МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Х.М. БЕРБЕКОВА»

АНАЛИЗ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ТАКАГИ ДЛЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ПЕРЕМЕННОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ

Методические указания к самостоятельной работе

2 издание, стереотипное

Для специальности 030302 – Физика
Профиль – Физика конденсированного состояния вещества
030402 – Физика (магистратура)
Физика конденсированного состояния

НАЛЬЧИК
2015

УДК 539.548.732
ББК 22.37:22.346
А64

Рецензент:

доктор технических наук, профессор
Кабардино-Балкарской государственной
сельскохозяйственной академии

М.П. Дохов

Составители: **Дышеков А.А., Хапачев Ю.П.,**
Савинцев А.П., Багов А.Н.

А64 Дышеков, А. А. Анализ решений уравнений Такаги для гетероструктур с переменной электронной плотностью [Текст] : методические указания к самостоятельной работе / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, А. П. Савинцев, А. Н. Багов. – Нальчик : Каб.-Балк. ун-т, 2015. – 13 с. – 100 экз.

Издание содержит методические указания к самостоятельному изучению темы «Анализ решений уравнений Такаги для гетероструктур с переменной электронной плотностью», а также пример решения практического задания.

Предназначено для студентов очной формы обучения физического факультета.

Рекомендовано РИС университета

УДК 539.548.732
ББК 22.37:22.346

ВВЕДЕНИЕ

Важнейшие достижения рентгеновской кристаллооптики связаны с теоретическим изучением динамического рассеяния излучения деформированным кристаллом. Однако этот раздел недостаточно полно освещен в существующей учебно-методической литературе, посвященной описанию взаимодействия излучения с кристаллом в рамках курса физики конденсированного состояния. В связи с этим в предлагаемых методических указаниях рассматривается один из вопросов рентгеновской кристаллооптики, связанный с анализом дифракционной картины от двухслойных гетероэпитаксиальных композиций с учетом как различия в периодах решеток, так и рассеивающей способности пленки и подложки, приводящих к деформации системы и перераспределению интенсивности отражения между дифракционными максимумами пленки и подложки. Рассматривается теоретическая постановка задачи, вводятся необходимые для описания динамического рассеяния параметры и обсуждается их физический смысл. В качестве практического приложения приводится методика расчета обобщенного параметра когерентности для ряда гетероструктур, имеющих важное теоретическое и практическое значение. В качестве примера рассматривается расчет для гетероструктуры $Ge_{0.01}Si_{0.99}/Si$ и проводится количественная оценка влияния различия электронной плотности на обобщенный параметр когерентности.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Динамическая дифракция в модулированных структурах относится к одному из перспективных направлений рентгеновской кристаллооптики. Модуляция, как правило, осуществляется с помощью изменения деформации по глубине структуры. Очевидно, для практических целей особое значение имеют гетероэпитаксиальные композиции, деформация в которых вызывается когерентным сопряжением эпитаксиальных слоев различного состава, в частности, на основе соединений $A^{III}B^{V}$.

Если в кристалле осуществляется дополнительная модуляция электронной плотности, то возникает сложное взаимодействие «геометрических» факторов, связанных с интерференцией волн, и «физических» факторов, определяющих интенсивность рассеяния рентгеновской волны с атомами.

В случае, когда рассматривается только деформация в кристалле, основной характеристикой, непосредственно связанной с волновым полем, оказывается параметр когерентности ξ. Эта величина, впервые введенная для СР, пропорциональна амплитуде деформации ε_0:

$$\xi = \frac{2\pi L_{ext}\varepsilon_0}{\lambda}\sin\theta. \qquad (1)$$

Здесь использована нормировка на длину экстинкции L_{ext}. Остальные обозначения стандартные. Для простоты мы рассматриваем только симметричную дифракцию.

Физический смысл параметра когерентности ξ для случая СР – следующий. Величина ξ определяет синфазное когерентное рассеяние на периоде СР, а именно: рассеяние происходит синфазно, если $|\xi| < 1$, и несинфазно, если $|\xi| \sim 1$. Эти результаты можно распространить и на случай непериодического поля деформаций при условии монотонного спадения деформации по глубине кристалла.

Тот факт, что в случае чистой деформации имеется единственный параметр, ответственный за волновое поле, – параметр когерентности ξ, позволяет, в частности, эффективно строить динамическую теорию для СР, основанную на методе зонных диаграмм.

Общий случай, учитывающий как деформацию, так и изменение состава кристалла по глубине, требует проведения специальной процедуры симметризации уравнений Такаги с целью определения минимального числа необходимых параметров волнового поля. Эта процедура приводит к появлению новой характеристики – обобщенного параметра когерентности:

$$\tilde{\xi} = \left(\left(\xi - f\chi_0\alpha_0 \left(1 - \frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right) \right)^2 + 4f^2\eta^2\chi_H\chi_{\overline{H}}\alpha_H\alpha_{\overline{H}}\frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right)^{1/2}. \qquad (2)$$

Здесь $\alpha_{0,H} = \dfrac{\Delta F(0,H)}{F(0,H)}$ – амплитуды относительного изменения структурного фактора решетки в направлении вектора обратной решетки $\vec{H}$. Выражение для $\tilde{\xi}$ получено исходя из предположения, что изменения состава и деформации происходят синфазно и по одному закону. Это допущение строго оправдано для гетероструктур со слоями твердого раствора замещения при условии выполнения линейного закона Вегарда.

Таким образом, четыре параметра – ξ, α_0, α_H и $\alpha_{\overline{H}}$ – оказываются связанными единым соотношением согласно (2). При этом уравнения Такаги переходят в систему вида:

$$\frac{d\mathbf{V}}{d\tau} = \left(\tilde{\mathbf{A}} + X(\tau)\tilde{\mathbf{B}} \right)\mathbf{V}, \qquad (3)$$

где $\mathbf{V}$ – искомый вектор-столбец, выражающийся через амплитуды E_0 и E_{H}, $\tilde{\mathbf{A}}$ – постоянная матрица, соответствующая дифракционному рассеянию в идеальном кристалле;

$$\tilde{\mathbf{B}} = i2\tilde{\xi}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

– «возмущающая» матрица, связанная с изменением деформации и электронной плотности по единому закону (модели) $X(\tau)$, τ – нормированная на L_{ext} координата в глубь структуры.

Согласно (3), структура уравнений, описывающих динамическую дифракцию, соответствует случаю чистой деформации. Этот результат означает, что описание динамической дифракции в общем случае изменения электронной плотности и деформации может быть сведено к частному случаю чистой деформации путем формальной замены $\xi \to \tilde{\xi}$. В связи с этим величина $\tilde{\xi}$ названа обобщенным параметром когерентности. Вместе с тем необходимо отметить, что указанное соответствие имеет в значительной степени формальный характер, поскольку величины ξ и $\alpha_0, \alpha_H, \alpha_{\overline{H}}$ имеют разный физический смысл и по-разному влияют на распространение рентгеновской волны.

Из (2) следует, что в гетероструктуре с переменной электронной плотностью и деформацией существует принципиальная возможность обращения величины $\tilde{\xi}$ в ноль. То есть, в данном случае структура в дифракционном отношении выглядит как идеальный кристалл с модифицированной электронной плотностью, влияние которой сводится к дополнительному преломлению для проходящей и дифрагированной волн. В частности, эта ситуация реализуется в гетероструктуре с полностью согласованными слоями, то есть без деформации. Как известно, такие структуры создаются на основе четырехкомпонентных твердых растворов, а значит, электронная плотность оказывается модулированной. В этом случае дифракционная картина в целом будет соответствовать идеальному кристаллу.

Применимость качественных аналитических методов при исследовании задач динамического рентгеновского рассеяния обусловлена общим свойством различных физических систем и процессов – наличием параметрического влияния характеристик среды на формирование волнового поля.

С точки зрения теории дифракции несомненный интерес представляет выяснение влияния структурных параметров – толщин деформированных слоев, градиентов и амплитуды деформации – на характеристики кривой дифракционного отражения. В дальнейшем мы будем рассматривать задачу рентгенодифракционного анализа именно в этом аспекте.

Качественные аналитические методы, использующие теорию устойчивости, позволяют выделить характерные особенности, связанные с общими свойствами различных профилей деформаций. Такой подход впервые был применен для СР. Рассмотрим физическую интерпретацию возможных типов решений уравнений Такаги с точки зрения теории устойчивости.

Устойчивый характер решения системы уравнений Такаги означает, что падающая рентгеновская волна свободно распространяется в глубь кристалла. Если же решение неустойчиво, то затухание волны в этом случае будет связано с экстинкцией, и, как следствие, «выталкиванием» падающей волны из кристалла с формированием дифракционного максимума в геометрии Брэгга. Именно такая интерпретация дифракционной картины применяется в случае динамической дифракции в СР в геометрии Брэгга.

Тип решений определяется соотношениями между угловой отстройкой от точного угла Брэгга и структурными характеристиками кристалла и деформационного профиля.

Таким образом, основные качественные особенности волнового поля в кристалле с заданным профилем деформации могут быть получены без решения уравнений Такаги, на основании только параметрических соотношений. Более того, такой анализ можно проводить для целых классов различных деформационных профилей, имеющих лишь некоторые характерные общие свойства.

Однако следует иметь в виду, что выводы теории устойчивости обычно формулируются как достаточные условия, оставляя открытыми вопросы, связанные с необходимостью получаемых соотношений между параметрами.

Покажем применение методов качественного анализа для конкретного класса кристаллических структур с модулированной электронной плотностью в случае динамической рентгеновской дифракции по Брэггу.

Запись системы уравнений Такаги в форме (3) явно выделяет «основную» матрицу **A**, собственные значения которой дают волновые векторы преломленной и дифрагированной волн в идеальном кристалле, и «возмущающую» матрицу $\mathbf{B}(\tau)$, пропорциональную обобщенному параметру когерентности $\tilde{\xi}$.

Рассмотрим деформационные поля в полубесконечном кристалле, убывающие по нормали в глубь кристалла до нуля на бесконечности. Воспользуемся результатом теории устойчивости, который применительно к рассматриваемому случаю формулируется следующим образом.

Если система вида (3), где $\tilde{\mathbf{A}}$ – постоянная матрица, такова, что система

$$\frac{d\mathbf{V}}{d\tau} = \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{V}$$

устойчива, и выполняется условие

$$\int_0^\infty X(\tau)d\tau < \infty, \tag{4}$$

то решения (3) остаются ограниченными при $\tau \to \infty$.

Как известно, условие устойчивости решений уравнений Такаги для идеального кристалла в случае дифракции по Брэггу ограничивает угловой интервал областями, лежащими вне области полного дифракционного отражения.

Для выполнения условия (4) достаточно, чтобы деформация убывала на глубине с градиентом:

$$\left|\frac{dX}{d\tau}\right| > \frac{const}{\tau^2}.$$

Иначе говоря, функциональная зависимость профиля деформации по глубине должна допускать асимптотическую оценку:

$$X(\tau) \sim \tau^{-\alpha},\ \alpha > 1.$$

Это условие заведомо удовлетворяется для профилей экспоненциального типа, асимптотика которых имеет, например, такой вид:

$$X(\tau) \sim e^{-a\tau}.$$

Кроме того, ясно, что произвольная многослойная эпитаксиальная структура (пленка-подложка) удовлетворяет условию (4).

Таким образом, угловая область полного дифракционного отражения от кристалла с переменным градиентом деформации, удовлетворяющим условию (4), такая же, как от идеального кристалла, и не зависит от параметров нарушенного слоя. Сам же характер затухания в области полного дифракционного отражения, разумеется, будет различным для каждого конкретного случая.

В функцию $X(\tau)$ входят параметры, определяющие модель структуры: толщины слоев, глубины их залегания, переходные области между слоями, градиент деформации и т.д. Соответственно, аналитическое выражение для интеграла (4) будет содержать некоторые соотношения между указанными параметрами. Если ограничиться лишь профилями, монотонно убывающими на бесконечности, то можно выделить некоторое общее свойство.

Из условия (4) в этом случае следует существование некоторой приведенной «эффективной толщины» h, на которой происходят наиболее существенные изменения структуры волнового поля по отношению к идеальному кристаллу. При этом $1/h$ задает скорость убывания (градиент) деформации и электронной плотности по глубине структуры. Таким образом, величина $\tilde{\xi}h$ является характерным «масштабом» дифракционной задачи и должна рассматриваться как один из специфических параметров для данных условий дифракционной задачи.

Указанные качественные выводы подтверждаются конкретными расчетами для СР и кристалла с переходной областью.

ПРАКТИЧЕСКАЯ РАБОТА

Задание

Пользуясь формулой

$$\tilde{\xi} = \left(\left(\xi - f\chi_0\alpha_0 \left(1 - \frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right) \right)^2 + 4f^2\eta^2\chi_H\chi_{\overline{H}}\alpha_H\alpha_{\overline{H}}\frac{\gamma_H}{\gamma_0} \right)^{1/2},$$

рассчитать обобщенный параметр когерентности для следующих гетероструктур:

$Ge_{0.1}Si_{0.99}/Si$;
$Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$;
$Al_{0.1}Ga_{0.9}P/GaP$;
InP/GaAs

– в случае симметричного отражения $\gamma_0 = -|\gamma_H|$ от атомной плоскости (400) Cu Kα_1 излучения λ=0,154 нм.

Сравнить значение $\tilde{\xi}$ с параметром когерентности ξ без учета вариации электронной плотности. Необходимые данные для расчета представлены в таблице.

Таблица

Гетероструктура	Параметр решетки подложки a, нм	χ_0, 10^{-6}	$\chi_H = \chi_{\bar{H}}$, 10^{-6}
$Ge_{0.01}Si_{0.99}/Si$	0,543	15,07 (Si) 28,73 (Ge)	7,634 (Si) 16,64 (Ge)
$Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$	0,5646	34,44 (GaAs) 24,76 (AlAs)	17,45 (GaAs) 12,54 (AlAs)
$Al_{0.1}Ga_{0.9}P/GaP$	0,5445	24,74 (GaP) 14,9 (AlP)	12,34 (GaP) 7,64 (AlP)
InP/GaAs	0,5646	34,44 (GaAs) 34,4 (InP)	17,45 (GaAs) 17,4 (InP)

Пример расчета для гетероструктуры $Ge_{0.01}Si_{0.99}/Si$

Запишем рабочий вариант формул для $\tilde{\xi}$ и для ξ в рассматриваемом случае:

$$\tilde{\xi} = \left(\frac{d}{\lambda\pi|\chi_H|}\right)\left[\left(\frac{\pi\varepsilon_0\lambda^2}{d^2} + 2\chi_0\alpha_0\right)^2 - 4|\chi_H|^2\alpha_H\alpha_{\bar{H}}\right]^{1/2};$$

$$\xi = \frac{\lambda\varepsilon_0}{d|\chi_H|}.$$

Определим параметр решетки пленки по концентрации твердого раствора согласно закону Вегарда:

$$a_{тв.р.} = a_{Ge}x + a_{Si}(1-x) = a_{Ge}0{,}01 + a_{Si}0{,}99 = 0{,}54323\ \text{нм}.$$

Амплитуда деформации определяется по параметрам решетки пленки и подложки через корреляционный фактор q = 0,5, учитывающий упругие свойства кристалла кубической сингонии:

$$\varepsilon_0 = q\frac{a_{тв.р.} - a_{Si}}{a_{Si}} = 1{,}85 \cdot 10^{-4}.$$

Межплоскостное расстояние определяется по индексам Миллера отражения:

$$d = \frac{a_{Si}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a_{Si}}{4} = 0{,}136\ \text{нм};$$

$$\alpha_H = \alpha_{\overline{H}} = \frac{(\chi_H)_{тв.р.} - (\chi_H)_{Si.}}{(\chi_H)_{Si.}} = 1{,}18 \cdot 10^{-2}.$$

Здесь $(\chi_H)_{тв.р.}$ определяется также по закону Вегарда из концентрации твердого раствора.

Подставляя полученные значения в рабочие формулы, найдем $\tilde{\xi}$ и ξ:

$$\tilde{\xi} = 7{,}81;$$

$$\xi = 26{,}7.$$

Как видно, учет изменения электронной плотности для данной гетероструктуры приводит к увеличению параметра когерентности почти в 3,5 раза.

Литература

1. Алфёров Ж. И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур / Ж. И. Алфёров // ФТП. – 1998. – Т. 32. – № 1. – С. 3–18.

2. Хапачев Ю. П. Брэгговская дифракция рентгеновских лучей в кристалле с переходным слоем / Ю. П. Хапачев, Ф. Н. Чуховский // ФТТ. – 1984. – Т. 26. – Вып. 5. – С. 1319–1325.

3. Дышеков А. А. Динамическая рентгеновская дифракция в сверхрешетках с различным градиентом деформации в переходной области / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, Д. А. Тарасов // ФТТ. – 1996. – Т. 38. – Вып. 5. – С. 1375–1386.

4. Дышеков А. А. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках (обзор) / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев // Успехи физики металлов. – 2001. – Т. 2. – № 4. – С. 281–351.

5. Дышеков А.А. Динамическая рентгеновская дифракция в эпитаксиальной сверхрешетке с различной электронной плотностью в слоях / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев // Материалы совещания: Рентгеновская оптика–2003. – Нижний Новгород, 2003. – С. 233–237.

6. Дышеков А. А. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. I. Точное аналитическое решение и основные качественные особенности волнового поля / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. – 1998. – № 3. – С. 20–26.

7. Дышеков А. А. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным градиентом деформации. II. Дифракция в случае резкого градиента деформации / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. – 1998. – № 6. – С. 21–30.

УЧЕБНОЕ ИЗДАНИЕ

Дышеков Артур Альбекович
Хапачев Юрий Пшиканович
Савинцев Алексей Петрович
Багов Алий Николаевич

АНАЛИЗ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ТАКАГИ ДЛЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ПЕРЕМЕННОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ

Методические указания к самостоятельной работе

2 издание, стереотипное

Для специальности 030302 – Физика
Профиль – Физика конденсированного состояния вещества
030402 – Физика (магистратура)
Физика конденсированного состояния

Редактор ***Е.А. Балова***
Компьютерная верстка ***В.Н. Мидовой***
Корректор ***Е.А. Балова***

В печать 13.01.2015. Формат 60x84 $^{1}/_{16}$.
Печать трафаретная. Бумага офсетная. 0.93 усл.п.л. 1.0 уч.-изд.л.
Тираж 100 экз. Заказ № 5944.
Кабардино-Балкарский государственный университет.
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Полиграфический участок ИПЦ КБГУ
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.