

鈴木芳文, 近浦吉則

人州工業大学 大学院 工学研究院 先端機能システム工学系

2013/9/10

1

本日のおはなし

▲ X線散乱トポグラフィ

- X線散乱トポグラフィ(SR)の概念ならびに用途
- 方位分布トポグラフィ(OR)、再構成方位分布トポグラフィ (ROR)
- 。例
- 動力学回折理論シミュレーション(高木方程式)
- CCDを用いた方位分布トポグラフィへの適応
- ▲ 極微小角入射X線回折(In-Plane 回折)

物質の結晶性と各種トポグラフィの関係



3

High-Resolution X-ray Scattering Topography Using Synchrotron Radiation Microbeam









X-ray Scattering Topography (SR) for GaAs on Si



Orientation Topography (OR) for GaAs on Si



Reconstruction Orientation Topography (ROR) GaAs epitaxial layer (GaAs on Si)



X-ray Scattering Topography (SR) for InAs on GaAs









Diffraction geometry with the crystal orientation and X-ray Optics at HASYLABO



Topographs of InAs epitaxial layer



 $l_{ex} = \frac{\lambda (\gamma_0 | \gamma_h)^{\gamma}}{2 \pi C | \chi_g}$

- l_{ex} : extinction distance
- $\gamma_0 = \sin (\theta_B \alpha), \ \gamma_h = \sin (\theta_B + \alpha)$
 - C : Polarization factor
 λ : Wavelength of X-ray
 χ : Electric Susceptibility

$$\chi = R_e \frac{\lambda^2 F}{\pi V_a} \qquad \begin{array}{c} R_e : \text{ class} \\ V_a : \text{ unit} \\ F : \text{ struct} \end{array}$$

Re : classical electron radius Va : unit cell volume F : structure factor

	InAs	GaAs
200	$1.025\mu\mathrm{m}$	4.986 µm
400	0.589µm	0.674 µm
600	5.753µm	14.47 µm
		$\lambda : CoK \alpha_1$



X線の結晶内の振る舞いを説明する式であり、歪みを含む 不完全結晶にも適用できる動力学的回折理論の基本方程式

$$\frac{\partial}{\partial S_0} D_0 = -i\pi K \chi_{\bar{h}} D_h(\boldsymbol{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial S_h} D_h = -i\pi K \chi_h D_0(\mathbf{r}) + 2i\pi [K\beta_h - \frac{\partial}{\partial S_h} \{\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\}] D_h(\mathbf{r})$$

 D_0 :透過波の振幅 D_h :回折波の振幅 χ :電気感受率 u(r):原子 の格子点からの変位 r:結晶の変位ベクトル h:回折波のベクトル S_h :回折方向 S_0 :透過方向 K:波数 β_h :ブラッグ角からのずれ を示すパラメータ

コンピュータシミュレーション

プログラムしやすい形にするため、高木方程式を

アッペルボーインの近似式" half-step deviation"を用いて式 の変形させる。

$$\begin{bmatrix} D_0(s_0, s_h) \\ D_h(s_0, s_h) \end{bmatrix} = 1/d \begin{bmatrix} C_2 & AC_2 & AB \\ B & AB & B \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} D_{0}(s_{0},s_{h}) \\ D_{h}(s_{0},s_{h}) \\ D_{h}(s_{0},s_{h}) \end{bmatrix} &= 1/d \begin{bmatrix} C_{2} & AC_{2} & AB & AC_{1} \\ B & AB & B & C_{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{0}(s_{0}-p,s_{h}) \\ D_{h}(s_{0}-p,s_{h}) \\ D_{0}(s_{0},s_{h}-q) \\ D_{h}(s_{0},s_{h}-q) \end{bmatrix} \\ A &= -\frac{1}{2}ip\pi K\chi_{h} \\ B &= -\frac{1}{2}iq\pi K\chi_{h} \\ W &= iq\pi \left\{ K\beta_{h} - \frac{\partial}{\partial s_{h}} \left[h \cdot u(r) \right] \right\} \end{aligned}$$

d = 1 - W - AB $C_1 = 1 + W$ $C_{2} = 1 - W$ A:回折の関数

B:透過の関数

W:ずれの関数

計算 1.0 µm InAs

٩

٩

$$\frac{\partial}{\partial S_0} D_0 = -i\pi K \chi_h D_h(\mathbf{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial S_h} D_h = -i\pi K \chi_h D_0(\mathbf{r}) + 2i\pi [K\beta_h - \frac{\partial}{\partial S_h} \{\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\}] D_h(\mathbf{r})$$

4 ブラッグ-ケース
4 境界条件
:界面で、
 $D_h = 0, D_0 = 1$
本 相反原理

2. X-ray Penetration Depth for Large Lattice-Mismatched Heteroepitaxial Layer by Dynamical Diffraction Theory using Computer Simulation





Energy-Dispersive Synchrotron Radiation Topographic Observation of InAs/GaAs Lattice-Mismatched Layer



Energy-Dispersive Synchrotron Radiation Topographic Observation of InAs Layer



Energy-Dispersive Synchrotron Radiation Topographic Observation of InAs/GaAs Lattice-Mismatched Layer



エピ膜(歪場を含む)断面の回折強度分布

Lattice Orientation Imaging of C₆₀-Fullerene Single Crystal using CCD Detector





0.1 mm (2 0 0)

C₆₀単結晶





$CCDを用いたX線散乱トポグラフ (角度差: <math>\phi_1$ 方向、 閾値:低)



CCDを用いたX線散乱トポグラフ(角度差: 如方向、 閾値:低)





JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 101, No.6 (2007) 255-258.

X-ray reciprocal space maps and x-ray scattering topographic observation of GaN layer on GaAs (001) in plasma-assisted molecular beam epitaxy Yoshifumi Suzuki, Masakazu Shinbara , Hideki Kii , Yoshinori Chikaura



Affine transformation



linear interpolation I(i,j)=I(x, h)(1-p)(1-q)+I(x+1, h)p(1-q)+I(x, h+1)(1-p)q+I(x+1, h+1)pq



