

ГОСУДАРСТВЕННОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Б.И. СТЕПАНОВА
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

УДК 548.73:539.389

БЕНЕДИКТОВИЧ
АНДРЕЙ ИГОРЕВИЧ

МЕТОДЫ РАСЧЕТА ПРОФИЛЕЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ И НАПРЯЖЕННЫХ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Минск, 2011

Работа выполнена в **Белорусском государственном университете**

Научный руководитель: **Феранчук Илья Давыдович**
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
теоретической физики и астрофизики БГУ

Официальные оппоненты: **Курочкин Юрий Андреевич**
доктор физико-математических наук,
заведующий лабораторией
теоретической физики ИФ НАН Беларуси

Слепян Григорий Яковлевич
доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник лаборатории
электродинамики неоднородных сред
НИИ ядерных проблем БГУ

Оппонирующая организация: Научно-практический центр НАН Беларуси
по материаловедению

Защита состоится «22» ноября 2011 г. в 16 часов 30 минут на заседании
совета по защите диссертаций Д 01.05.02 при Институте физики
им. Б.И. Степанова НАН Беларуси по адресу: 220072, Республика Беларусь,
г. Минск, пр. Независимости, 68; тел. ученого секретаря 284-04-41.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики
им. Б.И. Степанова НАН Беларуси.

Автореферат разослан «20» октября 2011 г.

Ученый секретарь
совета по защите диссертаций
кандидат физ.-мат. наук



Ю.П. Выблый

ВВЕДЕНИЕ

Начиная с открытия дифракции рентгеновского излучения на кристаллах М. Лауэ в 1912 году, рентгеновское излучение (РИ) уже почти столетие используется для получения уникальной информации о строении кристаллических систем. Поскольку длина волны РИ сопоставима с межатомными расстояниями в кристаллических структурах, дифракция РИ позволяет определять пространственную структуру и элементный состав кристаллической решетки, делать выводы о наличии и типе дефектов. Высокие проникающие свойства РИ позволяют исследовать большие объемы материала, изучать статистические закономерности строения вещества неразрушающим образом в естественной среде. Данное преимущество является уникальным среди прочих методов исследования структуры вещества в наномасштабах, таких, например, как электронная микроскопия, требующая сложной предварительной подготовки исследуемого образца.

Наличие широкодоступных источников РИ, рентгеновских трубок, и детекторов РИ, вместе с относительной простотой и легкостью проведения экспериментов по дифракции РИ, обусловили чрезвычайно широкое применение рентгеновской дифрактометрии (РД) в промышленном производстве и научных исследованиях. Примером промышленного применения является контроль качества и определение параметров самых разнообразных систем: определение фазового состава поликристаллических материалов, нахождение плотностей и шероховатостей защитных поверхностей, определение остаточных напряжений, контроль параметров решетки и толщин нанослоев в полупроводниковых гетероструктурах, и ряд других. Во всех упомянутых сферах РД решает задачи, не доступные ни оптическим, в силу большой длины волны по сравнению с исследуемыми объектами и малой проникающей способностью, ни электронным, в силу необходимости быстрого и неразрушающего контроля больших объемов материала, методам.

Однако, в отличие от, например, микроскопии, данные РД содержат информацию об изучаемом объекте в опосредованном, косвенном, виде, требующем интерпретации на основе теоретических моделей о структуре вещества и взаимодействия РИ с ним. В этой связи теоретические методы расчета распределения интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения играют ключевую роль для реализации упомянутых выше техник, основанных на РД. Наличие отлаженных эффективных алгоритмов

обработки данных РД, соответствующего программного обеспечения, в ряде случаев оказывается не менее важным условием для успешного функционирования техник, использующих РД, чем уровень используемого экспериментального оборудования.

Быстрый темп развития знаний о материалах, освоение все новых кристаллических структур, приводят к существенному расширению области использования методов РД. Соответственно, нуждаются в постоянной доработке и расширении и теоретические методы для обработки данных РД. Однако нередко встречаются случаи, когда данные РД от нового материала, обладающего качественными особенностями, обрабатываются на основе представлений, выработанных для других ранее использованных материалов, что приводит к неверным выводам.

Современные высокоинтенсивные рентгеновские трубки, многоканальные одно- и двумерные детекторы позволяют собирать большие объемы данных РД, которые несут в себе разнообразную ценную информацию о структуре исследуемого вещества. Однако в ряде случаев из-за отсутствия соответствующих методик обработки данных извлекается лишь малая часть информации. В данной связи возникает необходимость разработки новых методик, оперирующих со всем многомерным массивом данных, и позволяющих реализовывать те возможности, которые дает новое экспериментальное оборудование.

В данной диссертационной работе проводится обобщение и развитие методов РД для методик, появление которых есть следствие усовершенствования измерительной аппаратуры, и для объектов, которые в последнее время находят все большее практическое применение и требуют эффективных способов определения их характеристик.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с крупными научными программами (проектами) и темами

Научное исследование, выполненное в настоящей диссертационной работе, непосредственно связано с тематикой проблем, разрабатываемых на кафедре теоретической физики и астрофизики Белорусского государственного университета, в том числе в рамках Задания 04 «Разработка и применение новых эффективных методов теоретического описания квантовых систем» ГПФИ «Поля и частицы» (№ гос. регистрации 20063502), а также грантов Белорусского государственного университета для студентов, магистрантов и аспирантов по темам «Операторный метод непертурбативного описания взаимодействия излучения с периодическими структурами» (2009), «Когерентные эффекты при описании взаимодействия излучения с квантовыми объектами и кристаллическими структурами» (2010). Значительная часть поставленных задач была мотивирована сотрудничеством с компанией Bruker AXS в рамках х/договора для разработки программного обеспечения для дифрактометра Bruker D8.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является разработка методов теоретического анализа профилей рентгеновской дифракции на частично-релаксированных и напряженных кристаллических структурах.

Для достижения намеченной цели были решены следующие основные задачи:

1. Построено дисперсионное уравнение динамической теории дифракции в ковариантной форме и найдено его решение, позволяющее единым образом описывать дифракционный профиль, содержащий несколько Брэгговских пиков, и проведено обобщение матричного метода для данных условий.
2. Проведено обобщение динамической теории дифракции на случай частично-релаксированных структур, позволяющее осуществлять корректный расчет карт обратного пространства.
3. Развита кинематическая теория дифракции для кристаллических структур, содержащих непрерывные распределения дислокаций несоответствия, и на ее основе разработан метод определения

глубинных профилей концентрации и степени релаксации указанных структур.

4. Найдено выражение для вектор-параметра Федорова при переходах между системами координат, используемых в рентгеновском анализе остаточных напряжений, построены ориентационные функции распределения в случае текстур, описываемых аксиальными или сферическими компонентами, и на этой основе получены аналитические формулы для рентгеновских факторов напряжения для образцов, имеющих текстуру указанного типа.

Объектом исследования являются данные рентгеновской дифракции от неоднородных и напряженных кристаллических и поликристаллических структур. Предмет исследования – описание и моделирование профилей дифракции рентгеновского излучения с целью получения информации о неидеальных кристаллических и поликристаллических структурах. Выбор объекта исследования обусловлен широким применением методов рентгеновской дифрактометрии для исследования свойств неоднородных и напряженных кристаллических и поликристаллических структур и необходимостью разработки корректной модели для описания профилей рассеяния рентгеновского излучения при взаимодействии с данными структурами с целью получения информации о них.

Положения, выносимые на защиту

1. Метод расчета широкоугольных профилей рентгеновской дифракции с точностью до второго порядка по рентгеновской поляризуемости, основанный на ковариантной форме представления дисперсионного уравнения и его решений, а также на использовании матричного метода решения граничной задачи.
2. Метод расчета карт обратного пространства на основе динамической теории дифракции в случае дифракции рентгеновского излучения на частично релаксированных структурах.
3. Метод определения глубинных профилей концентрации и релаксации для гетероэпитаксиальных твердых кристаллических растворов с непрерывно меняющейся концентрацией компонент на основе карт обратного пространства, полученных при помощи дифрактометрии высокого разрешения.

4. Аналитические выражения для рентгеновских факторов напряжений поликристаллических образцов, обладающих текстурой, описываемой посредством сферических/аксиальных компонент.

Личный вклад соискателя

Большинство опубликованных работ, а также интерпретация полученных результатов выполнена совместно с научным руководителем, доктором физико-математических наук, профессором И.Д. Феранчуком, который определял основные цели и формулировал приоритетные задачи исследования. В работах, выполненных с другими соавторами (А.П. Ульяненьковым, Т.А. Ульяненьковой (Алексеевой), Т. Баумбахом, Х. Гуеральтом, Ф. Ренальди, С. Менцель, К. Саито, А. Жиликом, М. Мироновым, А. Добби, Д.Р. Ледли, В.М. Каганером) аналитические расчеты, разработка вычислительных алгоритмов и проведение численных экспериментов выполнены лично соискателем.

Апробация результатов диссертации

Результаты, представленные в настоящей диссертации, докладывались на следующих конференциях: «9th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging XTOP 2008» (Линц, Австрия, 2008), «57th Denver X-ray Conference» (Денвер, США, 2008), «58th Denver X-ray Conference» (Денвер, США, 2009), «Актуальные проблемы физики твердого тела» (Минск, 2009), «10th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging XTOP 2010» (Варвик, Англия, 2010), «59th Denver X-ray Conference» (Денвер, США, 2010), «8-th European Conference on Residual Stress» (Рива-дель-Гарда, Италия, 2010), «60th Denver X-ray Conference» (Денвер, США, 2011).

Опубликованность результатов диссертации

Результаты диссертации опубликованы в 13 научных работах, из них 9 в рецензируемых изданиях, включенных в перечень ВАК РФ [1–А – 9–А], 4 – в сборниках тезисов докладов конференций. Общий объем опубликованных работ – 6 авторских листов в изданиях, включенных в перечень ВАК РФ, 0,2 авторских листа – в других изданиях.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из перечня условных обозначений, введения, общей характеристики работы, четырех глав, заключения, библиографического списка, включающего 119 наименований. Полный объем диссертации составляет 107 страниц. В диссертации представлены 18 иллюстраций.

В **Главе 1** рассматриваются теоретические основы процесса дифракции рентгеновского излучения на кристаллах, а также применение рентгеновских методов в исследовании различных кристаллических структур.

В § 1.1 вводятся основные понятия кинематической и динамической теорий дифракции РИ на кристаллических структурах. Для этой цели рассматриваются уравнения Максвелла с учетом пространственной периодичности кристалла. Поиск решения в виде плоских волн закономерным образом приводит к возникновению основных понятий динамической теории дифракции, таких как условие Брэгга, двухволновое приближение, эффект Бормана и прочих. Введение длины экстинкции позволяет определить области применимости кинематического и динамического подхода к дифракции РИ.

В § 1.2 рассматриваются особенности дифракции РИ на частично-релаксированных структурах. Показывается, что различие кристаллических периодов в плоскости раздела слоев приводит к возникновению, в общем случае, дополнительных гармоник волновых полей. Данная задача выходит за рамки традиционно используемых вариантов динамической теории дифракции РИ и требует их доработки.

§ 1.3 посвящен особенностям дифракции РИ на гетероэпитаксиальных структурах с непрерывно меняющимися параметрами. На примере виртуальных субстратов обосновывается актуальность исследования данных структур, и демонстрируются преимущества использования методов рентгеновской дифрактометрии для их неразрушающего контроля. Обсуждается структура наиболее существенных для дифракции РИ дефектов кристаллической решетки (дислокаций несоответствия). Приводится краткий обзор работ, посвященных дифракции РИ на кристаллах с дислокациями, и обсуждается вопрос восстановления зависимости свойств гетероэпитаксиальных структур с непрерывно меняющимися параметрами от глубины по распределению интенсивности дифрагированного РИ.

В § 1.4. описываются основы рентгеновского анализа остаточных напряжений поликристаллических материалов. Приводятся основные соотношения, используемые для нахождения остаточных напряжений рентгеновским методом. На их основе показывается, что при наличии в поликристаллическом материале текстуры анализ данных на основе

рентгеновских упругих констант оказывается в общем случае некорректным, и необходимо использование рентгеновских факторов напряжения.

В главе 2 разрабатывается вариант динамической теории дифракции РИ, который позволяет находить профили распределения дифрагированного РИ в широком диапазоне углов, включающем несколько Брэгговских пиков (широкоугловые профили).

В § 2.1 рассматриваются существующие подходы к расчету широкоугловых профилей. Обосновывается необходимость поиска единых выражений для расчета профилей дифракции РИ, справедливых как в окрестности Брэгговских пиков, так и в промежутке между ними.

В § 2.2 основные уравнения динамической теории дифракции формулируются в ковариантном векторном виде. На основе полученных соотношений в ковариантном виде записывается дисперсионное уравнение. С точностью до второго порядка по рентгеновской поляризуемости кристалла находятся решения дисперсионного уравнения, справедливые при произвольном отклонении от угла Брэгга. Решения имеют вид

$$u_{i\pm,s} \approx \psi_{h_i} \pm u_{h_i} + x_{i\pm,s}, \quad (1)$$

где искомая величина $u = K_z/k_0$ (ось Z направлена по нормали к поверхности) представляется в виде суммы корректной асимптоты $\psi_{h_i} \pm u_{h_i}$, справедливой вдали от условия Брэгга (здесь $\psi_{h_i} = \mathbf{h}_i \mathbf{Z} / k_0$, \mathbf{h}_i - вектор обратной решетки, $\gamma_{h_i}^2 = 1 - (\mathbf{K} + \mathbf{h}_i)_\perp^2 / k_0^2$, $u_{h_i} = \sqrt{\gamma_{h_i}^2 + \tilde{\chi}_0}$) и поправок, описывающих дифракцию вблизи условия Брэгга

$$x_{h\pm,s} = \frac{(\pm u_{h_i}) \tilde{\alpha}_h^\pm + \text{sgn}[\pm u_{h_i} \tilde{\alpha}_h^\pm] \sqrt{u_{h_i}^2 [\tilde{\alpha}_h^\pm]^2 + Q_s^{(h)} [\pm 4u_{h_i} (-\psi_{h_i} \pm u_{h_i}) + \tilde{\alpha}_h^\pm]}}{\pm 4u_{h_i} (-\psi_{h_i} \pm u_{h_i}) + \tilde{\alpha}_h^\pm}, \quad (2)$$

где $\tilde{\alpha}_h^\pm = (u_{h_i} \mp \psi_{h_i})^2 - u_0^2$ - отклонение от условия Брэгга, $Q_s^h \equiv \tilde{\chi}_h \tilde{\chi}_{-h} [C_s^h]^2$, здесь $C_\sigma^h = K^2 K_h^2 / k_0^2$, $C_\pi^h = (\mathbf{K} \mathbf{K}_h)_\perp^2 / k_0^2$.

В § 2.3 построен матричный метод решения граничной задачи, обеспечивающий точность, соответствующую квадрату рентгеновской

поляризуемости кристалла. На его основе найдено явное выражение для распределения интенсивности дифрагированного РИ.

В § 2.4 сравниваются результаты расчета по предложенному методу с другими подходами к расчету широкоугловых профилей. Проводится сравнение результатов расчетов с измеренным профилем от структуры $YBa_2Cu_3O_7(22\text{нм})/SrTiO_3$ включающим 16 отражений. Предложенный метод удовлетворительно описывает экспериментальные данные во всем угловом диапазоне.

В главе 3 рассматривается дифракция РИ на частично релаксированных структурах и на кристаллических двухкомпонентных твердых растворах с градиентом концентрации.

В § 3.1 изучается процесс последовательной дифракции волн на двухслойной частично-релаксированной структуре, приводящий к возникновению дополнительных гармоник поля, обусловленных несоответствием латеральных кристаллических периодов. Проводится расчет амплитуд данных гармоник и показывается, что в рамках традиционно используемой геометрии эксперимента вклад гармоник в суммарную интенсивность мал (рисунок 1).

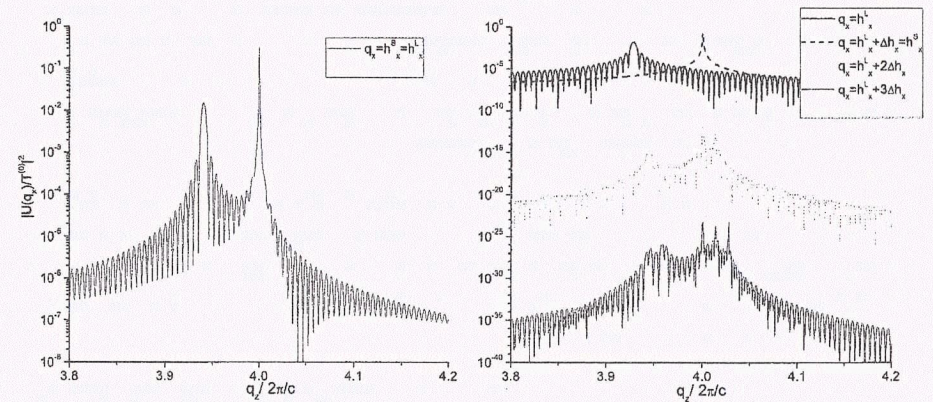


Рисунок 1 – Профиль интенсивности для псевдоморфного слоя и профили последовательных гармоник для частично релаксированного слоя.

В § 3.2 рассматривается дифракция на многослойных частично-релаксированных структурах. На основе выводов, сделанных в предыдущем параграфе, в пренебрежении высшими гармониками находятся амплитуды волн, возникших в результате дифракции на каждом слое и предлагается

алгоритм расчета двумерного распределения дифрагированного излучения (карт обратного пространства). Сравнение экспериментально измеренных карт обратного пространства с результатами расчетов показывает, что предложенный алгоритм позволяет учитывать особенности распределения дифрагированной интенсивности РИ от частично-релаксированных структур.

§ 3.3 посвящен кинематической теории дифракции РИ на кристаллических двухкомпонентных твердых растворах с градиентом концентрации.

Вводится микроскопическая модель процесса релаксации, которая связывает степень релаксации с плотностью дислокаций несоответствия. Рассматриваются поля смещения, вызванные пластической деформацией, которые разделяются на среднюю и флуктуирующую части. Выражение для интенсивности дифрагированного РИ представляется как Фурье-образ от корреляционной функции фазы атомных смещений, вызванных флуктуирующими деформациями.

Проводится расчет данной корреляционной функции для случая непрерывно распределенных по глубине некоррелированных дислокаций несоответствия. Показывается, что традиционно используемые приближения, приводящие к гауссовому виду корреляционной функции, оказываются в силу специфики данной системы неприменимы, и приводят к фиктивной расходимости. Предлагается полуаналитический способ расчета корреляционной функции, свободный от указанной расходимости и уменьшающий объем численных расчетов.

Анализируется возможность определения параметров градированных структур на основе рентгеновских карт обратного пространства. Рассматриваются различные приближения в расчете корреляционной функции и их использование для оценки параметров исследуемой структуры по рентгеновским данным.

В § 3.4 разработанная в предыдущем параграфе теория применяется для определения зависимости концентрации компоненты твердого раствора и степени релаксации от глубины по рентгеновским картам обратного пространства (рисунок 2). Исходя из симметричной и асимметричной карты проводится поправка на тилт. При расчете карт также используется аппаратная функция, определенная из экспериментальных данных. Предлагается процедура фитирования экспериментальных карт, основанная на предварительной оценке и последовательных приближениях. Найденные таким образом профили концентрации оказываются в согласии с

номинальными профилями, приблизительно известными из условий роста. Найденные профили плотности дислокаций несоответствия сравниваются с оценками по

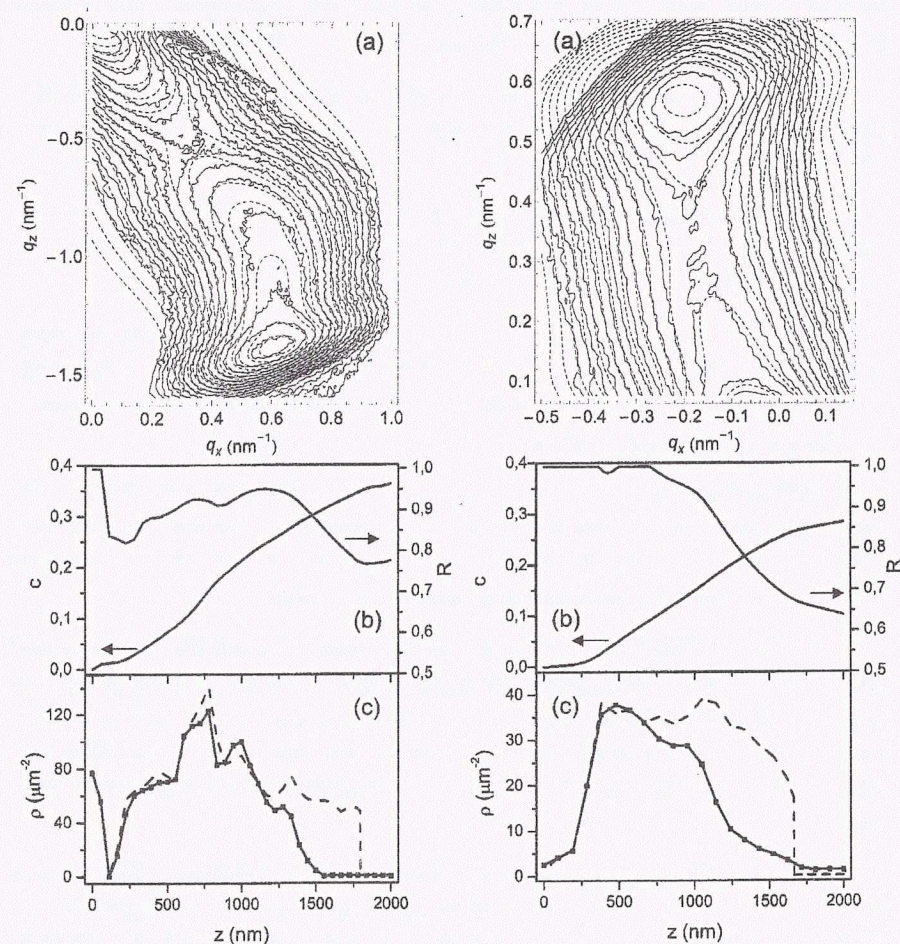


Рисунок 2 – Результаты фитирования карт обратного пространства для образца $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ толщиной 2 мкм (слева) и $2\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaAs}(001)$ (справа); (а) контурные графики экспериментально измеренной (сплошные линии) и расчетной фитированной (штриховые линии) карт обратного пространства для отражения 224^- . Шаг между контурами $10^{0.1}$. (б) Профили концентрации и релаксации. (с)

Результаты фитирования плотности дислокаций несоответствия, черные квадратные значки обозначают точки $\rho(z)$ посредством которых задавалась

фигурируемая функция. Пунктирная линия соответствует плотности дислокаций несоответствия по модели Терсофа.

модели Терсофа. Обсуждаются возможные причины отклонений рассчитанных распределений от экспериментальных данных.

В Главе 4 разрабатывается ковариантный метод расчета рентгеновских факторов напряжения при наличии текстуры. Для описания используемых систем отсчета активно используется вектор-параметр группы вращений.

В § 4.1 вводятся системы отсчета, используемые в рентгеновском анализе остаточных напряжений: система отсчета образца, кристаллографическая и лабораторные системы отсчета.

В § 4.2 переходы между введенными выше системами отсчета описываются на основе векторной параметризации группы вращений. Находятся выражения для вектор-параметра, описывающего переходы между указанными системами отсчета.

Рассматриваются разложения тензора упругости кристалла по неприводимым представлениям группы вращений. Данное разложение позволяет явным образом учитывать свойства симметрии кристалла, что упрощает анализ рентгеновских факторов напряжения.

В § 4.3 текстура поликристаллического материала, задаваемая посредством ориентационной функции распределения, описывается на основе векторной параметризации группы вращений. Находятся явные выражения для ориентационной функции распределения как функции вектор-параметра для случая текстур, описываемых с помощью сферических или аксиальных компонент.

Выражение для определения рентгеновских факторов напряжения записывается с учетом разложения тензора упругих постоянных по неприводимым представлениям группы вращений, преобразования тензора упругих постоянных в базисе неприводимых представлений, ориентационной функции распределения как функции вектор-параметра. Анализ полученного выражения показывает, что для случая текстур, описываемых с помощью сферических или аксиальных компонент, параметризация на основе вектор-параметра позволяет вычислить возникающие интегралы аналитически с использованием модифицированных функций Бесселя. Окончательное аналитическое выражение для рентгеновских факторов напряжения в присутствии аксиальной/сферической текстуры, имеет вид:

$$F_{ij}(\mathbf{h}, \mathbf{y}) = \left(\sum_{s=1,2} \sigma_{33kl}^{(s)} \sigma_{ij'k'l'}^{(s)} a_{ij'k'l'}^c + \sum_{d=1}^4 \delta_{33kl}^{(d)m} \frac{I_m(S\omega) e^{im\phi}}{I_0(S\omega)} \delta_{mn} T_{m'n}^{(2)} \left(\frac{\mathbf{h} \times \mathbf{e}_z}{1 + \mathbf{h} \cdot \mathbf{e}_z} \right) \delta_{ij'k'l'}^{(d)n} a_{ij'k'l'}^c + \right. \\ \left. \eta_{33kl}^m \frac{I_m(S\omega) e^{im\phi}}{I_0(S\omega)} \delta_{mn} T_{m'n}^{(4)} \left(\frac{\mathbf{h} \times \mathbf{e}_z}{1 + \mathbf{h} \cdot \mathbf{e}_z} \right) \eta_{ij'k'l'}^n a_{ij'k'l'}^c \right) T_{ki}^{LS} T_{lj}^{LS} \quad (3)$$

где $F_{ij}(\mathbf{h}, \mathbf{y})$ – искомые компоненты рентгеновских факторов напряжения для дифракционного отражения от системы плоскостей с вектором Брэгга \mathbf{h} при измерении в направлении \mathbf{y} , $a_{ij'k'l'}^c$ – компоненты тензора упругих постоянных, заданные в кристаллографической системе координат, $\sigma_{ij'k'l'}^{(s)}$, $\delta_{ij'k'l'}^{(d)n}$, $\eta_{ij'k'l'}^n$ – тензоры 4-го ранга, реализующие неприводимое представление группы вращений с весами 0, 2 и 4; $I_m(S)$ – модифицированная функция Бесселя порядка m , S, ω, ϕ – параметры, однозначно определяемые видом текстуры, заданной посредством сферических/аксиальных компонент, $T_{m'n}^{(l)}$ – матрицы углового момента веса l , T_{ki}^{LS} – матрица перехода от системы отсчета образца в лабораторную систему отсчета, задаваемая вектором Федорова $\mathbf{c} = \frac{\mathbf{y} \times \mathbf{e}_z}{1 + \mathbf{y} \cdot \mathbf{e}_z}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

В диссертации построен ковариантный вариант динамической теории дифракции для описания профилей рентгеновского излучения, захватывающего несколько Брэгговских пиков. Проведено обобщение динамической теории дифракции на случай частично-релаксированных структур. Описана дифракция рентгеновского излучения на гетероэпитаксиальных структурах и предложен способ определения зависимости концентрации и степени релаксации от глубины на основе данных рентгеновской дифрактометрии. Рассмотрен вопрос определения остаточных напряжений в поликристаллах, обладающих текстурой, и описан способ аналитического вычисления необходимых для данного метода величин – рентгеновских факторов напряжения.

В диссертации получены следующие новые научные результаты:

1. Ковариантное представление дисперсионного уравнения динамической теории дифракции для случая нескольких Брэгговских пиков и его решение, справедливое во всем используемом в измерении диапазоне углов, а также матричная запись граничных условий, обеспечивающая точность до второго порядка по рентгеновской поляризуемости [2–А], [4–А], [11–А].
2. Модификация динамической теории дифракции, позволяющая рассчитывать карты обратного пространства от частично-релаксированных структур [1–А], [5–А], [8–А], [10–А].
3. Теория дифракции рентгеновского излучения на кристаллических структурах, имеющих непрерывное распределение дислокаций несоответствия [7–А], [9–А], [12–А], [13–А].
4. Эффективный метод определения зависимости концентрации компонент твердого кристаллического раствора и степени его релаксации от глубины на основе данных рентгеновской дифрактометрии [7–А], [9–А].
5. Определение вектор-параметра группы вращений для преобразований, используемых в рентгеновском анализе

остаточных напряжений и приведение их к ковариантному виду, явно отделяющему изотропные и анизотропные свойства системы [3–А], [6–А].

6. Параметризация ориентационной функции распределения для случая текстур на основе вектор-параметра группы вращений и полученные на ее основе аналитические выражения для рентгеновских факторов напряжения для текстур, описываемых на основе аксиальных и сферических компонент [3–А], [6–А].

Рекомендации по практическому использованию результатов

Методы рентгеновской дифрактометрии, составившие предмет данной диссертации, существенны для применений как в научных исследованиях, так и в промышленном производстве.

Теория описания широкоугольных профилей имеет прикладное значение для анализа дифракционных профилей при исследовании поверхности кристаллов, которые ведутся в БГУ, в НПО материаловедения НАНБ, в Институте твердотельной электроники им. Пауля Друде (Берлин). Полученное решение дисперсионного уравнения, остающееся верным при больших отклонениях от угла Брэгга, снимает ограничения на малые отклонения от угла Брэгга без увеличения вычислительных затрат и может быть использовано в программных пакетах, применяемых для анализа дифракционных профилей, таких как Leptos, GlobalFit, X'Pert.

Модификация динамической теории дифракции для частично-релаксированных структур, находящихся все большее применение, позволит анализировать рентгеновские данные от них корректным образом и снимает существовавшие ранее ограничения на малое значение латерального мисматча. Она может быть использована в исследованиях, ведущихся в БГУ, в НПО материаловедения НАНБ, в Институте материаловедения РАН.

Способ определения толщинных профилей свойств гетероэпитаксиальных структур с непрерывным изменением параметров позволит осуществлять неразрушающий бесконтактный контроль качества виртуальных субстратов, находящихся широкое применение в подупроводниковых оптических и электрических приборах. Данные объекты изучаются в БГУ, в НПО материаловедения НАНБ, в Институте материаловедения РАН, в Университете г. Варвик (Англия).

Аналитические выражения и ковариантный подход к расчету рентгеновских факторов напряжения позволит проводить корректный рентгеновский анализ остаточных напряжений с учетом текстуры без существенного увеличения вычислительных затрат. Данные результаты могут быть использованы в БГУ, в НПО материаловедения НАНБ, в Институте материаловедения РАН, Институте исследования металлов им. Макса Планка (Штутгарт), Университет г. Тренто (Италия).

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи:

- 1-А. Бенедиктович, А.И. Динамическая теория дифракции рентгеновского излучения на частично релаксированных структурах / А.И. Бенедиктович, И.Д. Феранчук // Вестник Фонда фундаментальных исследований (раздел «Научные публикации»). – 2009. – №. 4 – С. 65–79.
- 2-А. Бенедиктович, А.И. Ковариантный подход в многоволновой динамической теории дифракции рентгеновских лучей / А.И. Бенедиктович, И.Д. Феранчук // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. – 2008. – №. 4 – С. 82–87.
- 3-А. Бенедиктович, А.И. Применение векторной параметризации группы $SO(3)$ для рентгеновского анализа остаточных напряжений / А.И. Бенедиктович, И.Д. Феранчук // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. – 2011. – №. 2 – С. 92–96.
- 4-А. Alexeeva, T.A. Long-range scans and many-beam effects for high-resolution x-ray diffraction from multilayered structures: Experiment and theory / T.A. Alexeeva, A.I. Benediktovich, I.D. Feranchuk, T. Baumbach, A. Ulyanekov // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 77. – Art. 174114. – P. 1–13.
- 5-А. Benediktovich, A. A dynamical theory for the X-ray diffraction from the partially relaxed layers / A. Benediktovich, I. Feranchuk // Phys. Status Solidi. A. – 2009. – Vol. A206, № 8. – P. 1695–1698.
- 6-А. Benediktovich, A. Calculation of X-ray stress factors using vector parameterization and irreducible representations for $SO(3)$ group / A. Benediktovich, I. Feranchuk, A. Ulyanekov // Material Science Forum. – 2011. – Vol. 681. – P. 387–392.
- 7-А. Benediktovitch, A. Concentration and relaxation depth profiles of $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ and $GaAs_{1-x}P_x/GaAs$ graded epitaxial films studied by x-ray diffraction / A. Benediktovitch, A. Ulyanekov, F. Rinaldi, K. Saito, V.M. Kaganer // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 84. – Art. 035302. – P. 1–7.

- 8-A. Benediktovich, A. X-ray dynamical diffraction from partly relaxed epitaxial structures / A. Benediktovich, I.D. Feranchuk, A. Ulyanenko // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 80. – Art. 235315. – P. 1–9.
- 9-A. Zhylik, A. High-resolution x-ray diffraction investigation of relaxation and dislocations in SiGe layers grown on (001), (011), and (111) Si substrates / A. Zhylik, A. Benediktovich, A. Ulyanenko, H. Guerault, M. Myronov, A. Dobbie, D. R. Leadley, T. Ulyanenkova // Journal of Applied Physics. – 2011. – Vol. 109. – Art. 123714. – P.1–12.

Тезисы докладов:

- 10-A. Benediktovich, A. Dynamical x-ray diffraction from relaxed and partly relaxed layers: strain gradient effects / A. Benediktovich, I.D. Feranchuk // The 9th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging: Abstract booklet, Linz, September 15–19, 2008 / Linz (Austria), 2008. – P. 152.
- 11-A. Benediktovich, A. Many beam effects in wide-angle dynamical x-ray diffraction from multilayers / A. Benediktovich [et al] // The 9th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging: Abstract booklet, Linz, September 15-19, 2008 / Linz (Austria), 2008. – P. 145.
- 12-A. Lattice tilt, concentration and relaxation degree of partly relaxed InGaAs/GaAs structures / Benediktovich A. [et al] // The 10th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging: Abstract booklet, Warwick, September 20–23, 2010 / Warwick (UK), 2010. – P. 89.
- 13-A. Reciprocal space mapping of graded SiGe buffers grown on non-standard orientation Si substrates / Benediktovich A. [et al] // The 10th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging: Abstract booklet, Warwick, September 20–23, 2010 / Warwick (UK), 2010. – P. 93.

Бенедиктович

РЕЗЮМЕ

Бенедиктович Андрей Игоревич

**МЕТОДЫ РАСЧЕТА ПРОФИЛЕЙ ДИФРАКЦИИ
РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ И
НАПРЯЖЕННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ**

Ключевые слова: дифракция рентгеновского излучения, широкоугольные профили, частично-релаксированные структуры, карта обратного пространства, дислокации несоответствия, рентгеновский анализ остаточных напряжений.

Целью диссертационной работы является разработка ковариантных и равномерно-пригодных методов расчета и обработки данных рентгеновской дифракции от частично-релаксированных, градиентных неоднородных, напряженных текстурированных структур.

Объектом исследования являются данные рентгеновской дифракции от неоднородных и напряженных кристаллических и поликристаллических структур.

Предметом исследования является описание и моделирование профилей дифракции рентгеновского излучения с целью получения информации о неидеальных кристаллических и поликристаллических структурах.

Наиболее важными новыми научными результатами являются:

- метод расчета широкоугольных профилей рентгеновской дифракции основанный на ковариантной форме представления дисперсионного уравнения и его решений, а также на использовании матричного метода решения граничной задачи;
- метод расчета карт обратного пространства на основе динамической теории дифракции в случае дифракции рентгеновского излучения на частично релаксированных структурах;
- метод определения глубинных профилей концентрации и релаксации для гетероэпитаксиальных твердых кристаллических растворов с непрерывно меняющейся концентрацией компонент на основе карт обратного пространства, полученных при помощи дифрактометрии высокого разрешения;
- аналитические выражения для рентгеновских факторов напряжений поликристаллических образцов, обладающих текстурой, описываемой посредством сферических/аксиальных компонент.

РЭЗЮМЭ

Бенедзіковіч Андрэй Ігаравіч

МЕТАДЫ РАЗЛІКУ ПРОФІЛЯЎ ДЫФРАКЦЫІ РЭНТГЕНАЎСКАГА ВЫПРАМЕНЬВАННЯ Ў НЕАДНАРОДНЫХ І НАПРУЖАННЫХ КРЫСТАЛІЧНЫХ СТРУКТУРАХ

Ключавыя словы: дыфракцыя рэнтгенаўскага выпраменьвання, шырокавуглавыя профілі, часткова-рэлаксаваныя структуры, карта адваротнай прасторы, дыслакацыі неадпаведнасці, рэнтгенаўскі аналіз рэшткавых напружанняў.

Мэтай дысертацыйнай працы з'яўляецца разпрацоўка каварыянтных і раўнамерна-прыдатных метадаў разліку і апрацоўкі дадзеных рэнтгенаўскай дыфракцыі ад часткова-рэлаксаваных, градыентных неаднародных і напружаных тэкстураваных структур.

Аб'ектам даследавання з'яўляюцца дадзеныя рэнтгенаўскай дыфракцыі ад неаднародных і напружаных крысталічных і полікрысталічных структур.

Прадметам даследавання з'яўляюцца апісанне і мадэляванне профіляў дыфракцыі рэнтгенаўскага выпраменьвання з мэтай атрымання інфармацыі аб неідэальных крысталічных і полікрысталічных структурах.

Найбольш значнымі новымі навуковымі вынікамі з'яўляюцца:

- метады разліку шырокавуглавых профіляў дыфракцыі, аснованы на каварыянтнай форме прадстаўлення дысперсійнага раўнання і яго рашэнняў, а таксама на выкарыстанні матрычнага метада рашэння межавай задачы;
- метады разліку карт адваротнай прасторы на падставе дынамічнай тэорыі дыфракцыі ў выпадку дыфракцыі рэнтгенаўскага выпраменьвання на часткова-рэлаксаваных структурах;
- метады вызначэння глыбінных профіляў канцэнтрацыі і рэлаксацыі для гетэраэпітаксіяльных цвёрдых крысталічных раствораў, канцэнтрацыя кампанентаў якіх неперарывна мяняецца з глыбіней на падставе карт адваротнай прасторы, атрыманых пры дапамозе дыфрактаметрыі высокага распазнавання;
- аналітычныя выразы для рэнтгенаўскіх фактараў напружання полікрысталічных узораў, якія маюць тэкстуру зададзеную праз сферычныя/аксіяльныя кампаненты.

SUMMARY

Benediktovitch Andrei Igorevich

METHODS OF X-RAY PROFILE CALCULATIONS FOR DIFFRACTION ON NONUNIFORM AND STRAINED CRYSTALLINE STRUCTURES

Key words: X-ray diffraction, long-range scans, partly-relaxed structures, reciprocal space maps, misfit dislocations, x-ray residual stress analysis.

The main goal of the thesis is the development of covariant and uniformly-applicable methods for calculation and evaluation of x-ray diffraction data from partly-relaxed, compositionally graded and strained textured structures.

The object of the research is x-ray diffraction data from nonuniform and strained crystalline and polycrystalline structures.

The subject of the research is description and modeling of x-ray diffraction profiles aimed to get the information about nonideal crystalline and polycrystalline structures.

The most significant new scientific results are:

- long-range scan calculation method based on covariant presentation of dispersion equation and its solutions as well as matrix method for boundary problem;
- reciprocal space map calculation method based on dynamical x-ray diffraction theory for partly-relaxed structures;
- graded solution concentration and relaxation depth profile determination method based on high-resolution reciprocal space map analysis;
- analytical expressions for x-ray stress factors of polycrystalline samples possessing texture described by spherical/axial components.