы динамической теории [8, 12] с учетом (2).

Для коэффициента отражения СР в направлении m -го сателлита получаем выражение

$$\begin{aligned} R_m = & \cos^2 \frac{\alpha_2}{2} \left(\sin^2 \frac{\alpha_1}{2} \sin^2 (A_{m1} - A_{m2} - A_{m3}) + \cos^2 \frac{\alpha_1}{2} \sin^2 (A_{m1} + A_{m2} + A_{m3}) \right) + \\ & + \sin^2 \frac{\alpha_2}{2} \left(\sin^2 \frac{\alpha_1}{2} \sin^2 (A_{m1} - A_{m2} + A_{m3}) + \cos^2 \frac{\alpha_1}{2} \sin^2 (A_{m1} + A_{m2} - A_{m3}) \right) - \\ & \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 \sin(2 A_{m1}) \sin(2 A_{m3}), \end{aligned} \quad (6)$$

где введены следующие обозначения:

$$A_{m1} = \pi N_1 z_0 \beta_m M_m \quad (7)$$

$$A_{m2} = \pi N_2 z_0 \beta_m M_m \quad (8)$$

$$A_{m3} = \pi N_3 z_0 \beta_m M_m \quad (9)$$

$$\beta_m = k C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} / (\cos \theta_m). \quad (10)$$

В отличие от кинематического приближения, относительное изменение интенсивности в направлении m -го сателлита, обусловленное наличием перекрывающихся дефектов упаковки, зависит как от скачка фазы на дефектах и глубины их залегания, так и от конкретной модели СР и номера сателлита.

При $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi$ коэффициент отражения СР в направлении m -го сателлита

имеет следующий вид:

$$R_m = \sin^2(A_{m1} + A_{m3} - A_{m2}). \quad (11)$$

3. Квадратичная модель СР

Искусственные СР кристаллы на основе гетеропереходов на раннем этапе после изготовления, когда отсутствует взаимная диффузия полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя, могут быть описаны прямоугольной (квадратичной, если слои из разных материалов имеют одинаковую толщину) моделью. Структурный фактор СР для квадратичной модели имеет следующий вид [10]:

$$M_m = \begin{cases} (\varepsilon_0/\pi) |\sin(\pi \varepsilon_0/4)/(m^2 - \varepsilon_0^2/4)|, & m = 2n, \\ (\varepsilon_0/\pi) |\cos(\pi \varepsilon_0/4)/(m^2 - \varepsilon_0^2/4)|, & m = 2n + 1, \end{cases} \quad (12)$$

где

$$\varepsilon_0 = 2kz_0 \sin \bar{\theta} \bar{\theta} \Delta d / \bar{d} \quad (13)$$

– параметр, характеризующий степень несоответствия гетероматериалов, Δd – разность межплоскостных расстояний гетероструктур, черточка обозначает усреднение по периоду СР.

Численные расчеты проведены для СР на основе гетероперехода GaAs–AlAs с периодом 800 нм при излучении CuK_α . На рис.1 приведены графики коэффициента отражения основного максимума ($m=0$) идеальной СР и СР с перекрывающимися дефектами упаковки в зависимости от безразмерного параметра p , пропорционального отклонению от направления усредненного по периоду СР угла Брэгга, при $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$ и глубине залегания дефектов $N_1 z_0 = N_2 z_0 = 0.1 N z_0$.

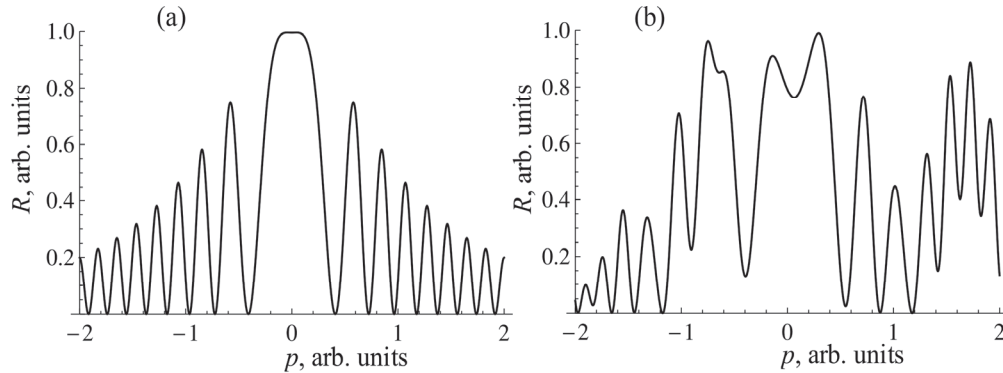


Рис.1. Коэффициент отражения основного максимума: (а) идеальная СР; (б) $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$, $N_1 z_0 = N_2 z_0 = 0.1 N z_0$.

На рис.2 приведены соответствующие графики коэффициента отражения для первых сателлитов, симметричных относительно основного максимума ($m = \pm 1$), в зависимости от безразмерного параметра p , пропорционального отклонению от направления брэгговского угла данного сателлита.

Как видно из рисунков, наличие перекрывающихся дефектов упаковок приводит к перераспределению интенсивности дифракционных максимумов.

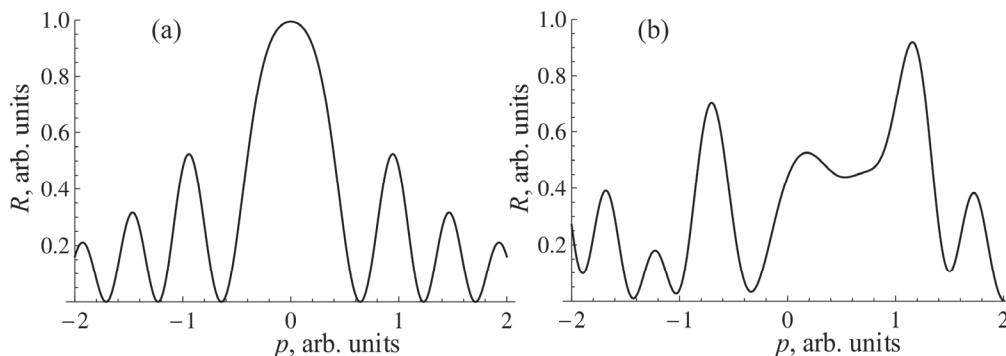


Рис.2. Коэффициент отражения первых сателлитов ($m = \pm 1$): (a) идеальная СР; (b) $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$, $N_1 z_0 = N_2 z_0 = 0.1 N z_0$.

4. Заключение

В работе показано, что в кинематическом приближении при дифракции рентгеновских лучей на СР с перекрывающимися дефектами упаковки относительное изменение интенсивности отражения рентгеновской волны в направлениях дифракционных максимумов не зависит от номера сателлита. При этом наличие дефектов упаковки уменьшает интенсивности всех сателлитов.

При динамической дифракции относительное изменение интенсивности отражения рентгеновской волны в направлениях дифракционных максимумов разное для разных сателлитов. Для иллюстрации сказанного на рис.1b и рис.2b приведены графики зависимости коэффициента отражения для основного максимума и первых сателлитов при дифракции рентгеновских лучей на СР с перекрывающимися дефектами упаковки в зависимости от безразмерного параметра p , пропорционального отклонению от направления дифракционного максимума, при $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$ и глубине залегания дефектов $N_1 z_0 = N_2 z_0 = 0.1 N z_0$. Для сравнения на рис.1a и рис.2a приведены соответствующие графики для идеальной СР. Сравнение графиков показывает, что изменение коэффициента отражения в направлении дифракционного максимума θ_m ($p = 0$), обусловленное наличием перекрывающихся дефектов упаковки, для разных сателлитов разное. При этом происходит перераспределение интенсивности отраженной волны, зависящее как от скачка фазы на дефектах и глубины их залегания, так и от конкретной модели СР и номера сателлита.

Полученные в работе результаты могут быть использованы для диагностики степени совершенства выращиваемых СР.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.М. Афанасьев, А.А. Зайцев, Р.М. Имамов. Кристаллография, **43**, 1 (1998).
2. C. Engström, J. Birch, L. Hultman, C. Lavoie, C. Cabral, J.L. Jordan-Sweet, J.R.A. Carlsson. J. Vac. Sci. Technol. A, **17**, 5 (1999).
3. V. Holy, J. Stangl, G. Springholz, M. Pinczolits, G. Bauer. J. Phys. D: Appl. Phys., **34**, A1 (2001).

4. **T. Roch, V. Holy, A. Hesse, J. Stangl, T. Fromherz, G. Bauer, T.H. Metzger, S. Ferrer.** *Phys. Rev. B*, **65**, 245324 (2002).
5. **Y. Yu, D. Yu, B. Sadigh, C.A. Orme.** *Nature Communications*, **9**, 4211 (2018).
6. **Z. Jiang, B. Lee.** *Appl. Phys. Rev.*, **8**, 011305 (2021).
7. **E. Marino, D.J. Rosen, S. Yang, E.H. Tsai, C.B. Murray.** *Nano Letters*, **23**, 4250 (2023).
8. **А.М.Манукян.** Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **10**, 17 (2007).
9. **D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan, H.M. Petrosyan.** *Acta Cryst.*, **A41**, 212 (1985).
10. **D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan, H.M. Petrosyan.** *Acta Cryst.*, **A41**, 218 (1985).
11. **Р. Джеймс.** Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Москва, ИЛ, 1950.
12. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԾԱԾԿՎՈՂ
ԴԱՐՍՄԱՆ ԱՐԱՏՆԵՐ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԳԵՐՑԱՆՑՈՒՄ

Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիան ծածկվող դարսման արատներ պարունակող գերցանցում: Արտածված է ռենտգենյան ճառագայթների անդրադարձման գործակցի բանաձևը սատելիտների ուղղությամբ՝ կախված դարսման արատների վրա ալիքի կրած փուլի թռիչքից և նրանց խորությունից: Կատարյալ գերցանցի հետ համեմատելու համար ստացված է անդրադարձման գործակցի հարաբերական փոփոխությունը:

X-RAY DIFFRACTION BY SUPERLATTICE
WITH OVERLAPPING STACKING FAULTS

H.M. MANUKYAN

A theoretical study of X-ray diffraction on a superlattice with overlapping stacking faults is carried out. Expressions for the X-ray reflection coefficient in the directions of satellites, depending on the wave's phase jump on the stacking faults and the depth of their occurrence, are obtained. For comparison with an ideal superlattice, the relative change in the reflection coefficient is obtained.