ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 574.5:591.524.12-045.52:627.8 DOI 10.19110/1994

A.B. KA3AKOB, B.N. NYHEFOB

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ пространственно ограниченных пучков в латеральных периодических структурах

Физико-математический институт ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, г. Сыктывкар

> kazakov@ipm.komisc.ru vpunegov@ipm.komisc.ru

D.V. KAZAKOV, V.I. PUNEGOV

X-RAY DIFFRACTION OF SPATIALLY Bounded beams in lateral periodic Structures

Institute of Physics and Mathematics, Federal Research Centre Komi Science Centre, Ural Branch, RAS, Syktyvkar

Аннотация

Рассмотрена общая задача динамической теории дифракции в латеральных периодических структурах в случае, когда падающий и отраженный рентгеновский пучок пространственно ограничен. Исследовано влияние упругих деформаций кристаллической решетки на угловое распределение интенсивности рассеяния. Приведены результаты дифракции на кристалле, промодулированной поверхностной акустической волной и на кристалле с металлической поверхностной решеткой.

Ключевые слова:

динамическая теория дифракции, пространственно ограниченные рентгеновские пучки

Abstract

Lateral periodic structures (LPS), including multilayer and crystal diffraction gratings, systems modulated by an external influence (for example, by an ultrasonics), are widely used in nano- and optoelectronics, as well as in X-ray optics. Usually, X-ray scattering on LPS is described by means of a model of an incident plane wave, spatially unbounded in lateral direction. However, when one compares experimental and simulated data, such model is not entirely appropriate, since in any experiment X-ray beams are always spatially bounded. On the other hand, within the framework of the plane wave model, it is impossible to perform a numerical cal-culation of the scattering intensity distribution in vicinity of a reciprocal lattice node, since an angular dimension of diffraction orders is described by the Dirac delta function. Within the framework of the theory of elasticity, numerical calculations of atomic displacement fields for lithium niobate and silicon crystals are performed. In the first case, periodic elastic deformations are caused by an action of a surface acoustic wave with a modulation period of 4 μm . In the second case, deformations arise due to intermolecular interactions caused by elastic force at the interface between medium of different chemical composition — wolfram stripes with a width of $0.5 \ \mu m$ periodically located on a silicon surface. Using the found solutions, numerical simulations of reciprocal space maps for crystals with periodically distributed elastic strains were performed. It was established, that for crystals modulated by an accoustic wave, diffraction orders consist of the main reflection vertical band and a pair of inclined bands, induced by spatially bounded X-ray beams. In the case of diffraction in crystals with the surface grating, one observes additional satellites along inclined bands caused by the spatial modulation of incident X-ray wave. Therefore, a general problem of the dynamical theory of X-ray diffraction in lateral periodic structures for a case of spatially bounded incident and reflected beams is considered. Effects, due to elastic deformations of a crystal lattice on an angular distribution of the scattered intensity, are investigated. Results of X-ray diffraction on a crystal modulated by a surface acoustic wave and on a crystal with a metal surface grating are presented.

Keywords:

Dynamical theory of X-ray diffraction, spatially bounded beams, reciprocal space maps

Введение

Латеральные периодические структуры (ЛПС), включая многослойные и кристаллические дифракционные решетки, структуры, модулированные внешним воздействием (например, ультразвуковой волной), находят широкое применение в нано- и оптоэлектронике, а также в рентгеновской оптике. Традиционно для описания рассеяния рентгеновских лучей на ЛПС используется модель падающей плоской волны, которая не ограниченна в латеральном направлении. Однако в процедуре сравнения измеренных и расчетных данных такая модель не совсем корректна, поскольку в эксперименте все рентгеновские пучки пространственно ограничены. Кроме того, в рамках модели плоских волн невозможно выполнить численный расчет распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки, так как угловые размеры дифракционных порядков описываются дельта функцией Дирака. Поэтому в данной работе теория рентгеновской дифракции обобщена на случай пространственно ограниченных рентгеновских пучков.

Теория

Рассмотрим дифракцию ограниченных рентгеновских пучков в кристалле, приповерхностная область которого состоит из периодически расположенных в латеральном направлении деформированных участков. Такое распределение упругих деформаций кристаллической решетки может быть создано в результате воздействия поверхностной акустической волны (рис. 1а), либо создания на поверхности кристалла периодической решетки из другого материала (рис. 1b). Для простоты рассмотрим симметричную дифракцию в геометрии Брэгга. Ширина засветки поверхности кристалла падающим пучком зависит от размера щели S_1 и равна $l_x^{(in)}$. Поперечный размер выходящего пучка формируется щелью S_2 , латеральная ширина которого на поверхности кристалла равна $l_x^{(ex)}$ (рис. 1b). Дифракцией рентгеновских лучей на краях щелей падающего S_1 и отраженного S_2 пучков пренебрегаем. Амплитудный коэффициент отражения (АКО) пространственно ограниченного пучка от ЛПС имеет вид

$$R(q_x, q_z) = \frac{a_h}{2\pi l_x^{(in)}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \ R_\infty(\kappa, q_x, q_z)$$
$$\hat{Y}_1(\kappa) \hat{Y}_2(\kappa - q_x), \quad (1)$$

где $R_\infty(\kappa,q_x,q_z)$ — АКО неограниченной плоской волны [1], функции

$$\hat{Y}_1(\kappa) = \frac{\sin\left(\kappa \ l_x^{(in)}/2\right)}{\kappa/2},$$
$$\hat{Y}_2(\kappa - q_x) = \frac{\sin\left((\kappa - q_x) \ l_x^{(in)}/2\right)}{(\kappa - q_x)/2}$$

определены в работе [2].

В рамках теории упругости выполнен численный расчет полей решеточных смещений в кристаллах ниобат лития ($LiNbO_3$) и кремния. В первом случае периодические упругие деформации вызваны действием поверхностной акустической волны с периодом модуляции 4 μm (рис. 2а). Во втором случае деформации возникают из-за молекулярного взаимодействия атомов разных по химическому составу сред — полосы вольфрама шириной $0.5 \ \mu m$ периодически расположены на поверхности кремния, периодической решетки равен 1 μm (рис. 2b).



Рис. 1. Схема дифракции ограниченных рентгеновских пучков на кристалле, промодулированном поверхностной акустической волной (а), и кристалле с поверхностной решеткой (b). Fig. 1. Geometry of diffraction for spatially bounded X-ray beams on a crystal modulated by a surface acoustic wave (a) and a crystal with a surface grating (b).



Рис. 2. Поля упругих деформаций в кристаллах ниобата лития (a) и кремния (b). Fig. 2. An elastic deformation field in lithium niobate (a) and silicon (b) crystals.



Рис. 3. Карты углового распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки от кристалла ниобата лития (а) и кремния (b).

Fig. 3. Reciprocal space maps of lithium niobate (a) and silicone (b) crystals.

На основе решения (1) выполнено численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки для кристаллов с разными периодическими деформациями. Для кристалла, промодулированного ПАВ, дифракционные порядки состоят из вертикальной полосы основного отражения и наклонных полос, вызванных ограниченностью рентгеновских пучков (рис. 3а). В случае дифракции на кристалле с поверхностной решеткой дополнительно наблюдаются сателлиты вдоль наклонных полос из-за модуляции падающего излучения (рис. 3b).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 18-10-2-23) и РФФИ (проект №17-02-00090).

Литература

- 1. Punegov V.I. et al. Coherent and diffuse X-ray scattering in crystals modulated by a surface acoustic wave // J. Appl. Cryst. 2010. Vol. 43. P. 520.
- Punegov V.I. et al. Applications of dynamical theory of X-ray diffraction by perfect crystals to reciprocal space mapping // J. Appl. Cryst. 2017. Vol. 50. P. 1256.

Статья поступила в редакцию 18.03.2019.