

# F7030 Rentgenový rozptyl na tenkých vrstvách

O. Caha  
PřF MU

Prezentace k přednášce  
Numerické simulace  
Příklady experimentů  
Vybrané vztahy

# Sylabus

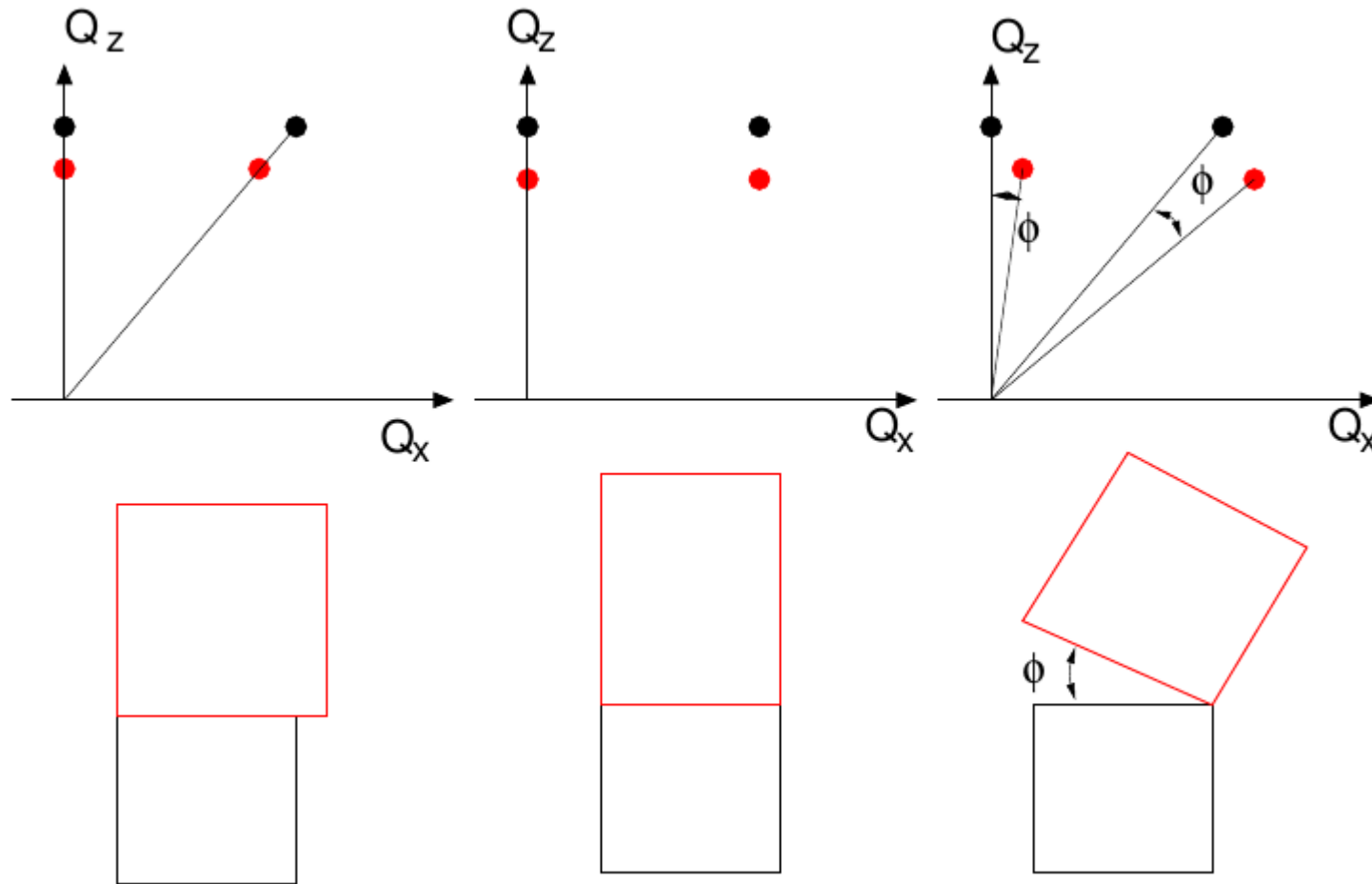
- **Elementární popis vlnového pole:** Rtg vlna ve vakuu; Greenova funkce volné částice, reprezentace rovinnými vlnami; Rozptyl vlnění, diferenciální účinný průřez; Směr vlny rozptýlené na tenké vrstvě nekonečných laterálních rozměrů; Klasifikace teorií rozptylu.
- **Kinematická teorie rozptylu na ideálních strukturách:** Rozptyl na atomu; Rozptyl na malém krystalu; Rozptyl na tenké vrstvě, rtg difrakce, rtg reflexe; Empirické započtení lomu a absorpce.
- **Kinematická rtg difrakce na porušených tenkých vrstvách:** Homogenní deformace, pseudomorfní a relaxované vrstvy; Periodické supermřížky; Náhodná deformace, koherentní a nekoherentní rozptyl; Laterální struktury; malouhlý rozptyl na nanostrukturách s krátkodosahovým a dalekodosahovým uspořádáním.
- **Dynamická teorie rozptylu:** Rovnice pro vlny v krystalu; Dispersní plochy; Okrajové podmínky na povrchu krystalu; Jednovlnová aproximace, rtg reflexe na volném povrchu a multivrstvách; Dvouvlňová aproximace, rtg difrakce na polonekonečném krystalu a vrstevnatém systému; Nekoplanární difrakce.
- **Semikinematická aproximace:** Semikinematická aproximace; malouhlý rozptyl na nanostrukturách na povrchu a uvnitř krystalu; difúzní rozptyl v okolí difrakce na poruchách uvnitř krystalu.
- **Rtg reflexe na drsných rozhraních:** Statistický popis drsnosti; Fraktálová drsnost; Samouspořádané struktury; Koherentní reflexe na drsných rozhraních; Difúzní rozptyl na drsných rozhraních.
- **Experimentální aspekty:** Zdroje rtg záření; Rtg difraktometr, rozlišovací funkce v recipročním prostoru; Rtg detektory.

**Literatura:** U. Pietsch, V. Holý, T. Baumbach, *High resolution x-ray scattering: from thin films to lateral nanostructures*, Springer 2004.

# Kinematická teorie difrakce

# Kinematicá teorie

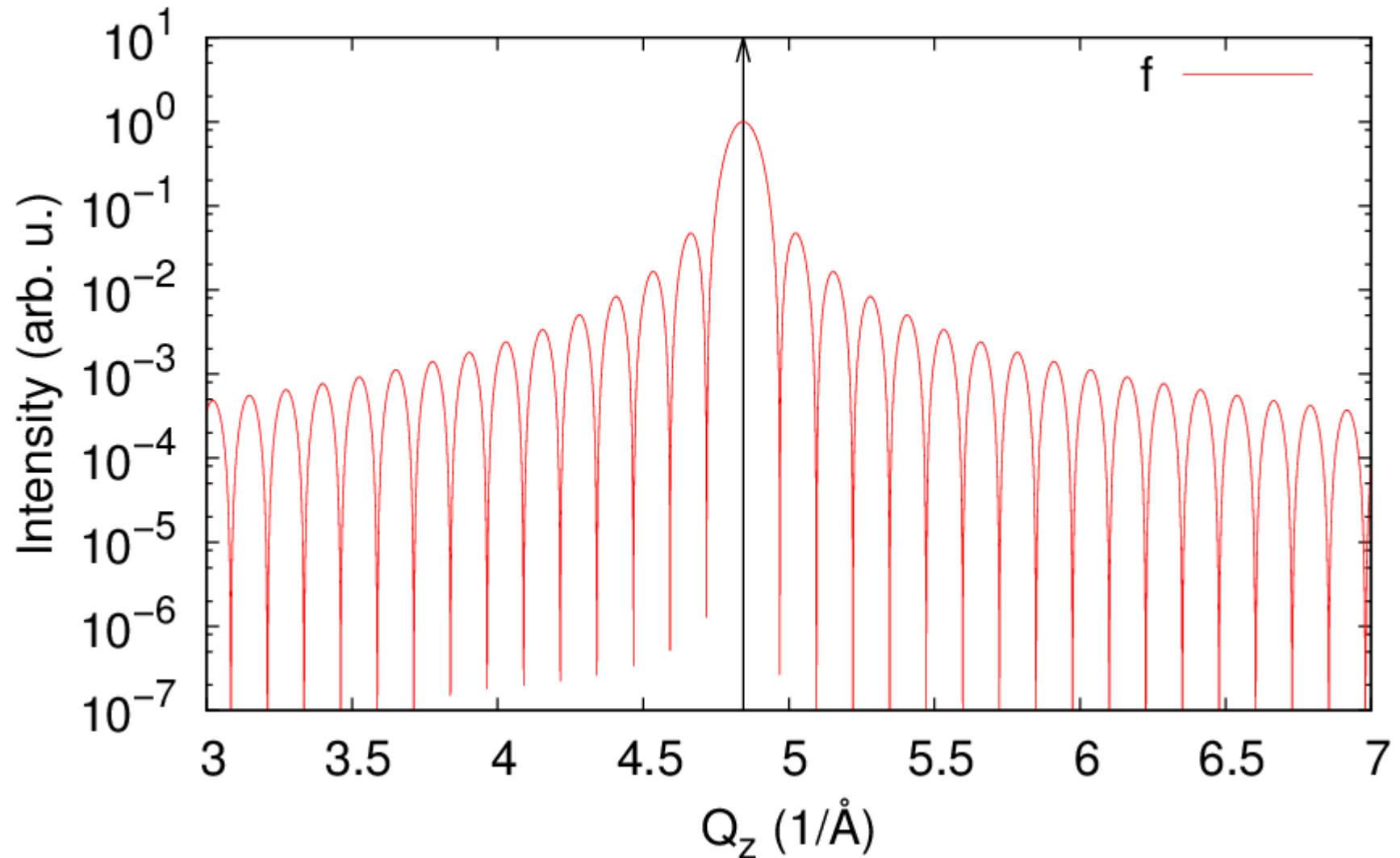
Polohy difrakčních maxim pro různé vzájemné polohy mřížky vrstvy a substrátu



# Kinematická teorie

Jednoduchá vrstva, šipka poloha  $2\pi/a$

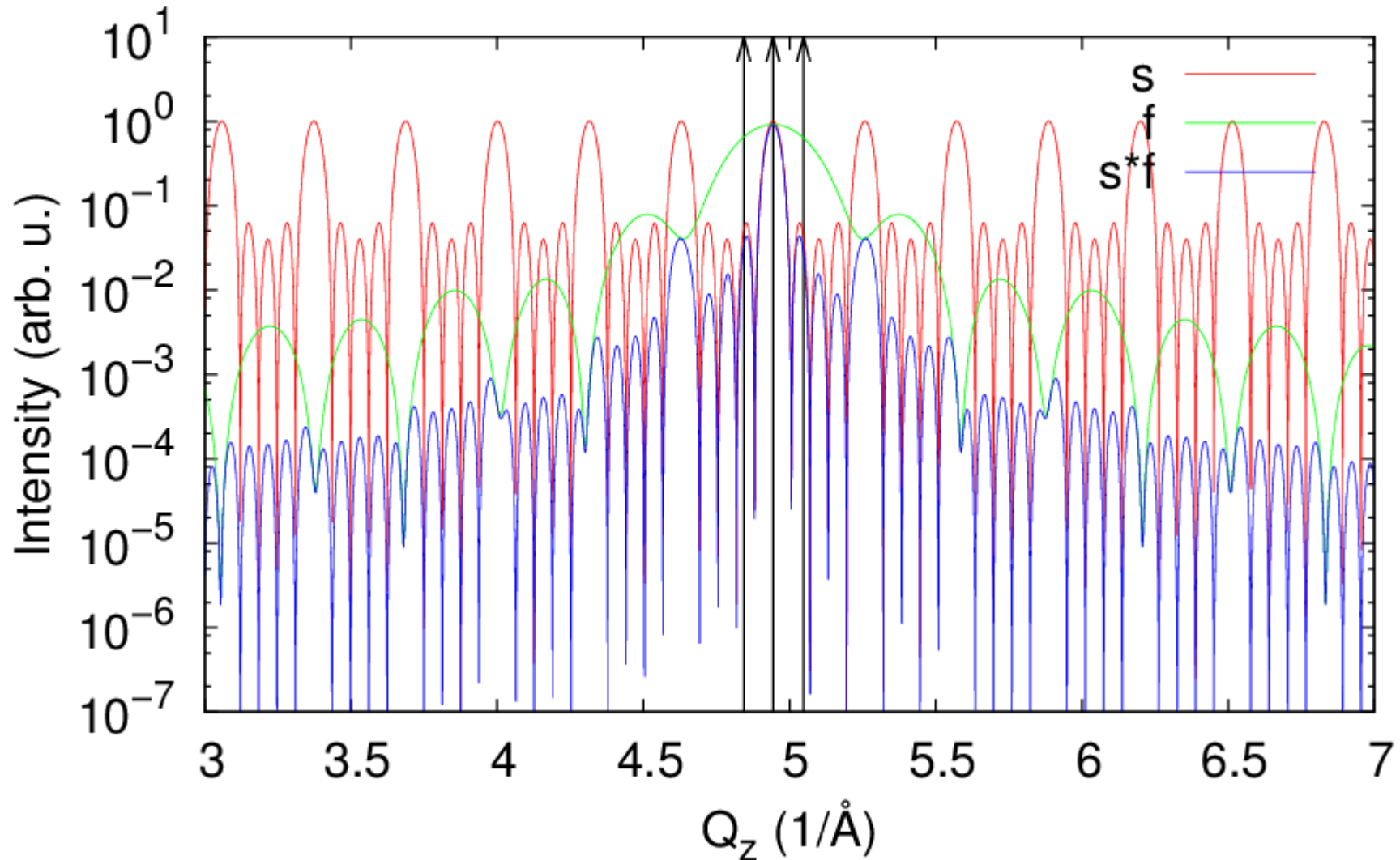
$$T_a = 50\text{\AA}, a_a = 5.189\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

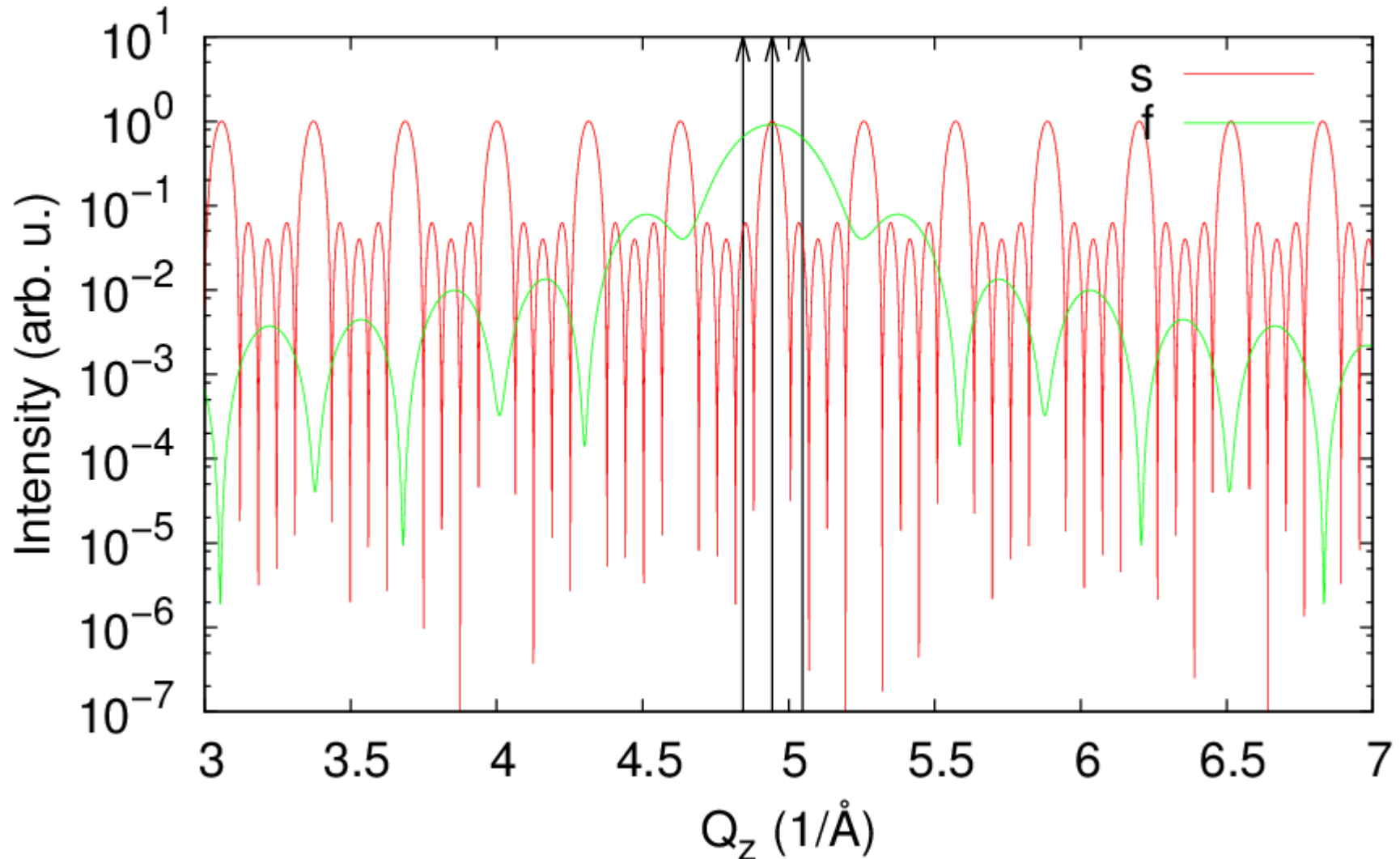
$$T_a=10\text{\AA}, T_b=10\text{\AA}, N=5, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

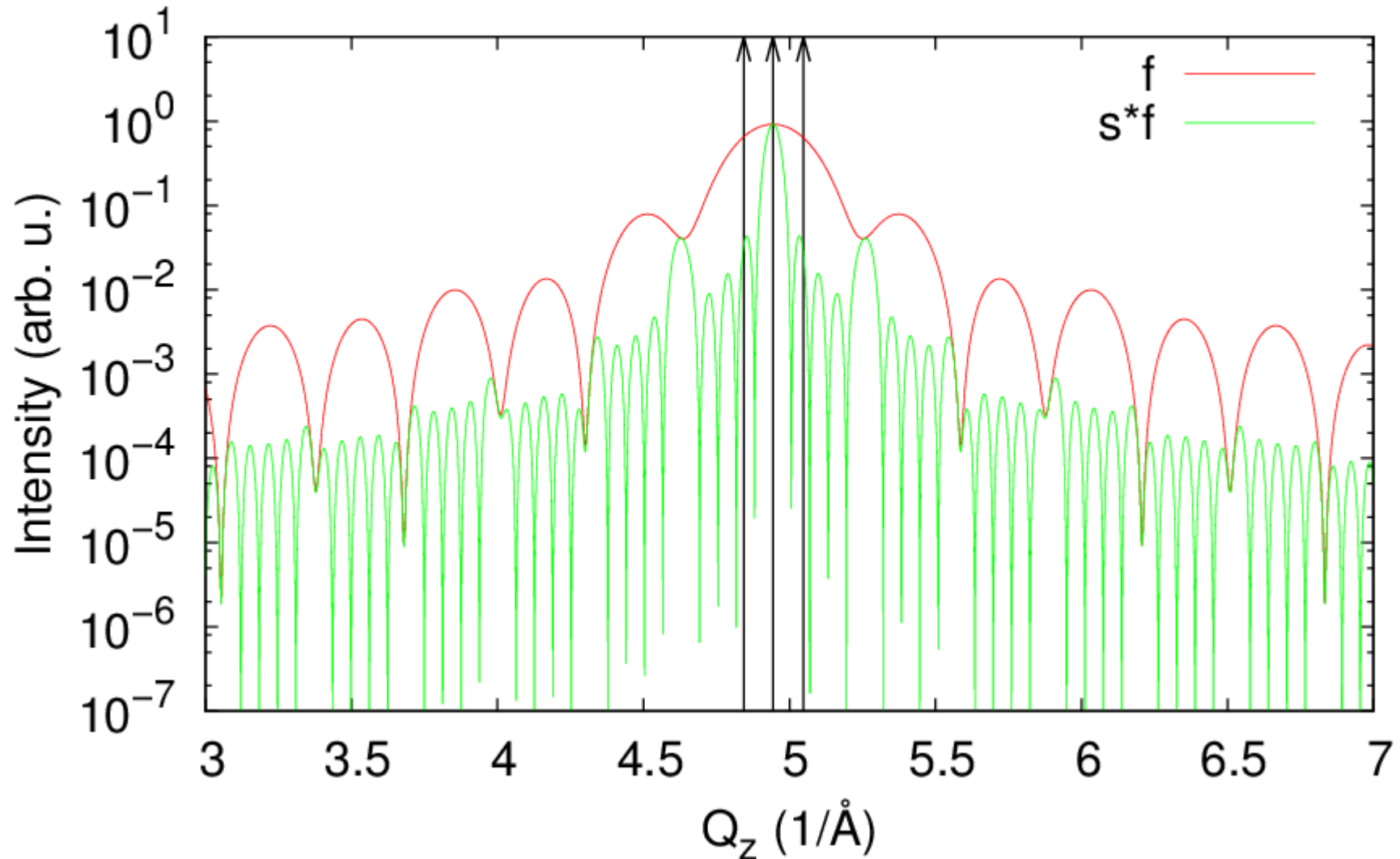
$$T_a=10\text{\AA}, T_b=10\text{\AA}, N=5, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

$$T_a=10\text{\AA}, T_b=10\text{\AA}, N=5, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$

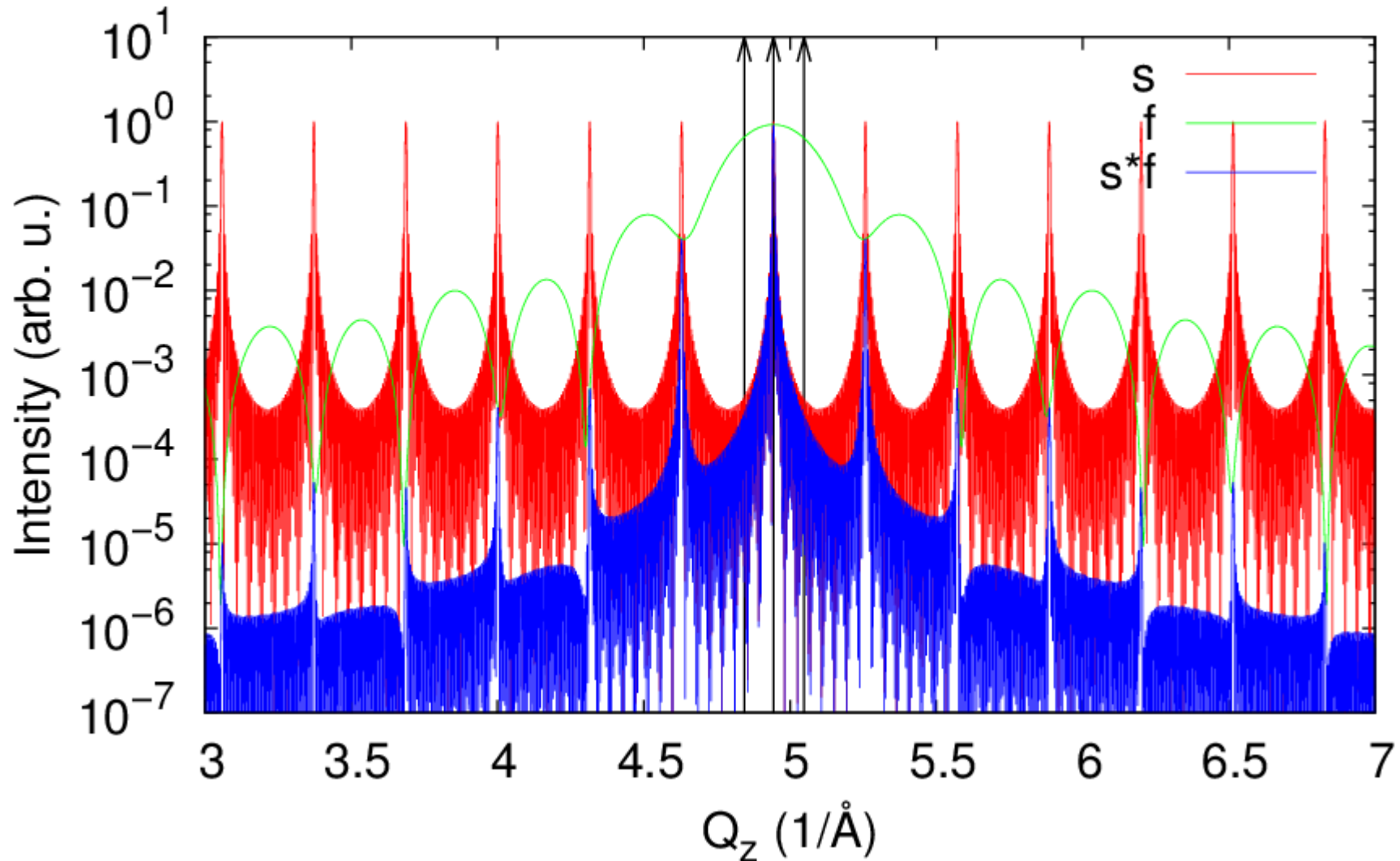




# Kinematická teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

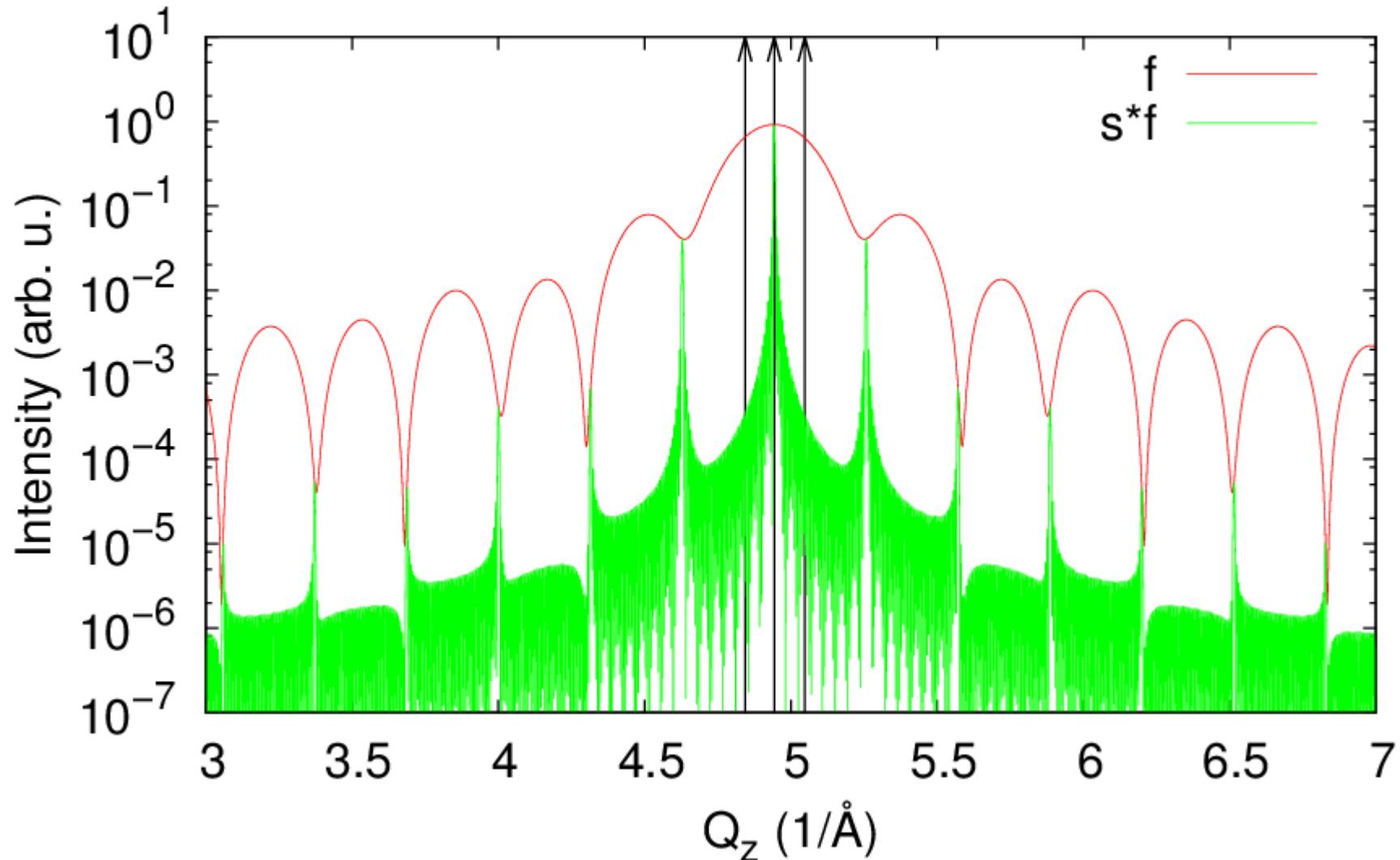
$$T_a=10\text{\AA}, T_b=10\text{\AA}, N=50, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

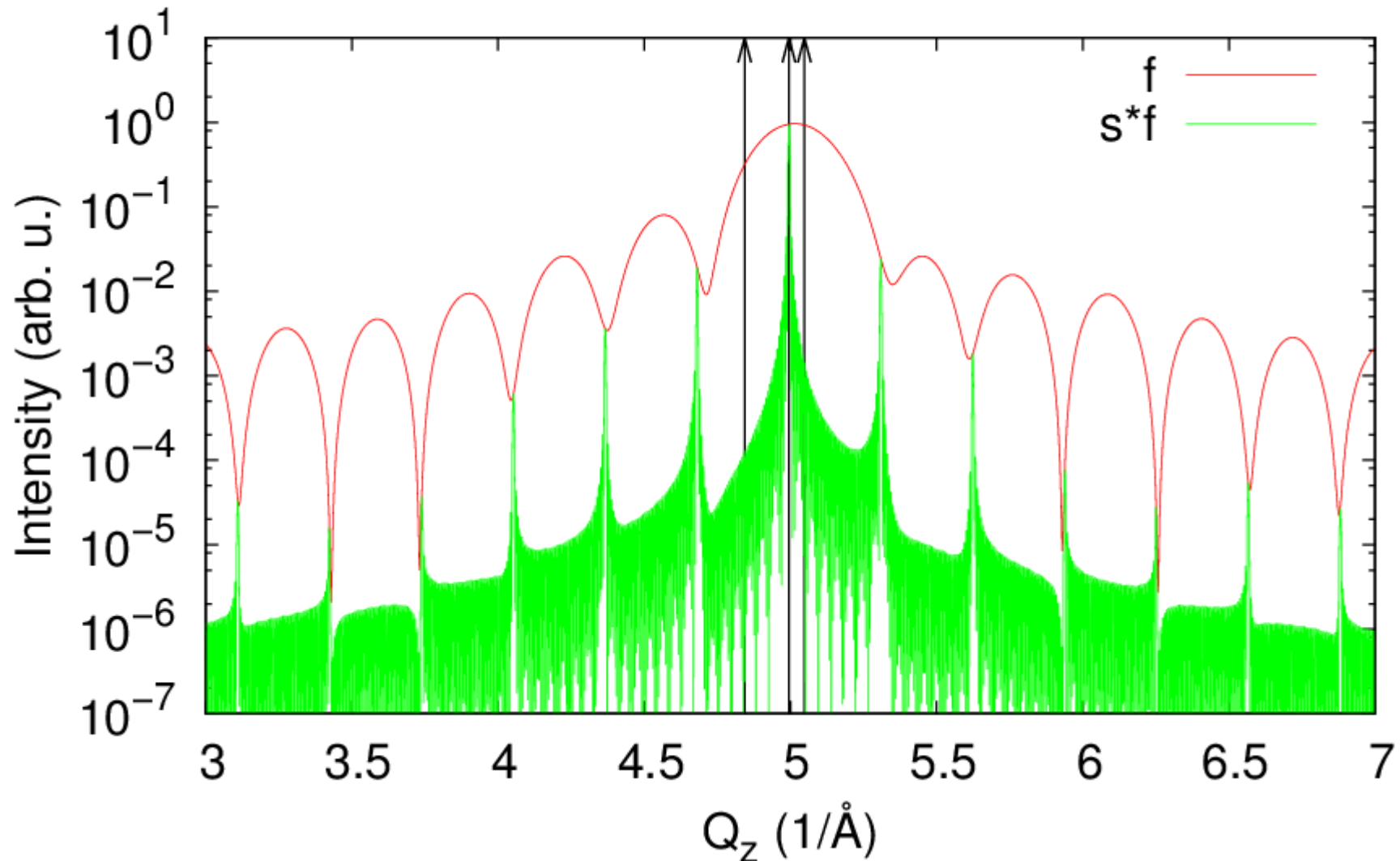
$$T_a=10\text{\AA}, T_b=10\text{\AA}, N=50, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

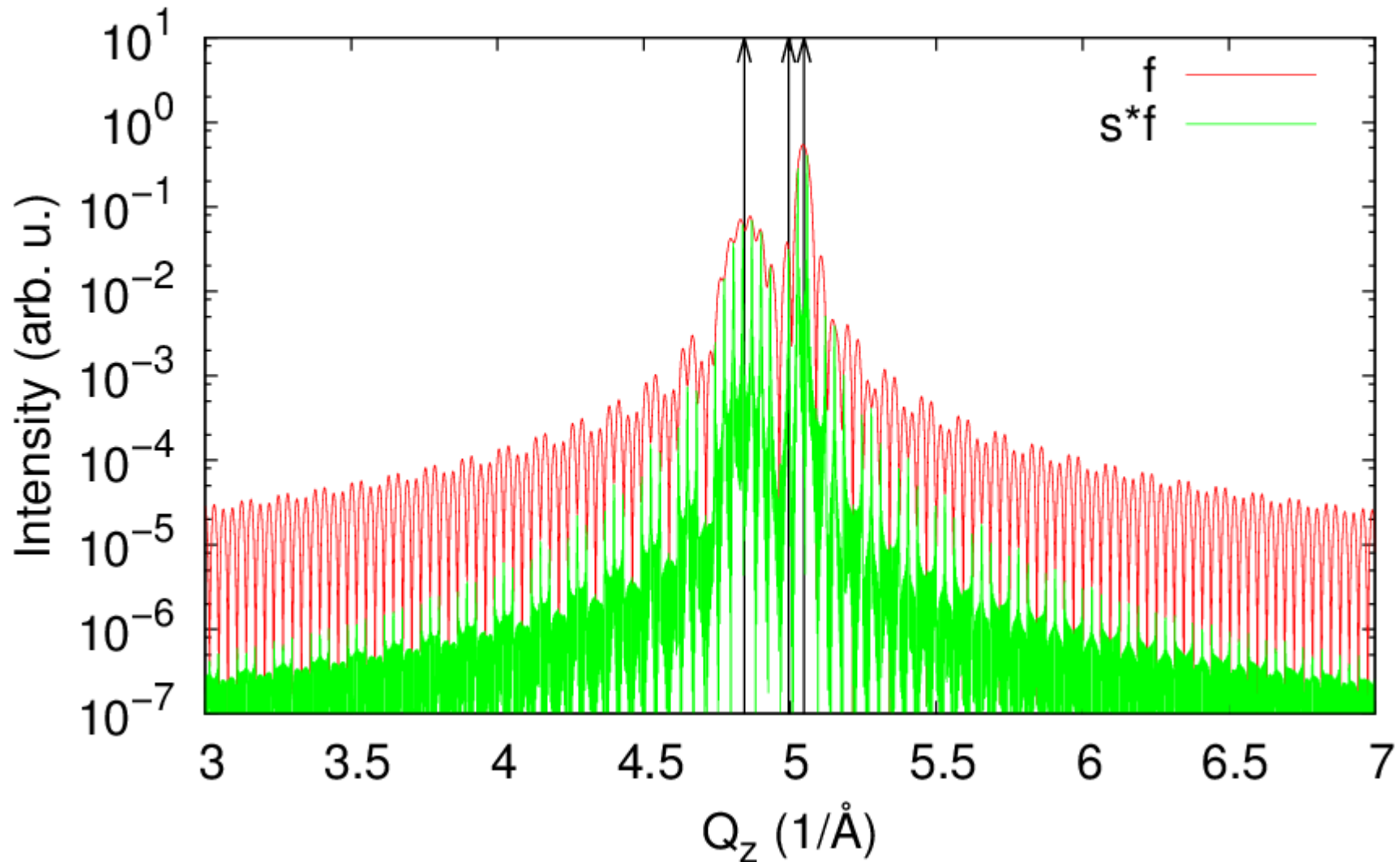
$$T_a=5\text{\AA}, T_b=15\text{\AA}, N=50, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

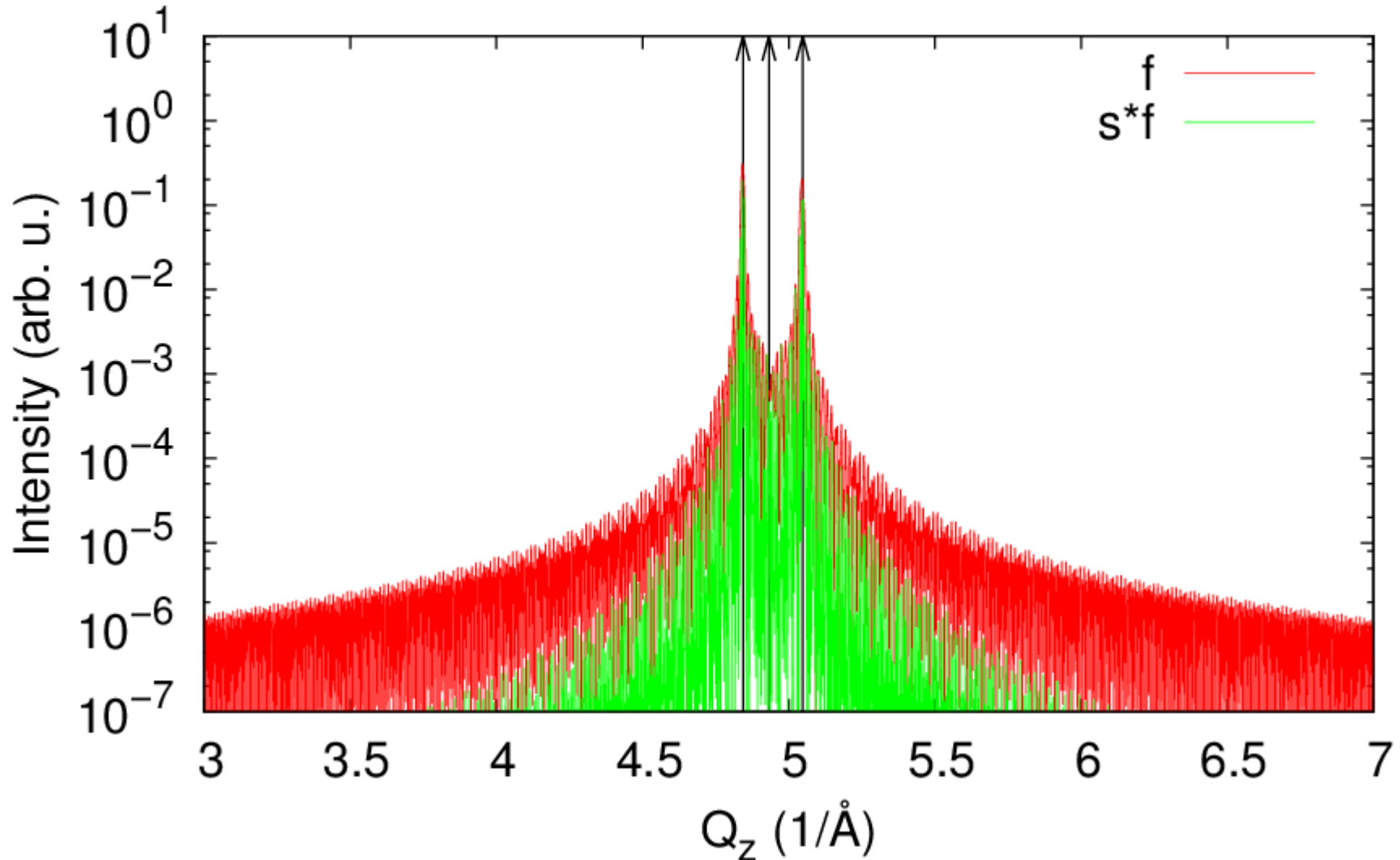
$$T_a=50\text{\AA}, T_b=150\text{\AA}, N=10, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematicá teorie

Multivrstva s – geometrický faktor, f – strukturní faktor, sf – celková intenzita

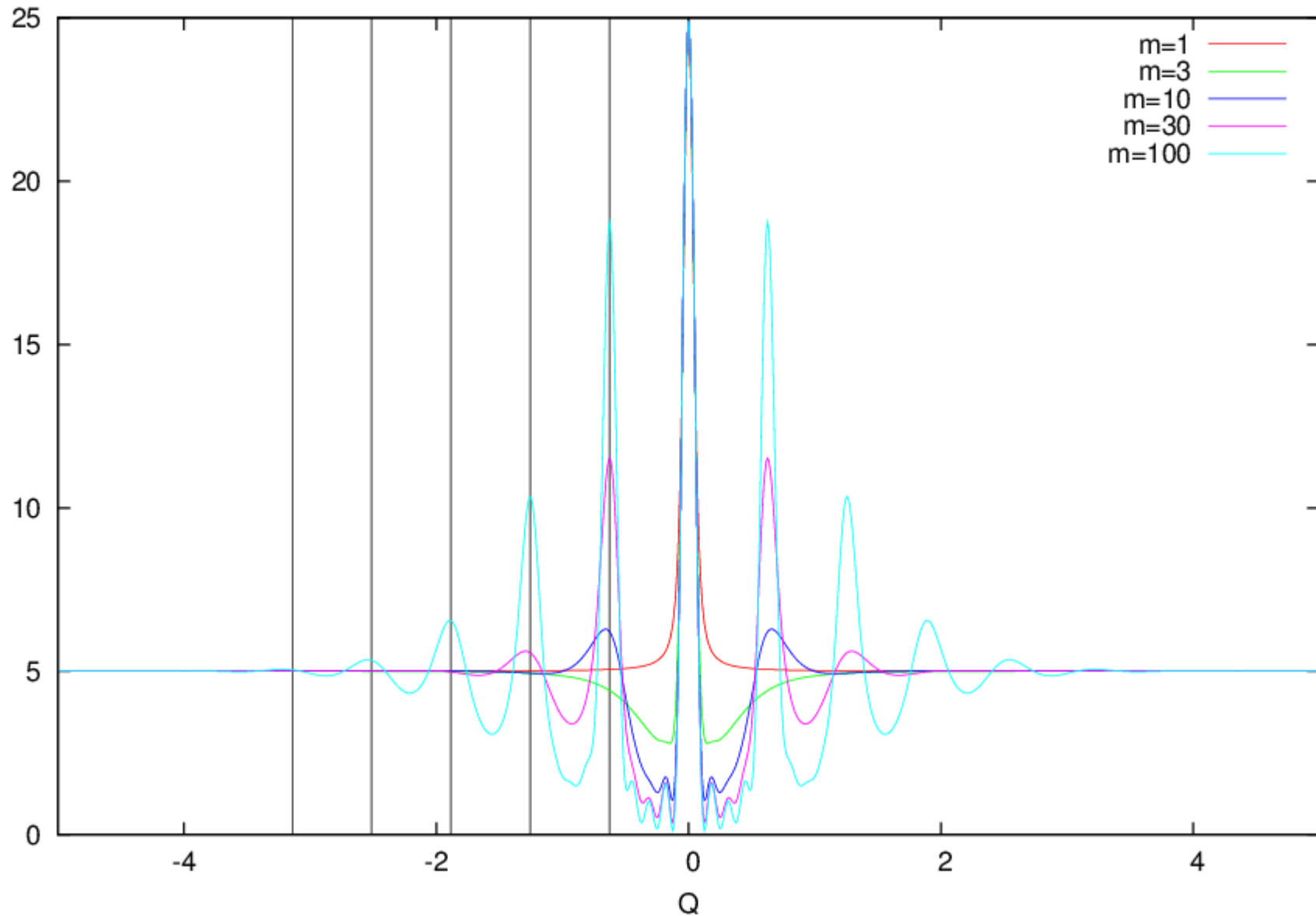
$$T_a=500\text{\AA}, T_b=400\text{\AA}, N=10, a_a=5.189\text{\AA}, a_b=4.979\text{\AA}$$



# Kinematická teorie

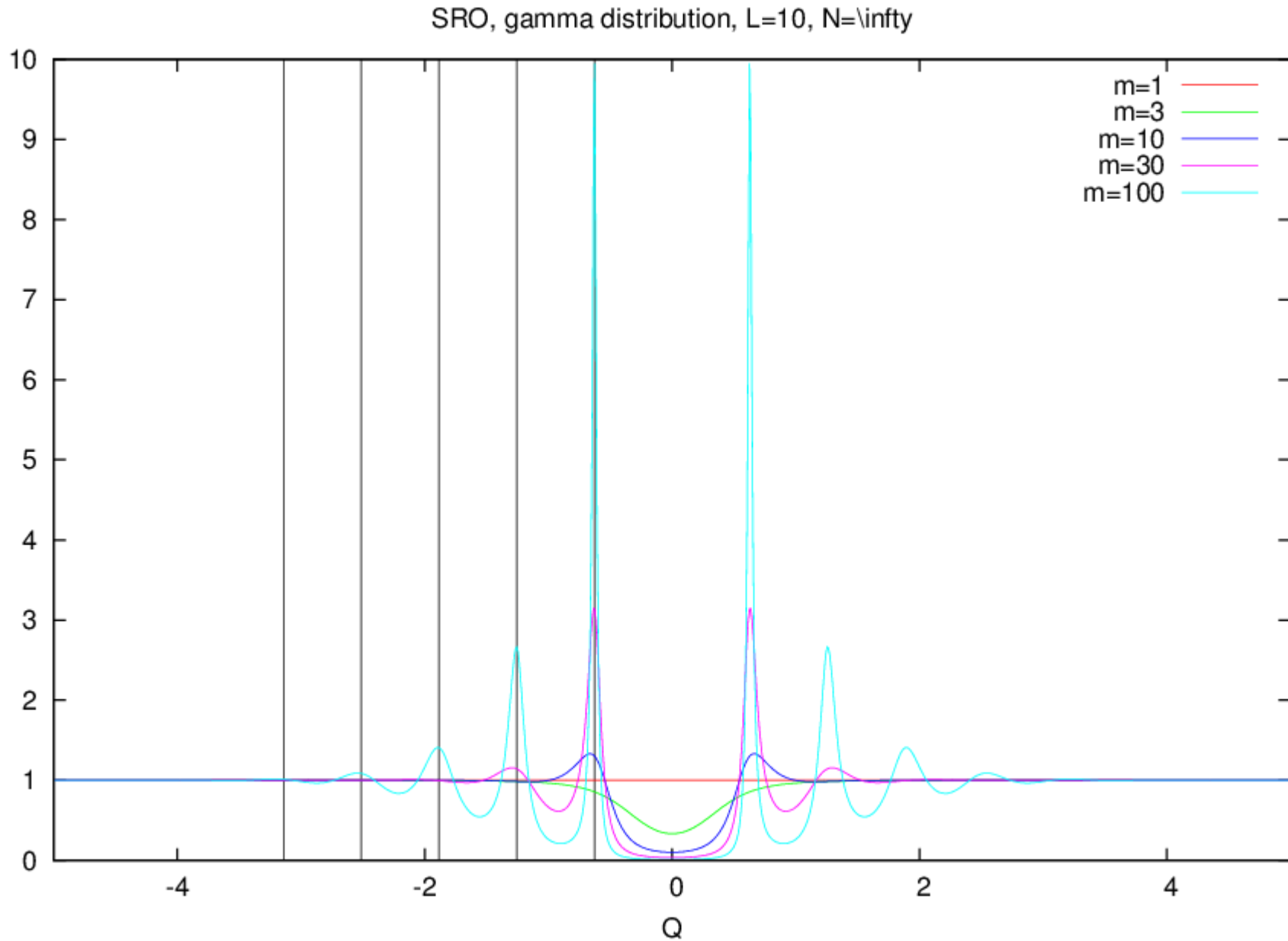
Malúhlý rozptyl an uspořádaných částicích

SRO, gamma distribution,  $L=10$ ,  $N=5$



# Kinematická teorie

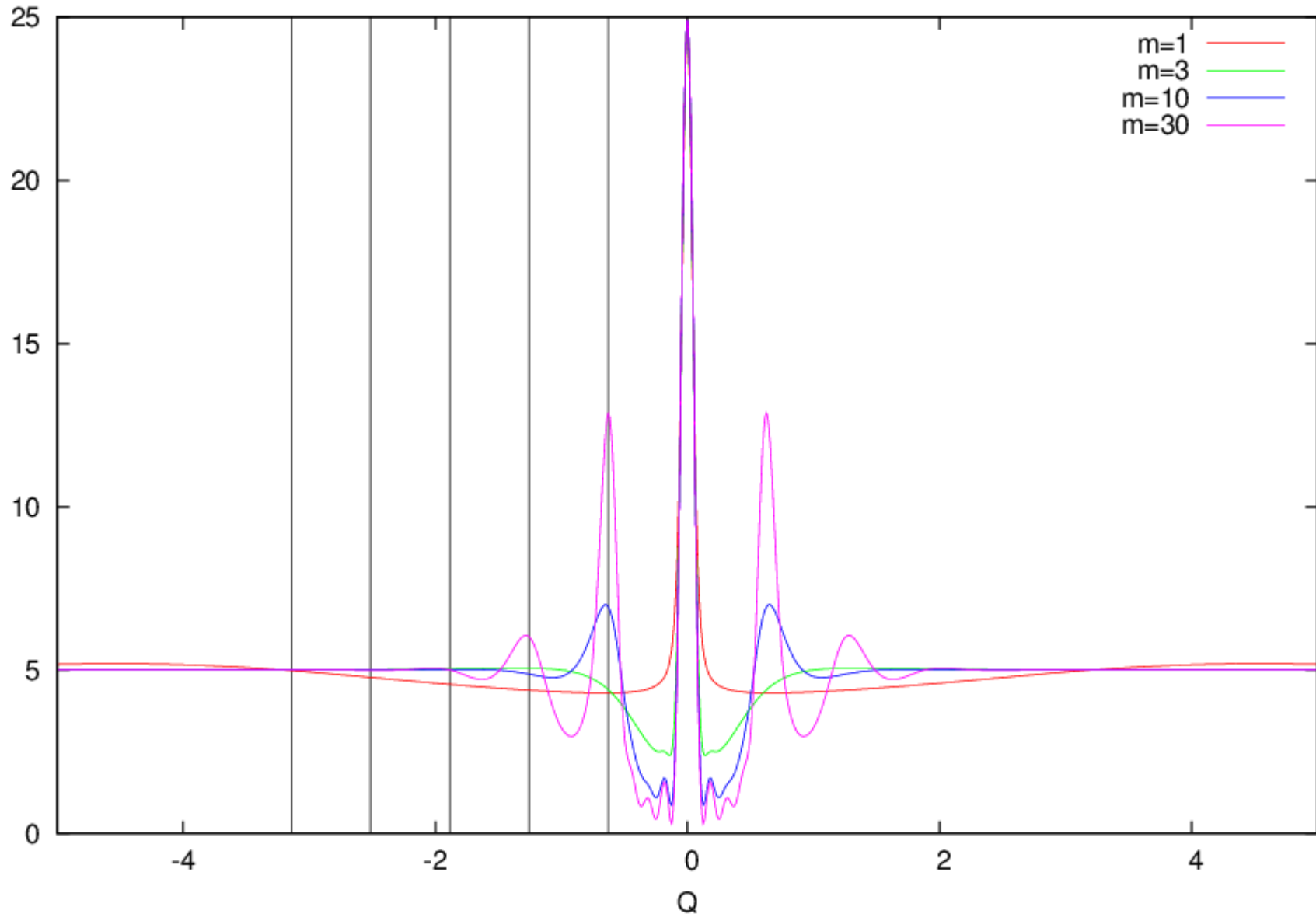
Malúhlý rozptyl an uspořádaných částicích



# Kinematická teorie

Malúhlý rozptyl an uspořádaných částicích

SRO, shifted gamma distribution,  $L=10$ ,  $L_0=1.0$ ,  $N=5$

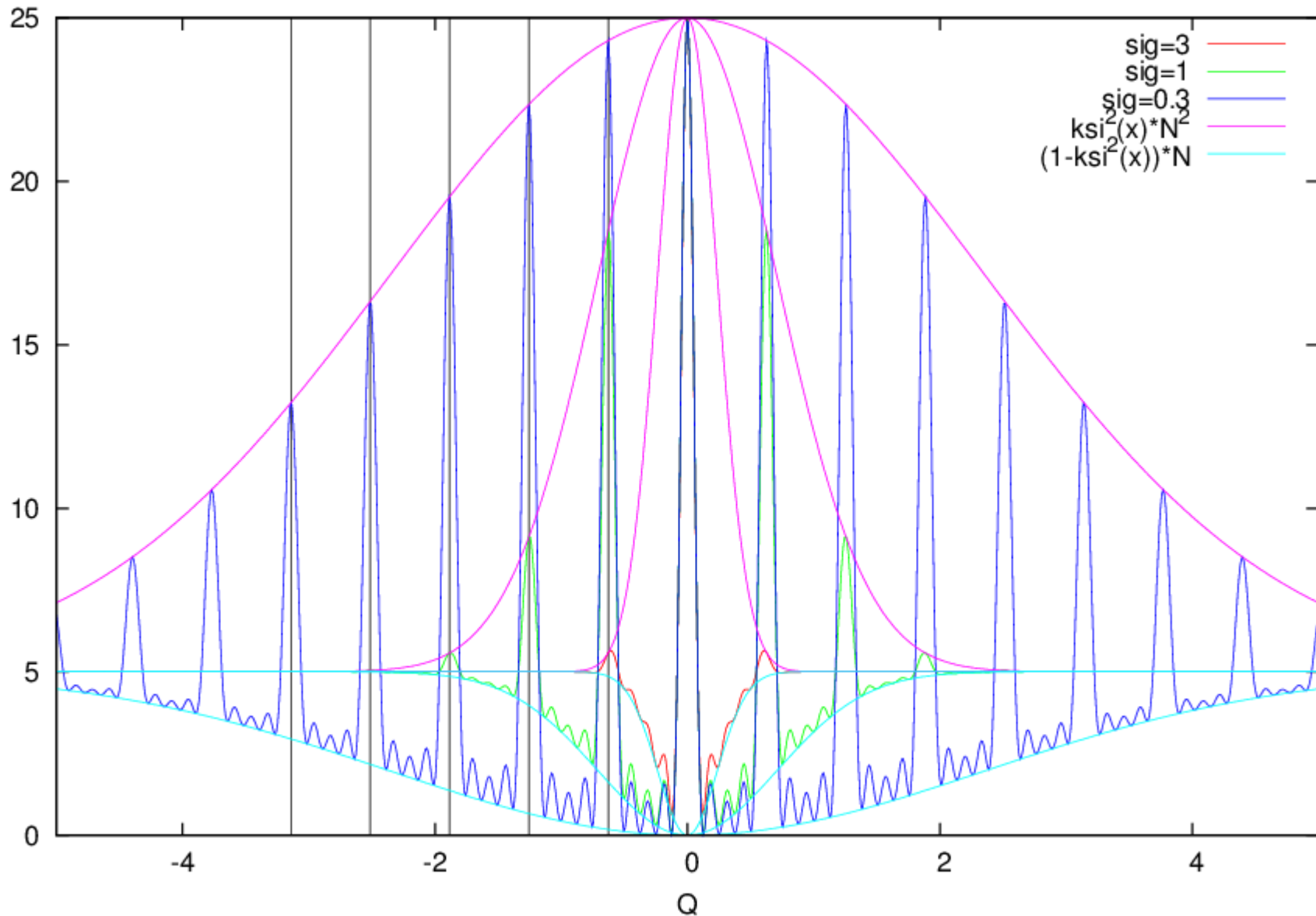




# Kinematická teorie

Malúhlý rozptyl an uspořádaných částicích

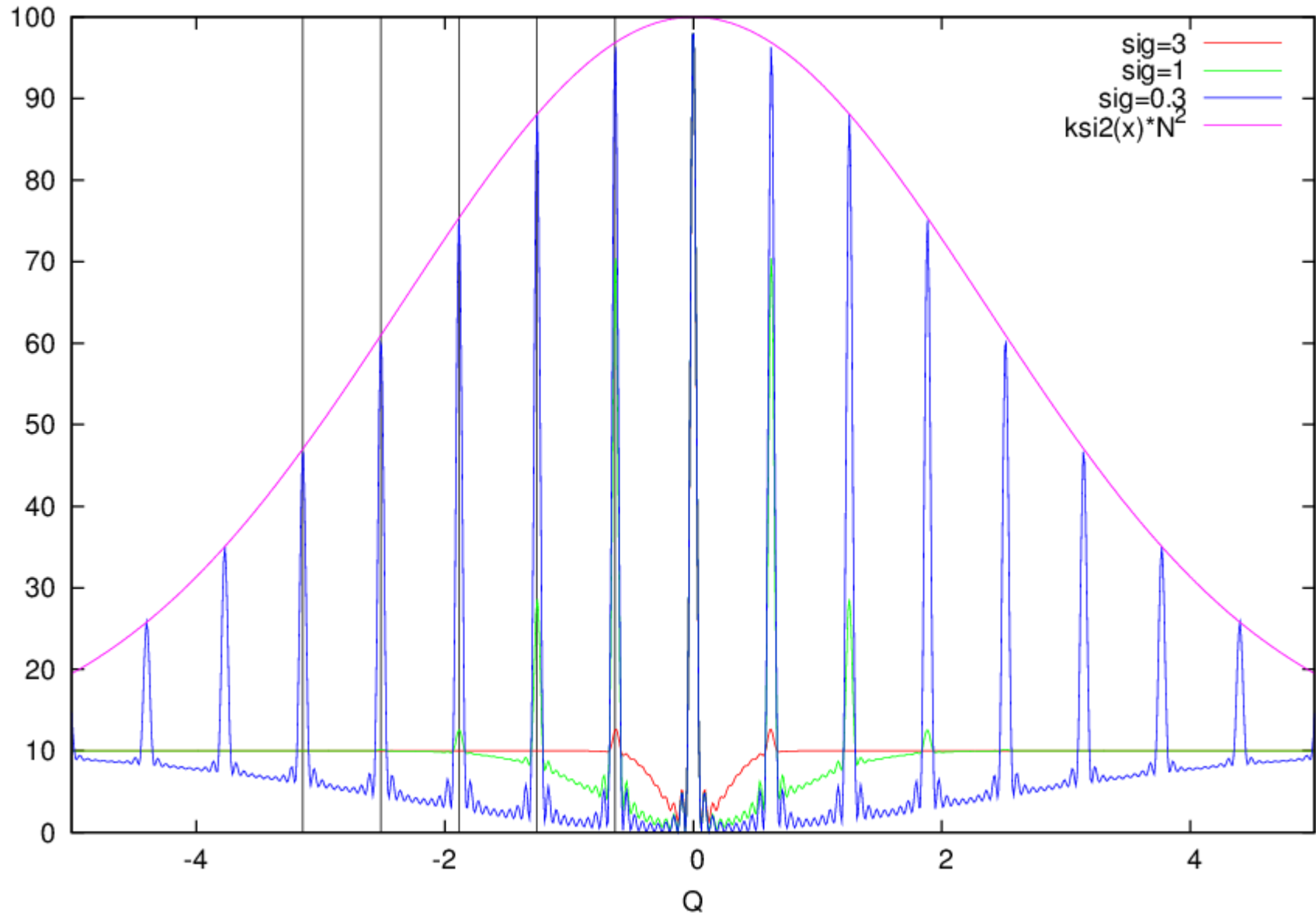
LRO, normal distribution,  $L=10$ ,  $N=5$



# Kinematická teorie

Malúhlý rozptyl an uspořádaných částicích

LRO, normal distribution, L=10, N=10

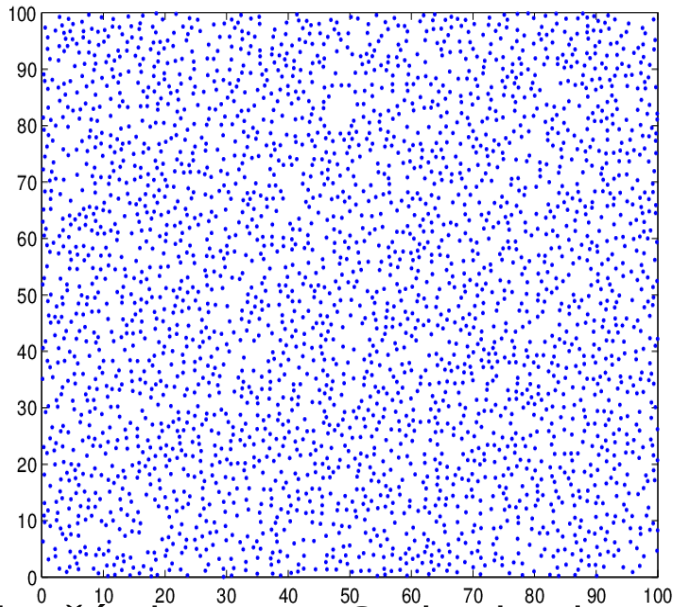


# Kinematická teorie

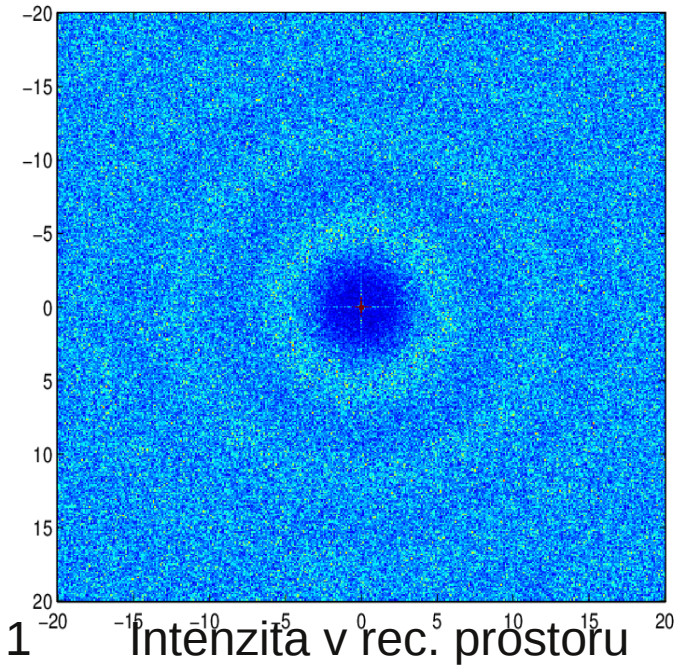
Malúhlý rozptyl an uspořádaných částicích

# Kinematická teorie

Malúhlý rozptyl na uspořádaných částicích v 2D

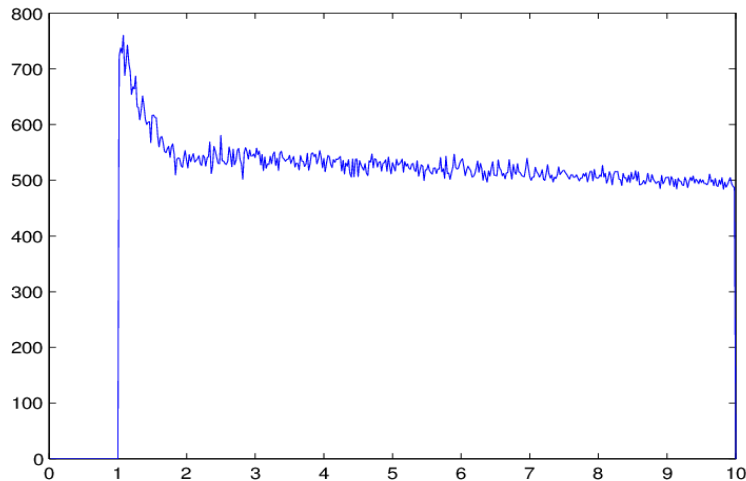


Poloha částic Monte Carlo simulace pro minimální vzdálenost 1

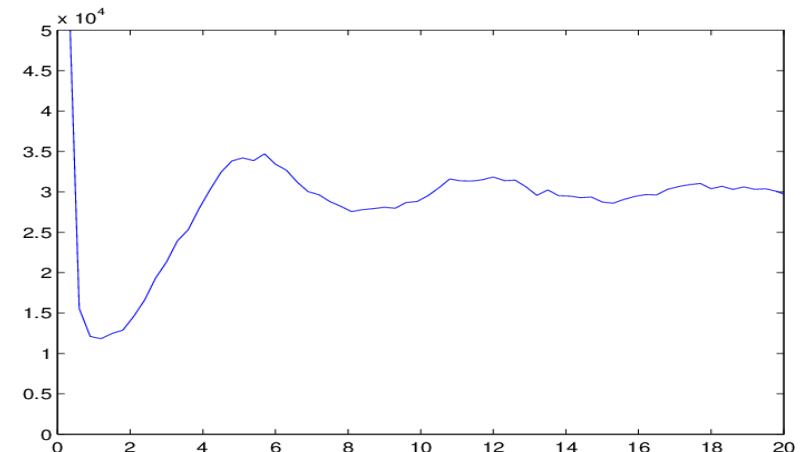


Intenzita v rec. prostoru

Pravděpodobnost nalezení částice na vzdálenosti



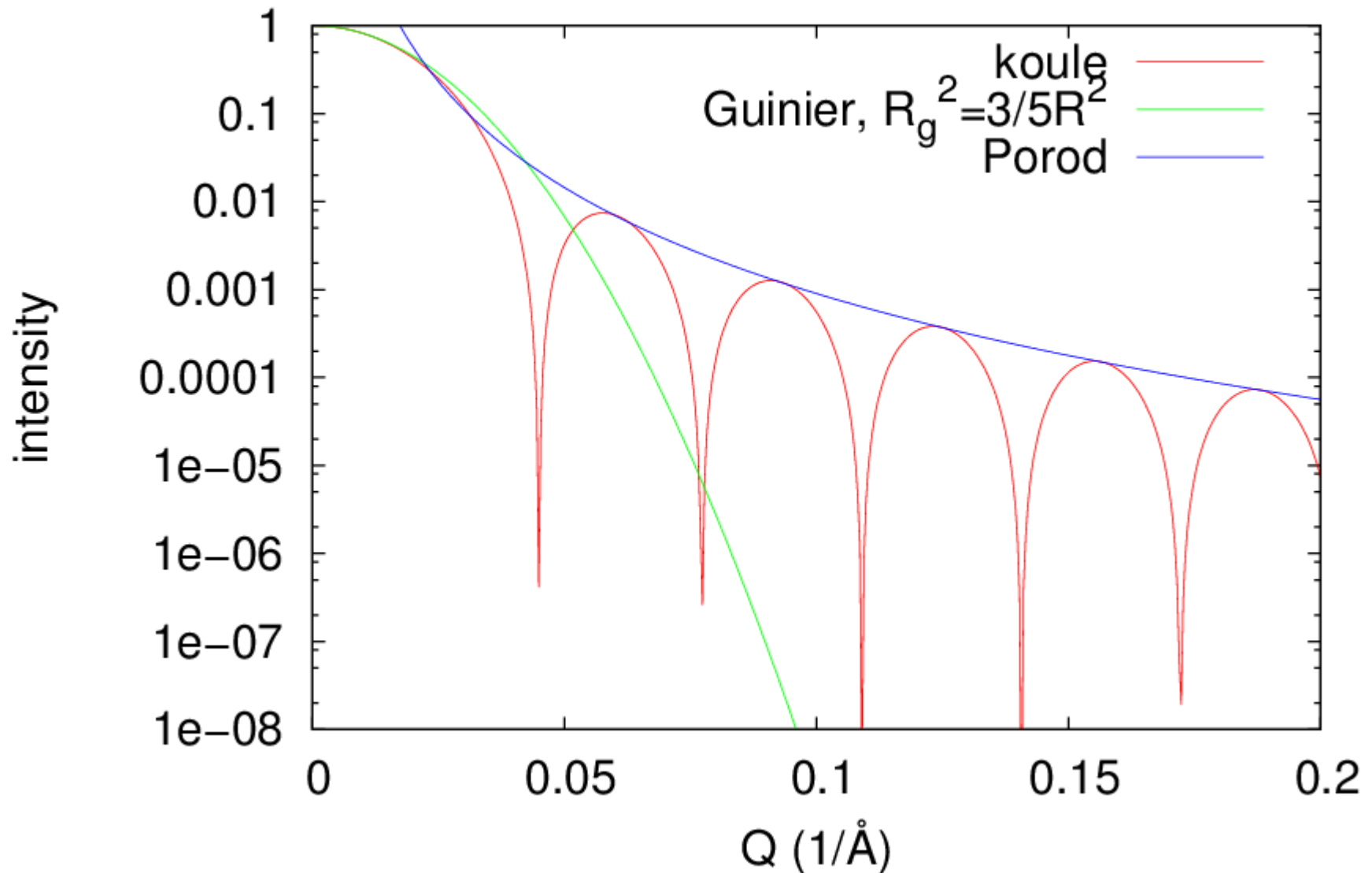
směrově středovaná intenzita



# Kinematicá teorie

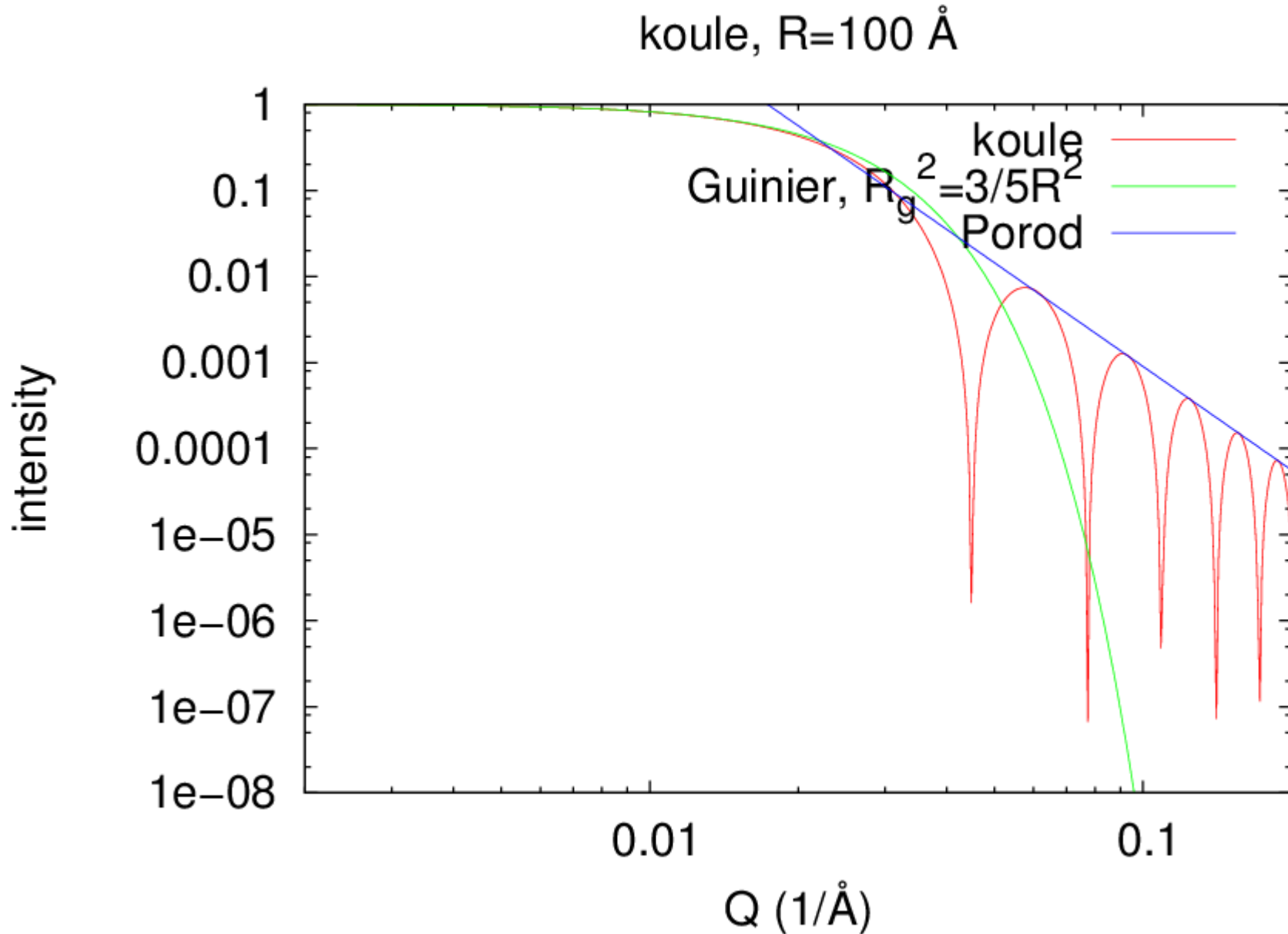
SAXS, rozptyl na kouli, Guinierova a Porodova aproximace

koule,  $R=100 \text{ \AA}$



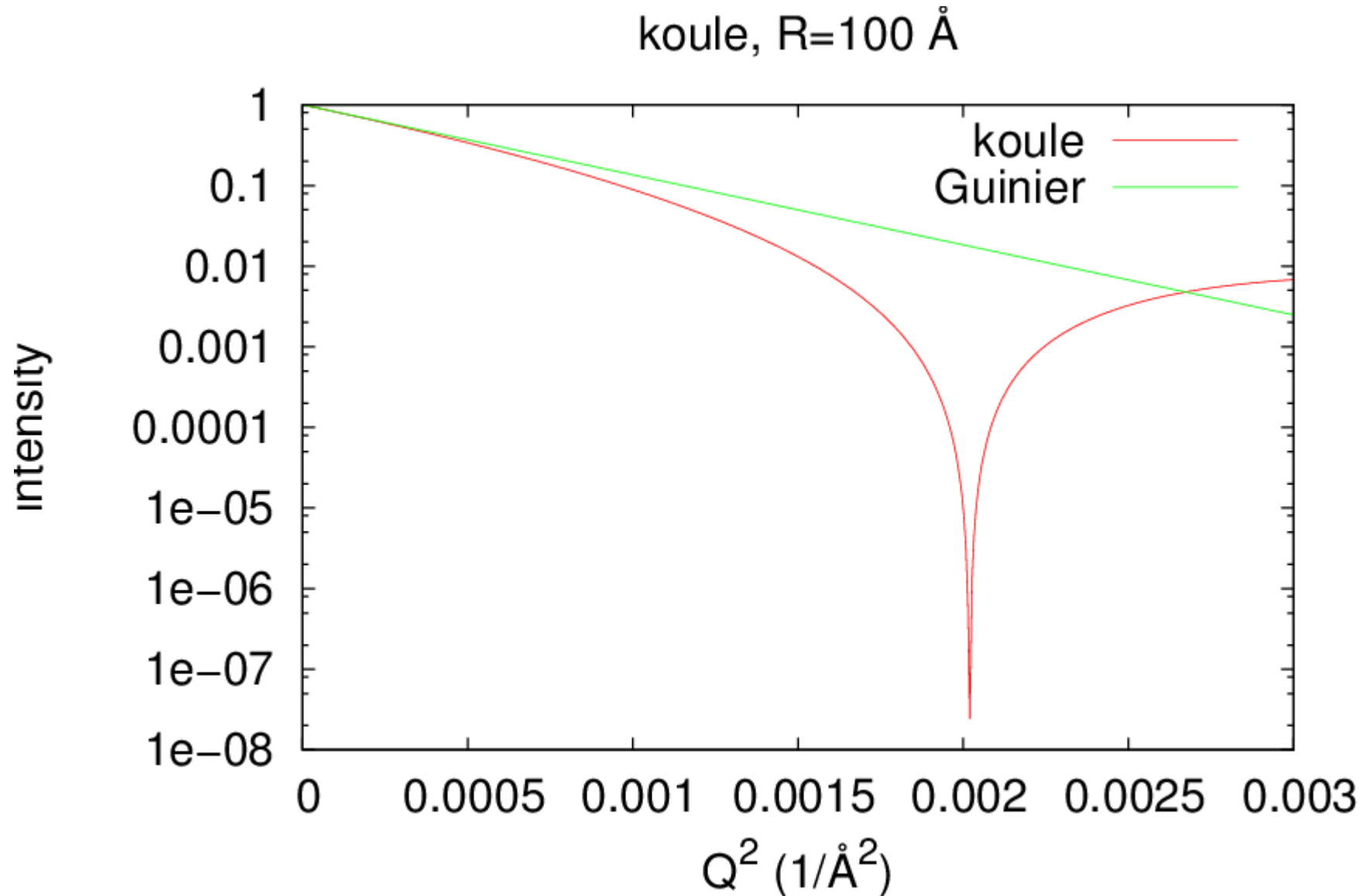
# Kinematická teorie

SAXS, rozptyl na kouli, Porodova aproximace: intenzita úměrná  $Q^{-4}$



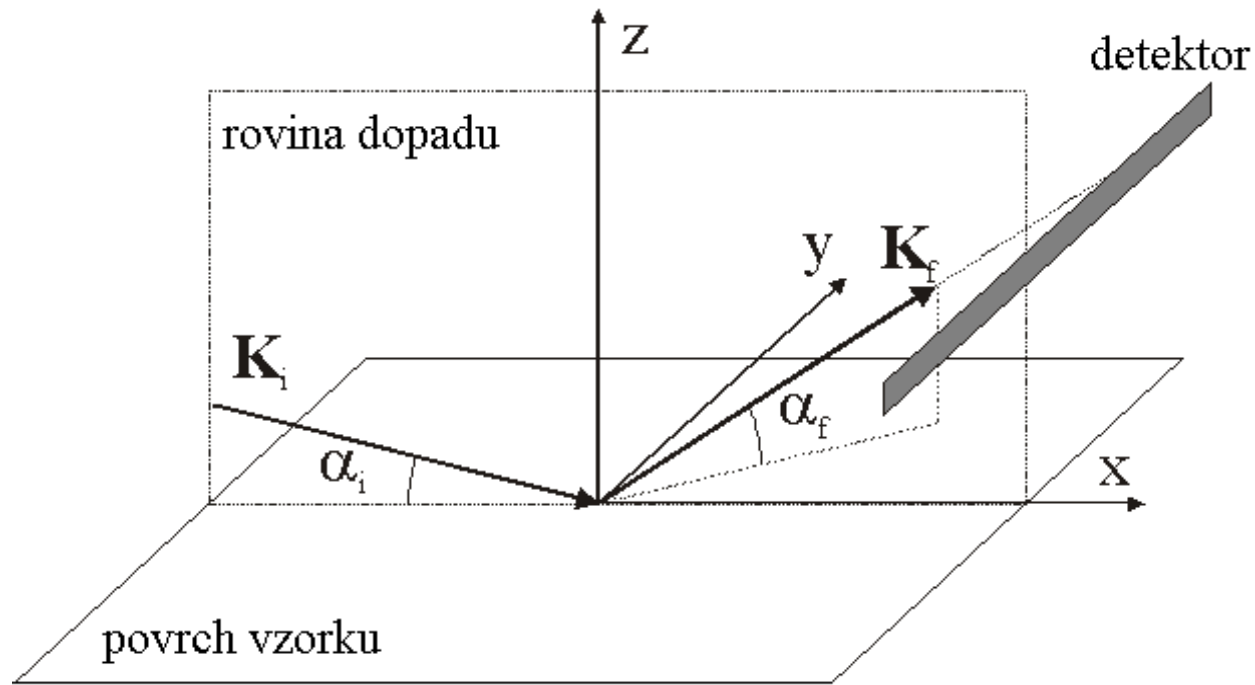
# Kinematická teorie

SAXS, rozptyl na kouli, Guinierův graf –  $\log(I)$  jako funkce  $Q^2$



# Kinematická teorie

GISAXS experimentální uspořádání





# Kinematická teorie

Intenzita rozptýleného záření pro objekty na povrchu

tvárová funkce tečky

Rozptyl na tečkách v kinematické aproximaci  $I_{\text{dif}}(\mathbf{Q}) = A |\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{Q})|^2 G(\mathbf{Q})$

korelační funkce poloh

V aproximaci DWBA pro tečky uvnitř vzorku:

$$I_{\text{dif}}(\mathbf{Q}) = A t_i t_f \exp(-2 \text{Im}(q_z)Z) |\Omega^{\text{FT}}(\mathbf{q})|^2 G(\mathbf{q})$$

transmisní funkce povrchu

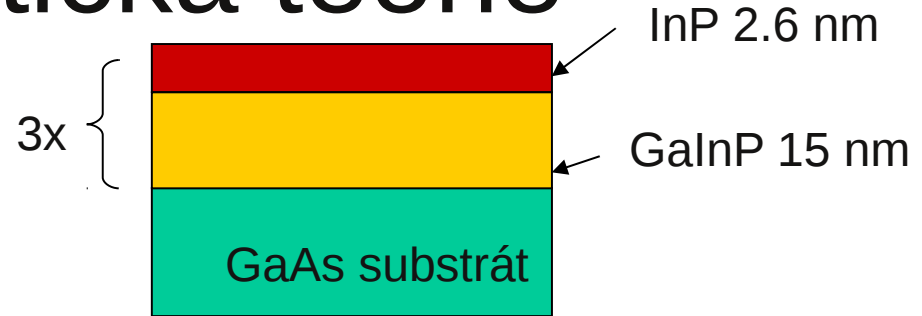
Pro tečky na povrchu:

$$I_{\text{dif}}(\mathbf{Q}) = A |\Omega^{\text{FT}}(Q_x, Q_y, Q_z) + r_i r_f \Omega^{\text{FT}}(Q_x, Q_y, -Q_z) + r_i \Omega^{\text{FT}}(Q_x, Q_y, Q_z) + r_f \Omega^{\text{FT}}(Q_x, Q_y, -Q_z)|^2 G(\mathbf{Q})$$

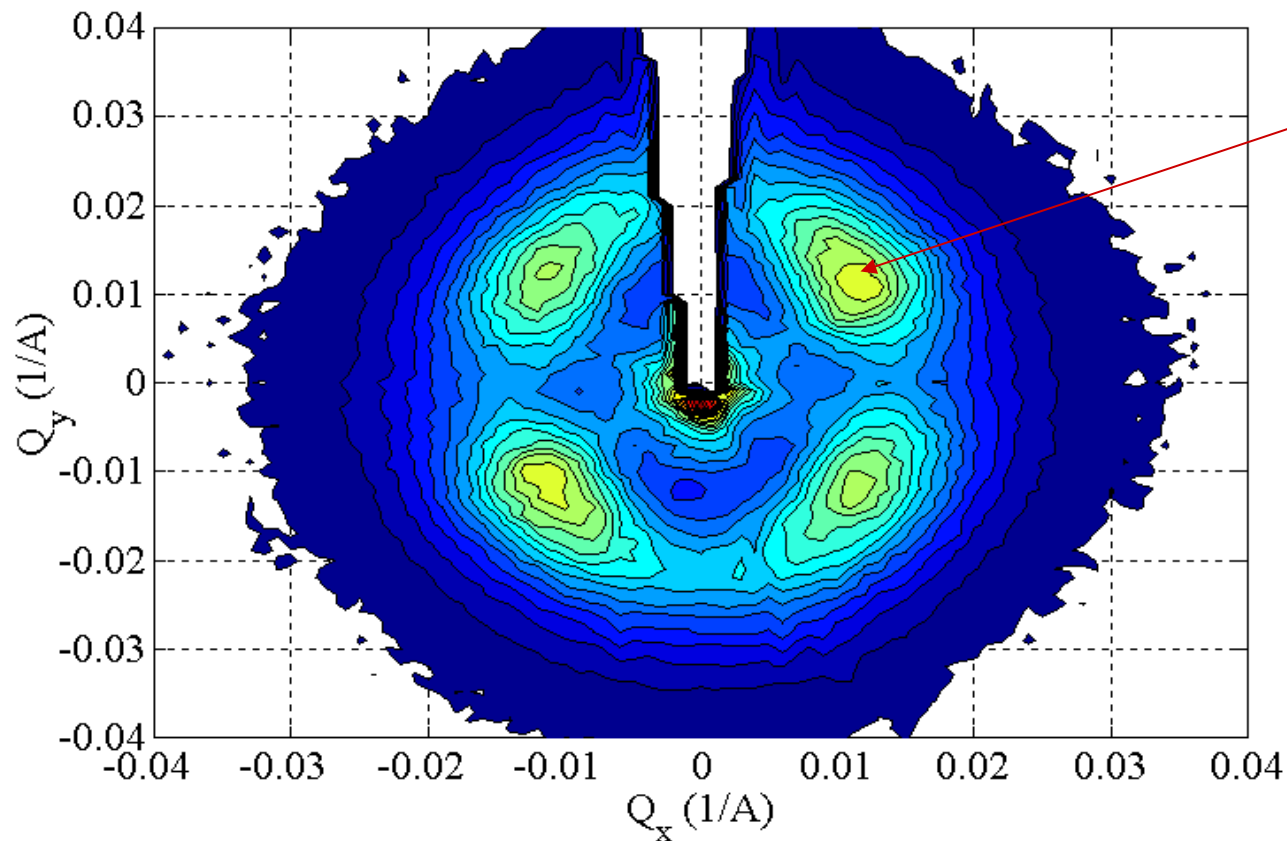
# Kinematická teorie

Příklad:

- GaInP-InP supermřížka (PDI Berlín)

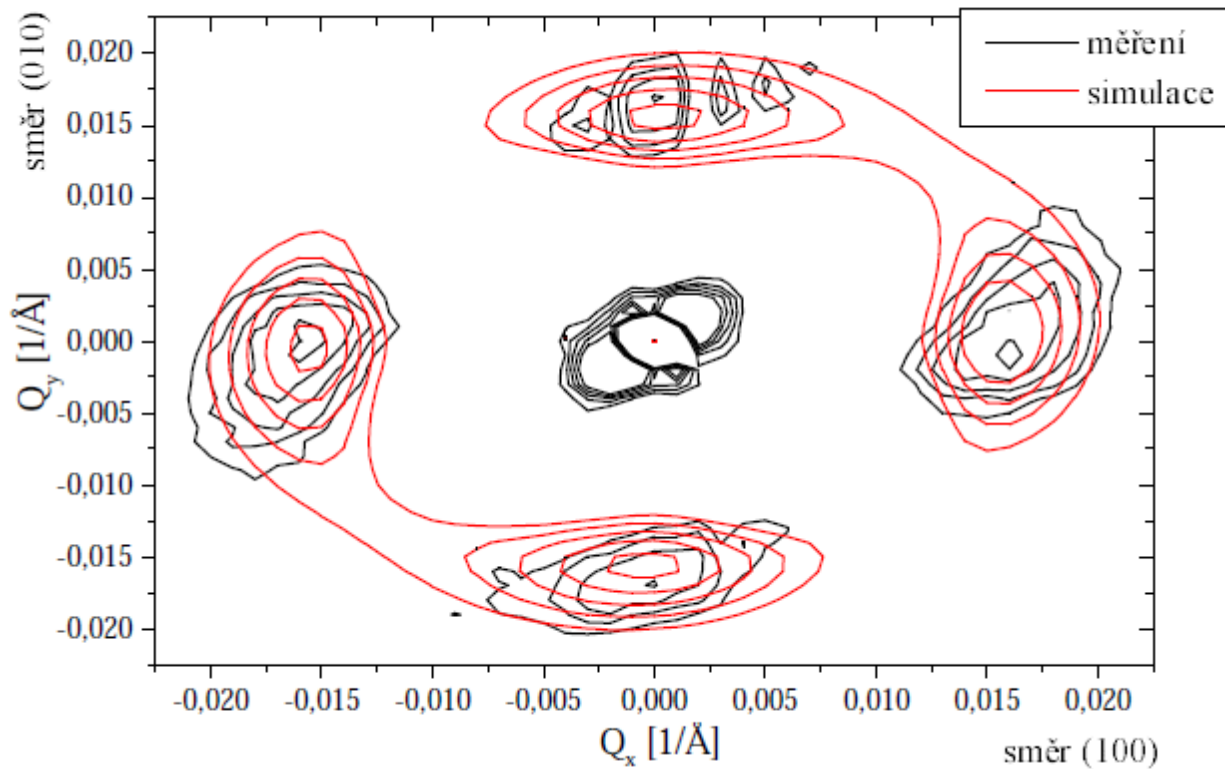


Naměřená mapa intenzity v reciprokém prostoru



vedlejší maxima díky korelaci poloh teček

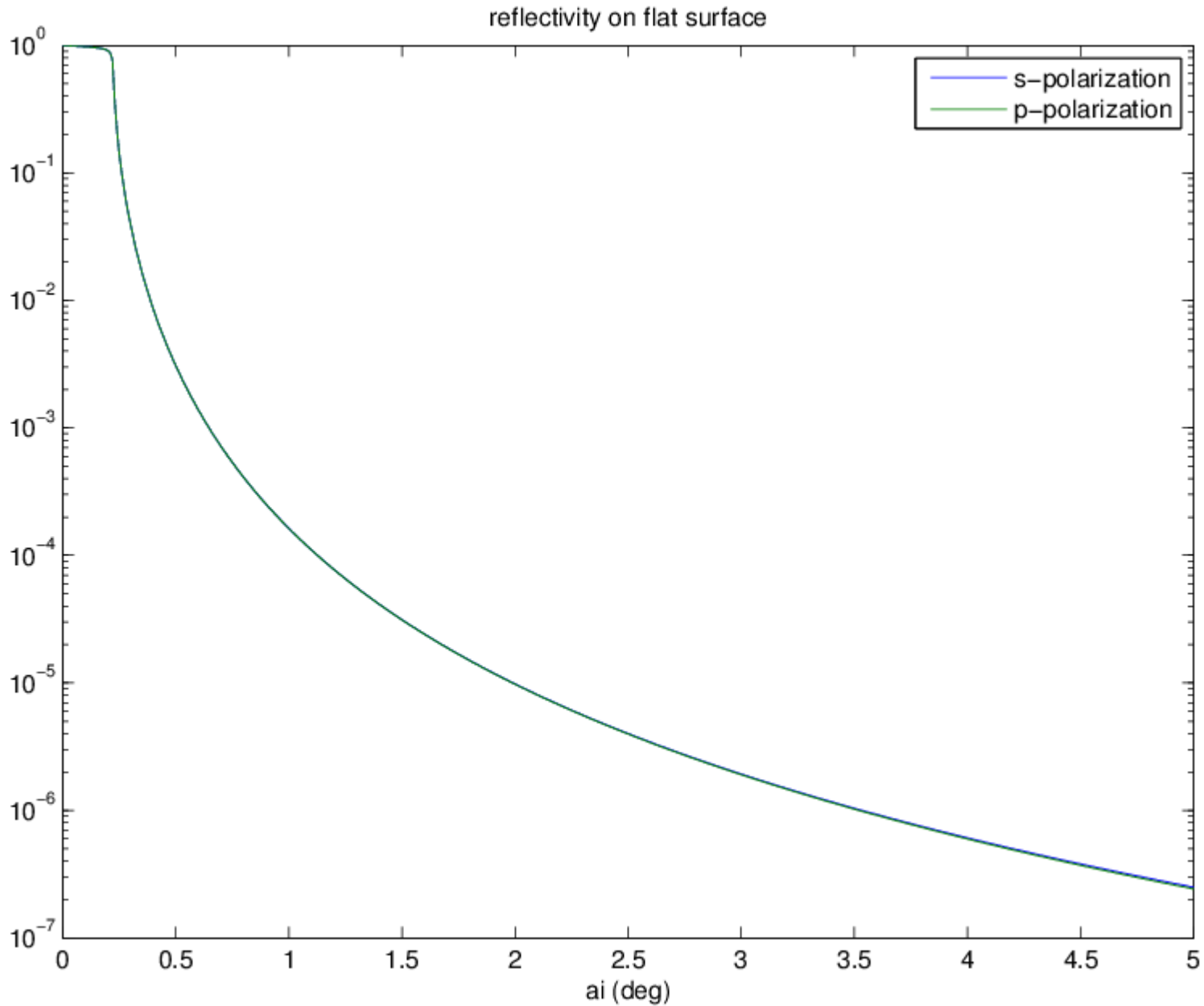
# Kinematická teorie



Model: poloelipsoidy s osami:  $(8.4 \pm 0.3)$  nm,  $(6.8 \pm 0.3)$  nm a výškou  $(0.1 \pm 0.2)$  nm.  
Střední vzdálenost:  $(40 \pm 2)$  nm, směrodatná odchylka vzdáleností 12 nm

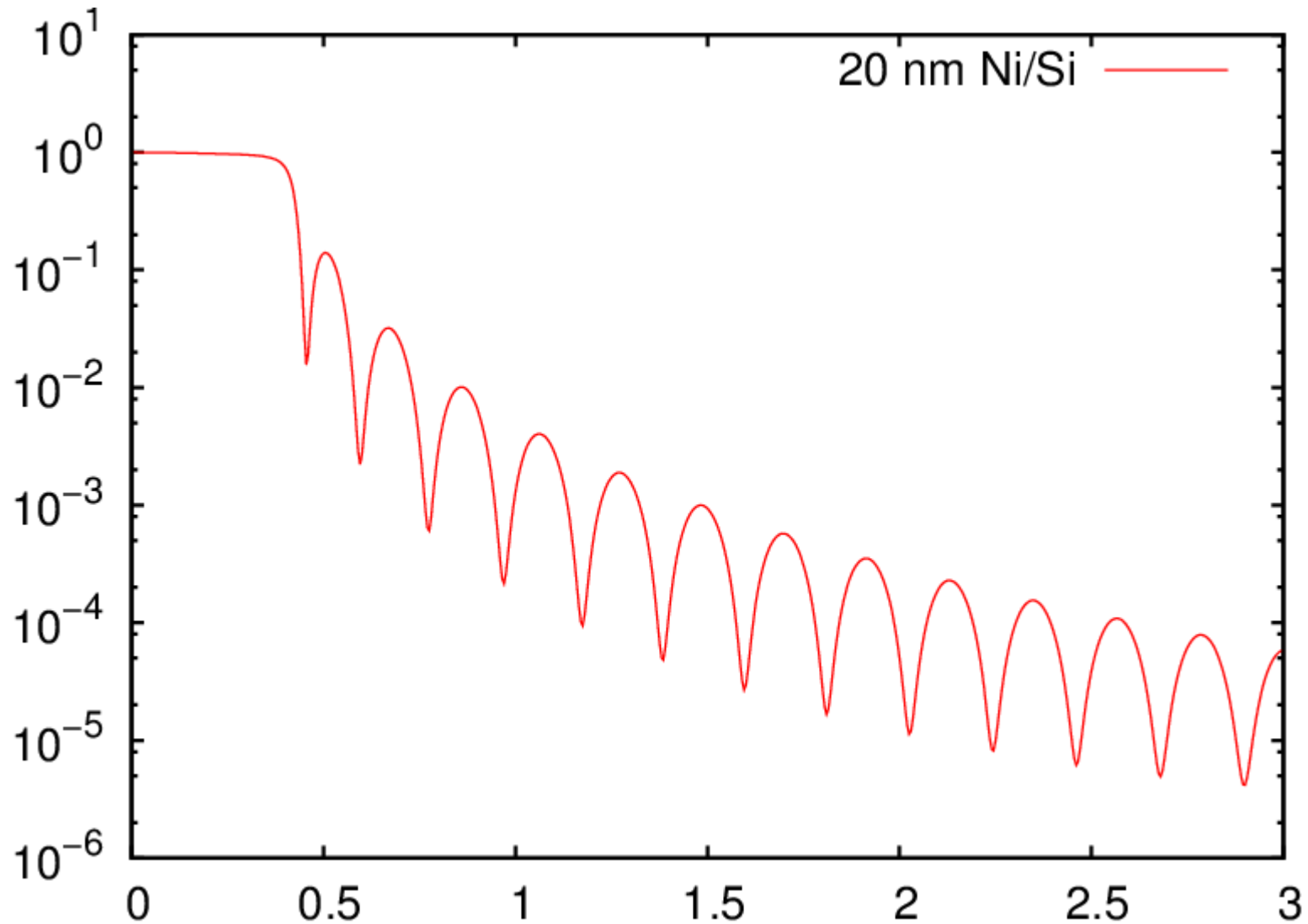
# Dynamická teorie

Odraz polonekonečném hladkém substrátu v jednovlnné aproximaci



# Dynamická teorie

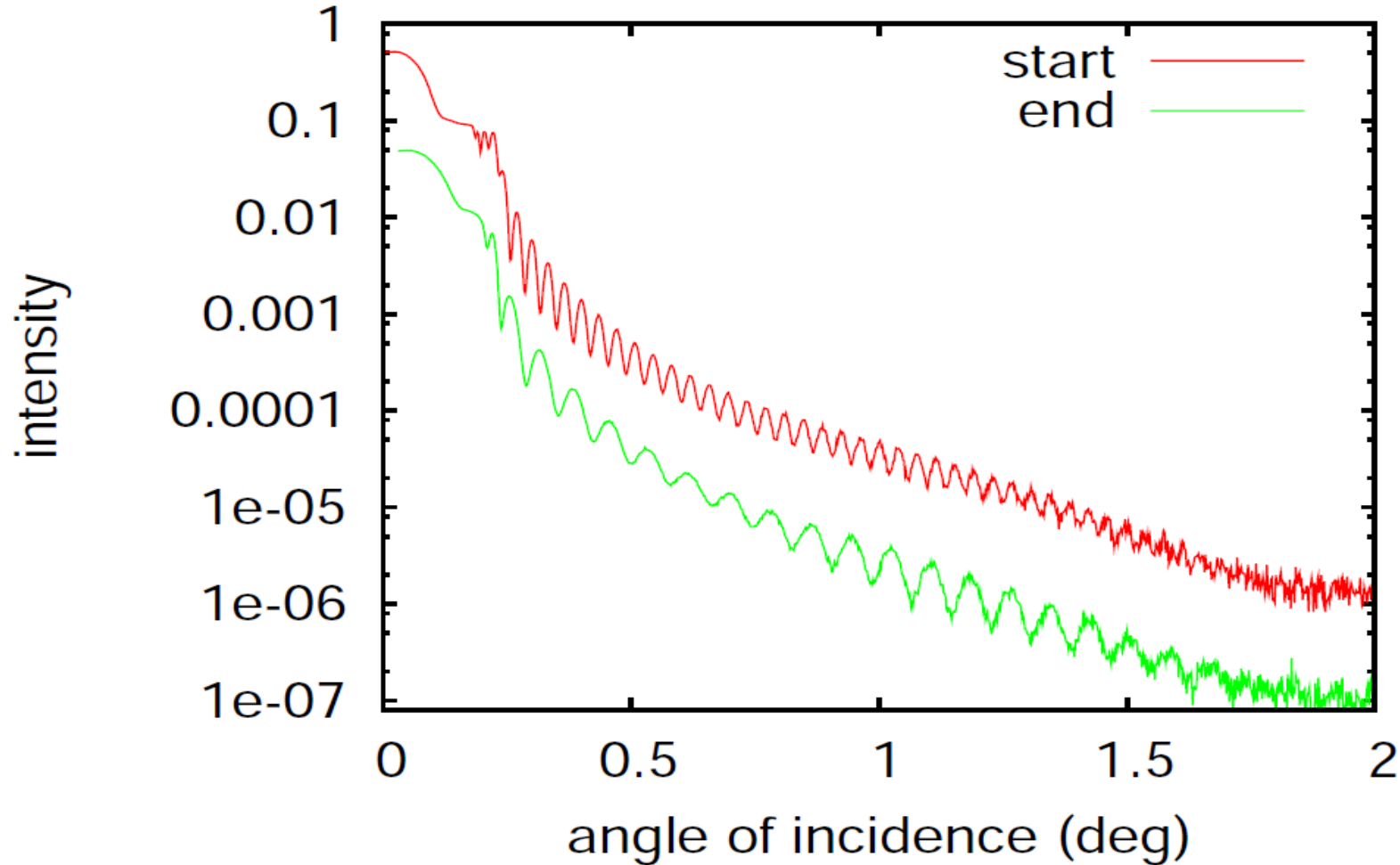
Odraz na vrstvě v jednovlnné aproximaci



# Dynamická teorie

Odraz na vrstvě v jednovlnné aproximaci

Degradace polymerní vrstvy (tetravinylsilan/Si) vlivem UV

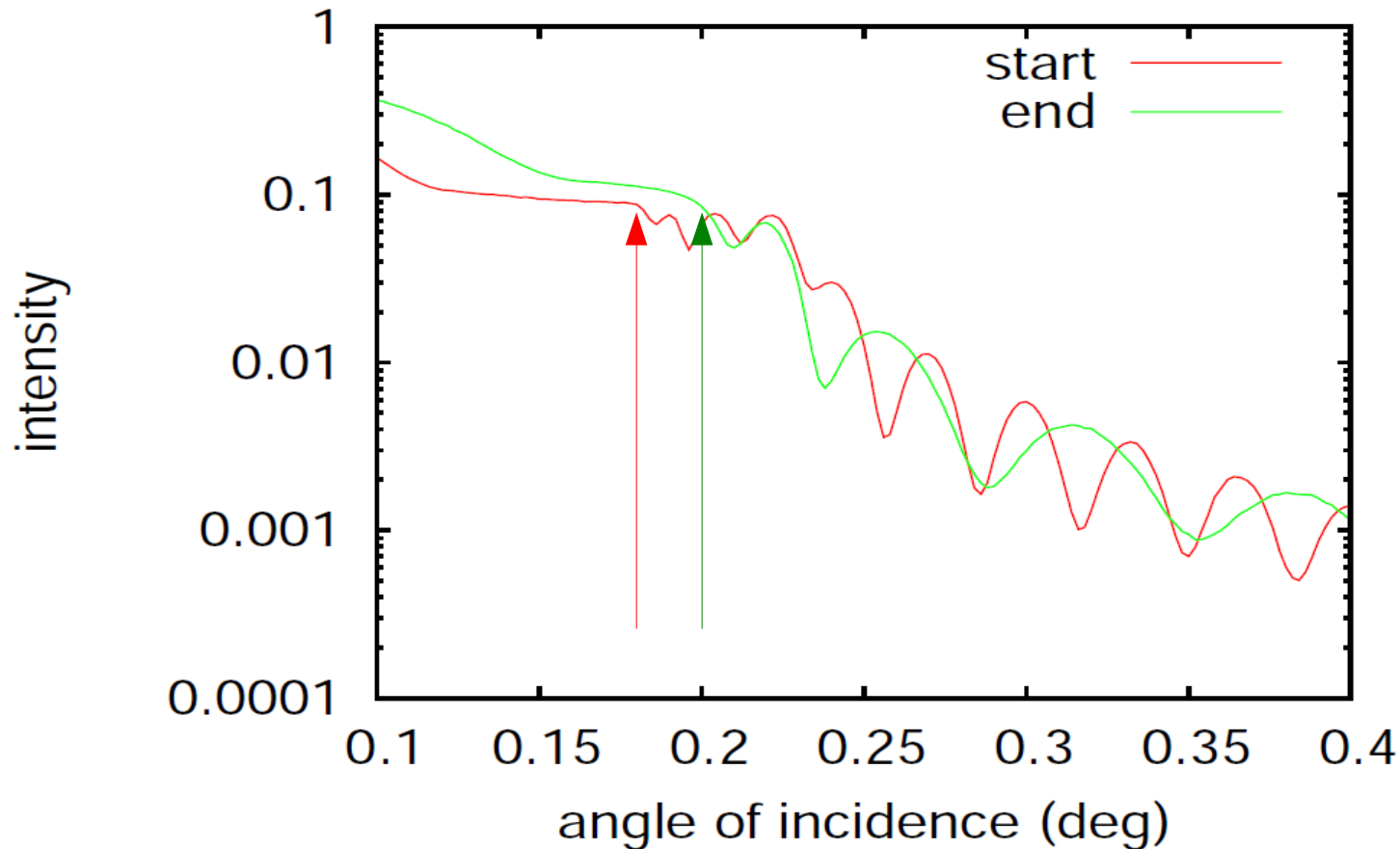


Tloušťka vlivem UV záření klesla ze 112 nm na 53 nm.

# Dynamická teorie

Odraz na vrstvě v jednovlnné aproximaci

Degradace polymerní vrstvy (tetravinylsilan/Si) vlivem UV

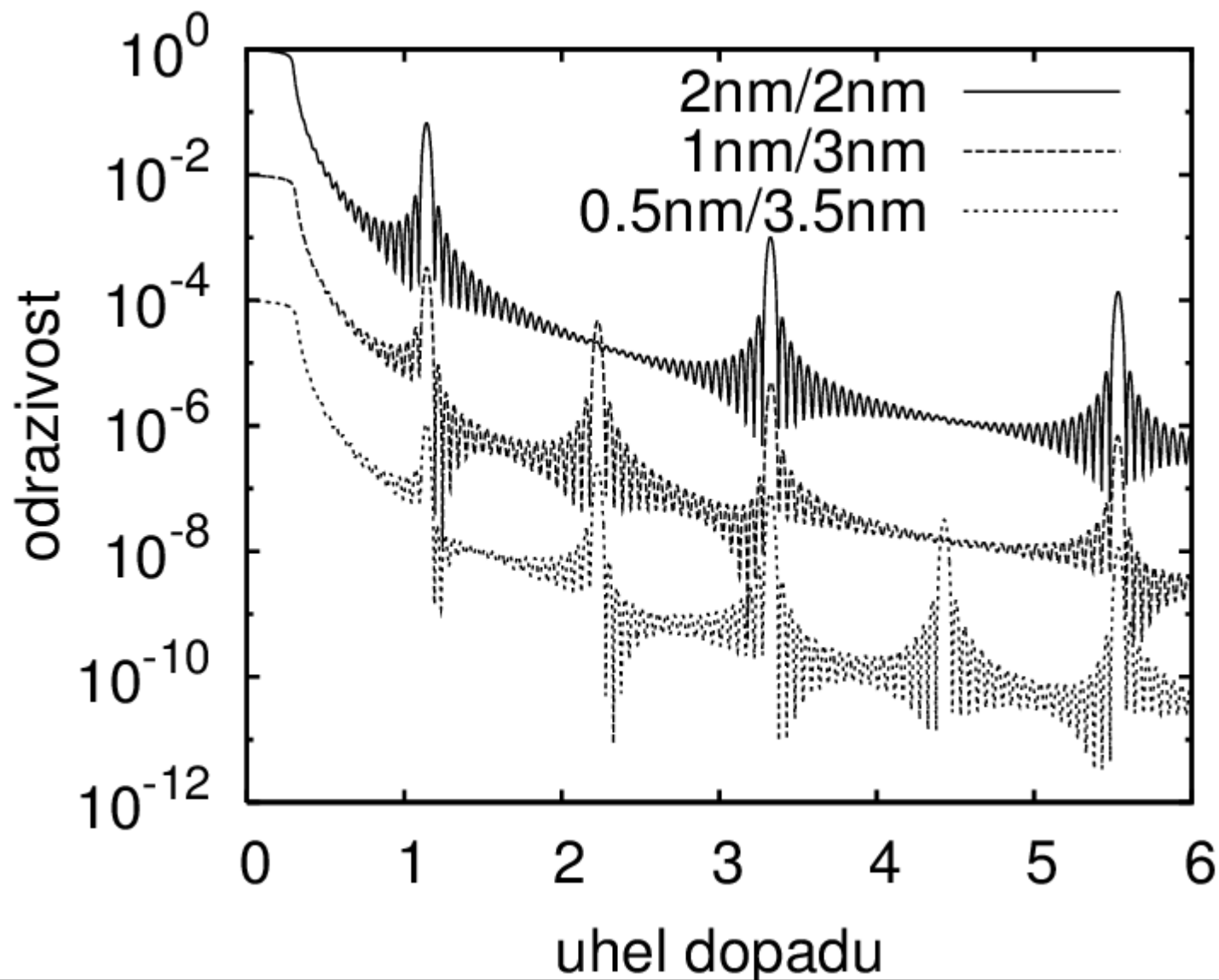


Úhel totálního odrazu závisí na hodnotě indexu lomu.

Hustota stoupla ze  $1.6 \text{ g/cm}^3$  na  $2.0 \text{ g/cm}^3$ .

# Dynamická teorie

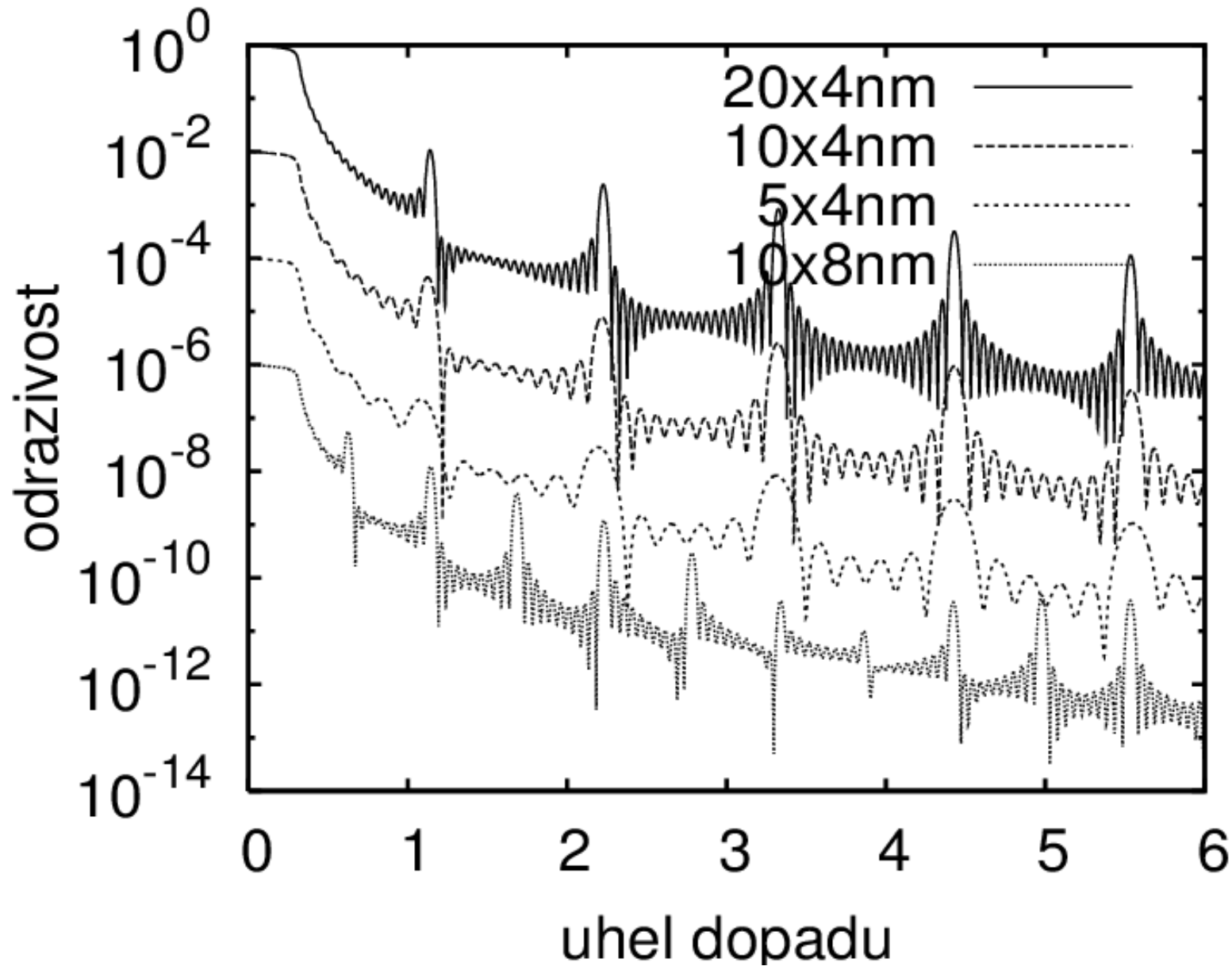
Odraz na periodické multivrstvě v jednovlnné aproximaci





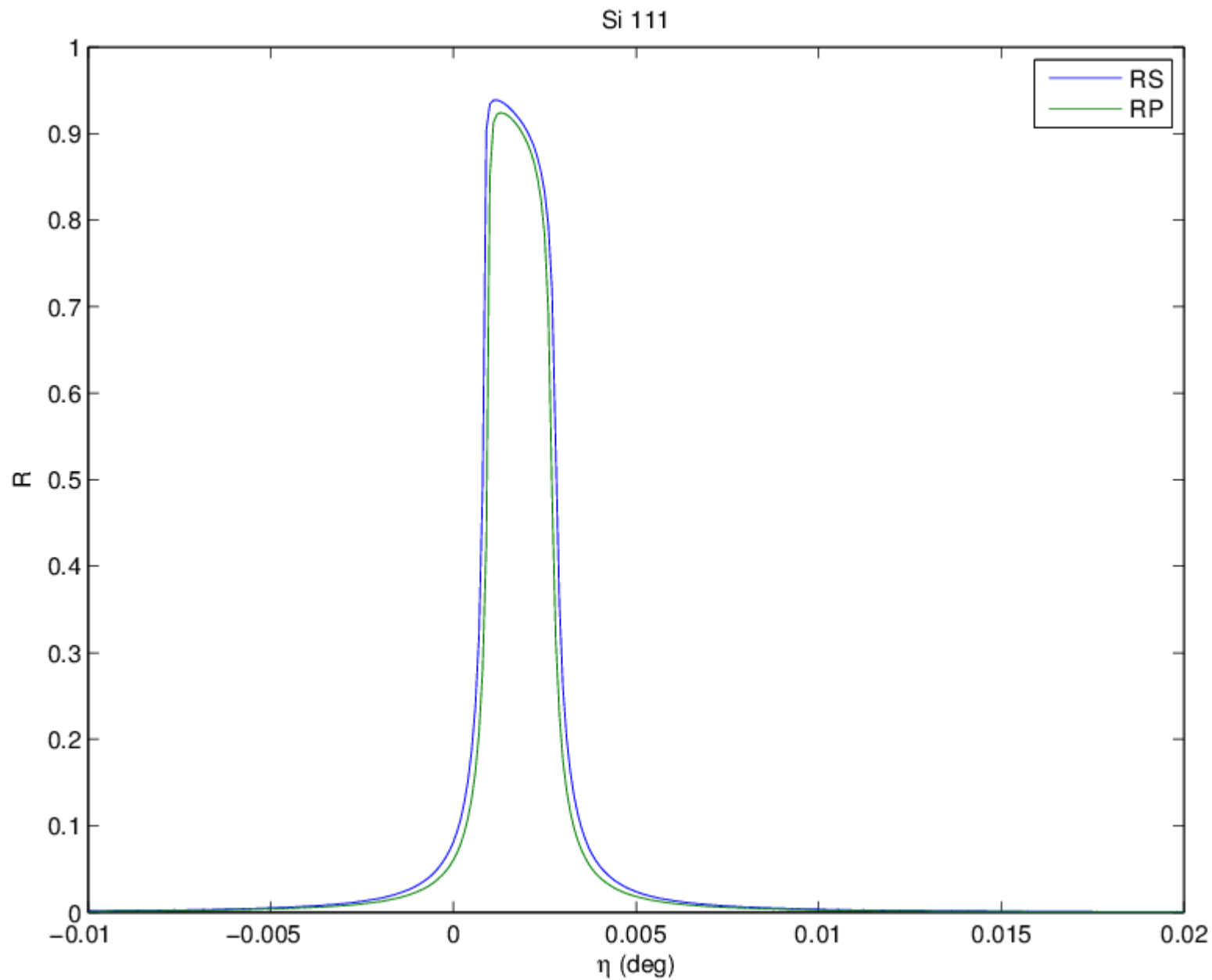
# Dynamická teorie

Odraz na periodické multivrstvě v jednovlnné aproximaci



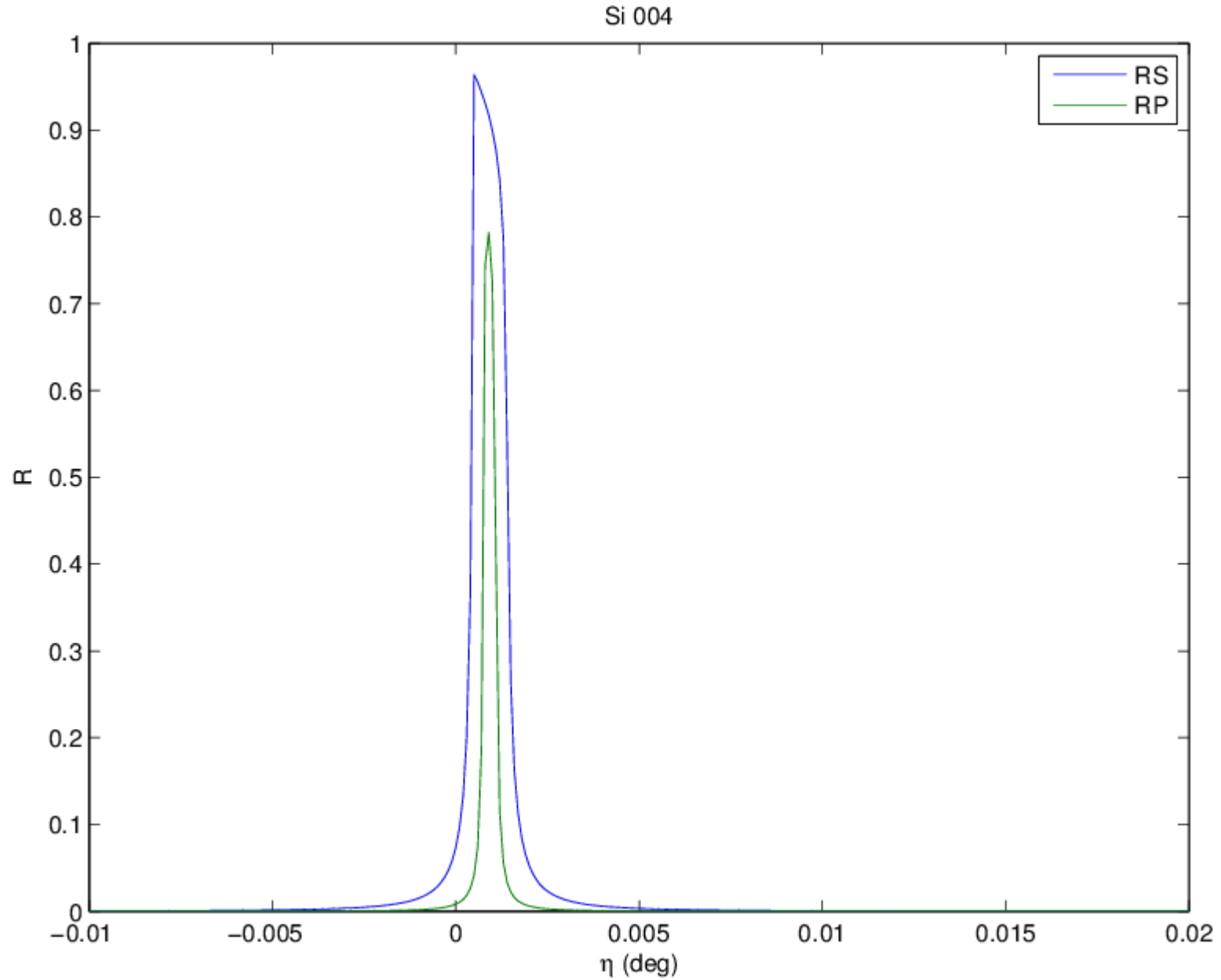
# Dynamická teorie

Difrakce na polonekonečném krystalu v dvouvlnné aproximaci



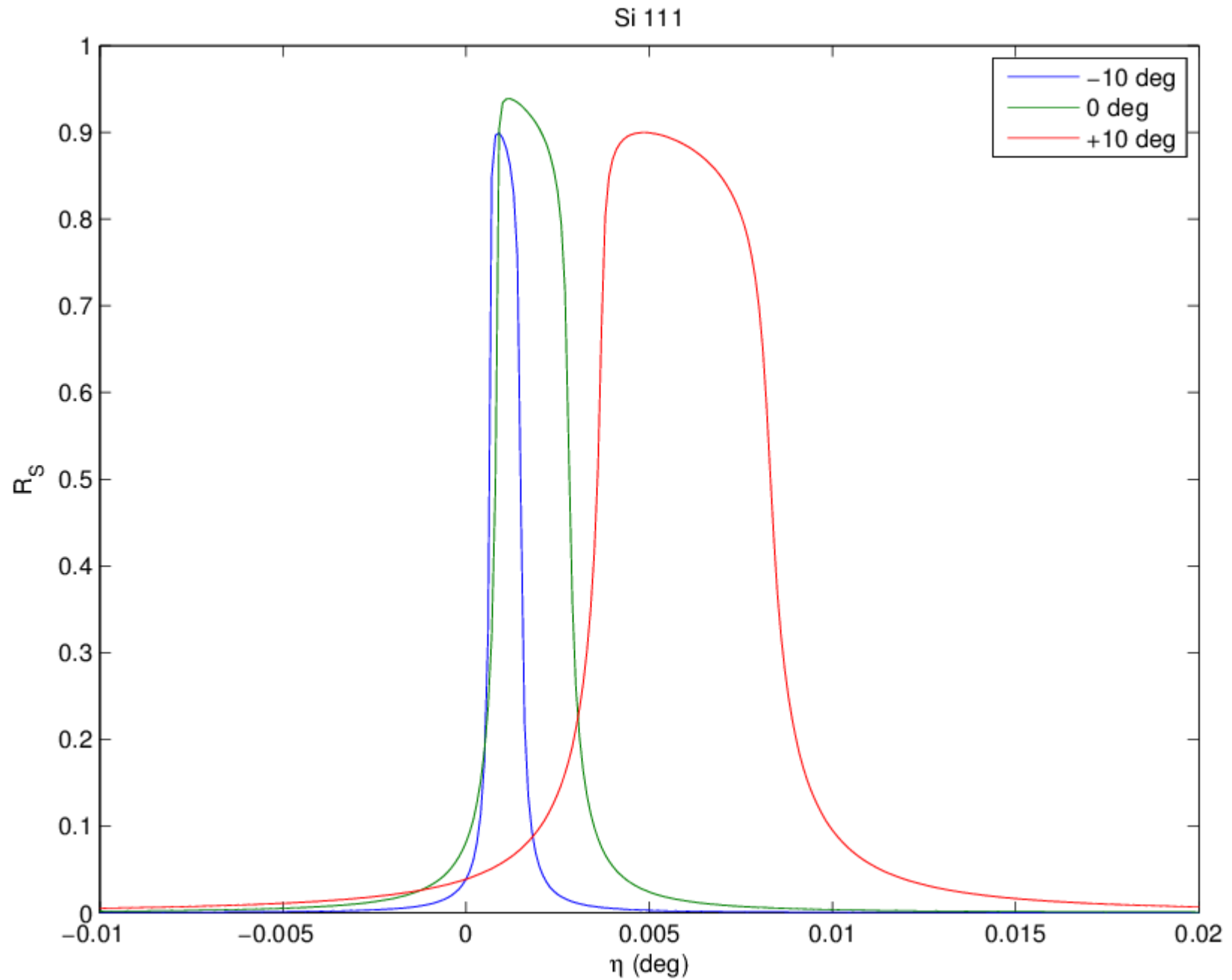
# Dynamická teorie

Difrakce na polonekonečném krystalu v dvouvlnné aproximaci



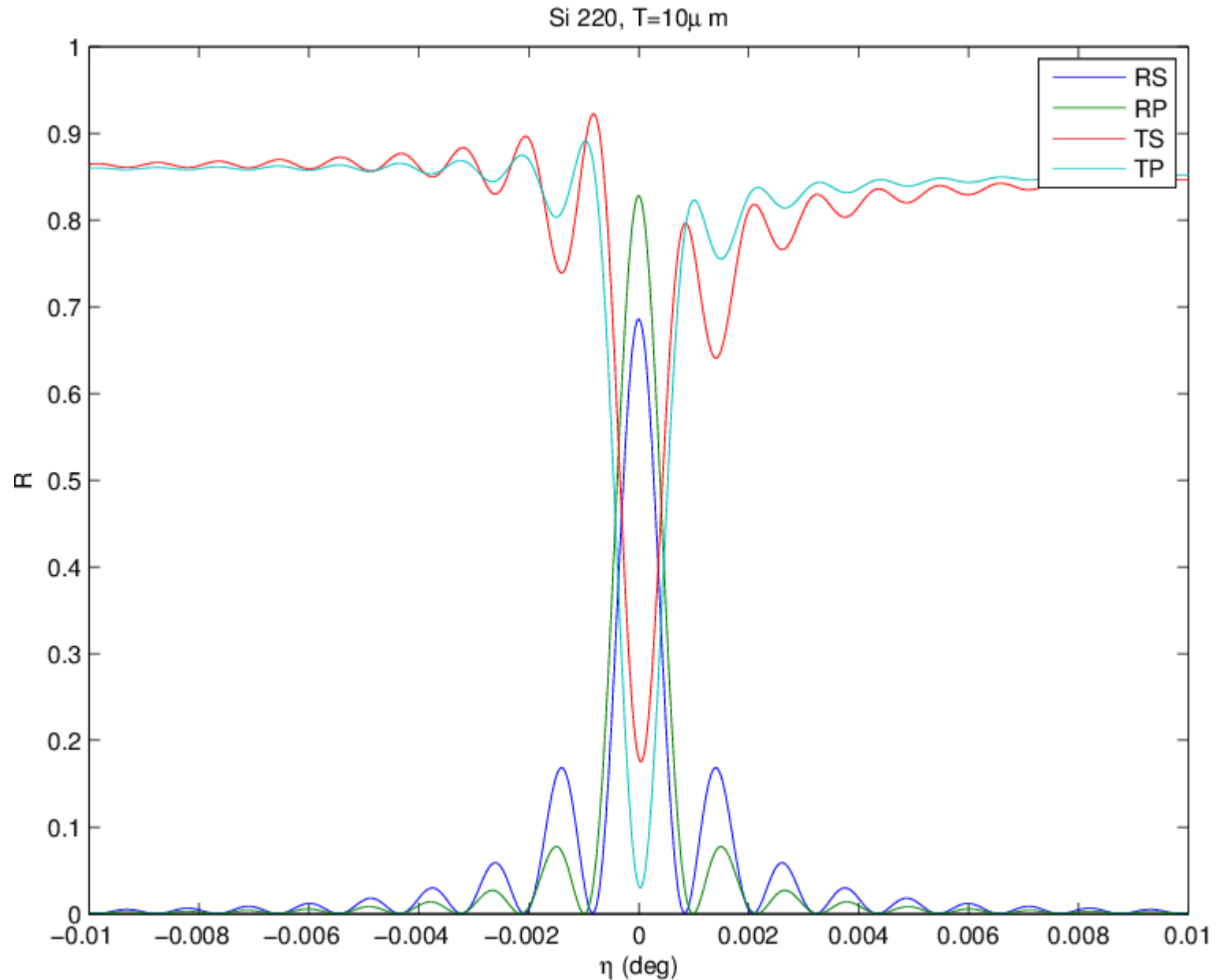
# Dynamická teorie

Difrakce na polonekonečném krystalu v dvouvlnné aproximaci



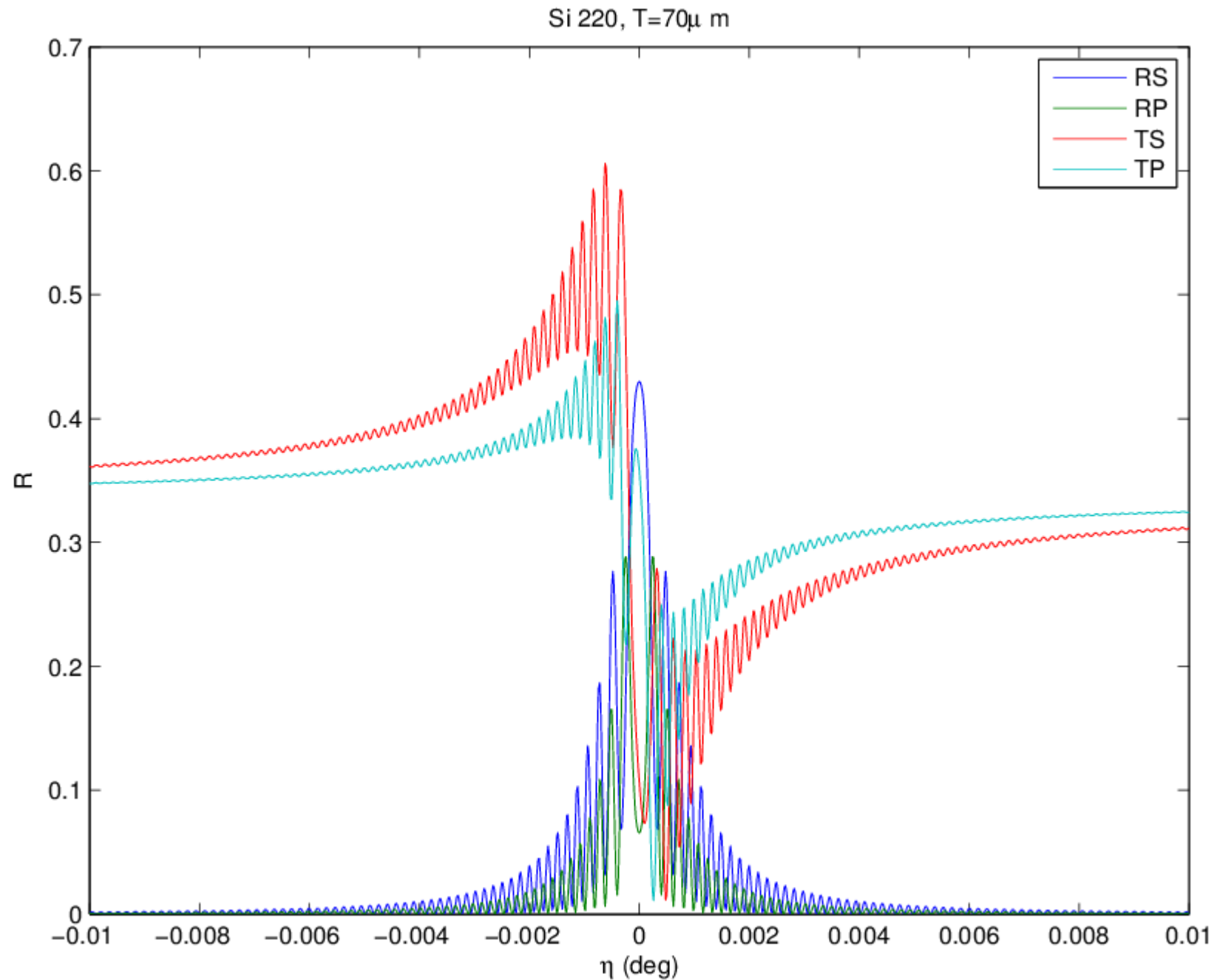
# Dynamická teorie

Difrakce na tenkém krystalu v dvouvlonné aproximaci



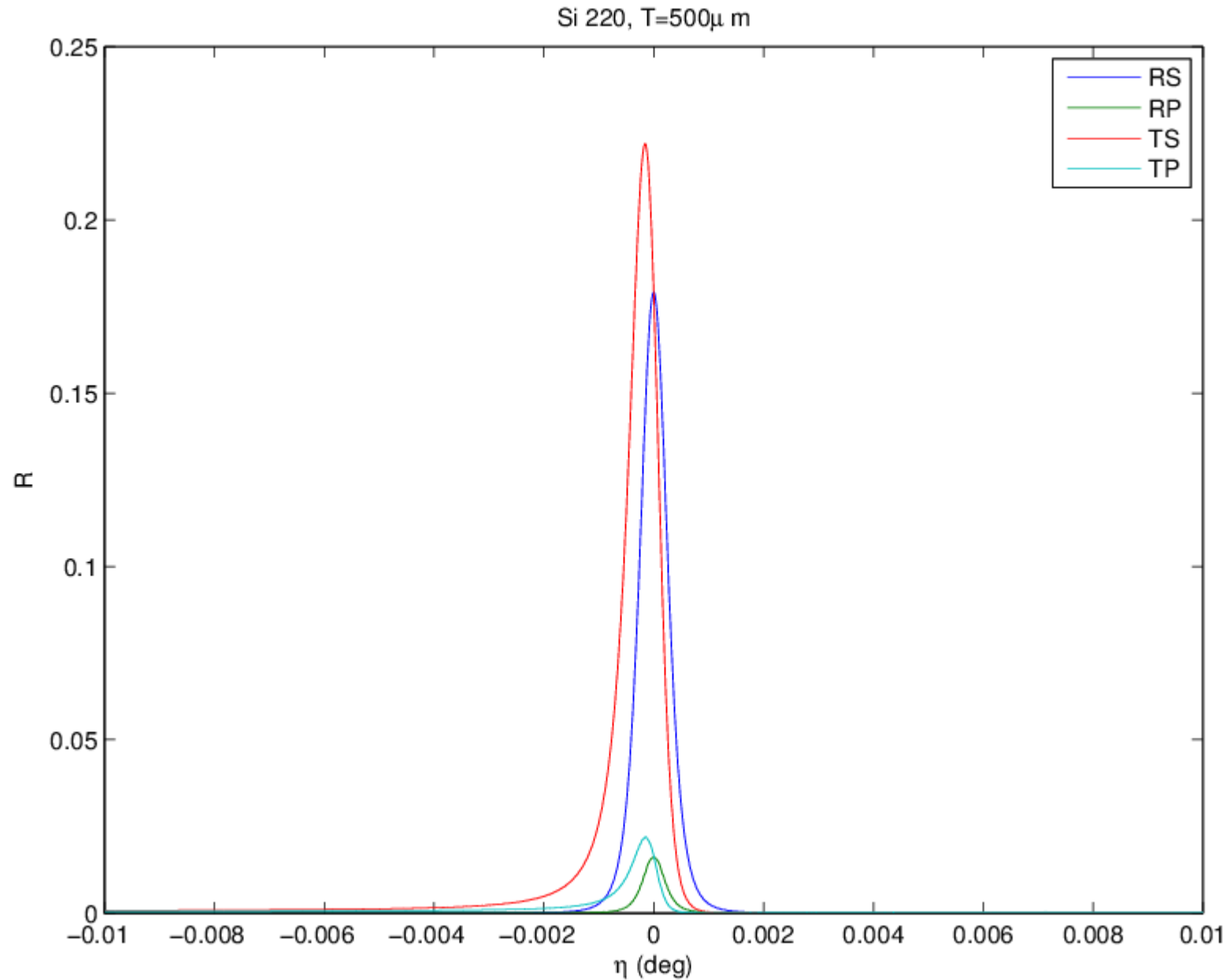
# Dynamická teorie

Difrakce na tenkém krystalu v dvouvlonné aproximaci



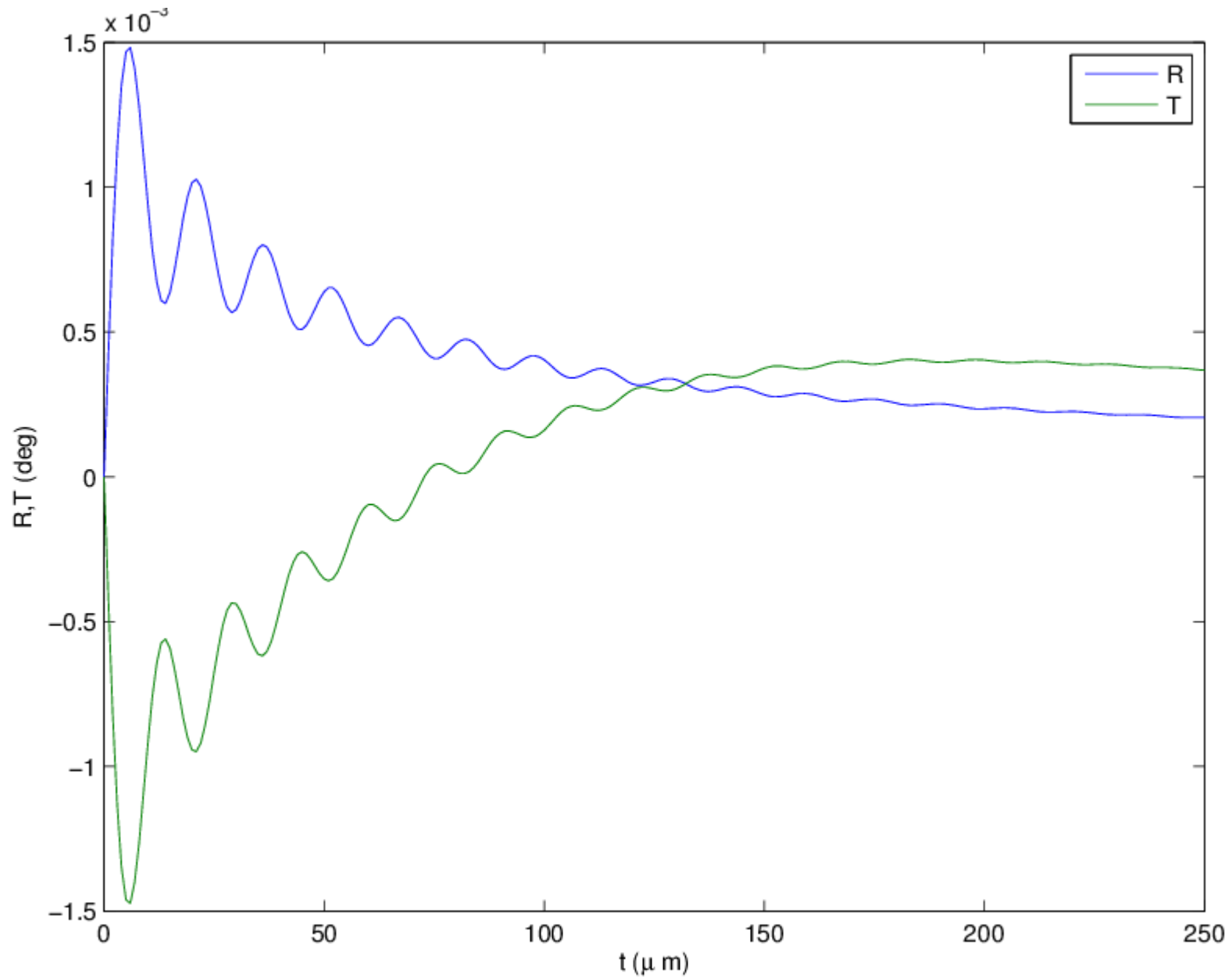
# Dynamická teorie

Difrakce na tenkém krystalu v dvouvlonné aproximaci



# Dynamická teorie

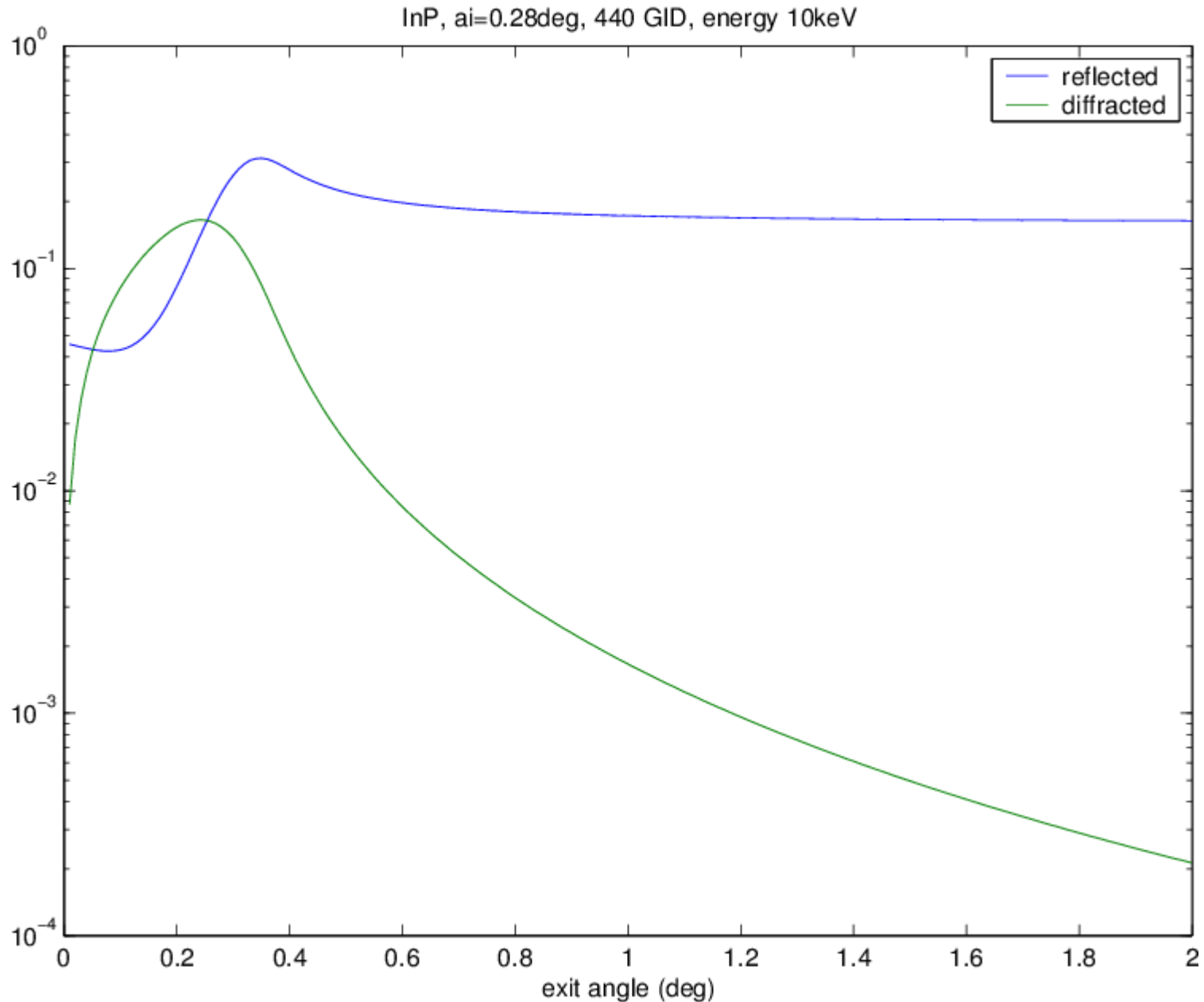
Difrakce na tenkém krystalu v dvouvlonné aproximaci, závislost integrální intenzity na tloušťce vzorku





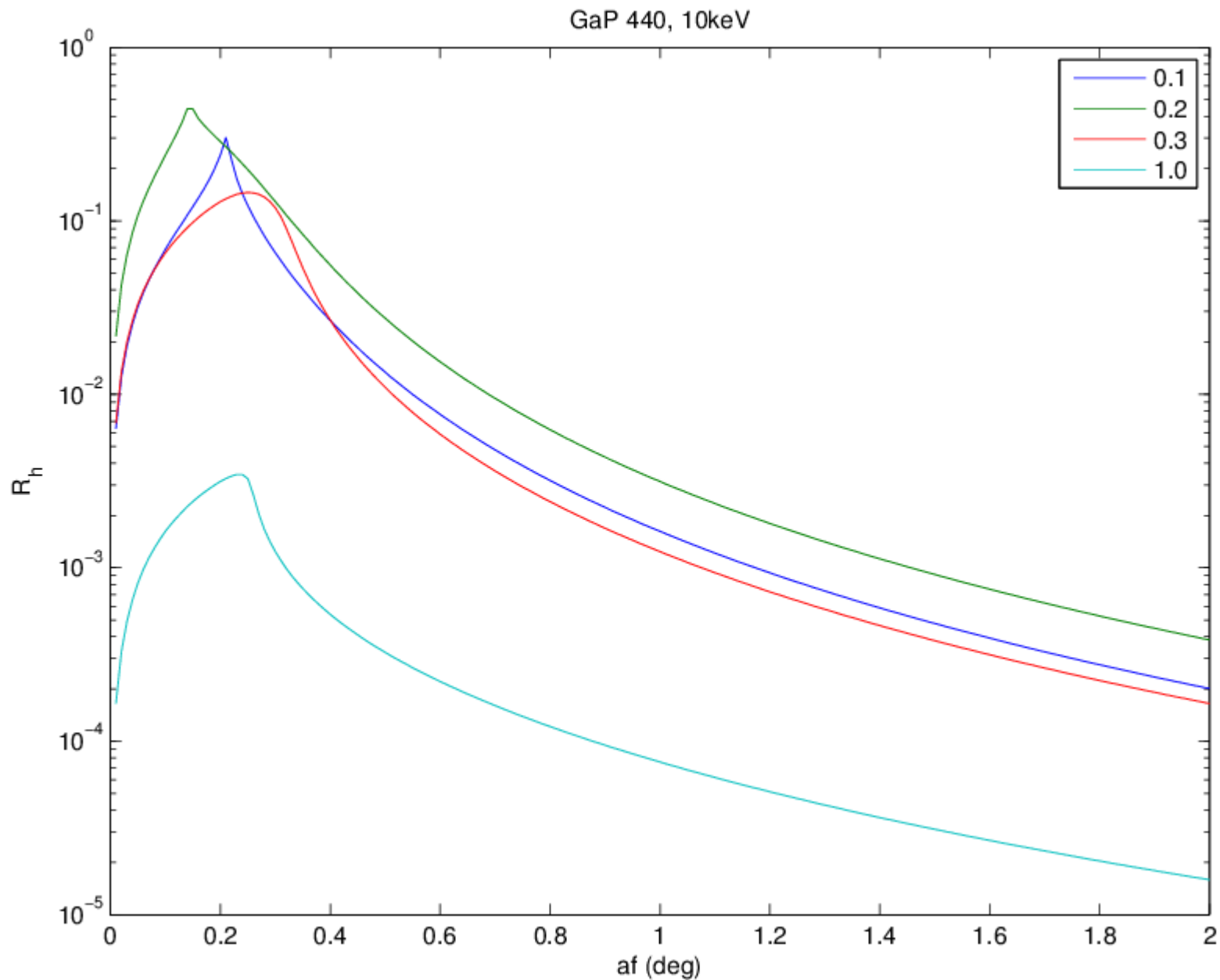
# Dynamická teorie

Grazing-incidence difrakce



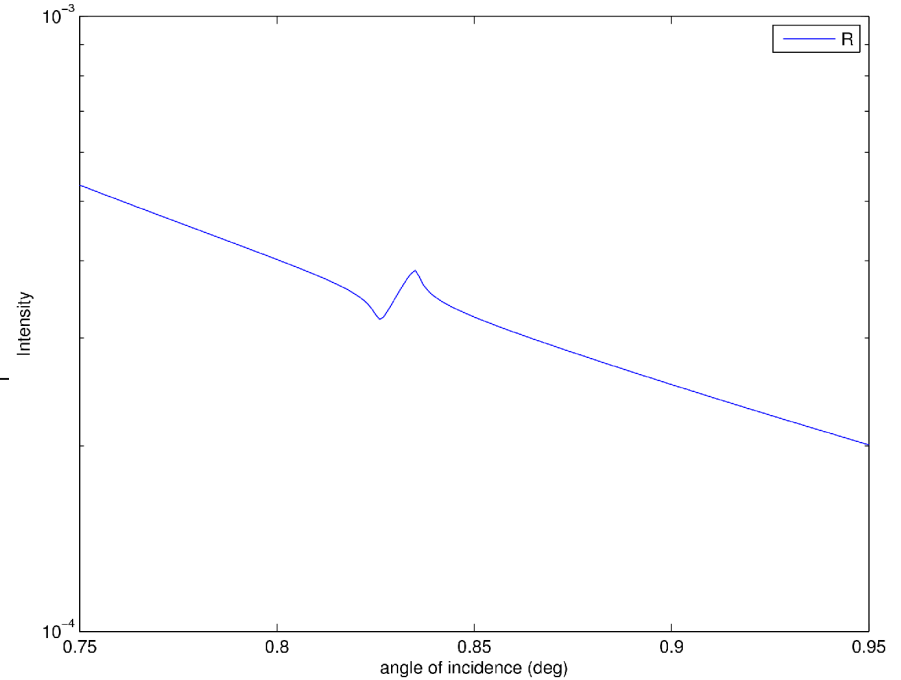
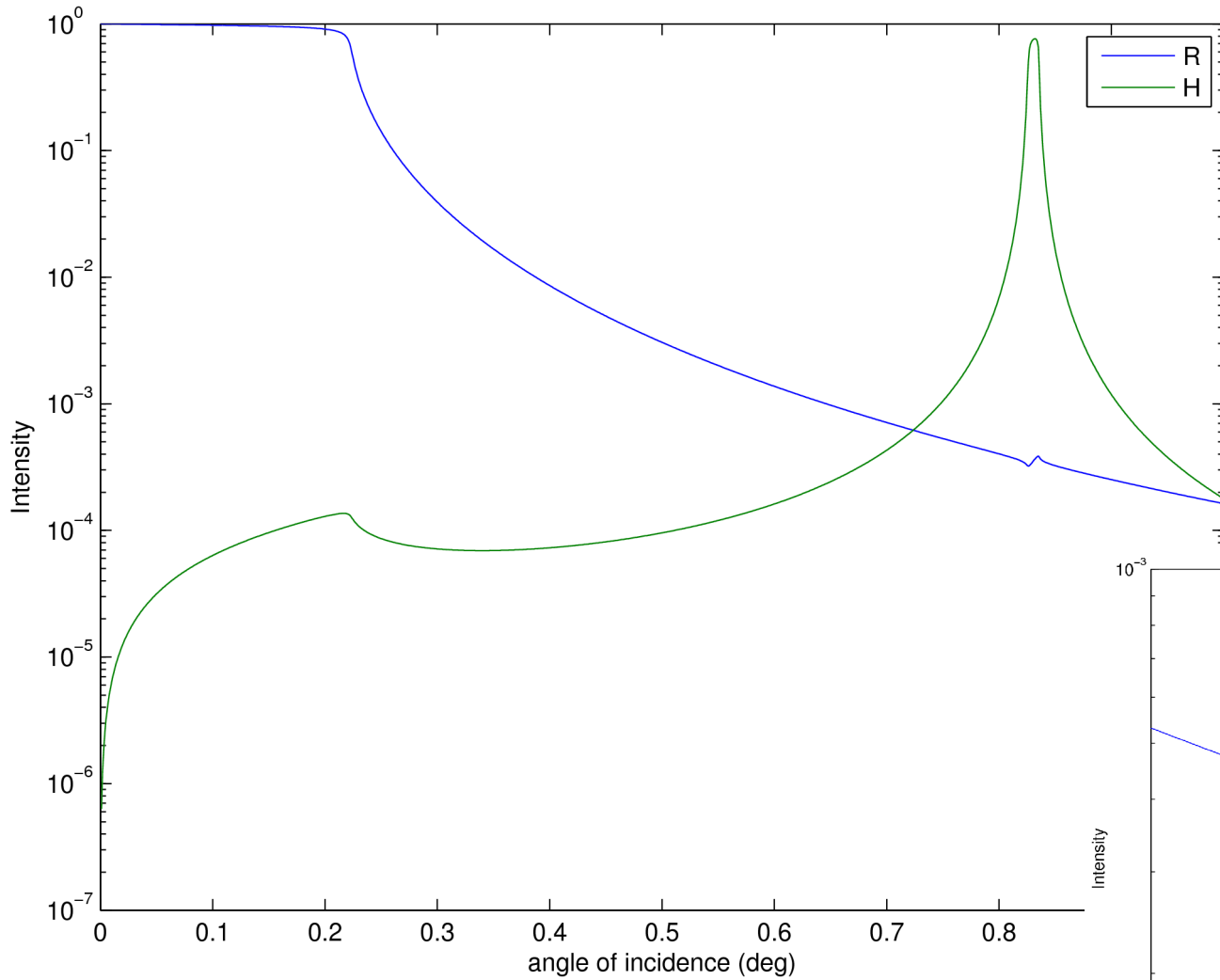
# Dynamická teorie

Grazing-incidence difrakce, závislost na úhlu výstupu pro různé úhly dopadu



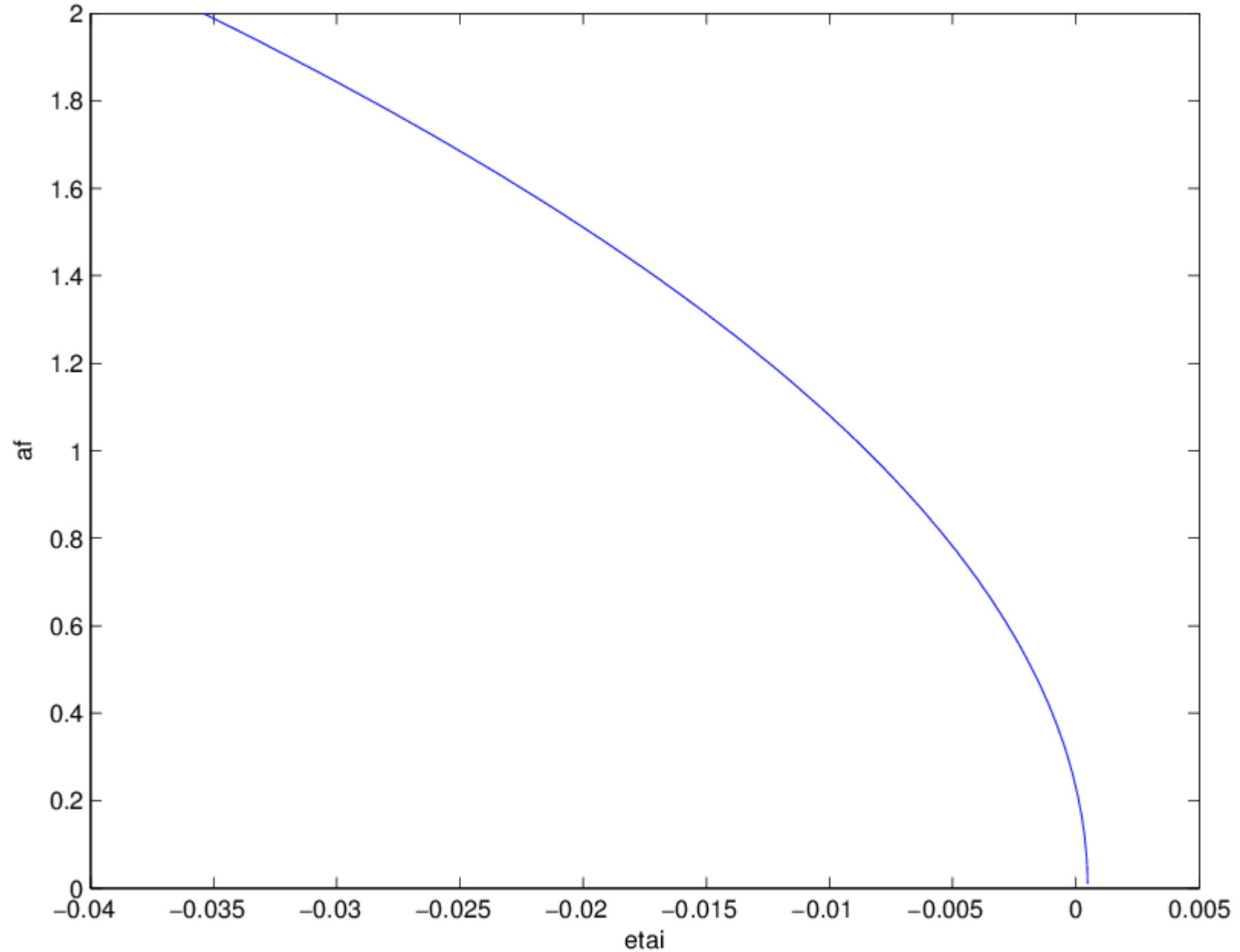
# Dynamická teorie

Silně asymetrická difrakce, záření CuK $\alpha$ , difrakce Si 220, úhel asymetrie 22.8



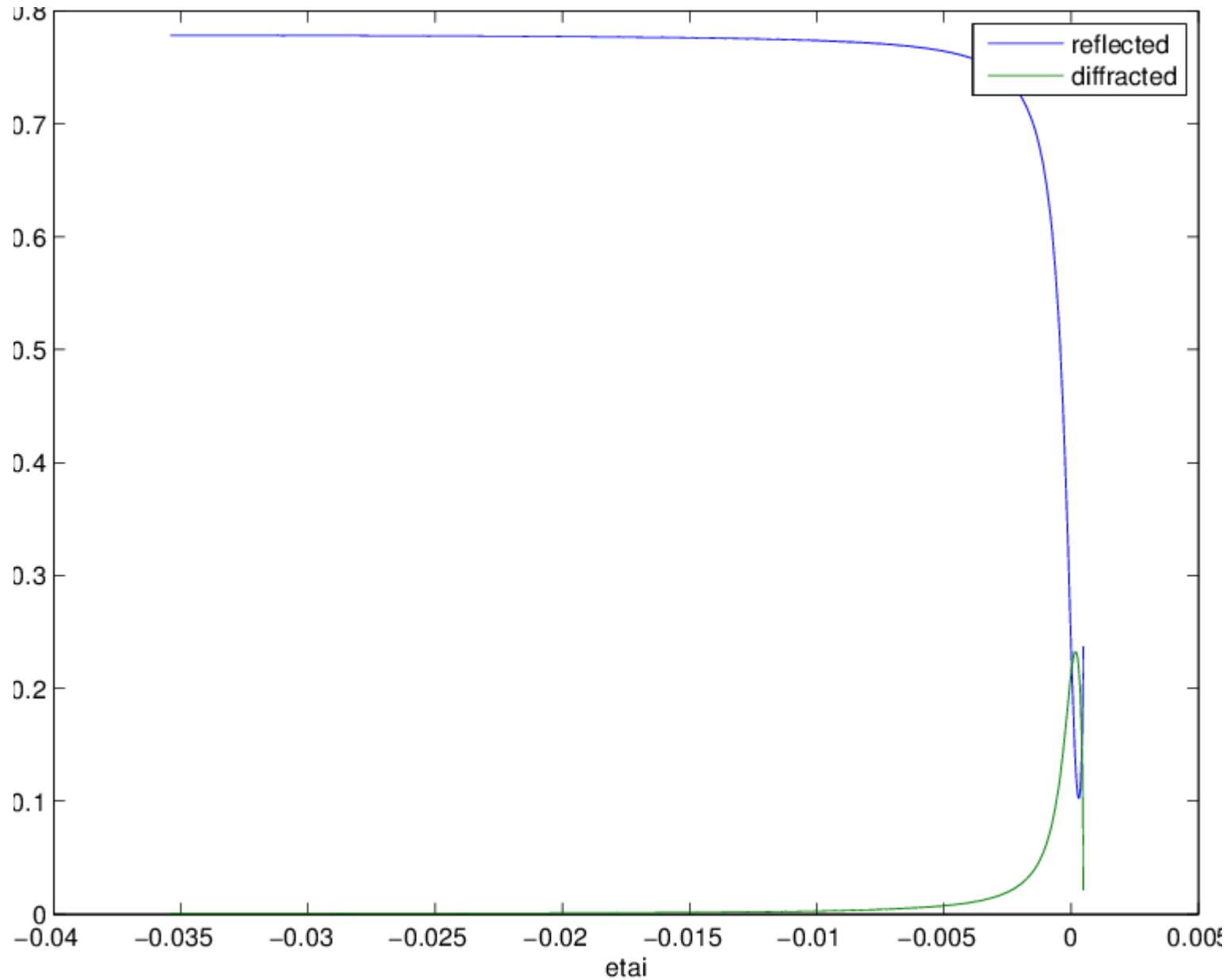
# Dynamická teorie

Grazing-incidence difrakce



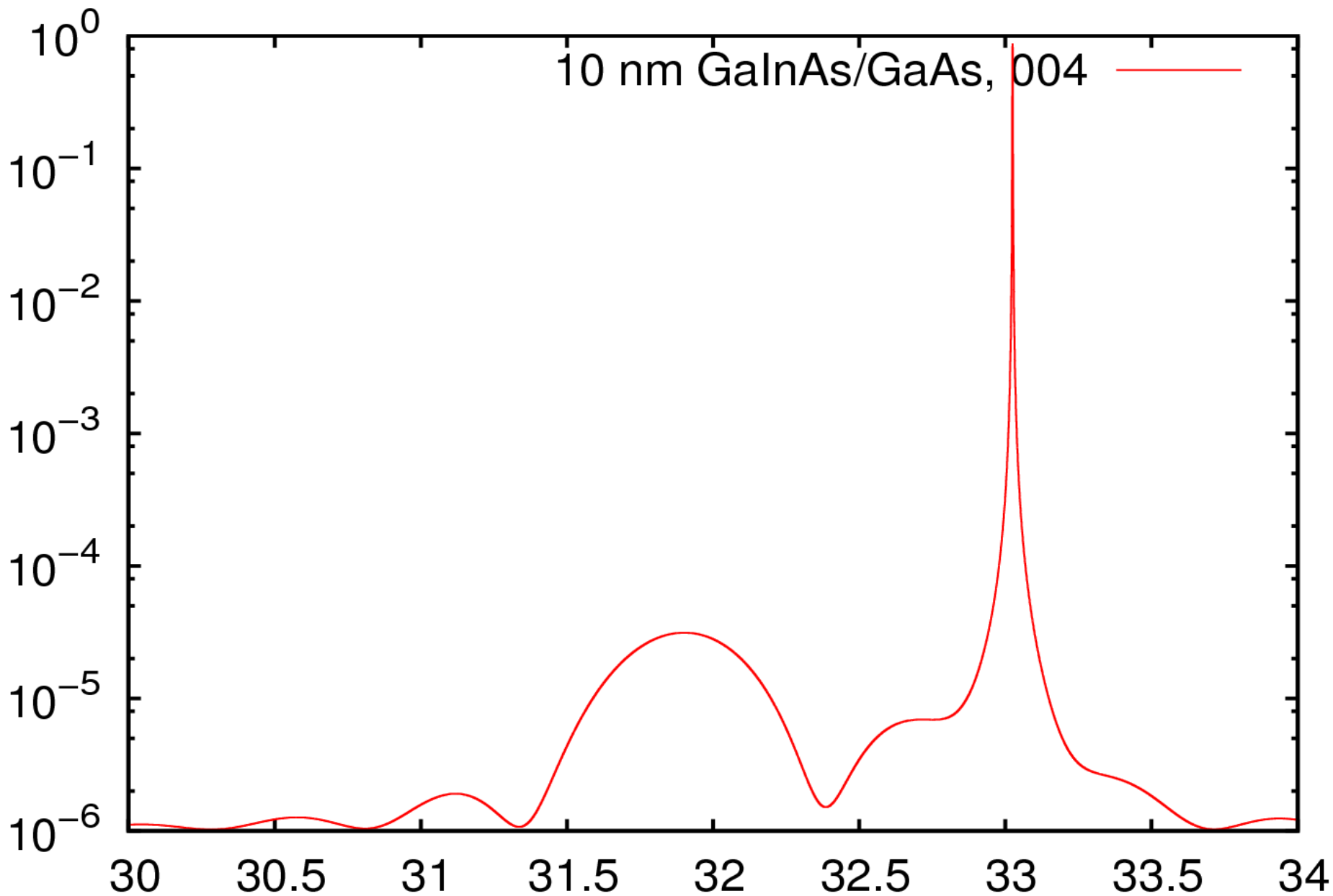
# Dynamická teorie

Grazing-incidence difrakce



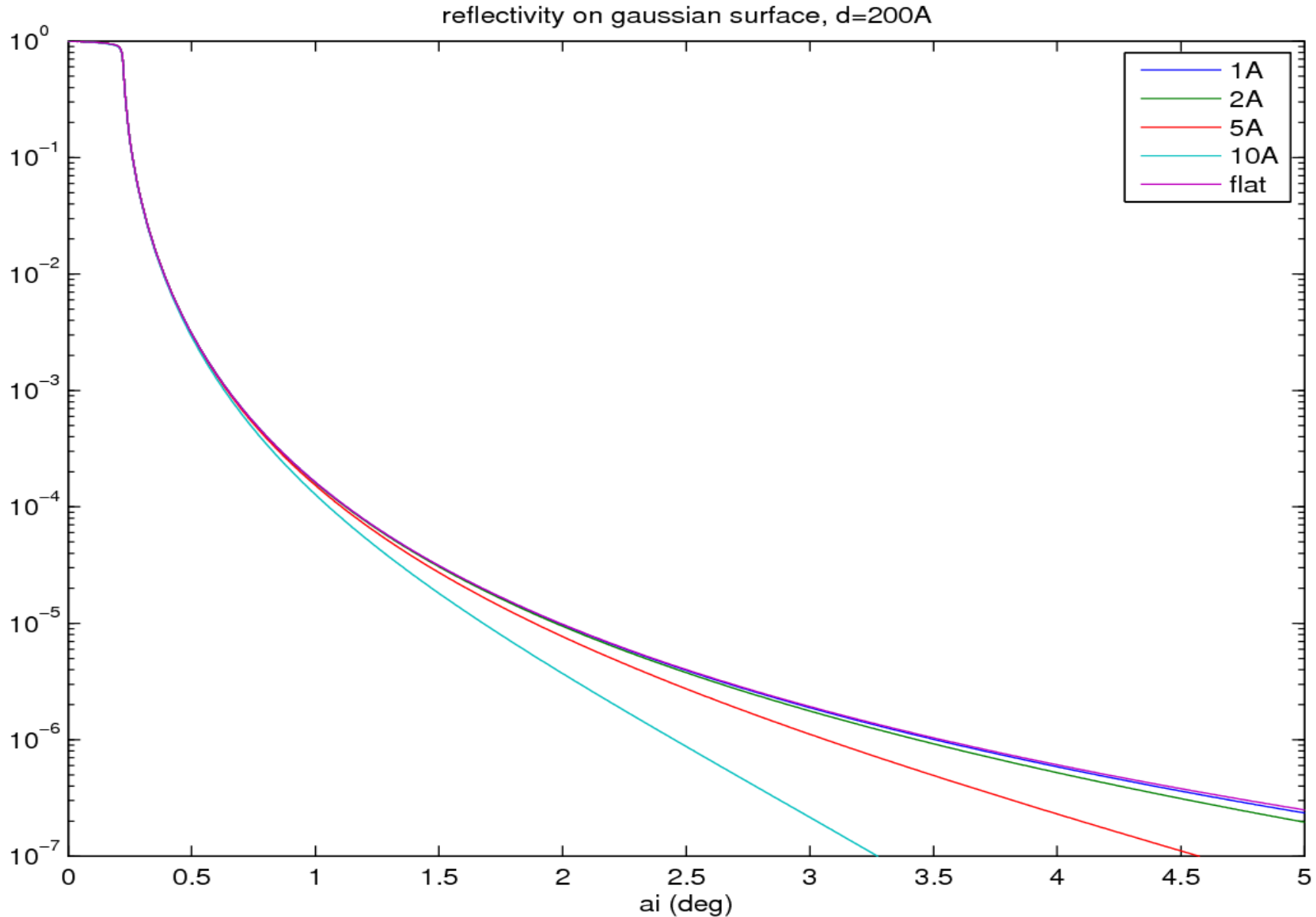
# Dynamická teorie

Pseudomorfní vrstva na substrátu



# Odraz na drsných rozhraních

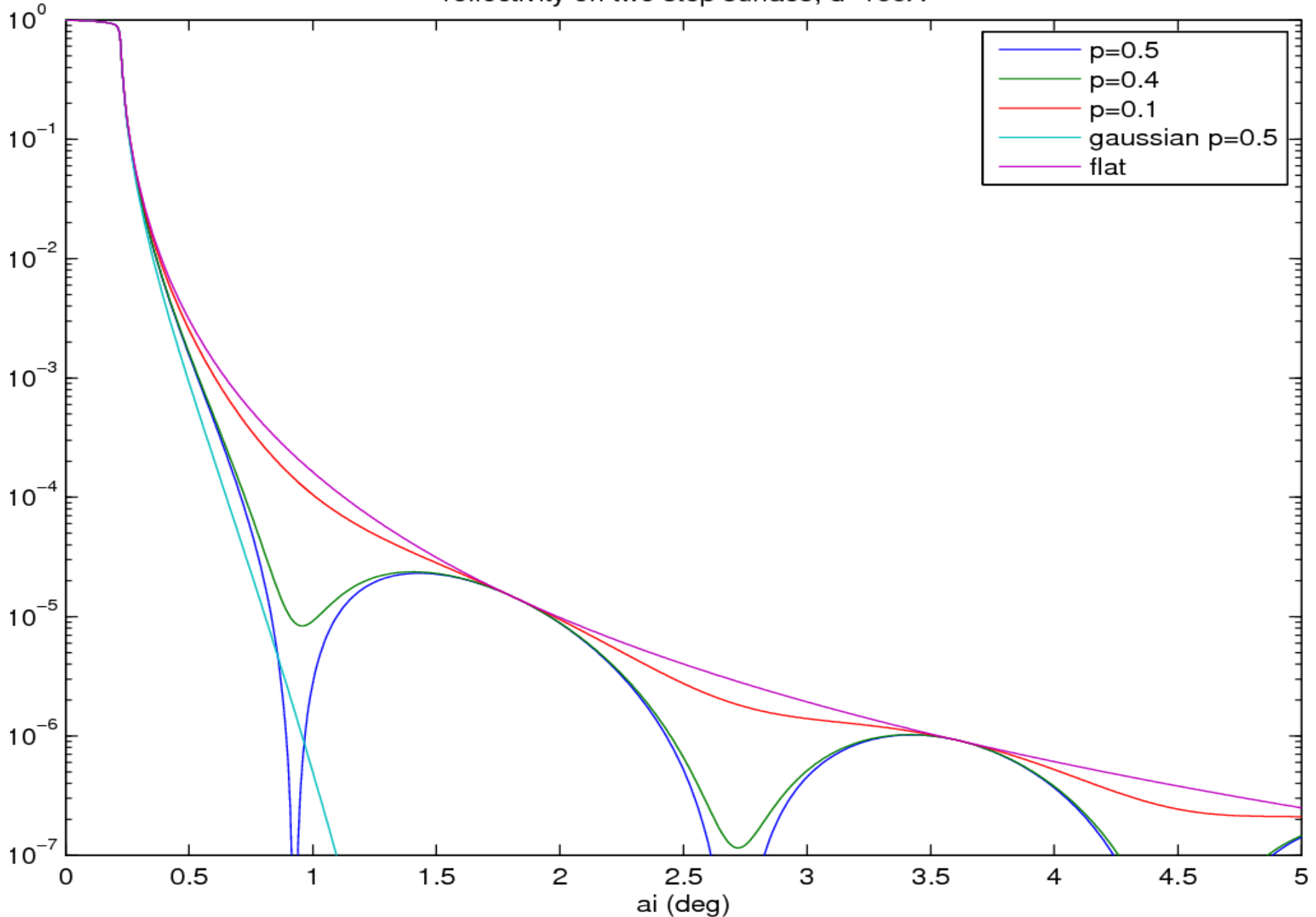
Jen substrát, různé drsnosti rozhraní, gaussovský model drsnosti, dvouúrovňové rozhraní



# Odraz na drsných rozhraních

Jen substrát, různé drsnosti rozhraní, gaussovský model drsnosti, dvouúrovňové rozhraní

reflectivity on two step surface,  $d=100\text{\AA}$

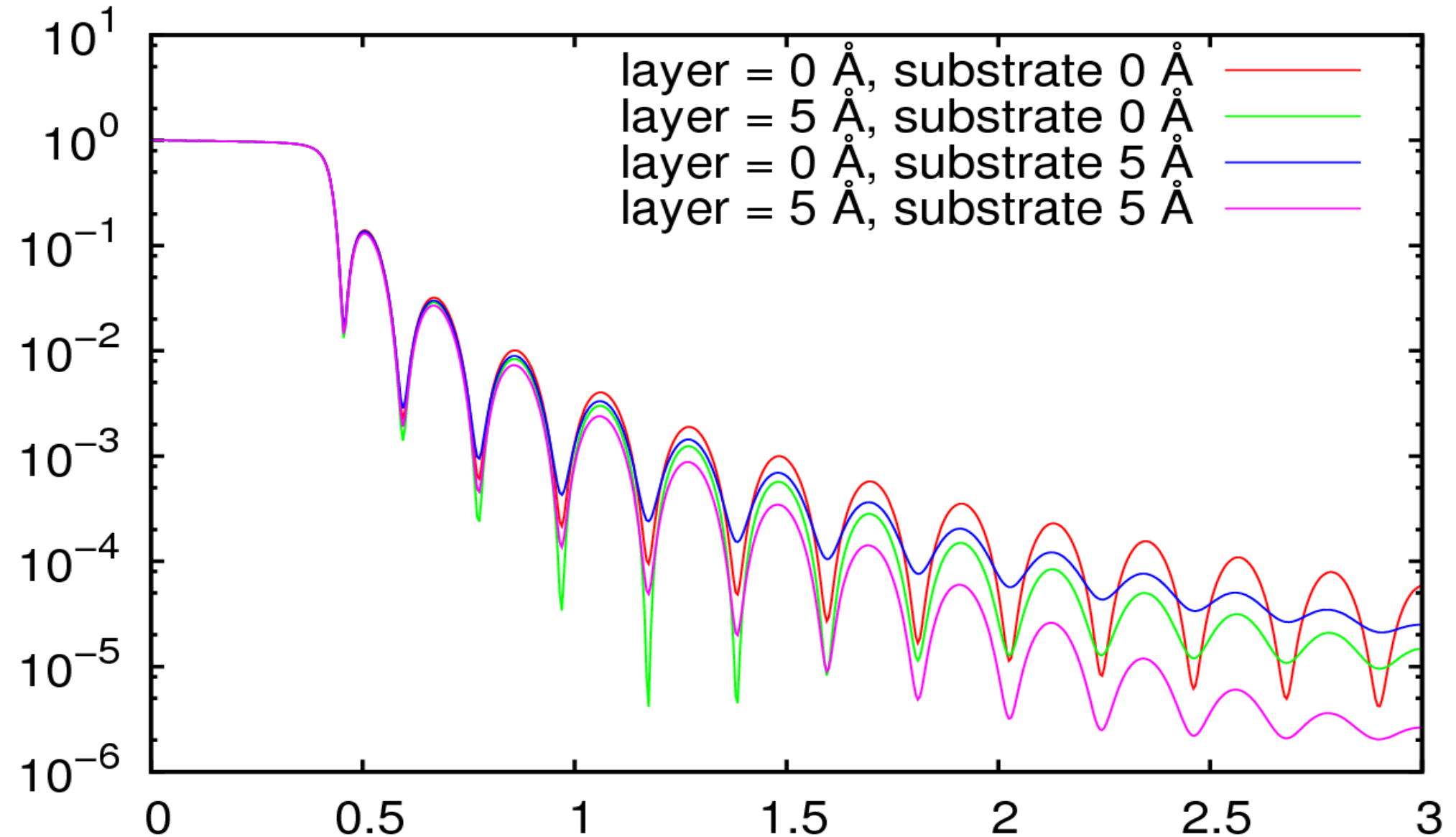




# Odraz na drsných rozhraních

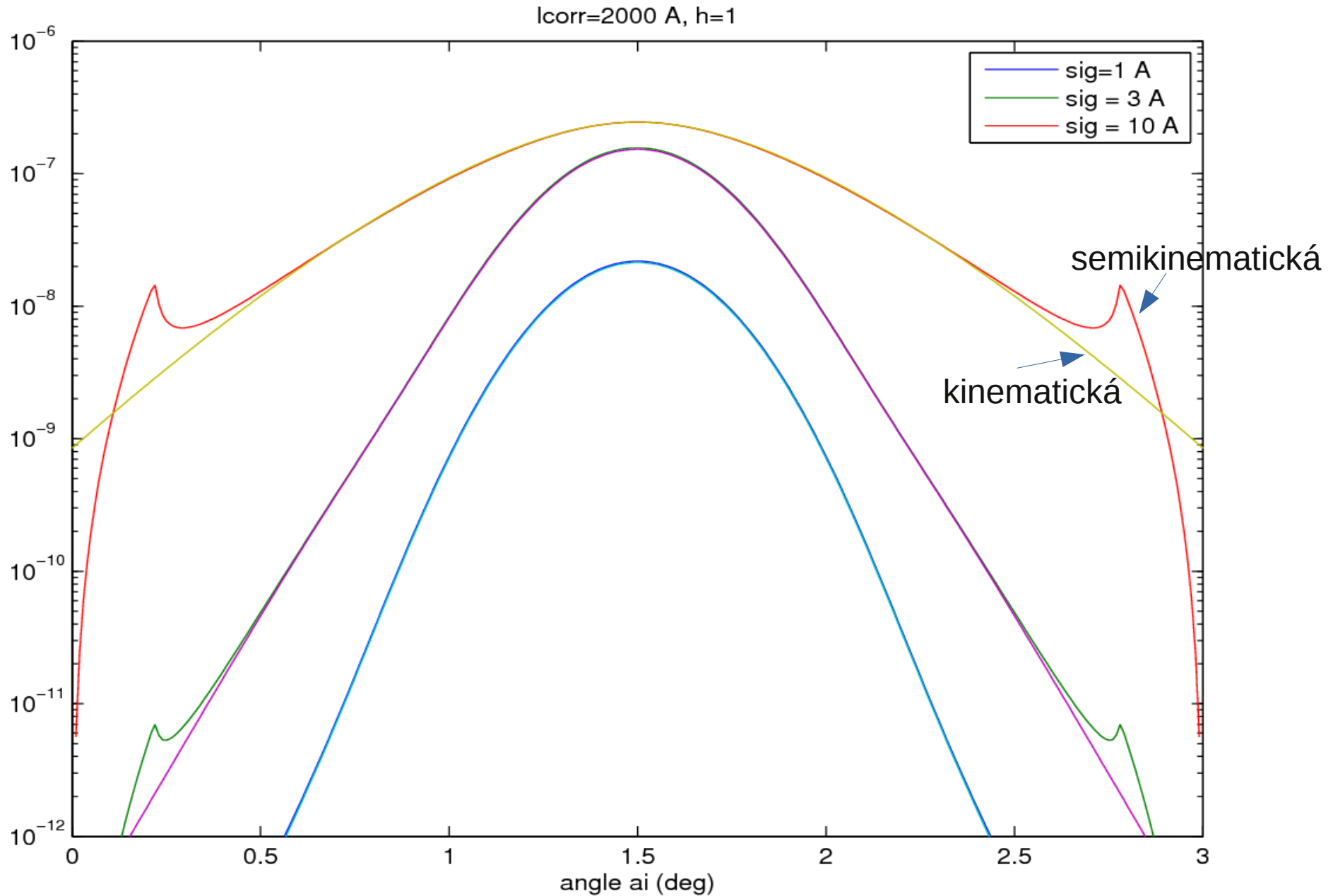
Vrstva na substrátu, různé drsnosti rozhraní, gaussovský model drsnosti

20 nm Ni/Si



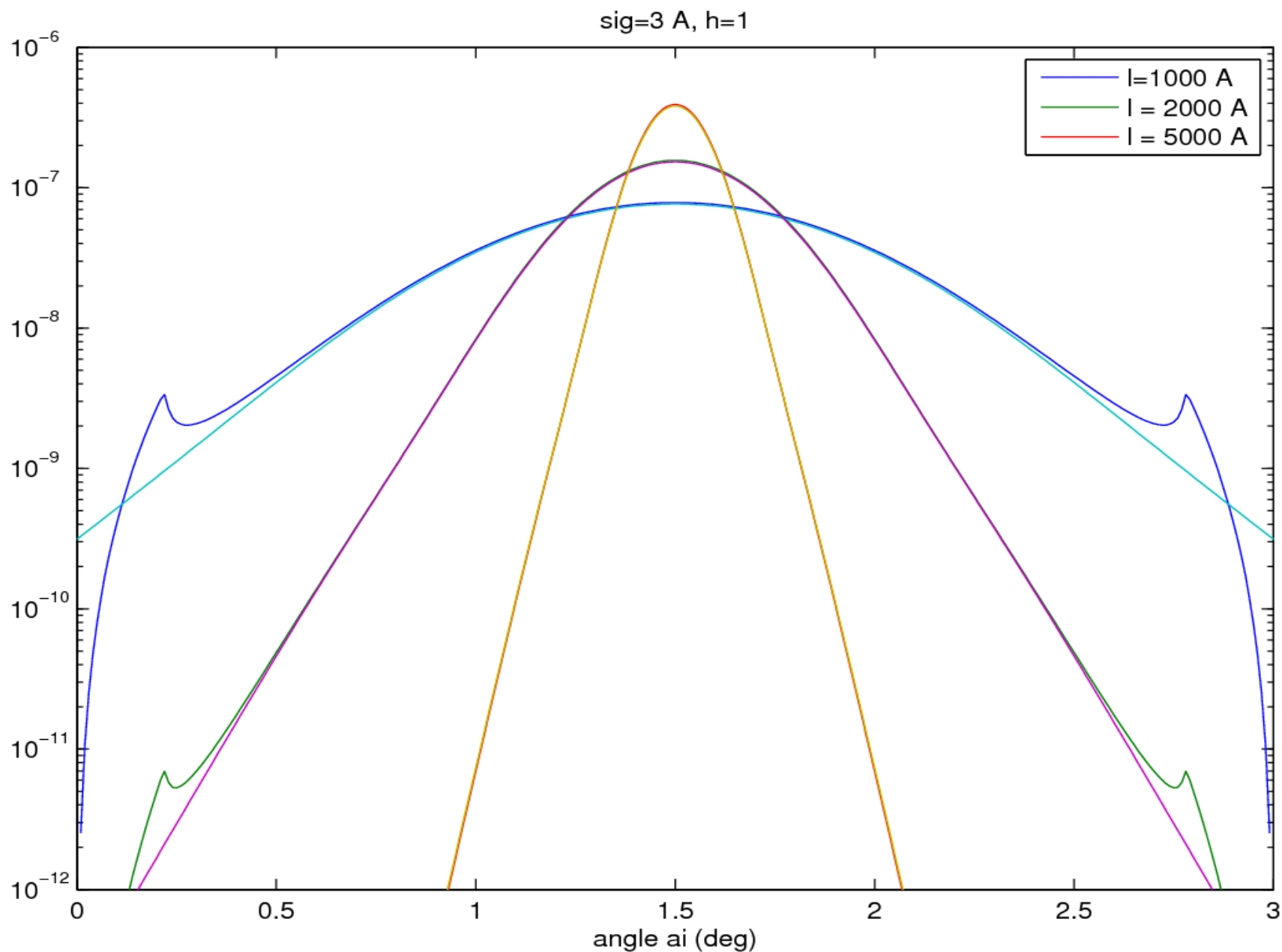
# Odraz na drsných rozhraních

Nekoherentní rozptyl, různé parametry fraktálové drsnosti



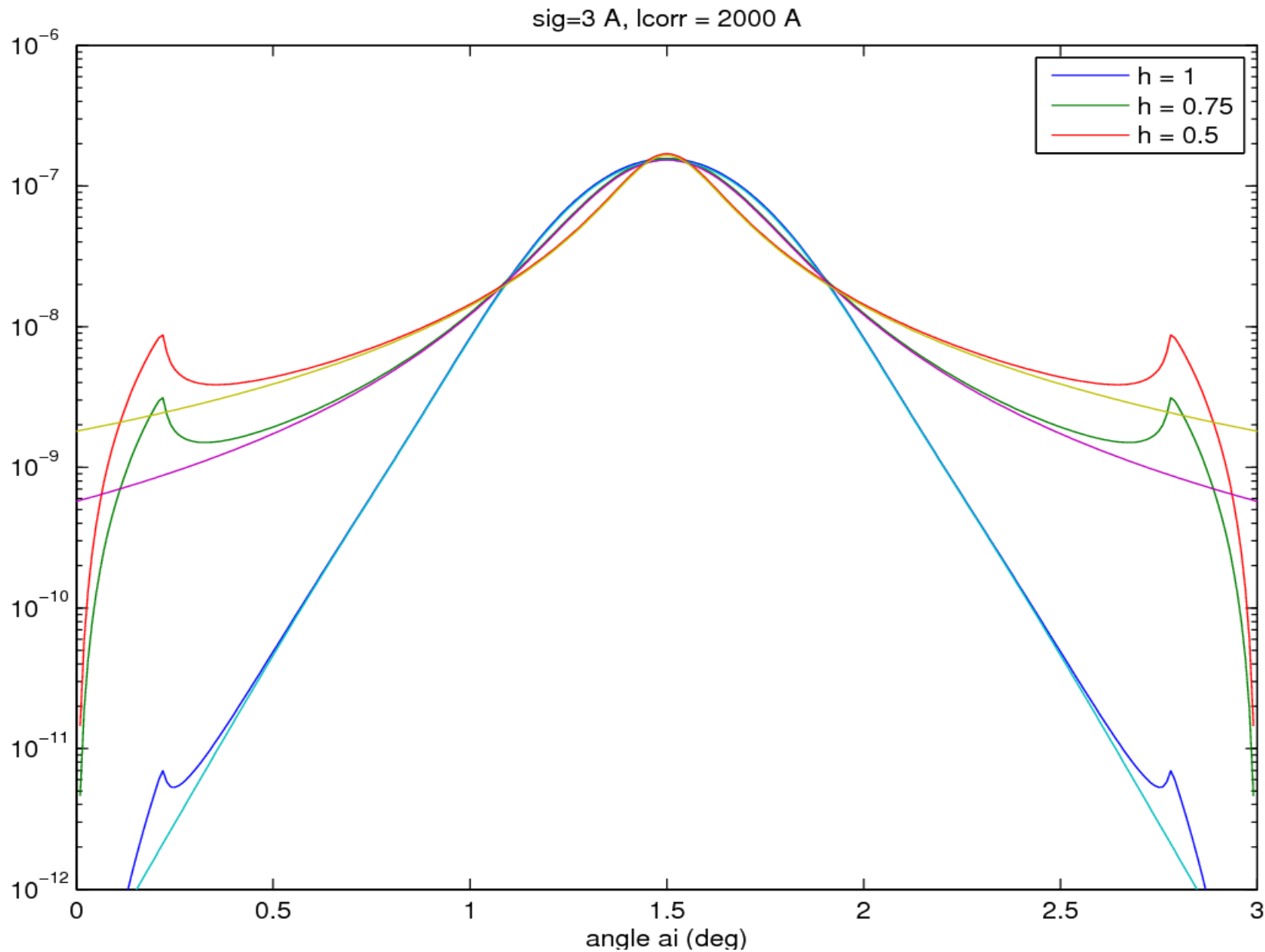
# Odraz na drsných rozhraních

Nekoherentní rozptyl, různé parametry fraktálové drsnosti



# Odraz na drsných rozhraních

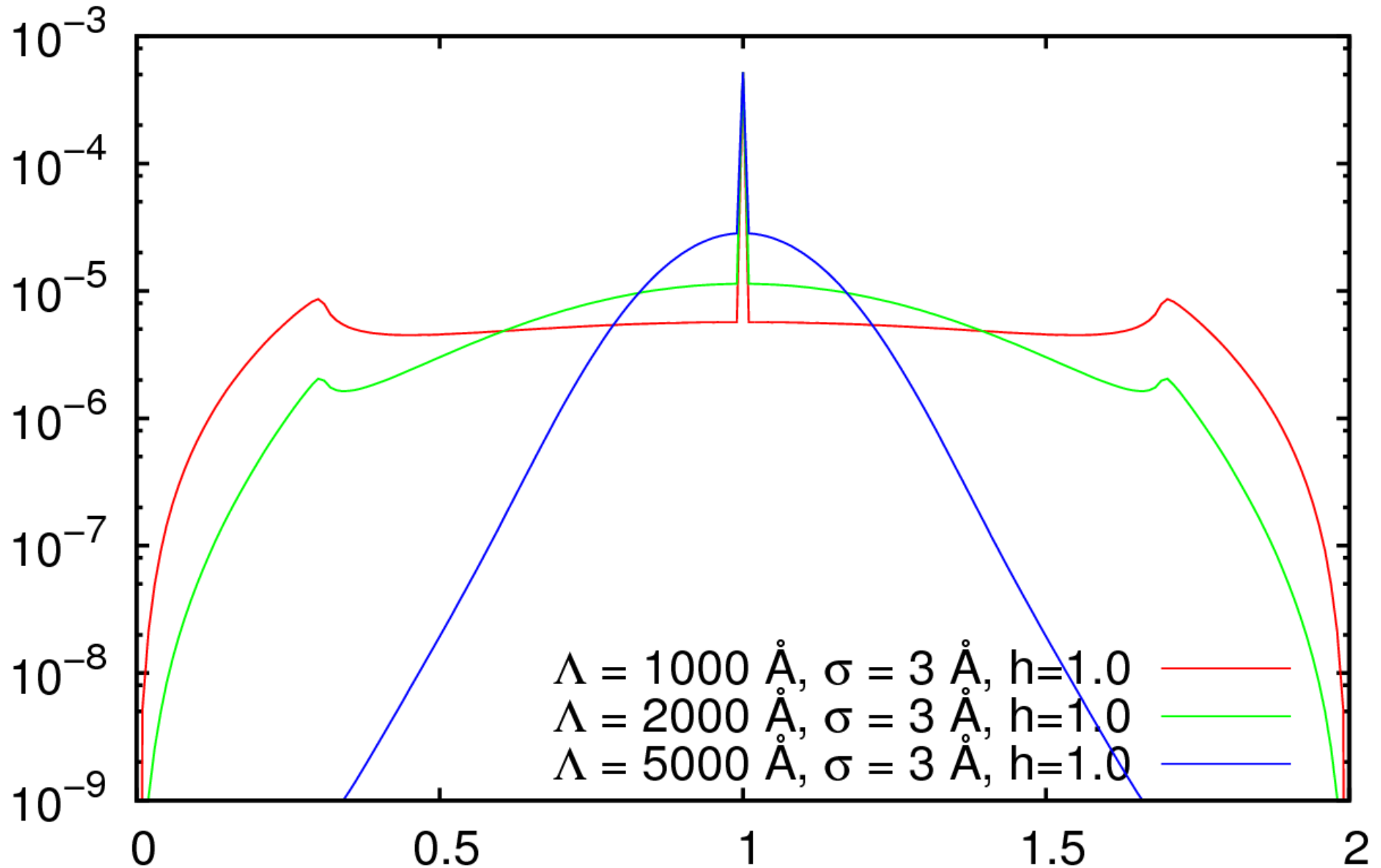
Nekoherentní rozptyl, různé parametry fraktálové drsnosti



# Odraz na drsných rozhraních

Koherentní a nekoherentní rozptyl, různé parametry fraktálové drsnosti

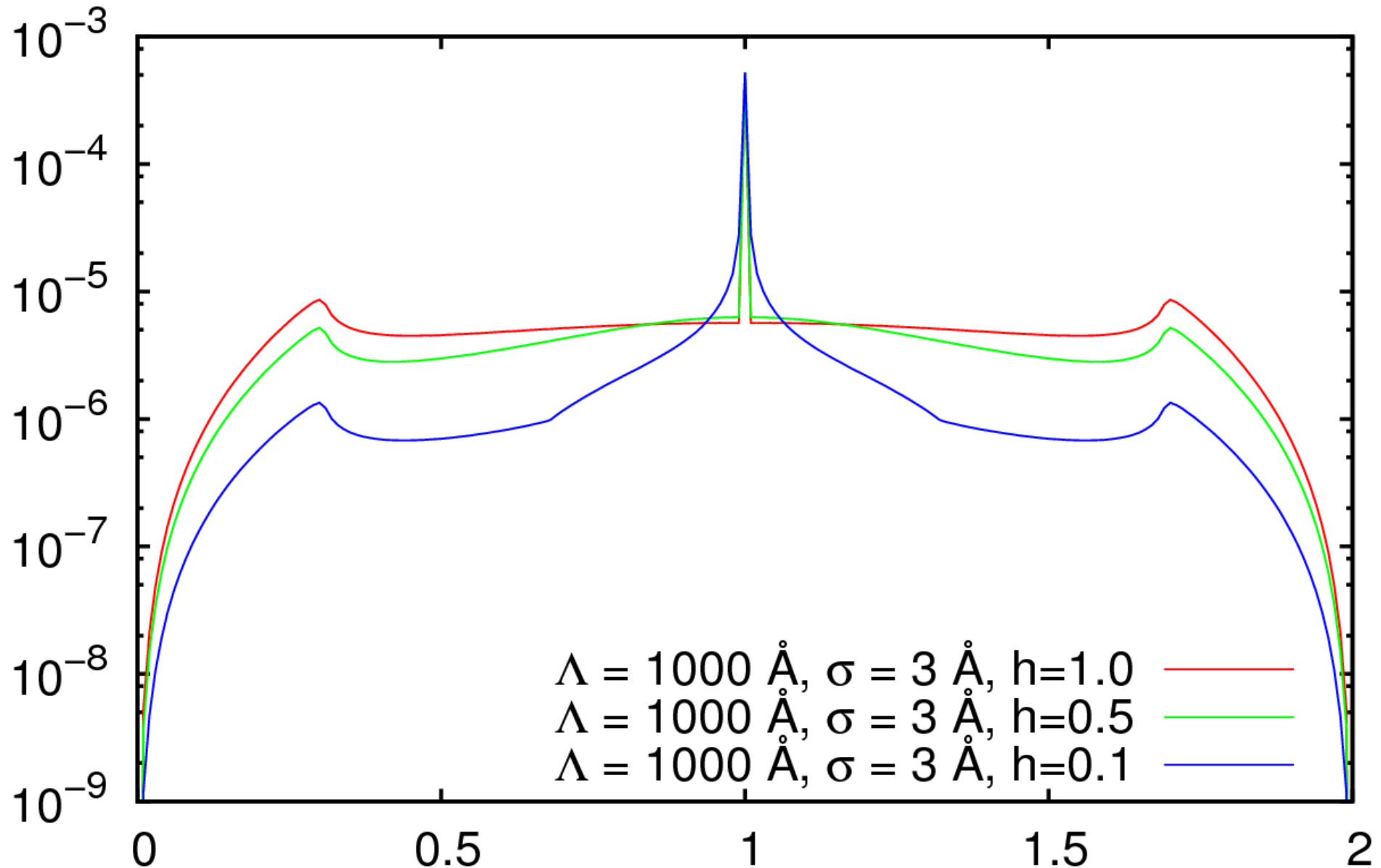
$\omega$  scan, GaAs substrate



# Odraz na drsných rozhraních

Koherentní a nekoherentní rozptyl, různé parametry fraktálové drsnosti

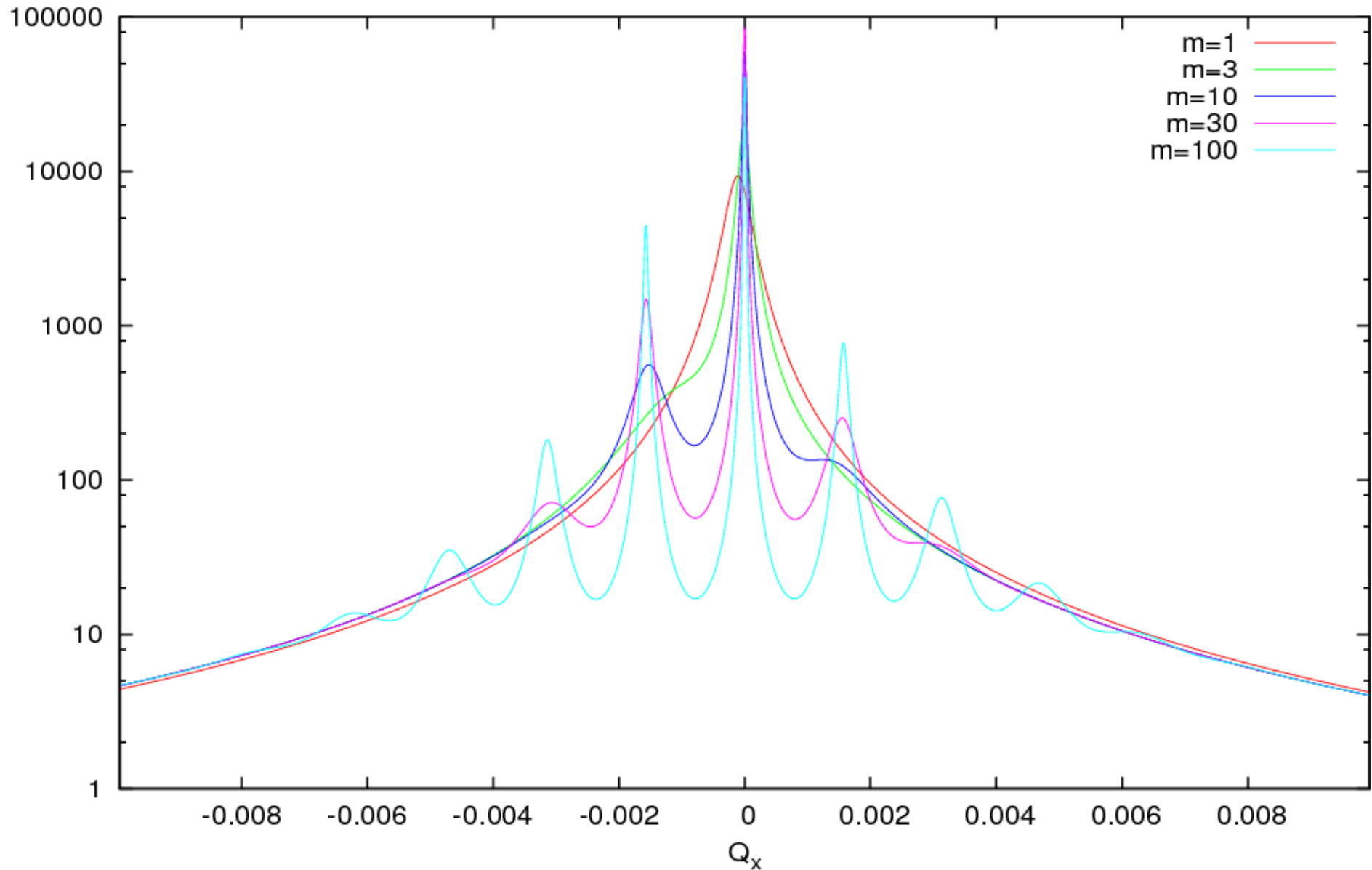
$\omega$  scan, GaAs substrate



# Odraz na drsných rozhraních

Nekoherentní rozptyl, různé parametry pro vicinální povrch

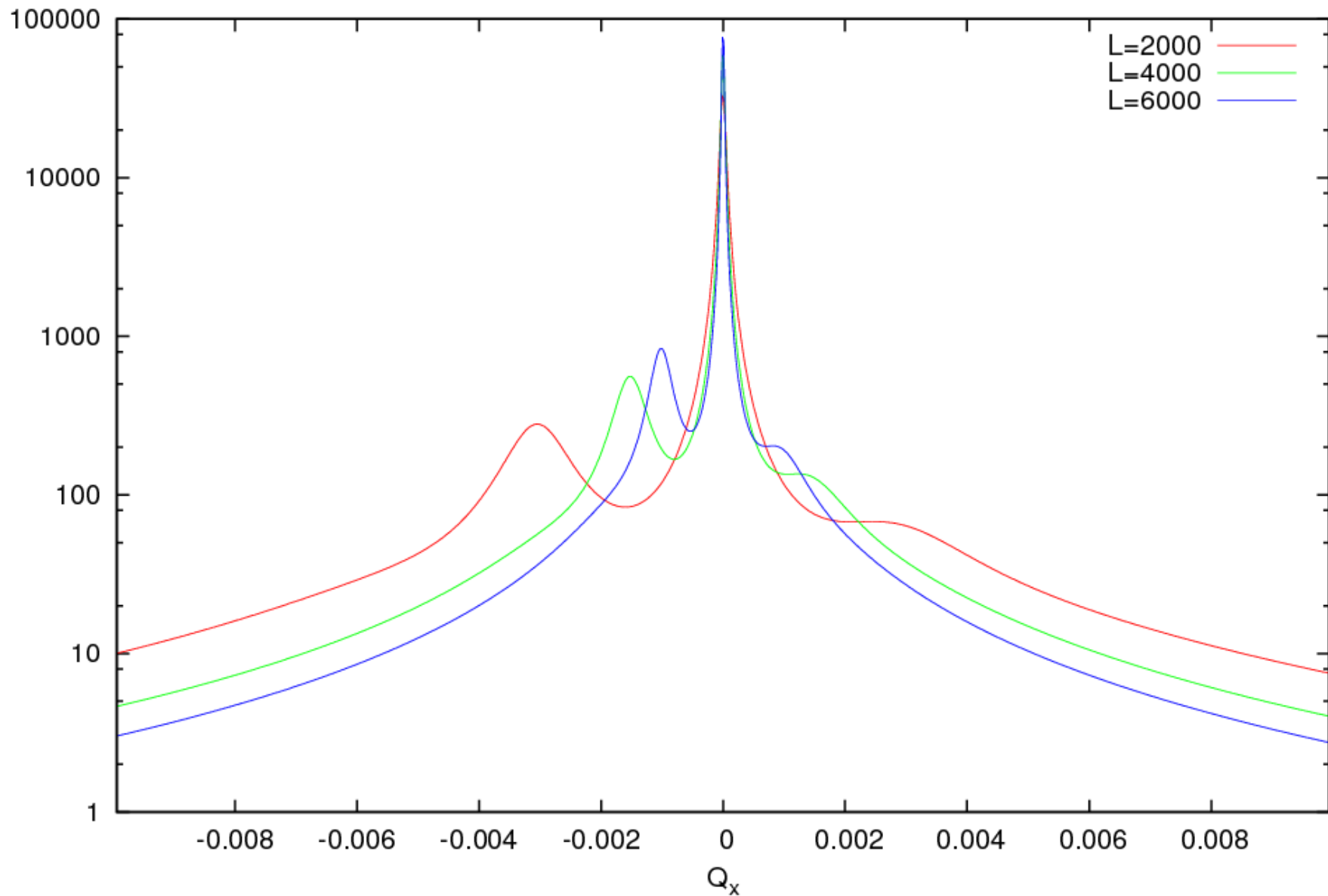
Kinematic approximation, gamma distribution,  $L=4000$ ,  $a_i+a_f=2.0\text{deg}$



# Odraz na drsných rozhraních

Nekoherentní rozptyl, různé parametry pro vicinální povrch

Kinematic approximation, gamma distribution,  $m=10$ ,  $a_i+a_f=2.0\text{deg}$

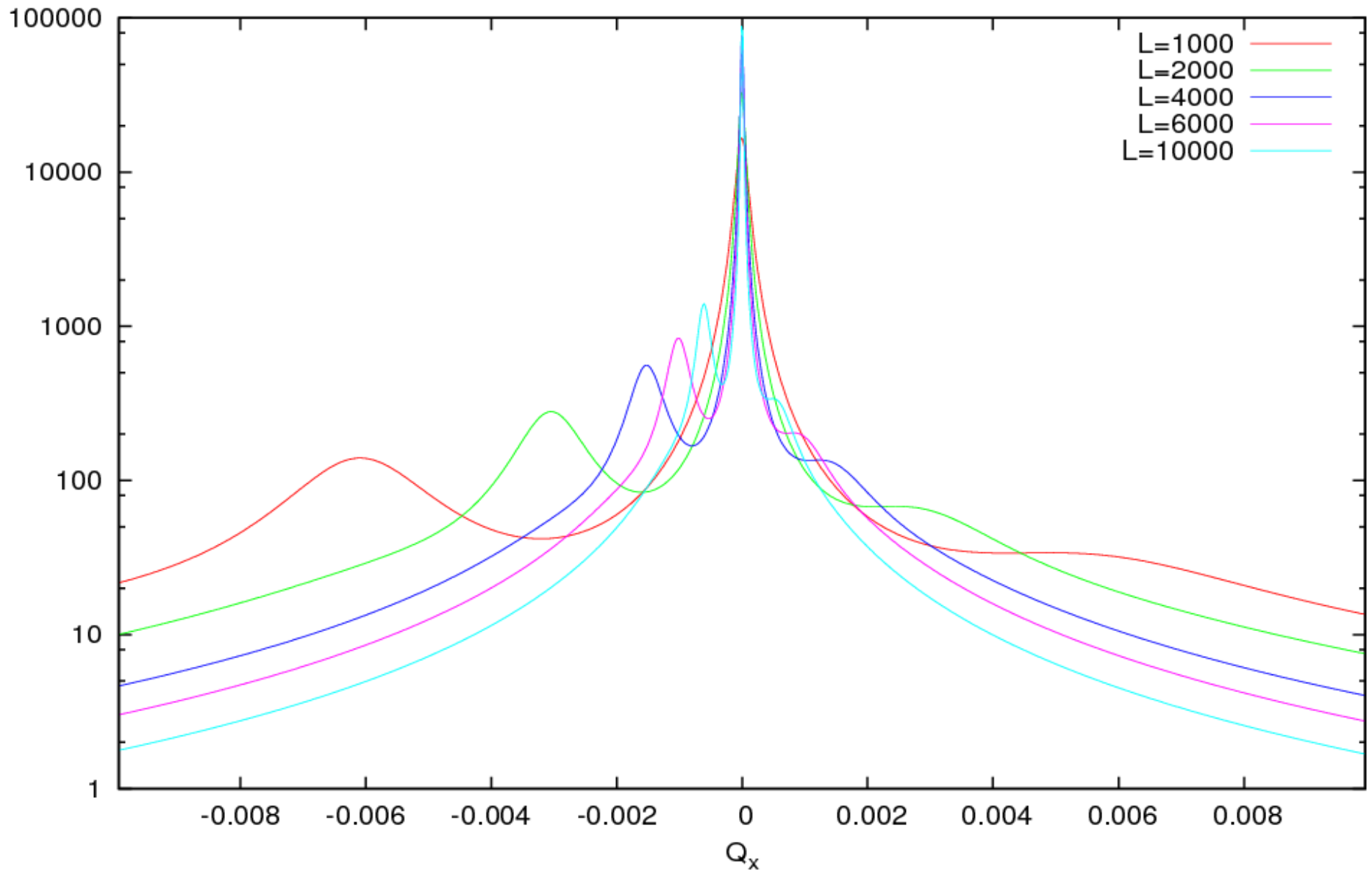




# Odraz na drsných rozhraních

Nekoherentní rozptyl, různé parametry pro vicinální povrch

Kinematic approximation, gamma distribution,  $m=10$ ,  $a_i+a_f=2.0\text{deg}$



# Odraz na drsných rozhraních

Nekoherentní rozptyl, různé parametry pro vicinální povrch

Semikinematic approximation, gamma distribution,  $L=4000\text{\AA}$ ,  $a_i+a_f=2.0\text{deg}$

