

01;05

## К теории дифракции рентгеновских лучей на латеральном кристалле с упруго изогнутыми атомными плоскостями

© В.И. Пунегов, С.И. Колосов, К.М. Павлов

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар, Россия  
Сыктывкарский государственный университет, Россия  
Centre for Synchrotron Science, School of Physics, Monash University,  
Melbourne, Victoria 3800, Australia  
E-mail: punegov@syktsu.ru

Поступило в Редакцию 3 апреля 2006 г.

В рамках кинематического приближения разработана теория дифракции рентгеновских лучей на латеральном кристалле с упруго изогнутыми атомными плоскостями. Получены аналитические решения для когерентного и диффузного рассеяния применительно к трехосевой рентгеновской дифрактометрии. Проведено численное моделирование углового распределения интенсивности когерентного и диффузного рассеяния вблизи узла обратной решетки. Показано, что дифракционная картина от кристалла с трапецидальным сечением и упруго изогнутыми атомными плоскостями имеет вид „бабочки“, что ранее наблюдалось экспериментально [4].

PACS: 61.10.-i

С успехами развития методов литографии [1] и селективного эпитаксиального роста [2] появились уникальные возможности создания латеральных структур элементной базы современной опто- и нанoeлектроники. Преимущественно такие низкоразмерные структуры, в частности квантовые нити, создают в виде поверхностных решеток (см. [3] и приведенную в ней литературу), что облегчает их исследование с помощью дифракции рентгеновских лучей из-за значительного увеличения интенсивности рассеяния. С другой стороны, латеральная периодичность является причиной формирования на дифракционной картине сателлитной структуры, которая усложняет получение информации о форме и внутреннем строении отдельного латерального объекта.

В последние годы наблюдается рост экспериментальных работ по дифракции рентгеновских лучей на одиночных латеральных структурах,

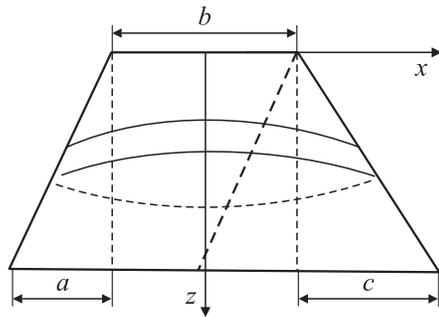
размеры которых варьируются от нескольких микрон до сотен нанометров [2,4]. Как правило, для исследования наноструктур используется синхронное излучение [4]. Теоретический анализ дифракции на таких структурах проводится лишь на основе численного метода конечных элементов [4]. К сожалению, такой подход весьма ограничен и не дает ясного физического представления о самом процессе дифракции, тем более, когда рассматривается когерентное и диффузное рассеяние на латеральных структурах.

Целью данной работы является разработка теории дифракции на латерально ограниченном кристалле с упруго изогнутыми атомными плоскостями. Упругий изгиб плоскостей может быть вызван разными причинами, в частности, распределением химических компонент, формой кристалла, внешними воздействиями и т.д. Рассмотрение проводится с учетом когерентного и диффузного рассеяния применительно к трехосевой рентгеновской дифрактометрии.

В кинематическом приближении для амплитуды когерентно рассеянной волны от кристалла толщиной  $l$  в обратном пространстве получено общее решение [5], которое для трехосевой дифрактометрии с учетом пренебрежения эффектами преломления и поглощения рентгеновских лучей в среде, может быть преобразовано и записано в виде

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{ia_h f}{\sqrt{2\pi}} \int_0^l dz e^{iq_z z} \int_{\Omega_1(z)}^{\Omega_2(z)} dx e^{iq_x x} \Phi(x, z), \quad (1)$$

где коэффициент  $a_h$  определяет отражательную способность кристалла [5]. При наличии дефектов кристаллической структуры функция атомных смещений  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  представляется в виде суммы усредненной и флуктуационной части  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \rangle + \delta \mathbf{u}(\mathbf{r})$ . В выражении (1) фазовый фактор кристалла  $\Phi(x, z) = \exp(i\mathbf{h}\langle \mathbf{u}(x, z) \rangle)$  описывает крупномасштабные (неслучайные) деформации в объеме кристалла. Здесь  $\mathbf{h}$  — вектор обратной решетки, причем  $h = 2\pi/d_{hkl}$ , где  $d_{hkl}$  — межплоскостное расстояние. Хаотические нарушения периодической структуры кристалла характеризуются статическим фактором Дебая–Валлера  $f = \langle \exp(i\mathbf{h}\delta \mathbf{u}) \rangle$ . Вектор  $\mathbf{q}$  задает отклонение вектора рассеяния  $\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$  от узла обратной решетки  $\mathbf{h}$ , где  $\mathbf{k}_{0,h}$  — волновые векторы падающего и дифракционного рентгеновского пучка. Мы рассмотрим дифракцию в латеральном кристалле с трапециевидным сечением (рис. 1). Такая



**Рис. 1.** Поперечное сечение латерального кристалла с упруго изогнутыми атомными плоскостями.

форма сечения при разных значениях параметров  $a, b$  и  $c$  преобразуется в треугольник, прямоугольник и параллелограмм. Пределы интегрирования в (1) представимы в виде:  $\Omega_1(z) = -(az/l + b/2)$  и  $\Omega_2(z) = cz/l + b/2$ .

Поле атомных смещений в случае эквидистантно изогнутых отражающих атомных плоскостей запишем как  $\mathbf{h}(\mathbf{u}(x, z)) = -\pi x^2/l_1^2$ , где  $l_1 = \sqrt{Rd_{hkl}/2}$  — размер первой зоны Френеля. По аналогии с оптикой, на границе этой зоны имеет место фазовый сдвиг дифракционной волны на  $\pi$  из-за изгиба отражающих атомных плоскостей,  $R$  — радиус кривизны атомных плоскостей. Решение для амплитуды когерентно рассеянной волны от латерального кристалла с изогнутыми атомными плоскостями имеет вид

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{ia_h f l_1}{\sqrt{2}} \exp(iq_x^2 l_1^2 / (4\pi)) (g_2(q_x, q_z) - g_1(q_x, q_z)). \quad (2)$$

Здесь

$$g_{1,2}(q_x, q_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \theta(l-z) \theta(z) e^{iq_z z} F(u_{1,2})$$

— Фурье-образы произведений интегралов Френеля  $F(u) = \int_0^u e^{i(\frac{\pi}{2} \tau^2)} d\tau$

и функций Хевисайда  $\theta(z) = \begin{cases} 1, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases}$  [6]. Безразмерные переменные

$u_{1,2} = (\sqrt{2}/l_1)(\Omega_{1,2}(z) - q_x l_1^2 / (2\pi))$  зависят от значения  $q_x$ .

В случае  $l_1 \rightarrow \infty$ , что соответствует предельному переходу к модели кристалла с планарными атомными плоскостями, решение (2) преобразуется к виду

$$E_h^c(q_x, q_z) = \frac{f a_h l}{\sqrt{2\pi} q_x} e^{i\varphi_0} (e^{i\varphi_i} \text{sinc}(q_c) - \text{sinc}(q_a)), \quad (3)$$

где  $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$ ,  $q_c = (q_z l + q_x c)/2$ ,  $q_a = (q_z l - q_x a)/2$ ,  $S_t = ((a+c)/2 + b)l$  — площадь сечения трапециевидального кристалла,  $\varphi_0 = (q_z l - q_x(a+b))/2$ ,  $\varphi_i = q_x S_t/l$ . Решение (3) при  $q_z = 0$  согласуется с результатом для случая двухкристалльной дифрактометрии [7].

В трехосевой дифракционной схеме измерений угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния

$$I_h^d(q_x, q_z) = |a_h|^2 (1 - f^2) \int_0^1 dz \int_{\Omega_1(z)}^{\Omega_2(z)} dx \tau(x; q_x, q_z)$$

определяется корреляционной площадью

$$\tau(x; q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_z e^{iq_z \rho_z} \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_x e^{i(q_x - \frac{2\pi x}{l_1^2})\rho_x} e^{-i\frac{\pi \rho_x^2}{l_1^2}} G(\rho_x, 0, \rho_z).$$

Случайные искажения периодической структуры кристалла задаются корреляционной функцией  $G(\rho_x, 0, \rho_z)$  [5]. Введем модель хаотических нарушений структуры, описываемых корреляционной функцией  $G(\rho_x, 0, \rho_z) = \exp[-\pi((\rho_x/\tau_x)^2 + (\rho_z/\tau_z)^2)]$ , где  $\tau_{x,z}$  имеют смысл корреляционных длин Като [8] в латеральном и вертикальном направлении соответственно. Предполагая, что  $\tau_x \ll l_1$ , для корреляционной площади получаем выражение в виде произведения корреляционных длин  $\tau(x; q_x, q_z) = (1/2\pi)\tau(x; q_x)\tau(q_z)$ . Здесь вертикальная длина корреляции  $\tau(q_z) = \tau_z \exp(-q_z^2 \tau_z^2/4\pi)$  не зависит от координат. Латеральная корреляционная длина  $\tau(x; q_x) = \tau_x \exp(-(q_x - 2\pi x/l_1^2)^2 \tau_x^2/4\pi)$  имеет зависимость от  $x$  из-за изгиба атомных плоскостей. Интенсивность диффузного рассеяния для выбранной модели корреляционной функции

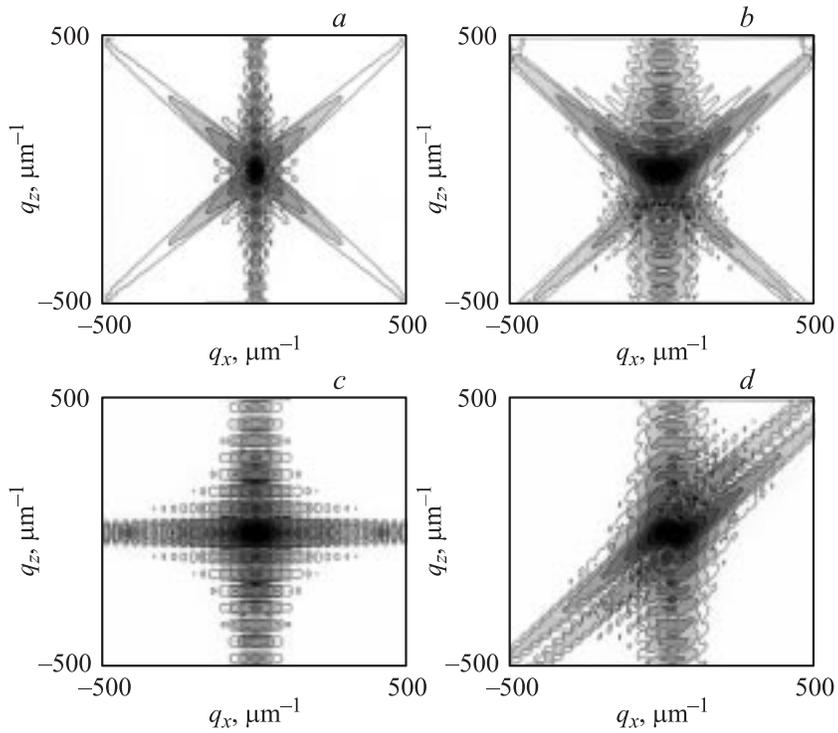
запишется как

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

где  $\beta_{1,2} = \frac{\tau_x}{2\sqrt{\pi}} (2\pi\Omega_{1,2}(z)/l_1^2 - q_x)$ ,  $\operatorname{erf}(b) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^b d\beta e^{-\beta^2}$  — интеграл вероятностей [6].

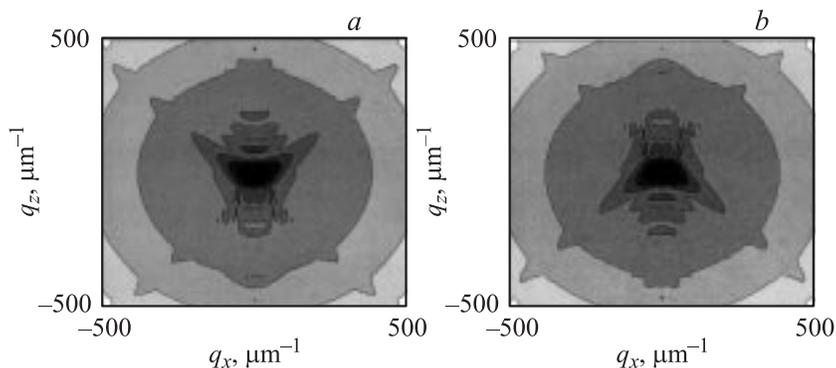
На основе решений (2)–(4) проведено численное моделирование углового распределения интенсивностей когерентного и диффузного рассеяния от латерального кристалла GaAs вблизи узла обратной решетки (004). В расчетах использованы данные для перпендикулярно поляризованного  $\text{CuK}_\alpha$  излучения.

На рис. 2 показаны карты распределения интенсивности когерентного рассеяния в обратном пространстве от латеральных кристаллов с поперечными сечениями в виде трапеции ( $a, b$ ), прямоугольника ( $c$ ) и параллелограмма ( $d$ ). Контуры равной интенсивности представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями составляет  $10^{0.5}$ . Влияние упругого изгиба на дифракционную картину от кристалла с трапециевидальным сечением с размерами  $a = b = c = l = 100$  nm демонстрируют рисунки 2,  $a$  и  $b$ . Распределение интенсивности когерентного рассеяния в обратном пространстве от латерального кристалла с планарными атомными плоскостями (рис. 2,  $a$ ) имеет симметричную форму в виде трех полос, пересекающихся в начале координат. Наличие наклонных полос обусловлено положением боковых сторон трапеции. Упругий изгиб отражающих атомных плоскостей, соответствующий  $l_1 = 100$  nm, приводит к уширению центральной полосы, нарушению симметрии, а сама дифракционная картина приобретает вид „бабочки“. Такое распределение интенсивности рассеяния наблюдалось экспериментально при исследовании наноразмерных островков SiGe [4]. Карты распределения интенсивности рассеяния от латеральных кристаллов с упруго изогнутыми плоскостями ( $l_1 = 100$  nm) с сечением в виде прямоугольника ( $a = c = 0$ ,  $b = 200$  nm,  $l = 100$  nm) и параллелограмма ( $a = -c = 100$  nm,  $b = 200$  nm,  $l = 100$  nm) показаны на рис. 2,  $c$  и  $d$  соответственно. Поскольку прямоугольное сечение не имеет наклонных



**Рис. 2.** Карты распределения интенсивности когерентного рассеяния в обратном пространстве от латеральных кристаллов с поперечными сечениями в виде трапеции (*a*), прямоугольника (*c*) и параллелограмма (*d*).

сторон, распределение интенсивности рассеяния формируется в виде двух перпендикулярных полос, при этом вертикальная полоса уширена из-за атомных плоскостей. Интересно отметить, что в случае кристалла с планарными плоскостями и с сечением в виде параллелограмма дифракционная картина состоит из двух полос, так как наклоны боковых сторон параллелограмма совпадают. Упругий изгиб отражающих плоскостей приводит к расщеплению наклонной полосы, что иллюстрируется рис. 2, *d*.



**Рис. 3.** Карты распределения интенсивности полного (когерентного и диффузного) рассеяния в обратном пространстве от кристалла с трапецидальным сечением с выпуклым (*a*) и вогнутым (*b*) изгибом отражающих атомных плоскостей.

Влияние диффузного рассеяния на дифракционную картину от латерального кристалла с изогнутыми атомными плоскостями показано на рис. 3. Расчеты выполнены по формуле (4) с использованием следующих структурных характеристик: корреляционные длины Като  $\tau_x = \tau_z = 10 \text{ nm}$ , статистический фактор Дебая–Валлера  $f = 0.8$ . Остальные параметры совпадают с данными вычисления когерентного рассеяния кристалла с трапецидальным сечением (рис. 2, *b*). Смена направления упругого изгиба атомных плоскостей кристалла с трапецидальным сечением (пунктирная линия на рис. 1) приводит к инверсии дифракционной картины, что проиллюстрировано на рис. 3.

Таким образом, разработанная теория позволяет описать когерентное и диффузное рассеяние от латерального кристалла с упруго изогнутыми атомными плоскостями. Обнаруженные в результате численного моделирования особенности дифракции от латеральных структур будут полезны при выполнении экспериментальных измерений.

Работа выполнена при финансовой поддержке целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы“ (проект РНП.2.1.1.3425) и Australian Research Council’s Discovery funding scheme (projects № DP0556840, DP0556492).

## Список литературы

- [1] *Xia Y., Rogers J.A., Paul K.E., Whitesides G.M.* // Chem. Rev. 1999. V. 99. P. 1823–1848.
- [2] *Nakashima K., Kawaguchi Y.* // J. Appl. Phys. 2001. V. 90. P. 3255–3262.
- [3] *Baumbach T., Lubbert D., Gailhanou M.* // J. Appl. Phys. 1999. V. 87. P. 3744–3758.
- [4] *Wiebach Th., Schmidbauer M., Hanke M., Raidt H., Köhler R., Wawra H.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 5571–5578.
- [5] *Nesterets Ya.I., Punegov V.I.* // Acta Cryst. A. 2000. V. A56. N 6. P. 540–548.
- [6] *Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.*
- [7] *De Caro L., Sciacovelli P., Tapfer L.* // Appl. Phys. Lett. 1994. V. 64. P. 34–36.
- [8] *Kato N.* // Acta Cryst. A. 1980. V. A36. P. 763–769.