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

КОНЦЕПЦИЯ ЕДИНОЙ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ ЗАДАЧИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ В СВЕРХРЕШЕТКАХ

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
К64

Рецензент:

доктор технических наук, профессор
Кабардино-Балкарской государственной
сельскохозяйственной академии

М.П. Дохов

Составители: **Дышеков А.А., Хапачев Ю.П.,
Савинцев А.П., Ташилов А.С.**

К64 Дышеков, А. А. Концепция единой параметризации задачи динамической дифракции в сверхрешетках [Текст] : методические указания к самостоятельной работе / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, А. П. Савинцев, А. С. Ташилов. – Нальчик : Каб.-Балк. ун-т, 2015. – 15 с. – 100 экз.

Издание содержит методические указания по самостоятельному изучению темы «Концепция единой параметризации задачи динамической дифракции в сверхрешетках», 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

Анализ динамических дифракционных явлений, происходящих в кристалле с периодическим полем деформаций – сверхрешетке, относится к одному из важнейших направлений общей проблемы динамического рассеяния в кристалле с переменным градиентом деформации. Периодичность сверхрешетки может быть получена различными способами, однако наибольший интерес представляют эпитаксиальные сверхрешетки, которые получаются перемежающимся эпитаксиальным наращиванием двух тонких слоев различного состава на монокристаллической подложке. Вместе с тем значительные достижения в данной области рентгеновской кристаллооптики не нашли еще отражения в существующей учебно-методической литературе, посвященной описанию взаимодействия излучения с кристаллом в курсе физики конденсированного состояния. Данные методические указания предназначены для восполнения этого пробела. Здесь рассматривается один из наиболее перспективных вариантов теории, основанный на формализме зонных диаграмм. Показывается, как работает этот метод для более общего случая вариации рассеивающей способности слоев в периоде сверхрешетки. Для этого излагаются необходимые теоретические предпосылки, вводится минимальный набор параметров, необходимых для адекватного описания динамической дифракции в сверхрешетке, и разъясняется их физическое содержание.

Для приобретения студентами навыков самостоятельной работы приводится методика расчета обобщенного параметра когерентности для ряда гетероэпитаксиальных сверхрешеток, служащих элементной базой современной оптоэлектроники.

Рассматривается также конкретный пример такого расчета для сверхрешетки $Ge_{0.1}Si_{0.99}$/Si/…/Si, с помощью которого демонстрируется влияние различия электронной плотности слоев на характеристики кривой дифракционного отражения.

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Проблема динамической дифракции в одномерных модулированных структурах представляет собой одно из перспективных направлений рентгеновской кристаллооптики. Как правило, модуляция осуществляется посредством изменения межплоскостного расстояния, которое описывается деформацией по глубине структуры. По ряду причин наибольший интерес представляют структуры с периодической модуляцией – сверхрешетки. Изменение межплоскостного расстояния может быть вызвано различными способами – например, возбуждением ультразвуковой волны в кристалле. Однако очевидно, что в микроэлектронике особое значение имеют твердотельные сверхрешетки, деформация в которых вызывается когерентным сопряжением эпитаксиальных слоев различного состава. Как правило, для этой цели используются трех- и четырехкомпонентные твердые растворы на основе соединений $A^{III}B^{V}$.

Рентгеновская волна в условиях динамической дифракции чувствительна не только к изменению межплоскостного расстояния, но также и к рассеивающей способности составляющих кристалл атомов, что, как известно, проявляется для идеального кристалла в эффекте преломления волны на границе раздела кристалл – вакуум. Если в кристалле наблюдается модуляция электронной плотности, то это, очевидно, должно привести к изменению состояния волнового поля в кристалле, поскольку преломление волны происходит уже на всем пути ее распространения в кристалле. В общем случае в кристалле одновременно наблюдается модуляция электронной плотности и межплоскостного расстояния, и таким образом возникает сложное взаимодействие эффектов «геометрической» природы, связанных с интерференционными условиями дифракции (структурный фактор), и «физической» природы, которые определяют интенсивность взаимодействия рентгеновской волны с атомами (атомный фактор). Именно такая ситуация имеет место в эпитаксиальных сверхрешетках на основе многокомпонентных твердых растворов.

Если в области динамической теории рентгеновской дифракции в сверхрешетках с модуляцией межплоскостного расстояния имеются значительные достижения, нашедшие отражение в различных подходах и приведшие к пониманию основных закономерностей дифракционной картины, то влияние на волновое поле периодического изменения электронной плотности остается невыясненным. Здесь мы рассмотрим этот вопрос, используя основные результаты формализма зонных диаграмм, который подробно описан в приведенной ниже литературе. Основные результаты этого формализма сводятся к следующему.

Анализ волнового поля в кристалле и характеристик дифракционного спектра проводится на основе физических представлений о возможности существования угловых областей падения рентгеновской волны, в которых ее свободное распространение невозможно в силу экспоненциального затухания аналогично эффекту экстинкции. Эти области, которые, как и в зонной теории, естественно назвать запрещенными зонами, соответствуют особому характеру решений уравнений Такаги, а именно – неустойчивому. Основная идея подхода состоит в определении границ, отделяющих устойчивые решения, соответствующие свободному распространению рентгеновской волны в кристалле, от неустойчивых, оставляя в стороне вопрос о явном виде кривой дифракционного отражения. Пересечение указанных границ с дисперсионной кривой, соответствующей распространению рентгеновской волны в отсутствие дифракции, дает угловые интервалы областей неустойчивого решения, в которых в условиях динамической дифракции формируются дифракционные максимумы – основной максимум и сателлиты. Анализ углового положения основного максимума и сателлитов, а также их взаимного расположения оказывается вполне достаточным для определения важнейших характеристик сверхрешетки. В математическом отношении эта задача сводится к построению зонных диаграмм устойчивых и неустойчивых решений в некотором параметрическом пространстве.

Естественно, при этом возникает задача определения минимально необходимого числа параметров, определяющего размерность параметрического пространства. Решение этой задачи позволяет эффективно реализовывать указанную выше программу. Оказывается, что для чисто деформационных сверхрешеток требуется три параметра, один из которых – параметр когерентности – непосредственно отражает деформационное состояние сверхрешетки (амплитуду деформации). Поскольку в условиях дифракционного эксперимента эта величина остается фиксированной, то достаточно рассматривать двумерные диаграммы, заданные в координатах волновых векторов падающей и преломленной волн для одноволнового случая. Важно при этом, что математическая процедура минимизации параметров приводит к величине, имеющей вполне определенный физический смысл: параметр когерентности определяет характер рассеяния на периоде сверхрешетки.

Обобщим формализм зонных диаграмм на случай периодического изменения электронной плотности в сверхрешетке. Будем исходить из следующей формы записи уравнений Такаги:

$$\frac{d}{d\tau}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\kappa - if\chi_0\alpha_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)X(\tau) & i2f\chi_{\overline{H}}\eta\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\left(1+\alpha_{\overline{H}}X(\tau)\right) \\ i2f\chi_H\eta\left(1+\alpha_H X(\tau)\right) & -i\kappa + if\chi_0\alpha_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)X(\tau) - i2\xi X(\tau) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix}. \quad (1)$$

В (1) введены следующие обозначения:

$$\tau = \frac{\pi z}{T},\ \kappa = f\beta_H = -f\left(2\Delta\theta\, sin\, 2\theta + \chi_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)\right), \quad f = -\frac{T}{2\lambda\, sin(\theta\pm\varphi)},$$

$\alpha_{0,H} = \dfrac{\Delta F(0,H)}{F(0,H)}$ – амплитуда относительного изменения структурного фактора кристаллической решетки в направлении вектора обратной решетки $\vec{H}$, $\xi = \dfrac{2T\varepsilon_0}{\lambda\sin(\theta\pm\varphi)}\sin^2\theta\left(\cos^2\varphi \pm \dfrac{1}{2}\mathrm{ctg}\theta\sin 2\varphi\right)$ – параметр когерентности, связанный с амплитудой деформации ε_0. $X(\tau) = X(\tau+T)$ – периодическая с периодом сверхрешетки T функция, описывающая изменение структурного фактора (электронной плотности) и деформации, вызванной изменением межплоскостного расстояния при когерентном сопряжении слоев различного состава и различного параметра решетки, z – координата по нормали в глубь кристалла, η – фактор поляризации, χ_0, χ_H и $\chi_{\overline{H}}$ – Фурье-компоненты поляризуемости кристалла, $\gamma_0 = \sin(\theta \mp \varphi)$ и $\gamma_H = -\sin(\theta\pm\varphi)$ – направляющие косинусы преломленной и дифрагированной волн соответственно, λ – длина волны излучения, θ – угол Брэгга, φ – угол наклона рассеивающей атомной плоскости к поверхности кристалла, $\Delta\theta$ – отклонение от точного угла Брэгга.

Уравнения (1) можно получить, представляя разложение поляризуемости кристалла в ряд Фурье вида:

$$\chi(\vec{r}) = \sum_H \chi_H\left(1+\alpha_H X(\vec{r})\right)\exp\left(\left(2\pi i\vec{H}(\vec{r}) + \vec{U}(\vec{r})\right)\vec{r}\right),$$

где $\vec{U}(\vec{r})$ – сумма упругого смещения атомных плоскостей и смещения, вызванного изменением межплоскостного расстояния при сопряжении слоев различного состава, а также записывая полное волновое поле в кристалле, согласно теореме Блоха, в виде:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_H \vec{E}_H(\vec{r}) \exp\left(2\pi i\left(\vec{k}_H \vec{r} + \vec{H}\vec{U}(\vec{r})\right)\right).$$

Дальнейшие стандартные процедуры, включающие также перенормировку амплитуды дифрагированной волны на несущественный фазовый множитель, приводят к системе (1). Можно, однако, непосредственно записать систему (1), если рассматривать когерентно сопряженные слои кристалла, каждый из которых имеет свою электронную плотность и собственный параметр решетки, и исходить из требования, чтобы уравнения Такаги имели одинаковый вид для каждого слоя, – иначе говоря, искомые уравнения должны быть ковариантны для всех слоев относительно изменения амплитудной характеристики рассеяния – электронной плотности.

Здесь необходимо отметить важное допущение, которое принято в (1). Изменение состава и деформации в слоях сверхрешетки происходит синфазно и по одному закону $X(\tau)$. Это допущение представляется вполне естественным и становится почти очевидным при рассмотрении сверхрешетки, состоящей из резко выраженных эпитаксиальных слоев с малыми переходными областями. Однако, строго говоря, возможны ситуации, когда указанная синфазность не имеет места.

Представим систему (1) в виде:

$$\frac{d\mathbf{E}}{d\tau} = \left(\mathbf{A} + X(\tau)\mathbf{B}\right)\mathbf{E}, \tag{2}$$

где введены следующие матрицы:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} i\kappa & i2f\chi_{\overline{H}}\eta\dfrac{\gamma_H}{\gamma_0} \\ i2f\chi_H\eta & -i\kappa \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -if\chi_0\alpha_0\left(1-\dfrac{\gamma_H}{\gamma_0}\right) & i2f\chi_{\overline{H}}\eta\dfrac{\gamma_H}{\gamma_0}\alpha_{\overline{H}} \\ i2f\chi_H\eta\alpha_H & if\chi_0\alpha_0\left(1-\dfrac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)-i2\xi \end{pmatrix}.$$

Тем самым мы выделяем «основную» составляющую, соответствующую распространению рентгеновской волны в идеальном кристалле (матрица **A**), и «модулирующую» составляющую (матрица **B**), ответственную за отклонения от идеальности, включающие деформацию и изменение электронной плотности.

Как видно, в случае чисто деформационной сверхрешетки матрица **B** имеет единственную отличную от нуля компоненту – параметр когерентности ξ. Именно это обстоятельство позволяет эффективно строить динамическую теорию, основанную на методе зонных диаграмм. Вместе с тем, в общем случае мы имеем четыре параметра, отвечающие за характер волнового поля в сверхрешетке, – помимо ξ, в матрице **B** имеются еще три амплитуды изменения структурного фактора: α_0, α_H и $\alpha_{\overline{H}}$. Таким образом, возникает вопрос: являются ли указанные параметры независимыми с точки зрения описания процесса динамического рассеяния в рамках формализма зонных диаграмм или же их число можно уменьшить. В случае, если эти параметры независимы, пришлось бы строить зонные диаграммы в многомерном параметрическом пространстве, что сделало бы дальнейший анализ практически необозримым и тем самым девальвировало бы ценность подхода и его идейную простоту.

Покажем, что в рамках предположения об одинаковой функциональной зависимости электронной плотности и деформации по глубине сверхрешетки число указанных параметров может быть сведено к единице. В уравнении (2) сделаем подстановку **E = RW**, где **W** – вектор-столбец, а **R** – матрица, диагонализующая матрицу **B**:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \end{pmatrix}, \ \mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 \\ 0 & \beta_2 \end{pmatrix}.$$

β_1 и β_2 – собственные значения матрицы **B**. Матрицу R можно построить стандартными методами путем решения соответствующего секулярного уравнения и нахождения собственных векторов, однако ее явный вид нам не понадобится. Тогда (2) преобразуется к виду:

$$\frac{d\mathbf{W}}{d\tau} = \left(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{R} + X(\tau)\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{R}\right)\mathbf{W} \cdot \qquad (3)$$

Далее, представим **W** в виде **W**=**T**(τ)**V**, где **V** – новый искомый вектор-столбец, переменная матрица **T**(τ) имеет вид:

$$T(\tau) = t(\tau)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а $t(\tau)$ – некоторая функция. Тогда уравнение (3) примет вид:

$$\frac{d\mathbf{V}}{d\tau} = \left(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{AR} + X(\tau)\mathbf{R}^{-1}\mathbf{BR} - \mathbf{T}^{-1}\frac{d\mathbf{T}}{d\tau}\right)\mathbf{V}\cdot \tag{4}$$

В (4) мы воспользовались коммутативностью матрицы **T**(τ) как пропорциональной единичной матрицы. Функцию $t(\tau)$ выберем таким образом, чтобы переменная составляющая уравнения (4) содержала единственную компоненту. Это приводит к условию:

$$X(\tau)\mathbf{R}^{-1}\mathbf{BR} - \mathbf{T}^{-1}\frac{d\mathbf{T}}{d\tau} = \begin{pmatrix} X(\tau)\beta_1 - \dfrac{t'(\tau)}{t(\tau)} & 0 \\ 0 & X(\tau)\beta_2 - \dfrac{t'(\tau)}{t(\tau)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & X(\tau)(\beta_2 - \beta_1) \end{pmatrix} = \tag{5}$$

$$= X(\tau)\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & (\beta_2 - \beta_1) \end{pmatrix} = X(\tau)\widetilde{\mathbf{B}},$$

которое может быть выполнено, если функция $t(\tau)$ равна

$$t(\tau) = \exp\left(\beta_1 \int X(\tau)d\tau\right)\cdot$$

В итоге мы приходим от исходного уравнения (2) к уравнению:

$$\frac{d\mathbf{V}}{d\tau} = \left(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{AR} + X(\tau)\widetilde{\mathbf{B}}\right)\mathbf{V} = \left(\widetilde{\mathbf{A}} + X(\tau)\widetilde{\mathbf{B}}\right)\mathbf{V}\cdot \tag{6}$$

Нетрудно убедиться, что уравнение (6) совпадает по виду с уравнением (2).

Как известно, общий вид решения матричного уравнения типа (6) с периодической функцией $X(\tau)$ определяется теоремой Блоха (в математической формулировке – теоремой Флоке – Ляпунова) и отражает в данном случае тот факт, что волновое поле в кристалле представляет собой плоские волны, модулированные периодическими с периодом сверхрешетки T амплитудами. На границе зон устойчивых и неустойчивых решений уравнения (6) по крайней мере одно из решений должно быть периодическим. На этом основаны аналитические методы построения переходных поверхностей методами теории возмущений. При этом оказывается, что зависимость переходных поверхностей от матрицы $\widetilde{\mathbf{A}}$ определяется двумя ее инвариантами: детерминантом и шпуром. Однако, как видно из (6), матрицы $\widetilde{\mathbf{A}}$ и $\mathbf{A}$ подобны, и значит, их шпуры и детерминанты совпадают. Следовательно, замена $\widetilde{\mathbf{A}}$ на $\mathbf{A}$ не влияет на вид переходной поверхности. Разумеется, при этом амплитуды волн, а значит, интенсивности основного дифракционного максимума и сателлитов меняются.

Таким образом, мы приходим к выводу, что в общем случае, когда в сверхрешетке имеются слои различного состава и периода решетки, динамическая дифракция описывается посредством единственного параметра, который представляет собой определенную комбинацию исходных четырех параметров и лишь в частном случае чисто деформационной сверхрешетки сводится к параметру когерентности:

$$\beta_2-\beta_1=-i2\left(\left(\xi-f\chi_0\alpha_0\left(1-\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)\right)^2+4f^2\eta^2\chi_H\chi_{\overline{H}}\alpha_H\alpha_{\overline{H}}\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right)^{1/2}=-i2\tilde{\xi}\cdot \qquad (7)$$

Знак в (7), зависящий от выбора знаков в собственных значениях β_1 и β_2, выбран таким образом, чтобы обеспечить предельный переход к случаю чисто деформационной сверхрешетки.

Полученный результат означает, что все выводы, полученные в рамках формализма зонных диаграмм, в частности, аналитические выражения для угловых ширин сателлитов и расстояния между ними для различных моделей сверхрешеток, остаются в силе и в общем случае, если в соответствующих выражениях произвести формальную замену $\xi\to\tilde{\xi}$. Поэтому величину $\tilde{\xi}$ естественно назвать 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.

Отметим, что из (7) следует вывод о том, что в сверхрешетке с переменной электронной плотностью и деформацией существует принципиальная возможность обращения величины $\tilde{\xi}$ в ноль. Это означает, что в данном случае сверхрешетка по отношению к рассеянию рентгеновской волны ведет себя как идеальный кристалл с некоторой модифицированной электронной плотностью, поскольку «возмущающая» матрица, ответственная за формирование кривой дифракционного отражения от сверхрешетки, оказывается равной нулю. Проведенные выше подстановки приводят лишь к появлению дополнительного преломления для проходящей и дифрагированной волн.

Кроме того, вид выражения (7) говорит о том, что параметры $\alpha_0, \alpha_H, \alpha_{\overline{H}}$ по отношению к динамической дифракции не являются независимыми, а выступают как вполне определенная совокупность, влияющая на общую структуру волнового поля в кристалле. Особенно ярко это проявляется в случае сверхрешетки с полностью согласованными слоями, то есть без деформации. Как известно, такие структуры создаются на основе четырехкомпонентных твердых растворов, а значит, электронная плотность оказывается модулированной. Наглядные представления о характере рассеяния в такой сверхрешетке должны приводить к выводу о том, что дифракционная картина, слегка искаженная эффектами дополнительного преломления, в целом будет соответствовать идеальному кристаллу.

Необходимо отметить, что все проведенные выше рассуждения и выкладки носят общий характер и никак не связаны с конкретным видом модели $X(\tau)$. Это означает, что основные выводы остаются в силе и для других структур.

ПРАКТИЧЕСКАЯ РАБОТА

Задание

Используя выражение

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

рассчитать обобщенный параметр когерентности для следующих полупроводниковых сверхрешеток (СР):

$Ge_{0.1}Si_{0.99}/Si/\ldots/Si$;

$Al_{0.3}Ga_{0.7}As/\ldots/GaAs$;

$Al_{0.1}Ga_{0.9}P/\ldots/GaP$;

$InP/GaAs/\ldots/GaAs$

для случая симметричной схемы дифракции, когда выполняется условие $\gamma_0 = -|\gamma_H|$, от атомной плоскости (400) для Cu Kα_1 излучения с длиной волны λ=0,154 нм. Сравнить значение $\tilde{\xi}$ с параметром когерентности ξ чисто деформационной сверхрешетки.

Необходимые данные для расчета представлены в таблице.

Таблица

Сверхрешетка	Параметр решетки подложки a, нм	χ_0, 10^{-6}	$\chi_H = \chi_{\bar{H}}$, 10^{-6}	Период СР T, нм
$Ge_{0.1}Si_{0.99}$/Si/…/Si	0,543	15,07 (Si) 28,73 (Ge)	7,634 (Si) 16,64 (Ge)	10
$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$/…/GaAs	0,5646	34,44 (GaAs) 24,76 (AlAs)	17,45 (GaAs) 12,54 (AlAs)	15
$Al_{0.1}Ga_{0.9}P$/…/GaP	0,5445	24,74 (GaP) 14,9 (AlP)	12,34 (GaP) 7,64 (AlP)	20
InP/GaAs/…/GaAs	0,5646	34,44 (GaAs) 34,4 (InP)	17,45 (GaAs) 17,4 (InP)	40

Пример расчета для сверхрешетки $Ge_{0.1}Si_{0.99}$/Si/…/Si

Выразим расчетную формулу через заданные параметры сверхрешетки и условия дифракции:

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

$$\xi = \frac{T\varepsilon_0}{d}.$$

Определим параметр решетки пленки, составляющий полупериод сверхрешетки 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:

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

Межплоскостное расстояние определяется по индексам Миллера отражения:

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

$$\alpha_0 = \frac{(\chi_0)_{тв.р.} - (\chi_0)_{Si.}}{(\chi_0)_{Si.}} = 0{,}91;$$

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

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

Подставляя полученные значения в рабочую формулу, найдем $\tilde{\xi}$ и ξ:

$$\tilde{\xi} = 1{,}52 \cdot 10^{-2};$$

$$\xi = 1{,}36 \cdot 10^{-2}.$$

Как видно, учет изменения электронной плотности для данной сверхрешетки приводит к увеличению обобщенного параметра когерентности примерно на 12 % по сравнению с чисто деформационным.

Литература

1. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки / М. Херман. – М. : Мир, 1989. – 240 с.

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

3. Дышеков А. А. Динамическая рентгеновская дифракция в эпитаксиальной сверхрешетке с различной электронной плотностью в слоях / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, А. Н. Багов // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. – 2005. – № 2. – С. 59–63.

4. Дышеков А. А. Рентгенодифрактометрическое исследование двухслойной гетероструктуры с переходным слоем с учетом изменения электронной плотности / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, М. Н. Барашев, Р. Н. Кютт, А. Н. Багов // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. – 2005. – № 6. – С. 13–17.

5. 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.

6. Хапачев Ю. П. Теория динамической рентгеновской дифракции в сверхрешетках / Ю. П. Хапачев, А. А. Дышеков. – Нальчик : Каб.-Балк. ун-т, 2002. – 95 с.

7. 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.

8. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости / Б. П. Демидович. – М. : Наука, 1967. – 472 с.

УЧЕБНОЕ ИЗДАНИЕ

Дышеков Артур Альбекович
Хапачев Юрий Пшиканович
Савинцев Алексей Петрович
Ташилов Аслан Султанович

КОНЦЕПЦИЯ ЕДИНОЙ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ ЗАДАЧИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ В СВЕРХРЕШЕТКАХ

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. 1.16 усл.п.л. 1.0 уч.-изд.л.
Тираж 100 экз. Заказ № 5946.
Кабардино-Балкарский государственный университет.
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

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