

ОСОБЛИВОСТІ ТРИХВИЛЬОВОЇ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ДИФРАКЦІЇ У КРИСТАЛАХ GaAs ТА InP З ПРИХОВАНИМ ДЕФОРМОВАНИМ ШАРОМ

Шляхом числового розв'язання системи диференціальних рівнянь Такагі досліджено вплив тонкого деформованого шару на трихвильові дифракційні ефекти розсіяння рентгенівського випромінювання в сполуках GaAs та InP. Встановлено, що ступінь пригнічення або посилення трихвильового аномального проходження істотно залежить від впливу параметрів деформованого шару на багатохвильові ефекти, характерні для кожної багатохвильової конфігурації, та від структурних особливостей розглянутих кристалів.

By the numerical solution of Takagi differential equations the influence of the thin subsurface strain layer on three-beam diffraction effects of X-ray scattering in compounds GaAs and InP is investigated. It is established that the degree of suppression or enhancement of three-beam anomalous transmission significantly depends on influence of parameters of strain layer on multiple effects, characteristic for each multiple configuration, as well as on structural features of the considered crystals.

Вступ

Внаслідок дифракції рентгенівського випромінювання одночасно від кількох, по-різному орієнтованих, кристалографічних площин кількість рентгенівських хвильових полів всередині кристала збільшується, що супроводжується якісними і кількісними змінами в процесах дифракції. Багатохвильовому розсіянню властиві такі дифракційні ефекти: посилення аномального проходження (подвійний ефект Бормана), непряме збудження відбивань, заборонених структурою або поляризацією (ефект Реннінгера), перерозподіл інтенсивності між дифрагованими хвилями на дозволених відбиваннях (просвітлення і сумісна дія ефектів просвітлення і посилення), багатохвильові маятникові осциляції та ін. [1-4]. Завдяки таким ефектам багатохвильова дифракція дуже чутлива до змін знаку і величини уявної і дійсної частин структурного фактора. Це відкриває нові можливості дослідження типу і характеру розподілу деформаційних полів і фізичних процесів, що відбуваються при дифракції рентгенівського випромінювання не тільки в однокомпонентних кристалах з центром симетрії, а й у бінарних кристалах без центра симетрії.

У більшості випадках аналіз багатохвильових процесів розсіяння у реальних кристалах здійснюється з використанням числових методів [5]. Зокрема, зміни розподілу інтенсивності впливу різних глибинних розподілів деформацій на бага-

тохвильове рентгенівське розсіяння у кристалах з ґраткою алмаза [7, 8], досліджувалися шляхом числового розв'язання системи нелінійних диференціальних рівнянь Такагі [6].

У даній роботі досліджено вплив одновимірного, тонкого деформованого шару, локалізованого на різних глибинах від поверхні кристала, на ефекти непрямого збудження, аномального проходження і модальної взаємодії для ряду трихвильових Лауе-дифракцій $CuK_{\alpha 1}$ -випромінювання в сполуках GaAs і InP. Зміщення атомів у такому прихованому деформованому шарі задавались половиною періоду синусоїдальної функції глибини кристала так, що за межами шару деформація дорівнює нулю (рис.1). Така модель одновимірної деформації близька до поля деформацій, яке виникає при іонній імплантації, лазерному опромінюванні, на границях розділу в багатшарових структурах і т.д.

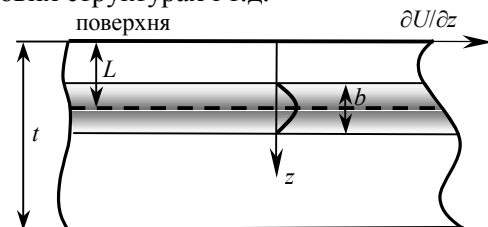


Рис.1. Залежність градієнта атомних зміщень $\partial U / \partial z$ від глибини кристала: L – глибина локалізації деформованого шару, яка відповідає максимальним зміщенням атомів, t – товщина кристала, b – протяжність деформованого шару.

Деталі моделювання

Слід зазначити, що для сполук A^3B^5 у випадку багатохвильової дифракції відносно збудження хвильових мод, для яких характерні малі значення інтерференційних коефіцієнтів поглинання, не дорівнюють нулю і їм, як і коефіцієнтам поглинання, властива асиметрія залежностей від кутів відхилення падаючого променя від умови Бреґга паралельно або перпендикулярно до вектора зв'язуючого відбивання [9].

Розглянуті випадки $\mu=20$ (μ – коефіцієнт фотоелектричного поглинання), для яких виявляється ефект аномального проходження і в багатохвильовій області, і у двоххвильових лініях, а також випадки $\mu=40$, коли інтенсивними залишаються тільки трихвильові області. Особливе місце займає обчислення Фур'є-коефіцієнтів поляризованості для кожного відбивання, що входить у багатохвильову конфігурацію.

Функція локальних розорієнтацій – один з найбільш важливих параметрів, що входять у систему рівнянь Такаґі [6] – в моделі одновиірної (розподіленої вздовж осі z) деформації, набуває вигляду [8]:

$$\alpha_i = \alpha_i^0 - p_i \cos(\gamma_i - \psi),$$

де $p_i = 2\pi H_i \frac{dU}{dz}$, індекс i відповідає двоххвильовим відбиванням, що формують багатохвильову дифракцію ($i=0$ – хвиля у напрямку падіння), \vec{U} – вектор атомних зміщень, γ_i – кут між векторами дифракції \vec{H}_1 і \vec{H}_i , ψ – кут між \vec{H}_1 і \vec{U} , α_i^0 – відхилення падаючого променя від кута Бреґга, що складається з відхилень у брегівському $\Delta\theta$ і азимутальному $\Delta\phi$ напрямках. Для локалізованого під поверхнею деформованого шару

$$p_i = P \cdot \sin(\pi z / b), \quad P = 2\pi\gamma_0\lambda \left| \vec{H}_i \right| \frac{B}{b},$$

де B – параметр, що задає амплітуду (потужність) деформації, b – протяжність деформованого шару, за межами деформованого шару $p_i=0$.

Отримано топографічні зображення розподілу інтенсивності $I_m(\Delta\phi, \Delta\theta)$ у трихвильових областях, товщинні залежності розподілу інтенсивності, а також залежності інтегральних коефіцієнтів відбивання в трихвильових областях від величини параметра деформації P :

$$R_m(P) = \frac{I_m(P)}{I_{m,ид}},$$

де $I_m(P)$ і $I_{m,ид}$ – інтенсивності хвиль у деформованому та ідеальному кристалах відповідно. Інтегрування проводилося по кутах $\Delta\phi$ і $\Delta\theta$ в межах трихвильової області відносно точної умови трихвильової дифракції.

Результати дослідження

Для всіх багатохвильових конфігурацій залежність $R_m(P)$ носить осциляційний характер (рис. 2,4,6), причому чим більше розмиття деформованого шару, тим більша частота осциляцій. При значеннях b , що задовольняють умову $\mu b > 2$, осциляції практично відсутні і залежність інтегральних інтенсивностей від максимального значення деформації стає монотонною. Осцилюючий характер $R_m(P)$ означає, що зміщення атомів у деформованому шарі приводять до зміни різниці фаз інтерферуючих у кристалі хвиль. Фазовий зсув залежить тільки від параметрів деформації і не залежить від глибини локалізації шару, а амплітуда осциляцій, тобто посилення або послаблення аномального проходження, визначається структурним фактором сполуки, товщиною розмиття і глибиною локалізації шару.

З отриманих результатів випливає, що у разі локалізації шару на глибині $L=0,5 \cdot L_{ext}$ трихвильова область найбільш чутлива до поля деформацій у вигляді схованого шару. На такій глибині розсіяння рентгенівських хвиль стає динамічним і, можливо, відбувається концентрація інтенсивності в трихвильовій області за рахунок двоххвильових областей. Таке резонансне посилення відбувається у результаті взаємодії слабо і сильно поглинених мод.

Дифракція $(111, \bar{1}11)$ має зв'язуюче відбивання (200) , заборонене структурою алмаза, але структурний фактор якого в ґратці сфалерита зростає із збільшенням різниці атомних номерів ΔZ . Для GaAs ($\Delta Z=2$) характерний ефект непрямого збудження, завдяки якому в трихвильовій області дифракції для ідеального кристала відбувається ефект посилення аномального проходження рентгенівського випромінювання. Така ж дифракція для InP ($\Delta Z=34$) подібна до дифракції $(111, \bar{1}11)$, коли зв'язуюче відбивання (220) сильне. Цей випадок характеризується ефектом посилення дифракції за Борманом у відбитих хвилях і його відсутності у хвилі, що поширюється в напрямку падіння.

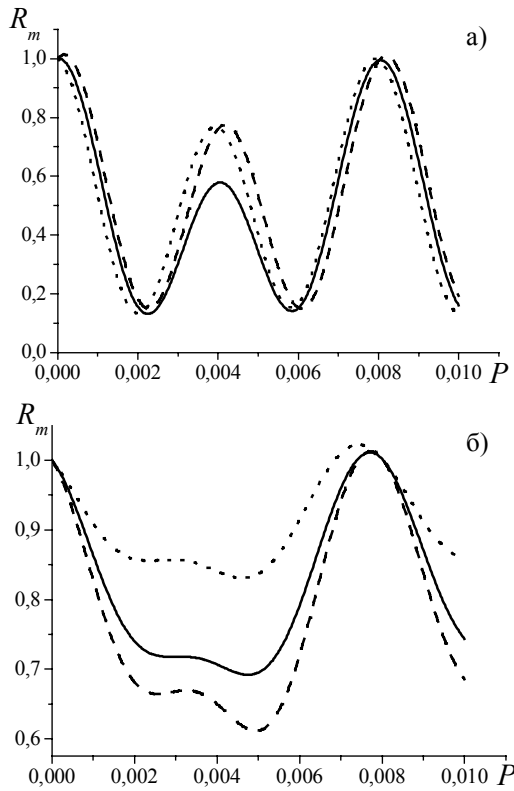


Рис.2. Залежність $R_m(P)$ для $(111, \bar{1}\bar{1}11)$ Лауе дифракції: $\vec{U} \parallel \vec{H}_{200}$, $\mu t=20$, $b=0,1$ мкм, $L=0,5 \cdot L_{ext}$ для GaAs (а), InP (б). Суцільна лінія – хвиля, що поширюється в напрямку падаючого пучка, пунктирна – відбита (111) хвиля, штрихова – відбита $(\bar{1}\bar{1}11)$ хвиля.

Для $(111, \bar{1}\bar{1}11)$ дифракції $\text{CuK}\alpha$ - випромінювання в InP інтерференційні мінімальні дво- і трихвильові коефіцієнти поглинання (для хвильових мод, які слабо поглинаються) відносно фотоелектричного коефіцієнта поглинання найменші у порівнянні з іншими сполуками A^3B^5 : $\mu^{(2)}/\mu_0 = 0,101$, $\mu^{(3)}/\mu_0 = 0,025$, тоді як для GaAs 0,302 і 0,053 відповідно. Водночас, для InP $\mu^{(3)}/\mu^{(2)} = 0,248$, а для GaAs – 0,175, що свідчить про слабше виявлення аномального багатохвильового проходження (подвійного ефекту Бормана) на фоні двоххвильових ліній у кристалах з великим ΔZ . Крім того, трихвильова область відбитих хвиль в InP має чотири додаткові витягнуті пелюстки (дві у напрямку лінії другого відбивання і дві – у напрямку зв'язуючого).

Важливу роль має орієнтація вектора \vec{U} по відношенню до векторів дифракції. У випадку $\vec{U} \parallel \vec{H}_{200}$ спостерігається посилення інтенсивності багатохвильового аномального проходження (до 10% в InP), а також асиметрія в розподілі інтенсивності: зі зростанням величини деформації трихвильова область періодично витягується то вздовж однієї двоххвильової лінії, то вздовж другої. Це свідчить, що різке збільшення інтенсивності в трихвильовій області відбувається за рахунок зменшення інтенсивності двоххвильових ліній внаслідок прямої взаємодії дифрагуючих хвиль і навпаки.

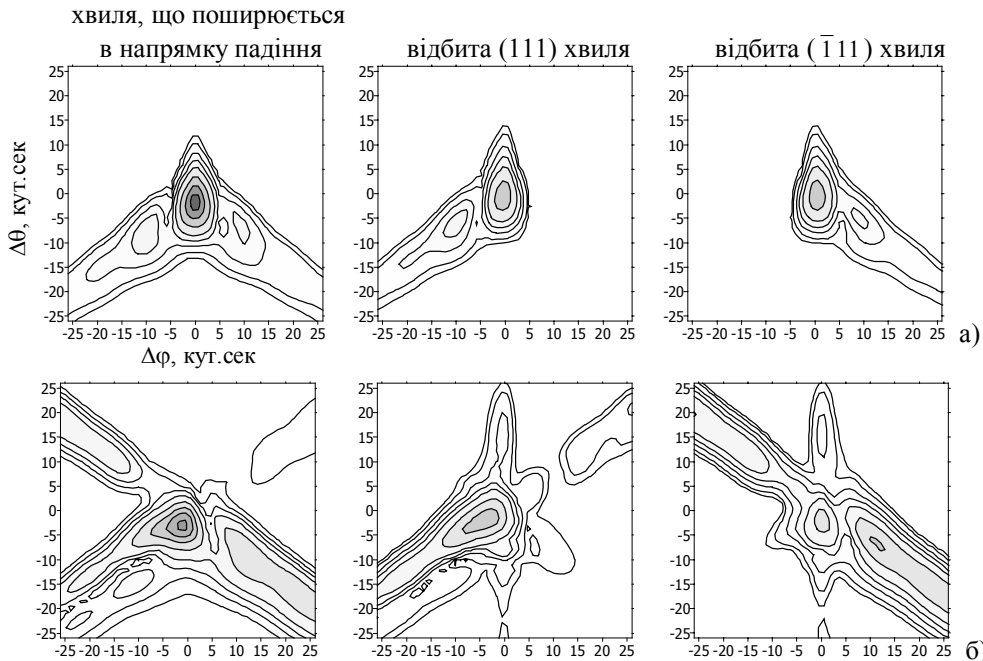


Рис.3. Розподіл інтенсивності $I_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ у трихвильовій області для $(111, \bar{1}\bar{1}11)$ дифракції. $L=0,5L_{ext}$, $b=0,1$ мкм, $\vec{U} \parallel \vec{H}_{200}$, $\mu t=20$. GaAs, $P=4 \cdot 10^{-3}$ (а); InP, $P=3,2 \cdot 10^{-3}$ (б).

У випадку $\vec{U} \perp \vec{H}_{200}$ симетрія розподілу інтенсивності трихвильових областей в дифрагуючих хвилях відносно лінії $\Delta\varphi=0$ зберігається, в той самий час істотно трансформуються самі багатохвильові області.

Дифракція $(111, \bar{1}\bar{1}1)$ найбільш чутлива до одновимірних деформацій у кристалах. Характер залежності $R_m(P)$ для дифракції $(111, \bar{1}\bar{1}1)$ в обох кристалах практично однаковий. Відмінності стосуються тільки амплітуди осциляцій, що пов'язано з різницею співвідношень структурних факторів: $F_{111}/F_{220}=0,85$ для GaAs і $0,96$ для InP. При $\vec{U} \parallel \vec{H}_{220}$ і локалізації деформованого шару на глибині $L=0,5L_{ext}$ спостерігається одночасне посилення багатохвильової області у дифрагованих хвилях (111) і $(\bar{1}\bar{1}1)$. Ця область набуває форми плями, витягнутої паралельно до зв'язуючого відбивання. З рис.5 видно, що це відбувається через зменшення інтенсивності у трихвильовій області заломленої хвилі і по чергового зменшення інтенсивності двоххвильових ліній. Важливо зазначити, що у GaAs з деформованим шаром трихвильова область хвилі, що поширюється в напрямку падіння, чітко виділяється на фоні двоххвильових ліній, на відміну від InP. Проте посилення трихвильової області дифрагованих хвиль сильніше в InP.

Для дифракції $(220, 20\bar{2})$ вектори дифракції утворюють рівносторонній трикутник. Для ідеального кристала посилення аномального проходження не спостерігається і має місце так званий ефект модального посилення хвилі, що поширюється в напрямку падіння – її трихвильова область є суперпозицією двоххвильових дифракцій. Усі відмінності дифракції $(220, 20\bar{2})$ в GaAs і InP

зумовлені різницею значень інтерференційних коефіцієнтів поглинання, адже перетини дисперсійних поверхонь і відносних збудження уздовж напрямку (220) практично однакові.

Розподіли інтенсивності $I_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ у трихвильовій області дифракції ідеальних кристалів подібні, оскільки відбивання типу (220) у розглянутих сполуках мають близькі значення структурних факторів $(174,22$ і $182,36)$ і, відповідно, дійсних частин коефіцієнтів Фур'є-поляризованості. Вплив деформованого шару на розподіли інтенсивності в дифрагованих хвилях визначається глибиною локалізації шару L . Значні відмінності в даних розподілах з'являються, коли максимальні зміщення атомів відповідають глибині $L=0,5L_{ext}$. Як і в попередніх випадках, кількість осциляцій $R_m(P)$ залежить тільки від товщини деформованого шару.

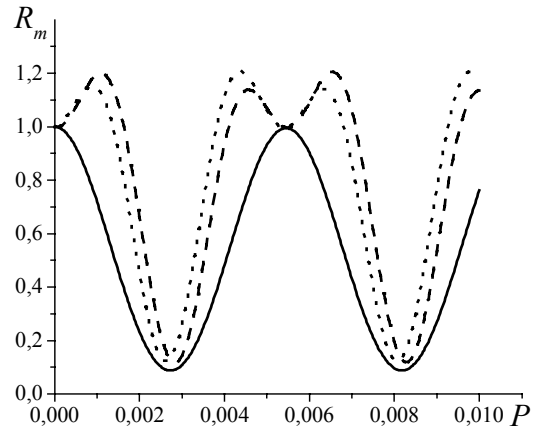


Рис.4. Залежність $R_m(P)$ для $(111, \bar{1}\bar{1}1)$ Лауе дифракції в InP: $\vec{U} \parallel \vec{H}_{220}$, $\mu t=20$, $b=0,1$ мкм, $L=0,5L_{ext}$. Суцільна лінія – хвиля, що поширюється в напрямку падаючого пучка, пунктирна – відбита (111) хвиля, штрихова – відбита $(\bar{1}\bar{1}1)$ хвиля.

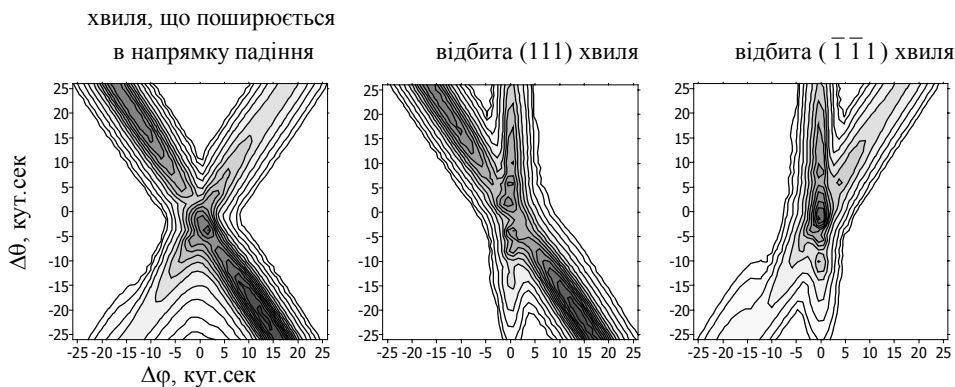


Рис.5. Розподіл інтенсивності $I_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ у трихвильовій області для $(111, \bar{1}\bar{1}1)$ дифракції в кристалі InP з тонким деформованим шаром. $L=0,5L_{ext}$, $b=0,1$ мкм, $\vec{U} \parallel \vec{H}_{220}$, $\mu t=20$, $P=1,1 \cdot 10^{-3}$.

Для InP при $\vec{U} \parallel \vec{H}_{202}$ максимальне збільшення інтенсивності дифрагованих хвиль (220) і (20 $\bar{2}$) складає ~10% для всіх розглянутих товщин деформованого шару, а для GaAs досягає ~40% при $b=0,1$ мкм і поступово зменшується із зростанням b . Причому, періодично – то хвиля (220) має велику інтегральну інтенсивність, то хвиля (20 $\bar{2}$). Трихвильова область для обох відбитих хвиль посилена і має форму плями, витягнутої паралельно до зв'язуючого відбивання (202).

Для даної конфігурації і деформованого кристала багатохвильова область не є простою суперпозицією двоххвильових ліній, а є результатом інтерференційної взаємодії слабпоглинутих хвильових полів. Тут проявляються два конкуруючі ефекти: маятникові осциляції слабпоглинутих хвильових полів і ефект Бормана. Порушення фазових співвідношень між хвилями у випадку локалізованого під поверхнею шару зумовлюють як послаблення ефекту аномального проходження, так і його посилення, і, відповідно, порушення умови модальної взаємодії.

Дифракція ($\bar{1}11,133$) цікава тим, що являє собою різносторонній трикутник, складений з векторів дифракції, причому об'єднує (222) відбивання заборонене структурою. Загальний вигляд перерізів дисперсійних поверхонь, інтегральних коефіцієнтів поглинання і відносних

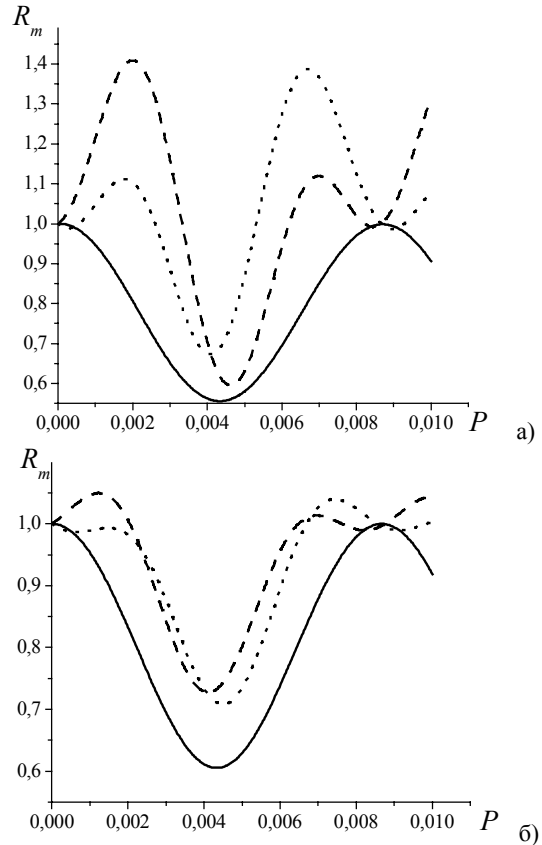


Рис.6. Залежність $R_m(P)$ для (220,02 $\bar{2}$) Лауе дифракції: $\vec{U} \parallel \vec{H}_{202}$, $\mu t=20$, $b=0,1$ мкм, GaAs (а), InP (б); $L=0,5 \cdot L_{ext}$. Суцільна лінія – хвиля, що поширюється в напрямку падаючого пучка, пунктирна – відбита (111) хвиля, штрихова – відбита (02 $\bar{2}$) хвиля.

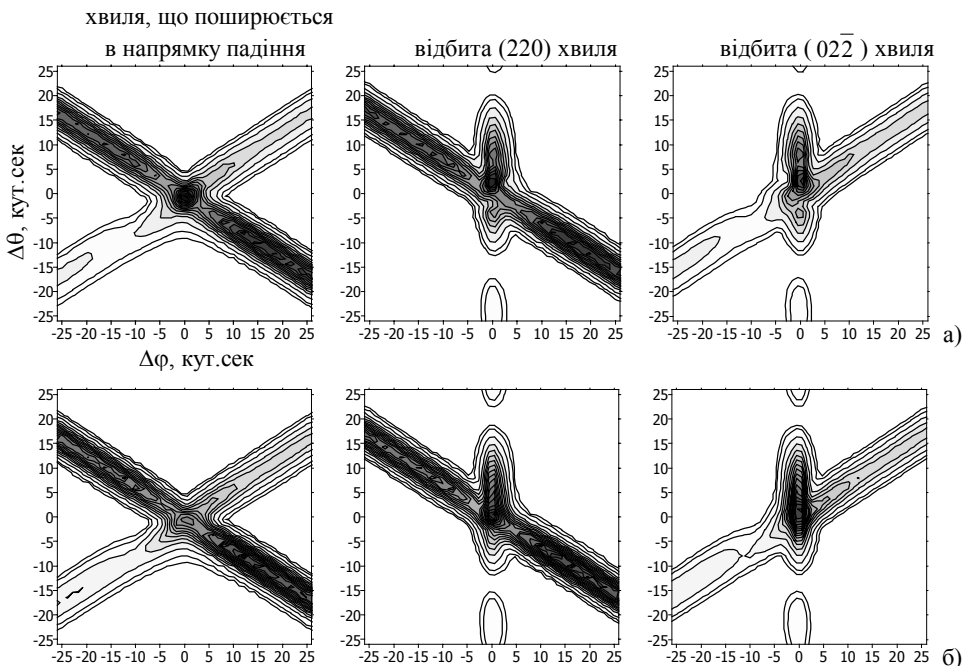


Рис.7. Розподіл інтенсивності $I_m(\Delta\phi, \Delta\theta)$ у трихвильовій області для (220,02 $\bar{2}$) дифракції. $L=0,5 L_{ext}$, $b=0,1$ мкм, $\vec{U} \parallel \vec{H}_{202}$, $\mu t=20$. GaAs, $P=2 \cdot 10^{-3}$ (а); InP, $P=2 \cdot 10^{-3}$ (б).

збуджень в залежності від кутового відхилення падаючого пучка від умови Брегга для GaAs та InP відрізняються за значеннями і за кількістю хвильових мод з ненульовим ступенем збудження – для InP їх більше, ніж для GaAs. Для InP спостерігається більш виражена пелюсткова структура трихвильової області дифрагованих хвиль.

Вплив параметрів схованого деформованого шару на інтегральні криві коефіцієнтів відбивання $R_m(P)$ та топографічні розподіли інтенсивності відбувається аналогічно до попередніх випадків. Як і очікувалось, значного посилення багатохвильового аномального проходження і його повного пригнічення, а також значних трансформацій областей багатохвильового розсіювання не спостерігається.

Як і для всіх попередніх випадків, найбільші зміни на залежностях $R_m(P)$ і на розподілах $I_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ спостерігаються у випадку локалізації приповерхневого шару на половині екстинкційної товщини. При $\vec{U} \parallel \vec{H}_{\bar{2}\bar{2}\bar{2}}$ із збільшенням b на $R_m(P)$ спостерігається періодичне подавлення аномального проходження як для GaAs, так і для InP. Причому на розподілах $I_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ це проявляється пригніченням як трихвильових, так і двохвильових областей (111) хвилі. Посилення дифрагованих хвиль незначне. Така ж картина має місце і при $\vec{U} \perp \vec{H}_{\bar{2}\bar{2}\bar{2}}$. Для GaAs асинхронність пригнічення на $R_m(P)$ різних хвиль проявляється більшою мірою, причому інтенсивність (133) хвилі зростає на 10-15 %. Залежності $R_m(P)$ та розподіли $I_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ у випадку $L=L_{ext}$ практично не відрізняються від випадку $L=0,5L_{ext}$.

Отже, трихвильова конфігурація ($\bar{1}11,133$) найменш чутлива до глибини локалізації деформованого шару та ступеня його розмитості.

Висновки

Присутність в кристалах з гратою сфалерита одновимірних деформацій, орієнтованих певним чином в площині багатохвильових векторів дифракції, приводить до істотної перебудови багатохвильових областей розсіювання, а також до появи осциляційної залежності інтегральних коефіцієнтів проходження від величини деформації шару, локалізованого під поверхнею, ступеня його розмитості і глибини розміщення.

Посилення інтенсивності трихвильового аномального проходження залежить від глибини локалізації деформованого шару. Найбільші зміни в розподілах інтенсивності багатохвильового розсіювання спостерігаються у разі локалізації шару на половині екстинкційної товщини, а також при орієнтації вектора зміщень атомних площин паралельно до зв'язуючого трихвильового відбивання.

Характер багатохвильового розсіювання визначається співвідношеннями уявних і дійсних частин структурних факторів відбитих хвиль.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Wagner E.* Über Spektraluntersuchungen an Röntgenstrahlen // *Physik. Z.* - 1920. - **21**. - S.632-638.
2. *Renninger M.* "Umweganregung" bisher unbeachtete Wechselwirkungserscheinung bei Raungitterinterferenzen // *Zeitschrift für Physik* - 1937. - **106**. - S.141-176.
3. *Bormann C. Hartwig W.* Die Absorbtion der Röntgenstrahlen im Dreistrahlfall der Interferenz // *Z. Kristallogr.* - 1965. - **121**. - S.401-409.
4. *Kato N, Lang.R.A.* A study of Pendellosung fringes in X-ray diffraction // *Acta Crystallogr.* - 1959. - **12**. - P.787-794.
5. *Чжан Ш.* Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. - М.: Мир, 1987.
6. *Takagi S.* Dynamical theory of diffraction applicable to crystal with any kind of small distorsion // *Acta Crystallogr.* - 1962. - **15**, No.12. - P.1311-1312.
7. *Гультай Л.Л., Фодчук И.М., Борча М.Д., Раранский Н.Д., Михалев И.В.* Влияние периодических деформаций кристалла на трехволновое аномальное прохождение рентгеновских лучей // *Металлофизика и новейшие технологии.* - 1999. - **21**, №10. - С.69-74.
8. *Fodchuk I.M., Raransky M.D., Borcha M.D., Gultay L.L., Tkach O.O.* The Features of Anomalous Multiple X-Ray Transmission in Ge Crystals with Distorsions // *J.Phys.D: Applied Physics.* - 2001. - **34**. - P.93-97.
9. *Иверонова В.И., Кацнельсон А.А., Рунова Т.К.* Влияние обработки граничных поверхностей на многоволновую дифракцию в кристаллах со структурой алмаза // *Кристаллография.* - 1981. - **26**, вып. 6. - С.1320-1322.