

MASARYKOVA UNIVERZITA

Přírodovědecká fakulta

Ústav fyziky kondenzovaných látek

Maloúhlý rozptyl rtg. záření
na samouspořádaných kvantových tečkách

Diplomová práce

Brno květen 2002

Ondřej Caha

Vedoucí práce: prof. RNDr. Václav Holý, CSc.

Prohlašuji, že jsem práci vypracoval samostatně a veškerou použitou literaturu jsem uvedl v seznamu.

Děkuji vedoucímu práce prof. Václavu Holému za vedení práce a rady při řešení problémů s ní spojených.

Dále děkuji také ostatním pracovníkům rtg. laboratoře i celého Ústavu fyziky kondenzovaných látek za poskytnuté rady a pomoc, zejména doc. Josefу Kuběnovi a Mojmíru Meduňovi.

Obsah

1	Úvod	ii
2	Vznik a význam kvantových teček	iii
3	Teorie	v
3.1	Rozptyl rtg. záření	v
3.2	Malouhlý rozptyl na samouspořádaných kvantových tečkách	vi
3.3	Aproximace DWBA	xiv
3.4	Aplikace approximace DWBA na kvantové tečky	xvii
4	Experiment	xix
5	Vzorek s multivrstvou InP/GaInP	xxi
5.1	Popis vzorku	xxi
5.2	Měření GISAXS	xxii
5.3	Zpracování měření	xxii
6	Vzorek s multivrstvou InAs/GaAs	xxx
6.1	Popis vzorku	xxx
6.2	Měření AFM	xxx
6.3	Měření GISAXS	xxx
6.4	Zpracování měření GISAXS	xxxi
7	Krátkoperiodická multivrstva InAs/AlAs	xxxvi
7.1	Popis vzorku	xxxvi
7.2	Měření GISAXS	xxxvi
7.3	Zpracování	xxxviii
7.3.1	Modely 1A a 1B	xlii
7.3.2	Model 2	xlii
7.3.3	Model 3A a 3B	xlv
7.3.4	Model 4 – schodkový	xlviii
8	Závěr	1

1 Úvod

Při epitaxním růstu polovodičových vrstev mohou vlivem elastického napětí vznikat oddělené ostrůvky, tzv. kvantové tečky, které mají významné elektrické a optické vlastnosti. Jediná nedestruktivní metoda umožňující zkoumat odděleně tvar kvantových teček a deformační pole v jejich okolí je rozptyl rtg záření. Tato metoda umožňuje zkoumat nejen tečky na povrchu vzorku ale i tečky na vnitřních rozhraních.

V diplomové práci jsem se věnoval numerickému zpracování dat naměřených metodou Grazing-Incidence Small Angle Scattering (GISAXS). Rozptyl rtg. záření při metodě GISAXS závisí pouze na tvaru kvantových teček a nezávisí na deformačním poli v krystalu. Zkoumal jsem tedy tvar, velikost a rozmístění kvantových teček ve vzorku.

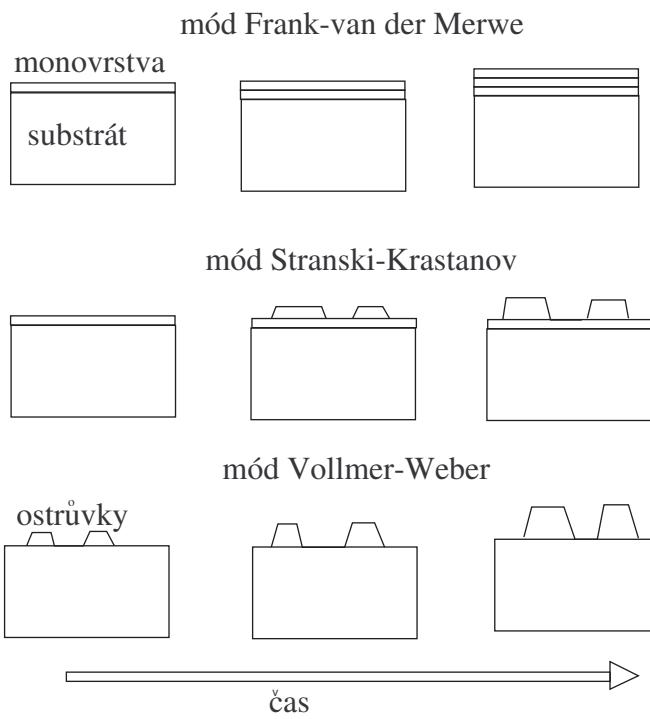
Zpracoval jsem měření provedené na třech vzorcích s multivrstvami III-V polovodičů (InP/GaInP, InAs/GaAs a InAs/AlAs). První dva vzorky obsahují kvantové tečky, určil jsem jejich tvar, střední velikost a disperzi rozdělení velikostí. Pro první vzorek jsem také určil parametry popisující rozmístění kvantových teček v multivrstvě, to je vektory periodické mřížky, v níž jsou kvantové tečky rozmištěny, a střední odchylky poloh kvantových teček od mřížových bodů. Ve druhém vzorku jsou naopak kvantové tečky rozmištěny náhodně. Třetí vzorek neobsahuje kvantové tečky ale kvantové dráty, pro něž jsem určil jejich tvar a periodickou mřížku v níž jsou uspořádány. Některé výsledky jsem srovnal s výsledky dosaženými z jiných měření (obvyklá ko-planární difrakce, GID, AFM) a ve všech případech se výsledky uspokojivě shodovaly.

Zpracovávaná data byla naměřena na synchrotronu ESRF v Grenoblu ve Francii. Vlastních měření jsem se nezúčastnil, naměřená data jsem dostal k dispozici prostřednictvím prof. Holého.

2 Vznik a význam kvantových teček

Kvantové tečky jsou jedním z typů tzv. nízkorozměrných kvantových struktur. Podstatou jejich využití je vznik elektronových stavů prostorově omezených v jedno nebo vícerozměrné kvantové jámě. Základní kvantovou strukturou je tenká vrstva, kde je elektronový plyn omezen v jednom směru rozhraními tenké vrstvy a vzniká tzv. dvourozměrný elektronový plyn. V případě omezení ve dvou rozměrech mluvíme o kvantovém drátu a pokud je vlnová funkce elektronového plynu omezena ve všech třech směrech nazývá se takový objekt kvantovou tečkou. Prostorově omezené elektronové stavy mají diskrétní spektrum energií, na rozdíl od spojitého energiového spektra v makroskopickém krystalu. Aby se projevilo toto prostorové omezení, musí být rozměry kvantových struktur řádově $10^1 - 10^2 \text{ \AA}$ ($10^0 - 10^1 \text{ nm}$). Tato vlastnost vede ke zvýšení kvantové výtěžnosti optoelektronických prvků, např. laserů nebo detektorů [15].

Kvantové tečky je možné připravit litografickými metodami nebo pomocí heteroepitaxního¹ růstu v módu Stranski-Krastanov [12], [13], [16]. Litografické metody jsou technologicky mnohem náročnější a není dosud průmyslově zvládnuta technologie pro rozměry menší než 10^3 \AA . Při heteroepitaxním růstu má narůstající vrstva jinou mřížkovou konstantu než substrát. V rostoucí vrstvě proto vzniká elastické napětí, jehož vlivem může vrstva růst ve třech základních módech (viz obrázek 1):



Obrázek 1: Různé růstové módy heteroepitaxního růstu

1. růst Frank-van der Merwe – rostoucí vrstva narůstá stále jako souvislá monovrstva za monovrstvou beze změn.
2. růst Stranski-Krastanov – nejprve naroste jedna až dvě souvislé monovrstvy a dále už rostou jen oddělené ostrůvky, což mohou být kvantové tečky. Tento růst se realizuje obvykle u polovodičových materiálů, jak čistých IV skupiny, tak i III-V polovodičů.

¹Epitaxním růstem se označuje takový růst, kdy rostoucí vrstva tvoří monokrystal navazující na substrát. Heteroepitaxe znamená nanášení vrstvy jiného materiálu než substrátu.

3. růst Vollmer-Weber – vrstva roste ve formě ostrůvků hned od začátku.

Druh módu, který se realizuje, závisí na podmínkách růstu a použitých materiálech, více uvádí např. [12]. V závislosti na použitých materiálech, podmínkách růstu a tloušťkách vrstev mohou být samovolně vzniklé kvantové tečky rozloženy po povrchu substrátu zcela náhodně nebo jejich polohy mohou tvořit pravidelně usporádanou strukturu.

Depozice kvalitních epitaxních vrstev je velmi náročná. Pro epitaxní depozici se požívají různé metody. Nejčastěji používané metody můžeme podle fáze látky vpouštěné do pracovního prostoru rozdělit na:

1. MBE (Molecular Beam Epitaxy) probíhá v prostoru vyčerpaném na velmi vysoké vakuum. Do pracovního prostoru vniká deponovaný materiál přímo jako páry čisté látky. Tato metoda je pomalá, náročná, ale přináší nejkvalitnější výsledky.
2. MO CVD (Chemical Vapour Deposition, někdy se označuje i jako VPE – Vapour Phase Epitaxy) je nejčastěji používaná metoda. Při této depozici jsou s nosným plynem (např. dusík N₂) do pracovního prostoru vháněny jednoduché organokovové sloučeniny, které na povrchu substrátu chemicky reagují za vzniku deponované vrstvy. Tato metoda je mnohem rychlejší než MBE a také levnější, ale za cenu nižší kvality deponovaných vrstev.
3. LPE (Liquid Phase Epitaxy) je poměrně málo používaná metoda, kdy depozice probíhá z kapalné taveniny.

Existuje ještě velké množství jiných metod epitaxního růstu, proto jsem uvedl jen metody, kterými byly vyrobeny vzorky použité při této práci.

3 Teorie

V této kapitole uvedeme vztahy pro maloúhlý rozptyl rtg. záření a aplikujeme je v případě rozptylu na samouspořádaný kvantový tečkách. Obsah této kapitoly čerpá především z [1].

3.1 Rozptyl rtg. záření

Vyjdeme z Maxwellových rovnic a materiálových vztahů

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \text{div} \vec{B} &= 0 \\ \text{rot} \vec{H} &= \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, & \text{div} \vec{D} &= 0 \\ \vec{D} &= (1 + \chi) \epsilon_0 \vec{E}, & \vec{B} &= \mu_0 \vec{H}, \end{aligned} \quad (1)$$

kde \vec{E} a \vec{D} jsou intenzita a indukce elektrického pole, \vec{H} , \vec{B} intenzita a indukce magnetického pole, ϵ_0 , μ_0 permitivita a permeabilita vakua a χ je elektrická susceptibilita. V těchto rovnicích je zanedbán vnější náboj a proud. Také relativní permeabilita materiálu je položena rovna jedné. Z Maxwellových rovnic (1) odvodíme vlnovou rovnici

$$\Delta \vec{E} = (1 + \chi) \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad (2)$$

a stejná rovnice platí pro veličiny \vec{H} , \vec{D} a \vec{B} . Řešení vlnové rovnice (2) ve vakuu (kde $\chi = 0$) lze vyjádřit součtem nezávislých řešení ve tvaru rovinných vln. Intenzita elektrického pole jedné vlny v závislosti na poloze \vec{r} a čase t je

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{K}\vec{r} - \omega t)}, \quad (3)$$

kde \vec{E}_0 je amplituda vlny, vlnový vektor \vec{K} vyjadřuje směr šíření fáze vlny a ω je kruhová frekvence vlny. Velikost vlnového vektoru je svázána s frekvencí vlny vztahem $K = \frac{\omega}{c}$. $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ je rychlosť světla ve vakuu. Vlnová délka λ souvisí s velikostí vlnového vektoru podle vztahu $K = \frac{2\pi}{\lambda}$.

V materiálu o susceptibilitě χ jsou řešením rovinné vlny

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)},$$

kde \vec{k} je vlnový vektor v prostředí a má velikost $k = K\sqrt{1 + \chi} = nK$, kde n je index lomu. Člen $e^{-i\omega t}$ už dále nebudu uvádět, protože pro další výpočty není podstatný.

Rozptyl rtg. záření lze popsat pomocí kvantové teorie rozptylu. Nejprve přepíšeme vlnovou rovnici do symboliky bra-ket vektorů. Dosadíme-li do vlnové rovnice (2) řešení ve tvaru rovinných vln získáme vztah

$$(\Delta + K^2) \vec{E} = -\chi K^2 \vec{E}.$$

Zavedeme operátory

$$\hat{L} = \Delta + K^2, \quad \hat{V} \vec{E}(\vec{r}) = -K^2 \chi(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}),$$

a vlnovou rovnici převedeme do tvaru

$$\hat{L} \vec{E} = \hat{V} \vec{E}. \quad (4)$$

V kinematické approximaci je dopadající vlna (označená jako ket-vektor $|E_i\rangle$) i rozptýlená vlna ($|E_f\rangle$) řešením vlnové rovnice ve vakuu ($\chi = 0$)

$$\hat{L}|E_i\rangle = 0, \quad \hat{L}|E_f\rangle = 0. \quad (5)$$

Dopadající vlna má vlnový vektor \vec{K}_i a rozptýlená \vec{K}_f . Amplituda elektrické intenzity v bodě o poloze \vec{r} je

$$\langle \vec{r} | E_i \rangle = e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}}, \quad \langle \vec{r} | E_f \rangle = e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}}.$$

Rozptyl můžeme popisovat pomocí diferenciálního účinného průřezu $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, což je počet fotonů rozptylených do prostorového úhlu $d\Omega$ za jednotku času dělený počtem fotonů dopadajícího svazku prošlých jednotkovou plochou za jednotku času. Při rozptylu na poruše s potenciálem \hat{V} platí v kinematické approximaci vztah pro diferenciální účinný průřez

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2} |\langle E_f | \hat{V} | E_i \rangle|^2 \quad (6)$$

Tento vztah můžeme vyjádřit v souřadnicové reprezentaci

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{K^4}{16\pi^2} \left| \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{K}_f\vec{r}} \chi(\vec{r}) e^{i\vec{K}_i\vec{r}} \right|^2$$

Zavedeme rozptylový vektor $\vec{Q} = \vec{K}_f - \vec{K}_i$ a dosazením získáme vztah

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{K^4}{16\pi^2} \left| \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{Q}\vec{r}} \chi(\vec{r}) \right|^2 \quad (7)$$

Tedy platí, že diferenciální účinný průřez je úměrný čtverci velikosti trojrozměrné Fourierovy transformace elektrické susceptibility. Ještě lze zavést pro Fourierovu transformaci označení indexem FT

$$\chi^{FT}(\vec{Q}) = \int d^3\vec{r} \chi(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}},$$

a tedy po přepsání vztahu (7)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{K^4}{16\pi^2} \left| \chi^{FT}(\vec{Q}) \right|^2. \quad (8)$$

Měřenou veličinou je ovšem intenzita záření I

$$I(\vec{r}) = |\vec{E}(\vec{r})|^2.$$

Budeme uvažovat nikoliv intenzitu v místě v prostoru, ale uvažujme intenzitu záření rozptyleného do směru s rozptylovým vektorem \vec{Q}

$$I(\vec{Q}) = \frac{I_0}{r^2} \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle = \frac{K^4 I_0}{16\pi^2 r^2} \langle |\chi^{FT}(\vec{Q})|^2 \rangle, \quad (9)$$

kde I_0 je intenzita dopadajícího záření v místě vzorku a r vzdálenost vzorku (rozptylového centra) od detektoru. Středování se provádí přes celý objem vzorku. Konstantu $\frac{K^4 I_0}{16\pi^2 r^2}$ budu dále označovat A .

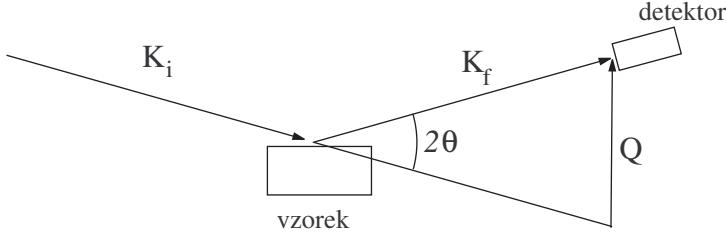
Intenzita rozptyleného záření v reciprokém prostoru je také přímo úměrná střední hodnotě čtverce velikosti trojrozměrné Fourierovy transformace elektrické susceptibility.

3.2 Maloúhlý rozptyl na samouspořádaných kvantových tečkách

Nyní uvedu aplikaci vztahů pro intenzitu rozptyleného záření na případ rozptylu na kvantových tečkách (viz [2], [3]).

Pro malé úhly rozptylu, tedy malé hodnoty rozptylového vektoru \vec{Q} intenzita rozptyleného záření odpovídá pouze takovým složkám Fourierovy transformace, jejichž perioda v přímém prostoru je větší než perioda atomové mřížky.

Pokud používáme rtg. záření o vlnové délce kolem $1,5 \text{ \AA}$, pak je velikost vlnového vektoru $K = 4,2 \text{ \AA}^{-1}$. Velikost rozptylového vektoru je $Q = 2K \sin \theta$, když dopadající a rozptylený paprsek svírají úhel 2θ (viz obrázek 2). Perioda mřížky je pro polovodiče typicky okolo 5 \AA , které odpovídá perioda reciproké mřížky $1,25 \text{ \AA}^{-1}$. Při měření maloúhlého rozptylu o úhlovém rozsahu do 3° dosahuje rozptylový vektor maximální velikosti $Q_{max} = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$. Maximální rozsah takového maloúhlého měření je dostatečně vzdálen od prvního difrakčního maxima atomové mřížky. Potom



Obrázek 2: Schéma uspořádání měření

lze susceptibilitu homogenního krystalu považovat za konstantu a nezabývat se atomovou strukturou vzorku. Vliv mají pouze změny susceptibility na větší vzdálenosti v prostoru než je velikost atomu.

Lze předpokládat jednoduchý model, kdy kvantové tečky jsou rozmístěny v substátu o susceptibilitě χ_{sub} . Uvnitř kvantových teček je susceptibility $\chi_{dot} = \chi_{sub} + \Delta\chi$. Každou kvantovou tečku lze popsat tvarovou funkcí tečky $F_j(\vec{r})$, která nabývá hodnoty 0 vně kvantové tečky a hodnoty 1 uvnitř. Susceptibilitu vzorku se soustavou kvantových teček je

$$\chi(\vec{r}) = \chi_{sub} + \Delta\chi \sum_{j=1}^N F_j(\vec{r}), \quad (10)$$

kde F_j je tvarová funkce j -té kvantové tečky a N počet kvantových teček na ozářené části vzorku. Nejprve budeme pro jednoduchost předpokládat, že jsou všechny kvantové tečky stejné. Potom můžeme zavést pouze jednu tvarovou funkci $F(\vec{r})$, která je tvarovou funkcí tečky umístěné v počátku souřadnicové soustavy. Počátek souřadnicové soustavy může být v libovolném referenčním bodě kvantové tečky. Obvykle jsem používal za referenční bod střed podstavy kvantové tečky. Susceptibilitu soustavy stejných kvantových teček je možné napsat ve tvaru

$$\chi(\vec{r}) = \chi_{sub} + \Delta\chi \sum_{j=1}^N F(\vec{r} - \vec{R}_j), \quad (11)$$

kde \vec{R}_j je poloha středu podstavy kvantové tečky.

Dosazením z (11) do vztahu (9) se získá vztah pro intenzitu rozptýleného záření v kinematické approximaci

$$I(\vec{Q}) = A \left\langle \left| \int d^3\vec{r} \left[\chi_{sub} + \Delta\chi \sum_{j=1}^N F(\vec{r} - \vec{R}_j) \right] e^{-i\vec{Q}\vec{r}} \right|^2 \right\rangle,$$

$$I(\vec{Q}) = A \left\langle \left| (2\pi)^3 \chi_{sub} \delta(\vec{Q}) + \Delta\chi \int d^3\vec{r} \sum_{j=1}^N F(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}} e^{-i\vec{Q}\vec{R}_j} \right|^2 \right\rangle.$$

První část výrazu s δ funkcí je nerozptýlený paprsek, který neměříme, protože pokračuje dovnitř vzorku, a nebudeme se o tento člen proto již dále vůbec zajímat. Fourierovu transformaci tvarové funkce si označíme jako F^{FT}

$$F^{FT}(\vec{Q}) = \int d^3\vec{r} F(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}}$$

$$I(\vec{Q}) = A \left\langle \left| \Delta\chi F^{FT}(\vec{Q}) \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{Q}\vec{R}_j} \right|^2 \right\rangle \quad (12)$$

Středování se v tomto případě netýká tvarové funkce a je možné ji vytknout před střední hodnotou. Čtverec absolutní velikosti lze napsat jako součin veličiny a její komplexně sdružené hodnoty

$$I(\vec{Q}) = A |\Delta\chi|^2 \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 \left\langle \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{Q}\vec{R}_j} \sum_{k=1}^N e^{i\vec{Q}\vec{R}_k} \right\rangle.$$

$$I(\vec{Q}) = A |\Delta\chi|^2 \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \right\rangle \quad (13)$$

Je možné si zavést ještě označení

$$G(\vec{Q}) = \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \right\rangle. \quad (14)$$

Funkce $G(\vec{Q})$ vyjadřuje závislost na rozložení kvantových teček. Vztah (13) nakonec můžeme napsat jako

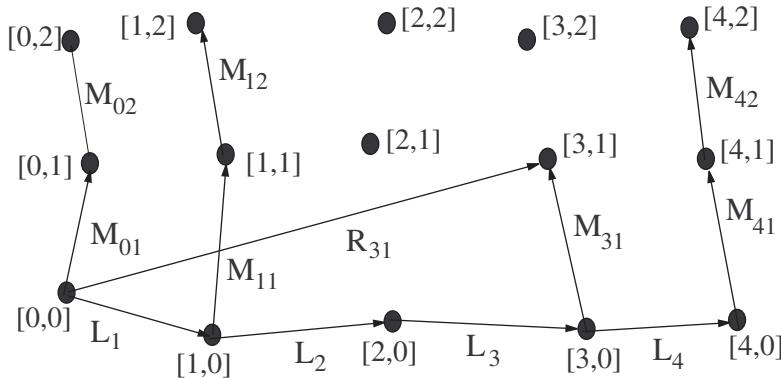
$$I(\vec{Q}) = A |\Delta\chi|^2 \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 G(\vec{Q}) \quad (15)$$

Kvantové tečky jsou rozloženy pouze na rozhraních jednotlivých vrstev různých materiálů, tedy v rovinách rovnoběžných s povrchem. Vždy budeme používat takovou soustavu souřadnic, ve které je osa z kolmá k povrchu. Potom polohový vektor teček \vec{R}_j v jedné vrstvě má vždy stejnou složku v ose $z R_{jz}$. Předpokládejme, že polohy teček umístěných v různých vrstvách jsou nezávislé, a tedy výsledná intenzita rozptýleného záření je součtem intenzit rozptýlených na různých vrstvách teček (v případě závislosti poloh se sčítá intenzitu elektrického pole). Potom celková intenzita rozptýleného záření je

$$I(\vec{Q}) = A |\Delta\chi|^2 \sum_{j=1}^n \left| F^{FT} \right|^2 G_j(\vec{Q}), \quad (16)$$

kde j je v tomto případě index vrstvy kvantových teček a n počet téhoto vrstev.

V další části následuje odvození funkce $G(\vec{Q})$ ze skutečného rozložení teček. Vyjdeme z předpokladu, že rozložení kvantových teček má strukturu podobnou alespoň přibližně dvourozměrné mřížce (viz obrázek 3). V tomto případě může být poloha každé kvantové tečky popsána dvěma indexy, např



Obrázek 3: Náčrt rozložení kvantových teček a definice vektorů vzájemné polohy

j, m . Vektor vzájemné polohy sousedních teček s indexy $(j-1), 0$ a $j, 0$ je označen \vec{L}_j . Vektor vzájemné polohy teček s indexy $j, (m-1)$ a j, m označujeme jako \vec{M}_{jm} . Polohový vektor tečky

popsané indexy j, m je potom $\vec{R}_{jm} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots + \vec{L}_j + \vec{M}_{j1} + \vec{M}_{j2} + \dots + \vec{M}_{jm}$ (viz obrázek 3). Funkci G lze napsat jako

$$G(\vec{Q}) = \left\langle \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_{jm} - \vec{R}_{kl})} \right\rangle,$$

kde N_1 a N_2 jsou počty kvantových teček ve směrech vektorů \vec{L}_j a \vec{M}_{jm} . Pro celkový počet teček platí $N = N_1 N_2$. Do předchozího vztahu lze dosadit za polohový vektor \vec{R}_{jm}

$$G(\vec{Q}) = \left\langle \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{L}_1 + \dots + \vec{L}_j + \vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{L}_1 - \dots - \vec{L}_k - \vec{M}_{k1} - \dots - \vec{M}_{kl})} \right\rangle$$

V tomto výrazu je možné přehodit pořadí sumací

$$G(\vec{Q}) = \left\langle \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{k=1}^{N_1} e^{-i\vec{Q}(\vec{L}_1 + \dots + \vec{L}_j - \vec{L}_1 - \dots - \vec{L}_k)} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{M}_{k1} - \dots - \vec{M}_{kl})} \right\rangle$$

Dále jsme předpokládali, že se ovlivňují pouze polohy nejbližší sousedních teček – takzvaný Short-Range Ordering (SRO) model. To znamená, že každý z vektorů \vec{L}_j a \vec{M}_{jm} je nezávislý na ostatních. Pravděpodobnost nalezení sousedních teček v určité poloze závisí na vektoru vzájemné polohy. V prvním směru jde o vektor \vec{L}_j , pravděpodobnost nalezení sousedních teček ve vzájemné poloze dané vektorem \vec{L}_j je $P_L(\vec{L}_j)$. V druhém směru je pravděpodobnost nalezení sousedních teček ve vzájemné poloze dané vektorem \vec{M}_{jm} $P_M(\vec{M}_{jm})$. Ve výrazu pro funkci G je možné oddělit sčítání přes $j = k$, $j > k$ a $j < k$

$$\begin{aligned} G(\vec{Q}) &= \left\langle \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{M}_{j1} - \dots - \vec{M}_{jl})} \right\rangle + \\ &+ \left\langle \sum_{j=2}^{N_1} \sum_{k=1}^{j-1} e^{-i\vec{Q}(\vec{L}_{k+1} + \dots + \vec{L}_j)} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{M}_{k1} - \dots - \vec{M}_{kl})} \right\rangle + \\ &+ \left\langle \sum_{k=2}^{N_1} \sum_{j=1}^{k-1} e^{i\vec{Q}(\vec{L}_{j+1} + \dots + \vec{L}_k)} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{M}_{k1} - \dots - \vec{M}_{kl})} \right\rangle \end{aligned} \quad (17)$$

Členy v tomto vztahu (17) si označíme jako C_1 , C_2 a C_3 . Nejprve upravíme člen C_1 , kdy je opět možné rozdělit sčítání přes $m = l$, $m > l$ a $m < l$

$$\begin{aligned} C_1 &= \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} 1 + \left\langle \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=2}^{N_2} \sum_{l=1}^{m-1} e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j,l+1} + \dots + \vec{M}_{jm})} \right\rangle + \\ &+ \left\langle \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{l=2}^{N_2} \sum_{m=1}^{l-1} e^{i\vec{Q}(\vec{M}_{j,m+1} + \dots + \vec{M}_{jl})} \right\rangle \end{aligned}$$

Střední hodnotu můžeme vsunout dovnitř sumace

$$\begin{aligned} C_1 &= N_1 N_2 + \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=2}^{N_2} \sum_{l=1}^{m-1} \left\langle e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j,l+1} + \dots + \vec{M}_{jm})} \right\rangle + \\ &+ \sum_{j=1}^{N_1} \sum_{l=2}^{N_2} \sum_{m=1}^{l-1} \left\langle e^{i\vec{Q}(\vec{M}_{j,m+1} + \dots + \vec{M}_{jl})} \right\rangle \end{aligned}$$

Dva poslední členy v tomto vztahu jsou komplexně sdružené a jejich součet je roven dvojnásobku jejich reálné části

$$C_1 = N_1 N_2 + 2\Re \left[\sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=2}^{N_2} \sum_{l=1}^{m-1} \left\langle e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j,l+1} + \dots + \vec{M}_{jm})} \right\rangle \right].$$

Protože jsou vektory \vec{M} nezávislé, lze střední hodnotu exponenciální funkce počítat jako součin středních hodnot

$$C_1 = N_1 N_2 + 2\Re \left[\sum_{j=1}^{N_1} \sum_{m=2}^{N_2} \sum_{l=1}^{m-1} \left\langle e^{-i\vec{Q}\vec{M}_{j,l+1}} \right\rangle \dots \left\langle e^{-i\vec{Q}\vec{M}_{jm}} \right\rangle \right]$$

Střední hodnota všech výrazů typu $\left\langle e^{-i\vec{Q}\vec{M}_{j,l}} \right\rangle$ je stejná a rovna $\left\langle e^{-i\vec{Q}\vec{M}} \right\rangle = \int d^2\vec{M} P_M(\vec{M}) e^{-i\vec{Q}\vec{M}} = P_M^{FT}(\vec{Q})$, což je charakteristická funkce rozdělení pravděpodobnosti vektorů \vec{M} . Potom je možné výraz dále upravit jako

$$C_1 = N_1 N_2 + 2\Re \left[N_1 \sum_{m=2}^{N_2} \sum_{l=1}^{m-1} \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^{m-l} \right].$$

Ted' jde už jenom o sčítání geometrických řad

$$\begin{aligned} C_1 &= N_1 N_2 + 2N_1 \Re \left[\sum_{m=2}^{N_2} \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^m \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^{-1} \frac{\left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^{-(m-1)} - 1}{\left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^{-1} - 1} \right] \\ C_1 &= N_1 N_2 + 2N_1 \Re \left[\frac{1}{1 - P_M^{FT}(\vec{Q})} \sum_{m=2}^{N_2} \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) - \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^m \right) \right] \\ C_1 &= N_1 N_2 + 2N_1 \Re \left[\frac{(N_2 - 1)P_M^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_M^{FT}(\vec{Q})} - \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^2 \frac{\left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^{N_2-1} - 1}{\left(1 - P_M^{FT}(\vec{Q}) \right) \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) - 1 \right)} \right] \end{aligned}$$

Protože je počet kvantových teček na ozářené části vzorku obrovský, lze udělat limitu pro $N_2 \rightarrow \infty$, aniž by tím byl ovlivněn výsledek

$$C_1 = N_1 N_2 \left(1 + 2\Re \left[\frac{P_M^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_M^{FT}(\vec{Q})} \right] \right)$$

Podobným způsobem lze upravit dva členy označené C_2 a C_3 . Můžeme z nich vytknout část závislou na vektorech \vec{M} a zbylé části závisející na vektorech \vec{L} jsou komplexně sdružené, proto je jejich součet opět dvojnásobkem jejich reálné části

$$C_2 + C_3 = 2\Re \left[\left\langle \sum_{j=2}^{N_1} \sum_{k=1}^{j-1} e^{-i\vec{Q}(\vec{L}_{k+1} + \dots + \vec{L}_j)} \right\rangle \right] \left\langle \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{M}_{k1} - \dots - \vec{M}_{kl})} \right\rangle$$

Opět je možné střední hodnotu stáhnout dovnitř sumací

$$C_2 + C_3 = 2\Re \left[\sum_{j=2}^{N_1} \sum_{k=1}^{j-1} \left\langle e^{-i\vec{Q}(\vec{L}_{k+1} + \dots + \vec{L}_j)} \right\rangle \right] \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} \left\langle e^{-i\vec{Q}(\vec{M}_{j1} + \dots + \vec{M}_{jm} - \vec{M}_{k1} - \dots - \vec{M}_{kl})} \right\rangle$$

a opět napsat střední hodnotu exponenciální funkce jako součin středních hodnot charakteristických funkcí, protože jsou navzájem nezávislé všechny vektory \vec{L}_j a \vec{M}_{jm} . Charakteristickou funkci rozdělení vektorů \vec{L} označíme $P_L^{FT}(\vec{Q}) = \langle e^{-i\vec{Q}\vec{L}} \rangle$ a po dosazení

$$C_2 + C_3 = 2\Re \left[\sum_{j=2}^{N_1} \sum_{k=1}^{j-1} \left(P_L^{FT}(\vec{Q}) \right)^{j-k} \right] \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} \left(P_M^{FT}(\vec{Q}) \right)^{m-l}$$

Tento výraz se již spočte podle obdobného postupu jako člen C_1

$$C_2 + C_3 = N_1 2\Re \left[\frac{P_L^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_L^{FT}(\vec{Q})} \right] N_2 \left(1 + 2\Re \left[\frac{P_M^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_M^{FT}(\vec{Q})} \right] \right)$$

Nakonec se dosadí zpět do výrazu (17)

$$G(\vec{Q}) = C_1 + C_2 + C_3 = N \left(1 + 2\Re \left[\frac{P_L^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_L^{FT}(\vec{Q})} \right] \right) \left(1 + 2\Re \left[\frac{P_M^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_M^{FT}(\vec{Q})} \right] \right) \quad (18)$$

Výraz (18) lze ještě upravit zavedením Fourierovy transformace korelační funkce $p^{FT}(\vec{Q}) = \int d^2\vec{r} p(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}}$, jejíž význam bude objasněn později

$$G(\vec{Q}) = N \left(1 + p^{FT}(\vec{Q}) \right), \quad (19)$$

$$p^{FT}(\vec{Q}) = \left(1 + 2\Re \left[\frac{P_L^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_L^{FT}(\vec{Q})} \right] \right) \left(1 + 2\Re \left[\frac{P_M^{FT}(\vec{Q})}{1 - P_M^{FT}(\vec{Q})} \right] \right) - 1.$$

Vztah (19) lze odvodit ze vztahu (14) i jiným postupem bez předpokladu o rozložení teček v přibližně dvojrozměrné mřížce. Tento postup rovněž pomůže objasnit význam korelační funkce $p(\vec{r})$. Vydeme opět ze vztahu (14)

$$G(\vec{Q}) = \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \right\rangle$$

Při epitaxním růstu krystalová struktura kvantových teček navazuje na okolní substrát. Proto lze předpokládat, že polohové vektory mohou být pouze vektory krystalové mřížky povrchu substrátu. Je možné přejít proto od sčítání přes kvantové tečky ke sčítání přes krystalovou mřížku.

$$G(\vec{Q}) = \left\langle \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M c_m c_n e^{-i\vec{Q}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)} \right\rangle, \quad (20)$$

kde M je počet mřížových bodů na ozářené ploše povrchu vzorku, m, n indexy mřížových bodů, \vec{r}_m, \vec{r}_n jejich polohové vektory a koeficienty c_m, c_n vyjadřují pravděpodobnost nalezení kvantové tečky v příslušném mřížovém bodě. Koeficient c_m je roven 1, pokud se kvantová tečka nachází v mřížovém bodě m a 0, pokud se v něm nenachází. Pro tyto koeficienty platí vztah $c_m = c_m^2$, který bude ještě použit. Lze opět provést již několikrát použitou úpravu spočívající ve vsunutí střední hodnoty dovnitř sumace

$$G(\vec{Q}) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M \langle c_m c_n \rangle e^{-i\vec{Q}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)} \quad (21)$$

Střední hodnota se pro $m = n$ spočte jako $\langle c_m^2 \rangle = \langle c_m \rangle = c$, přičemž c je hustota kvantových teček na mřížový bod povrchu. Pro m, n různé se vychází z přepokladu, že vzorek je statisticky homogenní, a tedy střední hodnota $\langle c_m c_n \rangle$ závisí pouze na vzájemné poloze mřížových bodů m a

n . Je proto možné si zavést korelační funkci $w(\vec{r}_m - \vec{r}_n) = \langle c_m c_n \rangle$. Funkce $w(\vec{r}_m - \vec{r}_n)$ vyjadřuje pravděpodobnost nalezení kvantových teček v bodech² \vec{r}_m i \vec{r}_n současně. Kvantové tečky nemohou být od sebe vzdáleny méně, než je velikost jedné tečky, a proto funkce $w(\vec{r})$ nabývá hodnoty 0 pro $|\vec{r}|$ menší než velikost teček. Naopak pokud jsou kvantové tečky dostatečně vzdálené, takže vzájemně neovlivňují své polohy, platí $w(\vec{r}_m - \vec{r}_n) = \langle c_m c_n \rangle = \langle c_m \rangle \langle c_n \rangle = c^2$, protože v tomto případě jsou koeficienty c_m a c_n vzájemně nezávislé. Oddělíme sčítání přes stejné kvantové tečky

$$G(\vec{Q}) = Mc + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1, n \neq m}^M w(\vec{r}_m - \vec{r}_n) e^{-i\vec{Q}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)} \quad (22)$$

Součin Mc je hustota kvantových teček násobená počtem mřížových bodů a je tedy rovna počtu kvantových teček N . Definujeme ještě hodnotu korelační funkce $w(\vec{0}) = 0$ a potom můžeme sčítat opět přes všechny mřížové body

$$G(\vec{Q}) = N + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M w(\vec{r}_m - \vec{r}_n) e^{-i\vec{Q}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)}$$

Protože se sčítá přes pravidelnou mřížku, tak lze snadno přejít od sumace k integraci

$$G(\vec{Q}) = N + \frac{1}{a^4} \int_S d^2 \vec{r} \int_S d^2 \vec{r}' w(\vec{r} - \vec{r}') e^{-i\vec{Q}(\vec{r} - \vec{r}')}, \quad (23)$$

kde a je mřížkový parametr a S plocha vzorku. Lze provést substituci $\vec{r} = \vec{r} - \vec{r}'$

$$G(\vec{Q}) = N + \frac{1}{a^4} \int_S d^2 \vec{r} \int_S d^2 \vec{r}' w(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}'} \quad (24)$$

$$G(\vec{Q}) = N + \frac{S}{a^4} \int d^2 \vec{r} w(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}} \quad (25)$$

Z porovnání se vztahem (19) vyplývá, že Fourierova transformace funkce $w(\vec{r})$ se rovná funkci $p^{FT}(\vec{Q})$ až na multiplikativní konstantu $\frac{S}{Na^4}$. Obě funkce $w(\vec{r} - \vec{r}')$ i $p(\vec{r} - \vec{r}')$ jsou přímo úměrné pravděpodobnosti nalezení kvantových teček současně v bodech \vec{r} a \vec{r}' .

Celková intenzita rozptýleného záření se získá dosazením z (19) do (15)

$$I(\vec{Q}) = AN |\Delta \chi|^2 \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 (1 + p^{FT}(\vec{Q})) \quad (26)$$

Pro estetické zjednodušení lze všechny konstanty sloučit do nové konstanty $B = AN |\Delta \chi|^2$

$$I(\vec{Q}) = B \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 (1 + p^{FT}(\vec{Q})) \quad (27)$$

Ještě je možné oddělit části závislé na tvaru kvantové tečky (tvarová funkce F) od části závislé na rozložení kvantových teček (korelační funkce p). Provede se zpětná dvourozměrná Fourierova transformace intenzity rozptýleného záření ze vztahu (27)

$$I^{FT}(x, y, Q_z) = \frac{B}{4\pi^2} \int dQ_x \int dQ_y \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 (1 + p^{FT}(\vec{Q})) e^{i(Q_x x + Q_y y)} \quad (28)$$

Tento výraz lze rozdělit na dvě části

$$I^{FT}(x, y, Q_z) = \frac{B}{4\pi^2} \int dQ_x \int dQ_y \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 e^{-i(Q_x x + Q_y y)} +$$

²Přesně řečeno ne přímo v bodech ale v okolí těchto bodů na ploše jedné primitivní buňky krystalové mřížky povrchu substrátu. Jedna primitivní buňka má plochu a^2 , když a označuje velikost mřížového vektoru.

$$+ \frac{B}{4\pi^2} \int dQ_x \int dQ_y \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 \int dx' \int dy' p(\vec{r}') e^{-i(Q_x x' + Q_y y')} e^{i(Q_x x + Q_y y)}. \quad (29)$$

Tvarová funkce kvantové tečky je v přímém prostoru ohraničena velikostí kvantové tečky v blízkém okolí bodu $\vec{0}$. Naopak korelační funkce v této oblasti nabývá hodnoty 0 a je lokalizována v oblasti vzdálené od počátku souřadnicové soustavy. V reciprokém prostoru je situace opačná, ovšem zpětnou Fourierovou transformací se situace znova obrátí. První část vztahu (29) závisí pouze na tvarové funkci je lokalizována v centrální oblasti, t.j. v okolí bodu $x, y = 0$ vymezeném zhruba velikostí kvantové tečky. Druhá část vztahu (29) je trochu složitější. Fourierova transformace korelační funkce je lokalizována v centrální oblasti reciprokého prostoru (tedy v okolí bodu $Q_x = Q_y = 0$, kde je Fourierova transformace tvarové funkce tečky přibližně konstantní a rovna $F^{FT}(0, 0, Q_z)$, a je tedy možné psát

$$I^{FT}(x, y, Q_z) = \frac{B}{4\pi^2} \int dQ_x \int dQ_y \left| F^{FT}(\vec{Q}) \right|^2 e^{i(Q_x x + Q_y y)} + B \left| F^{FT}(0, 0, Q_z) \right|^2 p(\vec{r}) \quad (30)$$

Celá Fourierova transformace intenzity rozptýleného záření je dána součtem dvou členů. První má vliv pouze v centrální oblasti (okolí bodu $x = y = 0$) a závisí pouze na tvaru teček. Kdežto druhý člen úměrný korelační funkci poloh teček ovlivňuje pouze oblast vzdálenější od středu, protože v centrální části je korelační funkce rovna nule.

V úvodu této kapitoly jsme předpokládali stejnou velikost a tvar všech kvantových teček. Uvážíme tedy, jak se změní předchozí výpočty vlivem různých velikostí kvantových teček. Suscep-tibilita soustavy různých kvantových teček je dána vztahem

$$\chi(\vec{r}) = \chi_{sub} + \Delta\chi \sum_{j=1}^N F_j(\vec{r} - \vec{R}_j), \quad (31)$$

kde tvarová funkce $F_j(\vec{r})$ je různá pro různé kvantové tečky. Rozptýlená intenzita je v kinematické approximaci podle vztahu (9)

$$I(\vec{Q}) = A |\Delta\chi|^2 \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N F_j^{FT}(\vec{Q}) F_k^{FT*}(\vec{Q}) e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \right\rangle$$

Nejprve lze oddělit sčítání přes stejné kvantové tečky (pro $j = k$)

$$I(\vec{Q}) = \frac{B}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N |F_j^{FT}(\vec{Q})|^2 + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1, k \neq j}^N F_j^{FT}(\vec{Q}) F_k^{FT*}(\vec{Q}) e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \right\rangle$$

Lze středovat zvlášť každý člen v součtu

$$I(\vec{Q}) = \frac{B}{N} \left(N \langle |F^{FT}(\vec{Q})|^2 \rangle + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1, k \neq j}^N \langle F_j^{FT}(\vec{Q}) F_k^{FT*}(\vec{Q}) e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \rangle \right)$$

Dále je možné předpokládat, že velikosti teček nijak nesouvisí s jejich polohami, tedy že funkce $F_j^{FT}(\vec{Q})$, $F_k^{FT*}(\vec{Q})$ a vektor vzájemné polohy $(\vec{R}_j - \vec{R}_k)$ jsou nezávislé. Proto můžeme středovat každý člen v součinu zvlášť

$$I(\vec{Q}) = \frac{B}{N} \left(N \langle |F^{FT}(\vec{Q})|^2 \rangle + \langle F^{FT}(\vec{Q}) \rangle \langle F^{FT*}(\vec{Q}) \rangle \sum_{j=1}^N \sum_{k=1, k \neq j}^N \langle e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_k)} \rangle \right)$$

Poslední vztah lze ještě upravit pomocí funkce p^{FT}

$$I(\vec{Q}) = B \left(\langle |F^{FT}(\vec{Q})|^2 \rangle + |\langle F^{FT}(\vec{Q}) \rangle|^2 p^{FT}(\vec{Q}) \right) \quad (32)$$

Na tento výraz lze opět aplikovat zpětnou Fourierovu transformaci

$$I(x, y, Q_z) = B \int dQ_x dQ_y \langle |F^{FT}(\vec{Q})|^2 \rangle e^{i(Q_x x + Q_y y)} + \\ + B |\langle F^{FT}(0, 0, Q_z) \rangle|^2 p(x, y, Q_z). \quad (33)$$

Pro intenzitu, která po zpětné Fourierově transformaci odpovídá centrální části, se středuje absolutní hodnota Fourierovy transformace tvarové funkce kvantových teček – středuje se intenzita. Naproti tomu intenzita, která odpovídá po zpětné Fourierově transformaci vzdálenější části, je počítána jako čtverec absolutní hodnoty středované Fourierovy transformace tvarové funkce – středuje se amplituda.

3.3 Aproximace DWBA

Přesnější výsledky než kinematická approximace dává Distorted-Wave Born Approximation (DWBA) (viz [1], [2]). V této approximaci se rozptylový potenciál rozdělí na dvě části, z nichž pro jednu je známé přesné řešení vlnové rovnice

$$\hat{V} = \hat{V}_A + \hat{V}_B \quad (34)$$

Dopadající vlna ze zdroje $|E_i\rangle$ a rozptylená vlna dopadající do detektoru $|E_f\rangle$ jsou řešením vakové rovnice. Řešeními pro potenciál \hat{V}_A jsou vlny $|i\rangle$ a $|f\rangle$

$$\hat{L}|i\rangle = \hat{V}_A|i\rangle, \quad \hat{L}|f\rangle = \hat{V}_A|f\rangle.$$

Vlna $|i\rangle$ je vlna vyvolaná dopadající vlnou $|E_i\rangle$ na potenciálu \hat{V}_A a $|f\rangle$ vlna vyvolaná rozptylenou vlnou $|E_f\rangle$. Pro rozptylový účinný průřez platí vztah

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{16\pi^2} \left| \langle f | \hat{V}_A | E_i \rangle + \langle f | \hat{V}_B | i \rangle \right|^2 \quad (35)$$

Jako poruchový potenciál \hat{V}_A je možné použít polonekonečný substrát s povrchem v rovině $z = 0$

$$\hat{V}_A \vec{E}(\vec{r}) = -K^2 \chi_{sub} H(-z) \vec{E}(\vec{r}), \quad (36)$$

kde χ_{sub} je susceptibilita substrátu a H Heavisideova distribuce (rovna 1 pro $z < 0$ a 0 pro $z \geq 0$).

Tento případ je řešen jako dopad vlny na rozhraní v rovině $z = 0$ a platí stejně vztahy jako v klasické optice [9]. Narozdíl od klasické optiky viditelného záření se pro rtg. záření úhel dopadu a odrazu se obvykle měří od povrchu vzorku. Dopadající vlna má vlnový vektor

$$\vec{K}_i = (K_{ix}, K_{iy}, K_{iz}), \quad K_{iz} = K \sin \alpha_i,$$

kde α_i je úhel, který svírá s povrchem vzorku. Odražená vlna vystupuje také pod úhlem α_i a má vlnový vektor

$$\vec{K}_{iR} = (K_{ix}, K_{iy}, -K_{iz}).$$

Uvnitř vzorku postupuje lomená vlna s vlnovým vektorem

$$\vec{k} = (K_{ix}, K_{iy}, k_{iz}), \quad k_{iz} = \sin \beta_i,$$

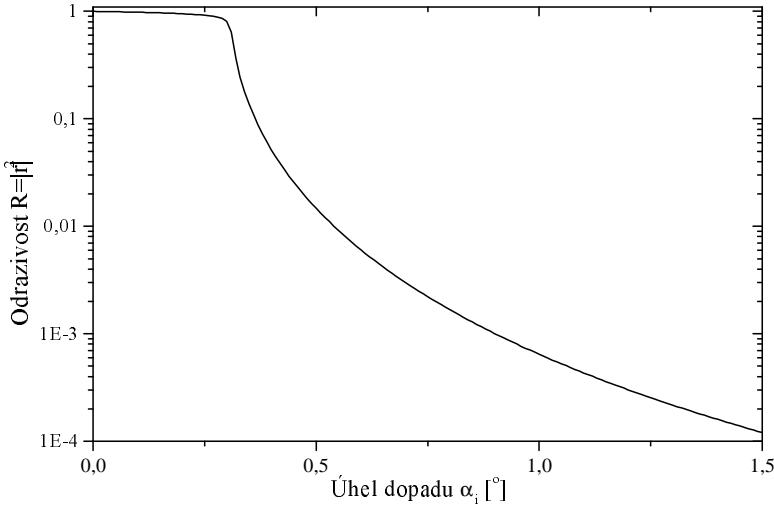
úhel β_i svírá paprsek lomené vlny s povrchem. Pro úhel β_i platí zákon lomu

$$\cos \alpha_i = n \cos \beta_i,$$

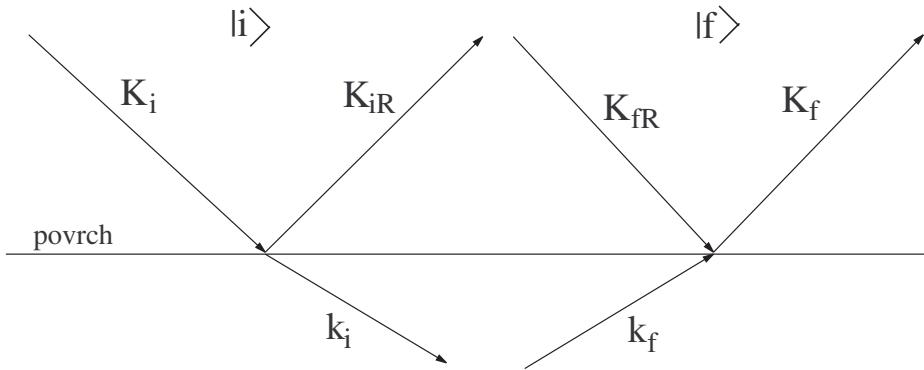
kde $n = \sqrt{1 + \chi_{sub}}$ je index lomu. Amplituda elektrické intenzity odražené vlny je rovna amplitudě dopadající vlny násobené Fresnelovým koeficientem odrazivosti r_i . Amplitudu lomené vlny se od dopadající vlny liší koeficientem propustnosti t_i . Tyto koeficienty jsou různé pro různé polarizace. Pro s-polarizované světlo (vektor elektrické intenzity je v rovině rovnoběžný s povrchem) platí

$$r_i = \frac{K_{iz} - k_{iz}}{K_{iz} + k_{iz}}, \quad t_i = \frac{2K_{iz}}{K_{iz} + k_{iz}}$$

Všechny materiály mají pro rtg. záření index lomu velmi málo odlišný od 1. Odchylka je obvykle řádu 10^{-5} až 10^{-7} a vždy záporná. Absorbci v materiálu vyjadřuje imaginární část indexu lomu, která je obvykle řádově menší než reálná část. Rovněž vlnový vektor lomené vlny \vec{k}_i je komplexní. Jeho imaginární část vyjadřuje pokles intenzity absorpcí. Pro takovéto hodnoty indexu lomu je reflexní koeficient velmi malý, transmisní velmi blízký 1 a vlnový vektor lomené vlny \vec{k}_i je přibližně roven vlnovému vektoru dopadající vlny \vec{K}_i . Tedy lomená vlna se pouze nepatrně liší od dopadající vlny a odražená vlna je o mnoho řádů slabší než dopadající vlna. Vyjímkou tvoří pouze malé úhly dopadu – řádově do 5° . Příklad závislosti odrazivosti $R_i = |r_i|^2$ je v obrázku 4. Kdybychom do stejněho grafu vynesli odrazivost pro p-polarizované světlo (vektor elektrické intenzity je v rovině kolmé k povrchu), nebylo by možné je od sebe rozoznati. Chyba, které se dopouštím, pokud uvažují pouze s Fresnelovými koeficienty pro s-polarizaci je zanedbatelná.



Obrázek 4: Závislost odrazivosti na úhlu dopadu pro vlnovou délku $\lambda=1,54 \text{ \AA}$ na povrchu GaAs.



Obrázek 5: Schéma vln vystupujících v approximaci DWBA

Vlnu $|i\rangle$ lze napsat jako

$$\langle \vec{r}|i\rangle = \begin{cases} e^{i\vec{K}_i\vec{r}} + r_i e^{i\vec{K}_{iR}} & z > 0 \\ t_i e^{i\vec{k}_i\vec{r}} & z \leq 0 \end{cases} \quad (37)$$

Vlna $|i\rangle$ je součtem vlastní dopadající vlny $e^{i\vec{K}_i\vec{r}}$ a odražené vlny $r_i e^{i\vec{K}_{iR}}$ v oblasti nad povrchem a lomené vlny $t_i e^{i\vec{k}_i\vec{r}}$ pod povrchem, uvnitř vzorku (viz obrázek 5).

S vlnou $|f\rangle$ je situace poněkud složitější. Z vlnového vektoru rozptýlené vlny \vec{K}_f definujeme vektory "odražené" \vec{K}_{fR} a "lomené" vlny \vec{k}_f a reflexní a transmisní Fresnelovy koeficienty stejně jako v případě dopadající vlny (viz obrázek 5). Rozdíl v tomto případě je ovšem v časové následnosti. "Odražená" vlna není následnou, ale předchází výsledné rozptýlené vlně, takže "odražená" vlna směřuje k povrchu a odrazí se do směru rozptýlené vlny. Také "lomená" vlna směřuje k povrchu a láme se do směru rozptýlené vlny. Vlnu $|f\rangle$ lze napsat jako

$$\langle \vec{r} | f \rangle = \begin{cases} e^{i\vec{K}_f \vec{r}} + r_f^* e^{i\vec{K}_{fR} \vec{r}} & z > 0 \\ t_f^* e^{i\vec{k}_f^* \vec{r}} & z \leq 0 \end{cases} \quad (38)$$

Výraz pro $|f\rangle$ je zapsán podobným způsobem jako výraz (37) pro vlnu $|i\rangle$. Protože mají ale jednotlivé členy v $|f\rangle$ opačnou časovou následnost, musí se provést časová inverze, která se projeví komplexním sdružením. Stejný výraz jako (37) bychom dosáhli dosazením vlnových vektorů $-\vec{K}_f$, $-\vec{K}_{fR}$ a $-\vec{k}_f$ (obr. 5). Když potom provedeme komplexní sdružení získáme vztah (38).

První část vztahu (35) je pouze rozptylem na potenciálu \hat{V}_A , tedy zrcadlovým odrazem dopadajícího záření do směru \vec{K}_{iR} . Zrcadlovému odrazu jsme se při měření vyhýbali, a proto dále bude uvažován pouze druhý člen, který dává difuzní rozptyl do obecného směru

$$I_{dif}(\vec{Q}) = \frac{A}{K^2} \left\langle \left| \langle f | \hat{V}_B | i \rangle \right|^2 \right\rangle \quad (39)$$

Skutečná susceptibilita je $\chi(\vec{r})$. Uvnitř vzorku ($z < 0$) dává potenciál \hat{V}_A susceptibilitu χ_{sub} . Pro poruchový potenciál \hat{V}_B platí

$$\hat{V}_B \vec{E}(\vec{r}) = -K^2 (\chi(\vec{r}) - \chi_{sub}) \vec{E}$$

Pro rozptyl uvnitř vzorku se použijí amplitudy vln ze vztahů (37) a (38) a převede se vztah (39) do souřadnicové reprezentace

$$\langle f | \hat{V}_B | i \rangle = t_i t_f \int d^3 \vec{r} (\chi(\vec{r}) - \chi_{sub}) e^{-i(\vec{k}_f - \vec{k}_i) \vec{r}}$$

Můžeme zavést rozptylový vektor opravený o lom $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$

$$\langle f | \hat{V}_B | i \rangle = t_i t_f \int d^3 \vec{r} (\chi(\vec{r}) - \chi_{sub}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad (40)$$

V tomto případě je intenzita rozptýleného záření úměrná trojrozměrné Fourierově transformaci elektrické susceptibilitě stejně jako v kinematické approximaci, ale rozptylový vektor je opravený o lom.

Pro defekty, které se nacházejí nad povrchem vzorku ($z > 0$), je poruchový potenciál

$$\hat{V}_B \vec{E}(\vec{r}) = -K^2 \chi(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})$$

Pro tento případ se použijí z výrazů (37) a (38) části pro $z > 0$

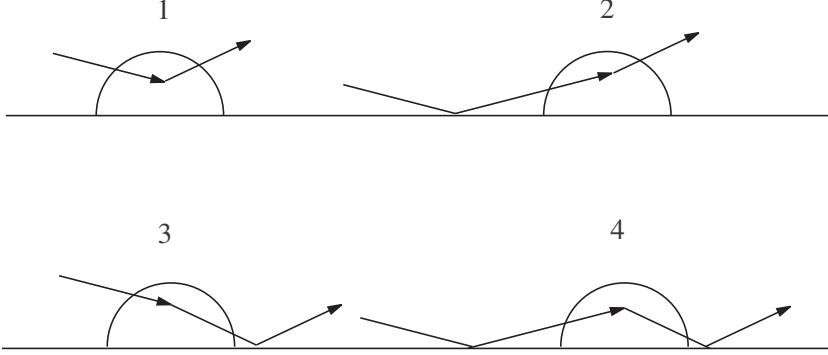
$$\langle f | \hat{V}_B | i \rangle = -K^2 \int d^3 \vec{r} \left(e^{-i\vec{K}_f \vec{r}} + r_f e^{-i\vec{K}_{fR} \vec{r}} \right) \chi(\vec{r}) \left(e^{i\vec{K}_i \vec{r}} + r_i e^{i\vec{K}_{iR} \vec{r}} \right)$$

Tento vztah lze rozdělit na čtyři části

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V}_B | i \rangle = -K^2 & \left(\int d^3 \vec{r} \chi(\vec{r}) e^{-i(\vec{K}_f - \vec{K}_i) \vec{r}} + r_i \int d^3 \vec{r} \chi(\vec{r}) e^{-i(\vec{K}_f - \vec{K}_{iR}) \vec{r}} + \right. \\ & \left. + r_f \int d^3 \vec{r} \chi(\vec{r}) e^{-i(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_i) \vec{r}} + r_i r_f \int d^3 \vec{r} \chi(\vec{r}) e^{-i(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_{iR}) \vec{r}} \right) \end{aligned} \quad (41)$$

V tomto případě lze rozptyl vyjádřit součtem čtyř členů (viz obrázek 6), z nichž první vyjadřuje přímý rozptyl záření (obr. 6-1), druhý vyjadřuje případ paprsku, který se nejprve odrazí od povrchu a potom rozptýlí (6-2), třetí paprsek, který se nejprve rozptýlí a poté odrazí (6-3) a čtvrtý člen vyjadřuje paprsek, který se odrazí, rozptýlí a znova odrazí (6-4).

Approximace DWBA dává výsledky shodné s kinematickou approximací pro velké úhly dopadu (nad 5°), kdy lomená vlna se jen velmi málo liší od dopadající a téměř žádné záření se neodráží.



Obrázek 6: Schéma čtyř procesů při rozptylu na povrchu

3.4 Aplikace approximace DWBA na kvantové tečky

Dále budou aplikovány obecné vztahy approximace DWBA na kvantové tečky.

Nejprve pro kvantové tečky na povrchu vzorku. Intenzita rozptýleného záření v reciprokém prostoru se spočte ze vztahů (40) a (41). Susceptibilita soustavy kvantových teček na povrchu je

$$\chi(\vec{r}) = \chi_{dot} \sum_{j=1}^N F(\vec{r} - \vec{R}_j)$$

Intenzita záření rozptýleného na povrchových tečkách je podle (41)

$$I(\vec{Q}) = A|\chi_{dot}|^2 \left\langle \left| F^{FT}(\vec{K}_f - \vec{K}_i) \sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{K}_f - \vec{K}_i)\vec{R}_j} + r_i F^{FT}(\vec{K}_f - \vec{K}_{iR}) \sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{K}_f - \vec{K}_{iR})\vec{R}_j} + \right. \right. \\ \left. \left. + r_f F^{FT}(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_i) \sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_i)\vec{R}_j} + r_i r_f F^{FT}(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_{iR}) \sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_{iR})\vec{R}_j} \right|^2 \right\rangle \quad (42)$$

Polohové vektory teček na povrchu leží v rovině $z = 0$, tedy všechny vektory \vec{R}_j mají složku do osy z rovnou 0. Dvojice vlnových vektorů \vec{K}_i a \vec{K}_{iR} , se liší pouze znaménkem složky v ose z . Stejně tak i dvojice vektorů \vec{K}_f a \vec{K}_{fR} . Člen $G(\vec{Q}) = \left\langle \left| \sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{K}_f - \vec{K}_i)\vec{R}_j} \right|^2 \right\rangle$ lze tedy vytknout

$$I(\vec{Q}) = A|\chi_{dot}|^2 G(\vec{Q}) \left| F^{FT}(\vec{K}_f - \vec{K}_i) + r_i F^{FT}(\vec{K}_f - \vec{K}_{iR}) + \right. \\ \left. + r_f F^{FT}(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_i) + r_i r_f F^{FT}(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_{iR}) \right|^2, \quad (43)$$

S tímto výrazem lze opět provést zpětnou Fourierovu transformaci podle stejného postupu jako v kapitole 3.2. Pouze Fourierovu transformaci tvarové funkce nahradíme součtem čtyř členů

$$I^{FT}(x, y, Q_z) = \frac{AN|\chi_{dot}|^2}{4\pi^2} \int dQ_x \int dQ_y \left| F^{FT}(\vec{K}_f - \vec{K}_i) + r_i F^{FT}(\vec{K}_f - \vec{K}_{iR}) + \right. \\ \left. + r_f F^{FT}(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_i) + r_i r_f F^{FT}(\vec{K}_{fR} - \vec{K}_{iR}) \right|^2 e^{i(Q_x x + Q_y y)} + \\ + AN|\chi_{dot}|^2 \left| F^{FT}(0, 0, K_{fz} - K_{iz}) + r_i F^{FT}(0, 0, K_{fz} - K_{iRz}) + \right. \\ \left. + r_f F^{FT}(0, 0, K_{fRz} - K_{iz}) + r_i r_f F^{FT}(0, 0, K_{fRz} - K_{iRz}) \right|^2 p(\vec{r}) \quad (44)$$

Výraz má opět dvě části, které mají stejný význam a lokalizaci v prostoru jako ve výrazu (33).

Pro kvantové tečky uvnitř vzorku lze použít susceptibilitu ze vztahu (10), která se dosadí do vztahu (40)

$$I(\vec{Q}) = A|\Delta\chi|^2 \left\langle \left| \int d^3\vec{r} t_i t_f \sum_{j=1}^N F(\vec{r} - \vec{R}_j) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right|^2 \right\rangle, \quad (45)$$

což lze upravit jako

$$I(\vec{Q}) = A|\Delta\chi t_i t_f|^2 \left\langle \left| \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{q}\vec{R}_j} \right|^2 \right\rangle |F^{FT}(\vec{q})|^2 \quad (46)$$

Část závislou na polohách teček označím opět jako funkci $G(\vec{q})$. Tuto funkci můžeme upravit pomocí následující úvahy. Tečky jsou umístěné na rozhraní jednotlivých vrstev, tedy v rovinách rovnoběžných s povrchem. Počítá-li se intenzita rozptýlená pouze na tečkách na rozhraní daném rovinou $z = -c$, pak lze funkci $G(\vec{q})$ přepsat

$$G(\vec{q}) = \left\langle \left| \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{q}\vec{R}_j} \right|^2 \right\rangle = \left\langle \left| e^{iq_z c} \sum_{j=1}^N e^{-i(q_x R_{jx} + q_y R_{jy})} \right|^2 \right\rangle \quad (47)$$

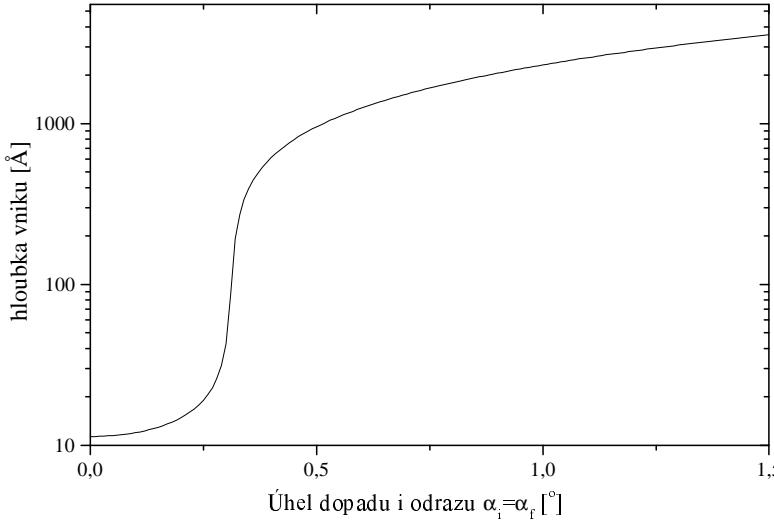
Člen $|e^{iq_z c}|^2$ lze vytknout a dále upravit

$$|e^{iq_z c}|^2 = |e^{i\Re(q_z)c} e^{-\Im(q_z)c}|^2 = e^{-2\Im(q_z)c}$$

Tento člen tedy vyjadřuje absorbci rtg. záření směrem dovnitř vzorku. Lze jej také přepsat pomocí hloubky vniku $l = \frac{1}{2\Im(q_z)}$, což je hloubka, z níž je rozptýlená intenzita e -krát menší než při stejném procesu těsně pod povrchem.

$$|e^{iq_z c}|^2 = e^{-c/l}$$

Příklad závislosti hloubky vniku na úhlu dopadu je v obrázku 7. Zbylou část funkce $G(\vec{Q})$, lze



Obrázek 7: Závislost hloubky vniku v GaAs na úhlu dopadu a výstupu (zde jsou si pro jednoduchost rovné) pro vlnovou délku $\lambda=1,54$ Å.

vyjádřit pomocí korelační funkce

$$G(\vec{q}) = N e^{-c/l} (1 + p^{FT}(\vec{q}))$$

Intenzita rozptýlená uvnitř vzorku na rozhraní v hloubce c je

$$I(\vec{Q}) = AN|\Delta\chi t_i t_f|^2 e^{-c/l} (1 + p^{FT}(\vec{q})) |F^{FT}(\vec{q})|^2. \quad (48)$$

Nyní lze opět provést zpětnou dvojrozměrnou Fourierovu transformaci podle stejného postupu jako v kapitole 3.2

$$\begin{aligned} I^{FT}(x, y, Q_z) = & \frac{B|t_i t_f|^2 e^{-c/l}}{4\pi^2} \left(\int dQ_x \int dQ_y |F^{FT}(\vec{q})|^2 e^{i(Q_x x + Q_y y)} + \right. \\ & \left. |F^{FT}(0, 0, q_z)|^2 p(\vec{r}) \right), \end{aligned} \quad (49)$$

kde je opět člen odpovídající tvarové funkci lokalizován v centrální oblasti a člen úměrný korelační funkci ve větší vzdálenosti od počátku.

Celková rozptýlená intenzita v approximaci DWBA je součtem intenzity rozptýlené na povrchu vzorku a od různých rozhraní uvnitř vzorku, tedy součtem intenzit vypočtených ze vztahů (43) a (48)

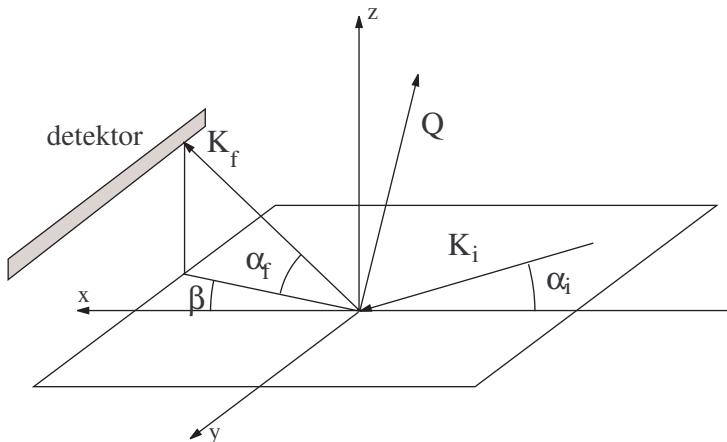
$$\begin{aligned} I(\vec{Q}) = & AN|\chi_{dot}|^2 |F^{FT}(Q_x, Q_y, K_{fz} - K_{iz}) + r_i F^{FT}(Q_x, Q_y, K_{fz} + K_{iz}) + \\ & + r_f F^{FT}(Q_x, Q_y, -K_{fz} - K_{iz}) + r_i r_f F^{FT}(Q_x, Q_y, -K_{fz} + K_{iz})|^2 (1 + p^{FT}(\vec{Q})) + \\ & + AN|\Delta\chi|^2 |t_i t_f|^2 |F^{FT}(\vec{q})|^2 (1 + p^{FT}(\vec{Q})) \sum_j e^{-z_j/l}, \end{aligned} \quad (50)$$

kde z_j je hloubka j -tého rozhraní obsahujícího kvantové tečky. Po provedení zpětné dvourozměrné Fourierovy transformace výrazu (50) je součet výrazů (44) a (49), ve kterém lze opět oddělit části odpovídající tvaru a rozložení kvantových teček.

4 Experiment

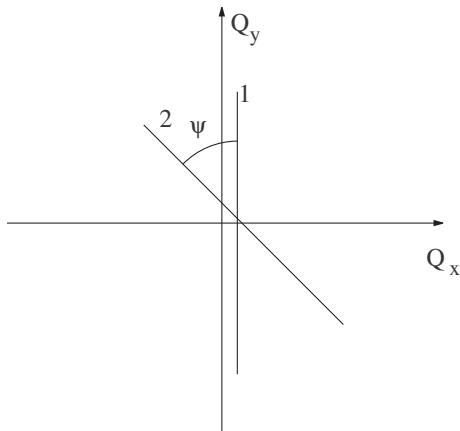
Měření byla prováděna na sychrotronu ESRF v Grenoblu ve Francii na zdroji beamline ID10B (označuje se také jako TROIKA II) při vlnové délce 1,54 Å. Zdroj vyzařuje na širokém rozsahu vlnových délek od tvrdého rtg. záření až po radiové vlny, pomocí krystalových monochromátorů je možné nastavit vlnovou délku. Synchrotronové záření má malou divergenci, velkou intenzitu a velkou koherenční délku v celém rozsahu vlnových délek. Na beamline ID10B je zdrojem undulátor, který vyzařuje s divergencí $28 \times 17 \mu\text{rad}^2$ (což je $5.8'' \times 3.5''$ v horizontálním × vertikálním směru). Ve vzdálenosti 27 m od zdroje je štěrbina, pak následuje monochromátor, který je tvořen dvojicí diamantových krystalů v orientaci (111). Nakonec ve vzdálenosti 42 m od zdroje je umístěn osmikruhový goniometr. Ve vzdálenosti 3 m od goniometru jsou umístěny detektory. Na této beamline je možné měřit záření v rozsahu energie 8 až 13 keV (vlnová délka $0,95\text{--}1,55 \text{ \AA}^{-1}$). Energiová disperze je $\frac{\Delta E}{E} = 6 \cdot 10^{-5}$, stejnou relativní disperzi má i vlnová délka. Průřez svazku v místě vzorku je menší než $1 \times 0,5 \text{ mm}^2$ (horizontálně × vertikálně), intenzita v místě vzorku je 10^{11} fotonů/s. Blížší údaje o tomto sychrotronu uvádí [14].

Měřilo se v upořádání GISAXS (Grazing-Incidence Small Angle X-ray Scattering) – viz obr. 8. Záření dopadá na vzorek pod úhlem dopadu α_i a měří se intenzita záření vystupujícího pod jiným úhlem α_f , abychom se vyhnuli příliš intenzivnímu zrcadlově odraženému záření. Podle obrázku 8 mají vlnové vektory složky: $\vec{K}_i = K(\cos \alpha_i, 0, -\sin \alpha_i)$, $\vec{K}_f = K(\cos \alpha_f \cos \beta, \cos \alpha_f \sin \beta, \sin \alpha_f)$. Velikost vlnových vektorů je stejná a rovna $K = \frac{2\pi}{\lambda}$, kde λ je vlnová délka. Rozptylový vektor je pak $\vec{Q} = \vec{K}_f - \vec{K}_i = K(\cos \alpha_f \cos \beta - \cos \alpha_i, \cos \alpha_f \sin \beta, \sin \alpha_f + \sin \alpha_i)$. Intenzita se měří polohovým detektorem, takže v jednom scanu se proměří najednou intenzita v závislosti na úhlu β pro konstantní Q_z . Jeden scan odpovídá v reciprokém prostoru úsečce rovnoběžné s osou y o délce dané rozsahem úhlu β , tedy pro konstantní Q_x a Q_z (ve skutečnosti je to oblouček v rovině $Q_x Q_y$, ale pro tuto úvahu je úsečka názornější). Se vzorkem se postupně otáčí kolem osy z . V souřadné soustavě spojené se vzorkem (obrázek 8 by značil první scan) každý další scan odpovídá opět stejně dlouhé úsečce v rovině pro stejně Q_z , ale otočené kolem osy z . V obrázku 9 je znázorněn první



Obrázek 8: Schéma uspořádání měření GISAXS

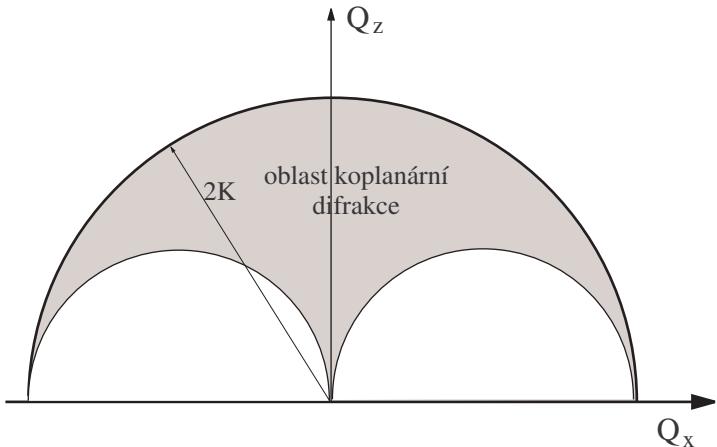
scan (označen 1), kdy souřadná soustava odpovídá obrázku 8, a scan (označen 2), při kterém se se vzorkem otočilo kolem osy z o úhel ψ . Postupným otáčením se naměří intenzita v celé rovině konstantního Q_z v rozsahu daném úhlu β , tedy tzv. mapa v reciprokém prostoru.



Obrázek 9: Jednotlivé scany v rovině Q_xQ_y

V uspořádání GISAXS dopadající i měřený vystupující svazek svírá velmi malý úhel s povrchem, v oblasti totálního odrazu nebo jejím okolí. Hloubka vniku záření se v této oblasti rychle mění, takže můžeme ve velkém rozsahu měnit tloušťku povrchové části vzorku z níž pochází rozptylené záření. Také úhel β je velmi malý (maximálně do 3°). Pro větší úhly β jde o metodu Grazing Incidence Diffraction (GID), kdy se měří v okolí difrakčních maxim atomové mřížky.

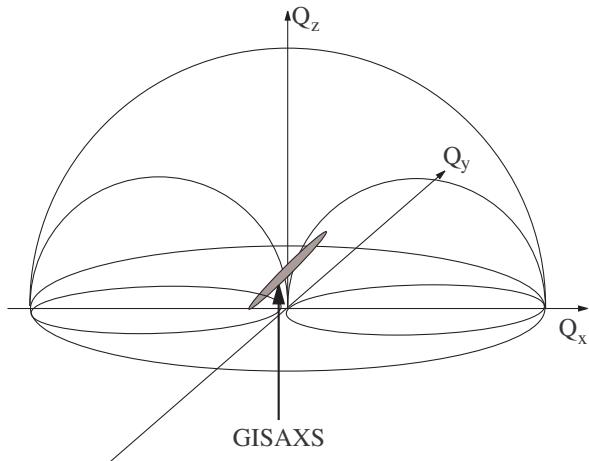
Metoda GISAXS je nekoplanární, proto je možné měřit s takovými rozptylovými vektory, které jsou v obvyklém koplanárném uspořádání nedosažitelné. V koplanární geometrii je rovina daná vlnovými vektory \vec{K}_i , \vec{K}_f a \vec{Q} kolmá k povrchu (v obr. 8 úhel $\beta = 0$). Koplanární uspořádání omezuje dosažitelnou oblast reciprokého prostoru třemi půlkružnicemi (viz obr. 10): první omezení dává podmínka, že velikost rozptylového vektoru nemůže být větší než dvojnásobek vlnového vektoru $Q \leq 2K$ – tato podmínka platí pro jakékoli uspořádání a dává omezení kružnicí se středem v počátku a poloměrem $2K$. Další omezení plynou z podmínek, že dopadající vlna i rozptylená musí být nad vzorkem (neměříme skrz vzorek) $K_{iz} \leq 0$ a $K_{fz} \geq 0$. Tyto podmínky pro koplanární uspořádání dávají omezení rozptylového vektoru v reciprokém prostoru dvěmi kružnicemi. Je-li dopadající paprsek rovnoběžný s povrchem vzorku, je rozptylový vektor roven $\vec{Q} = K(\cos \alpha_f - 1, 0, \sin \alpha_f)$, což je kružnice se středem $(-K, 0, 0)$ a poloměrem K . Jestliže je



Obrázek 10: Dosažitelná oblast v koplanárním uspořádání

rovnoběžný s povrchem vystupující paprsek, pak je je rozptylový vektor $\vec{Q} = K(1-\cos \alpha_i, 0, \sin \alpha_i)$, což dává kružnici se středem v $(K, 0, 0)$ a poloměrem K .

V nekoplanárním uspořádání platí stejné podmínky, ale protože měření není omezeno jen na rovinu $Q_y = 0$, tak jsou půlkruhy nahrazeny polokoulemi (viz obr. 11). Oblast měřená při GISAXS



Obrázek 11: Dosažitelná oblast v nekoplanárním uspořádání

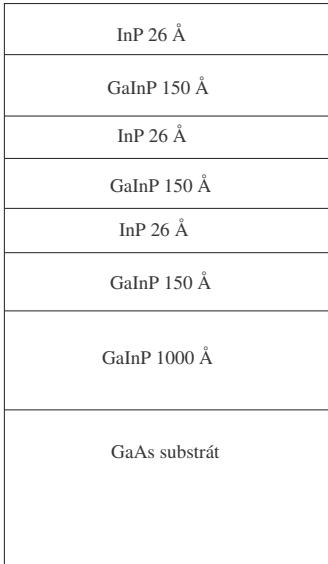
se nachází právě podél osy Q_y , takže se vyhne omezujícím polokoulím. Nekoplanárně je možné měřit pro takové hodnoty složky rozptylového vektoru rovnoběžné s rozhraním ($\sqrt{Q_x^2 + Q_y^2}$), které jsou při daných hodnotách Q_z v koplanárním uspořádání nedosažitelné.

5 Vzorek s multivrstvou InP/GaInP

5.1 Popis vzorku

Tento vzorek byl vyroben metodou epitaxe z kapalné fáze (LPE) na Paul-Drude Institut v Berlíně.

Tento vzorek je tvořen trojnásobně opakovánou dvojvrstvou GaInP a InP (viz obrázek 12). Ve vrstvách GaInP je obsah galia a india v poměru 52 % a 48 %. Celá multivrstva je nanesena na substrátu GaAs v orientaci povrchu (001), na kterém je ještě nanesena 1000 Å tlustá podkladová



Obrázek 12: Schéma vzorku InP/GaInP

vrstva GaInP. Multivrstva je tvořena třemi dvojvrstvami. Každá dvojvrstva je tvořena vždy 150 Å tlustou vrstvou GaInP a 26 Å tlustou vrstvou InP. Kvantové tečky tvoří vrstvy InP. Ve vzorku jsou tedy tečky umístěny na povrchu a ve dvou rovinách pod povrchem v hloubkách $z_1 = 175 \text{ Å}$ a $z_2 = 350 \text{ Å}$.

5.2 Měření GISAXS

Zpracovával jsem měření GISAXS, která naměřili R. Köhler a M. Schmidbauer na synchrotronu ESFR v Grenoblu na beamline ID10B. Parametry tohoto zařízení jsou uvedeny v kapitole 4. Bylo použito záření o vlnové délce 1,5498 Å pro dva různé úhly dopadu a výstupu:

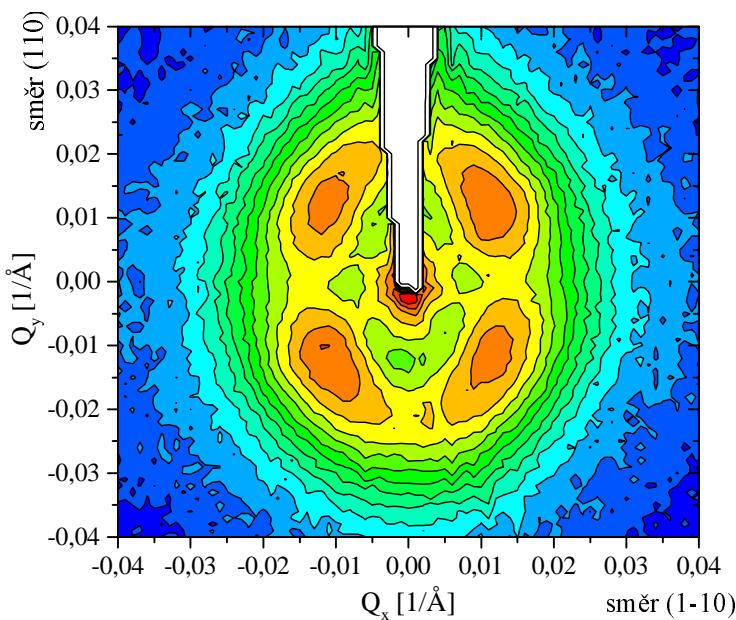
1. úhel dopadu $\alpha_i = 0.25^\circ$, úhel výstupu $\alpha_f = 0.5^\circ$, $Q_z = 0.051 \text{ Å}^{-1}$, hloubka vniku $l=21 \text{ Å}$
2. úhel dopadu $\alpha_i = 0.57^\circ$, úhel výstupu $\alpha_f = 0.57^\circ$, $Q_z = 0.081 \text{ Å}^{-1}$, hloubka vniku $l=514 \text{ Å}$.

Naměřené mapy intenzity v reciprokém prostoru jsou v obrázcích 13 a 14. Osa Q_x má orientaci s Millerovým indexem [1-10], osa Q_y [110] a osa Q_z [001]. V naměřených mapách je vždy uprostřed pro $Q_x = Q_y = 0$ maximum odpovídající spekulárnímu odrazu dopadajícího záření na povrchu, jeho rozšíření způsobuje rozptyl na drsných rozhraních. V horní části je klín, který je způsoben chybějícími daty v této oblasti, nejde o rozptyl záření způsobený vlastnostmi vzorku. Dále jsou v naměřených mapách reciprokého prostoru 4 vedlejší maxima ve směrech, které svírají s osou Q_x úhly 45° a 135° , čemuž odpovídají krystalografické směry s Millerovými indexy [100] a [010]. Vzdálenost těchto maxim od středu $Q_x = Q_y = 0$ je stejná pro obě hodnoty Q_z , činí přibližně $Q = 0.015 \text{ Å}^{-1}$. Tato vzdálenost odpovídá vzdálenosti v přímém prostoru asi 400 Å.

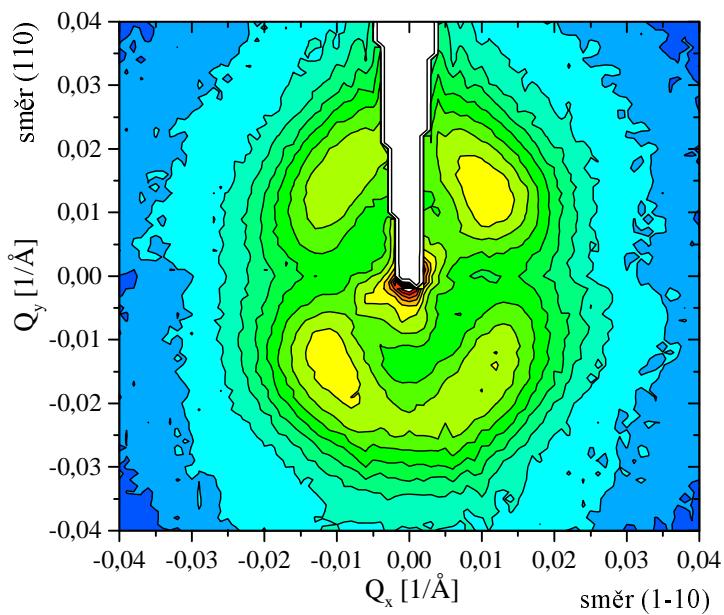
Protože polohy těchto maxim nezávisí na Q_z , přisuzujeme jejich vznik rozdílení poloh kvantových teček. Odpovídají totiž poměrně velkým rozměrům v přímém prostoru a Fourierova transformace tvarové funkce teček závisí na všech třech souřadnicích Q_x , Q_y a Q_z . Funkce $G(\vec{Q})$ vyjadřující vliv rozdílení poloh kvantových teček nezávisí na Q_z , pokud se navzájem neovlivňují polohy kvantových teček rozložených v různých vrstvách rovnoběžných s povrchem.

5.3 Zpracování měření

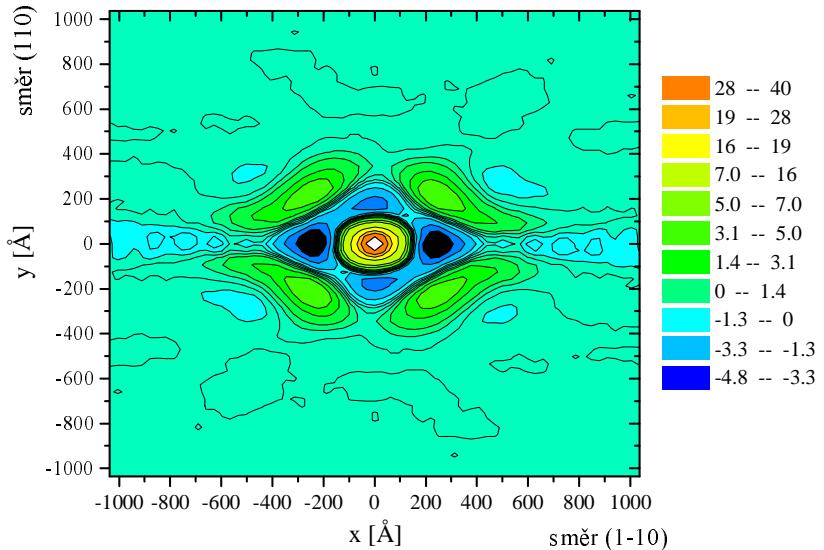
Nejprve jsem provedl zpětnou dvojrozměrnou Fourierovu transformaci naměřených map (viz obrázek 15) k oddělení části závislé tvaru teček od části závislé na jejich rozložení.



Obrázek 13: Rozložení intenzity v reciprokém prostoru na vzorku InP/GaInP pro $Q_z = 0.053 \text{ \AA}^{-1}$. Intenzita je vynesena v logaritmické škále, rozdíl mezi sousedními vrstevnicemi je 1,5.



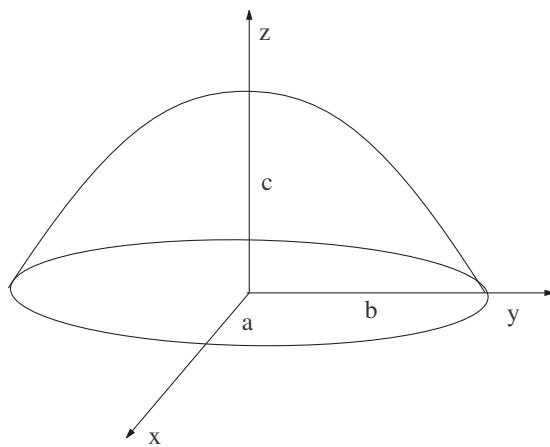
Obrázek 14: Rozložení intenzity v reciprokém prostoru na vzorku InP/GaInP pro $Q_z = 0.081 \text{ \AA}^{-1}$. Intenzita je vynesena v logaritmické škále, rozdíl mezi sousedními vrstevnicemi je 1,24.



Obrázek 15: Vzorek InP/GaInP: Fourierova transformace intenzity pro $Q_z = 0.053 \text{ \AA}^{-1}$. Fourierova transformace druhého měření vypadá velmi podobně.

Osy x a y odpovídají krystalografickým směrům s Millerovými indexy [1–10] a [110]. V získané mapě v přímém prostoru je opět ve středu maximum, které je způsobeno tvarovou funkcí kvantových teček $F(\vec{r})$ (viz vztah (30)). Toto maximum má osovou symetrii vzhledem k osám x a y , ve směru osy x je protažené. Dále jsou v mapě v přímém prostoru opět 4 vedlejší maxima ve směrech svírajících s osou x úhly 45° a 135° (opět odpovídají směrům [100] a [010]). Tato maxima jsou způsobena maximy korelační funkce $p(\vec{r})$ (vztah (30)). Sousední kvantové tečky se tedy nalézají přibližně v krystalografických směrech [100] a [010]. Mezi vedlejšími maximy a centrálním maximem jsou minima, která nemají jednoduchou přímou souvislost s některým parametrem.

Nejprve jsem se zabýval tvarovou funkcí kvantových teček. Centrální maximum je symetrické vzhledem k osám x a y , z čehož vyplývá, že tvarová funkce má stejnou symetrii vzhledem k osám x a y . Vrstevnice tohoto maxima mají přibližně tvar elips protažených ve směru osy x . Protože na centrálním maximu není patrná žádná jiná vnitřní struktura, předpokládali jsme tečky ve tvaru poloviny elipsoidu s hlavními poloosami a, b, c ve směrech os x, y, z (viz obrázek 16).



Obrázek 16: Schéma modelu poloelipsoidické tečky

Intenzita závisí na Fourierově transformaci tvarové funkce teček $F(\vec{r})$. Tvarovou funkci poloelipsoidické tečky popisují tři parametry – poloosy elipsoidu.

$$F^{FT}(\vec{Q}) = \int d^3\vec{r} F(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}},$$

Pro půlelipsoide je výhodné zavést válcové souřednice

$$x = ar \cos \phi, y = br \sin \phi, z = ct$$

Tvarová funkce je rovna 1 v těchto mezích proměnných r, ϕ, t

$$0 \leq r \leq 1, 0 \leq \phi < 2\pi, 0 \leq z \leq \sqrt{1 - r^2}$$

Fourierova transformace tvarové funkce ve válcových souřadnicích je

$$F^{FT}(\vec{Q}) = abc \int_0^1 dr r \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\sqrt{(Q_x a)^2 + (Q_y b)^2} r \cos \phi} \int_0^{\sqrt{1-r^2}} dt e^{-iQ_z ct},$$

kde lze ještě analyticky zintegrovat přes t a ϕ

$$F^{FT}(Q_x, Q_y, Q_z) = 2\pi abc \int_0^1 dr r J_0(r\sqrt{(Q_x a)^2 + (Q_y b)^2}) \frac{e^{-iQ_z c \sqrt{1-r^2}} - 1}{-iQ_z c}, \quad (51)$$

kde J_0 je Besselova funkce prvního druhu. Tento integrál již nelze analyticky vypočítat, proto jsem jej počítal numericky.

Rozptyl na kvantových tečkách v approximaci DWBA je dán vztahem (50)

$$\begin{aligned} I_0(\vec{Q}) = AN|\chi_{dot}|^2 &|F^{FT}(Q_x, Q_y, K_{fz} - K_{iz}) + r_i F^{FT}(Q_x, Q_y, K_{fz} + K_{iz}) + \\ &+ r_f F^{FT}(Q_x, Q_y, -K_{fz} - K_{iz}) + r_i r_f F^{FT}(Q_x, Q_y, -K_{fz} + K_{iz})|^2 (1 + p^{FT}(\vec{Q})) + \\ &+ AN|\Delta\chi|^2 |t_i t_f|^2 |F^{FT}(\vec{q})|^2 (1 + p^{FT}(\vec{q})) \sum_{j=1}^2 e^{-z_j/l}, \end{aligned} \quad (52)$$

kde $z_1 = 175 \text{ \AA}$ a $z_2 = 350 \text{ \AA}$ jsou hloubky vrstev InP uvnitř vzorku od povrchu. Po provedení zpětné dvouozměrné Fourierovy transformace funkce $I_0(\vec{Q})$ získáme součet výrazů (44) a (49). Centrální část závislou jen na tvaru kvantových teček získáme Fourierovou transformací vztahu (52) při dosazení za $p^{FT}(\vec{Q}) = 0$. Protože F^{FT} nezávisí přímo na obou souřadnicích Q_x, Q_y , ale pouze na $\sqrt{(Q_x a)^2 + (Q_y b)^2}$ (označím ještě $q_{||} = \sqrt{(Q_x a)^2 + (Q_y b)^2}$), lze situaci opět zjednodušit použitím válcových souřadnic

$$\begin{aligned} Q_x &= \frac{q_{||}}{a} \cos \phi, Q_y = \frac{q_{||}}{b} \sin \phi \\ I_0^{FT}(x, y, Q_z) &= \frac{1}{4\pi^2} \int dQ_x dQ_y I_0(q_{||}, Q_z) e^{i(Q_x x + Q_y y)} = \\ &= \frac{1}{4\pi^2 ab} \int_0^\infty dq_{||} q_{||} I_0(q_{||}, Q_z) \int_0^{2\pi} d\phi e^{iq_{||} r \cos \phi} = \\ &= \frac{1}{2\pi ab} \int_0^\infty dq_{||} q_{||} I_0(q_{||}, Q_z) J_0(rq_{||}) \end{aligned} \quad (53)$$

Tento integrál jsem také počítal numericky.

Nakonec jsem ještě prováděl středování přes různé velikosti teček. Podle vztahu (33) se pro výpočet centrální časti v přímém prostoru středuje intenzita záření. Za předpokladu, že všechny tečky jsou si podobné, tedy že poměry jednotlivých poloos teček jsou stejné pro všechny tečky, lze zavést pouze jeden parametr t vyjadřující velikost tečky. Původní parametry a, b, c jsou středními

hodnotami velikostí jednotlivých poloos. Skutečné poloosy tečky, kterou popisují parametry a, b, c, t jsou $a_{skut} = at, b_{skut} = bt, c_{skut} = ct$. Parametr t má střední hodnotu 1 a nabývá pouze kladných hodnot. Předpokládal jsem rozdělení χ^2 parametru t

$$\phi_\nu(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu/2)2^{\nu/2}}x^{\nu/2-1}e^{-x/2}$$

Takto zavedené rozdělení má střední hodnotu ν a směrodatnou odchylku $\sigma = \sqrt{2\nu}$. Rozdělovací funkci proto lze přeskálovat dosazením za parametr $x = t\nu$

$$f_\nu(t) = \frac{\nu}{\Gamma(\nu/2)2^{\nu/2}}(t\nu)^{\nu/2-1}e^{-t\nu/2}$$

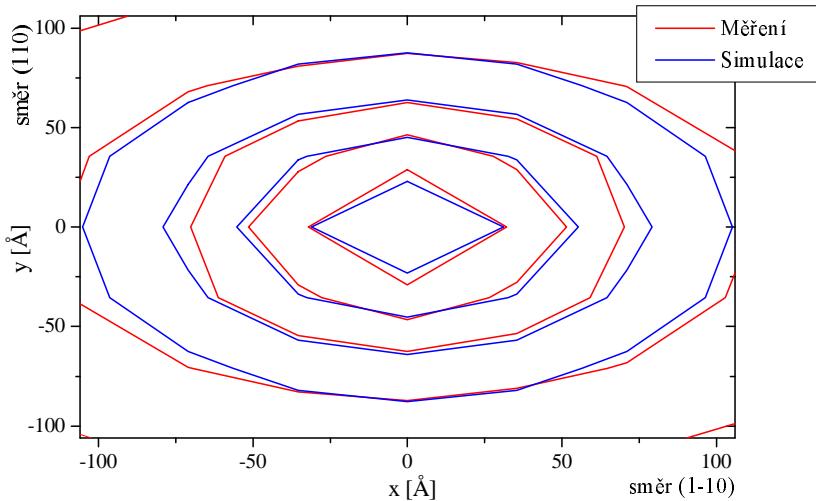
Toto rozdělení $f_\nu(t)$ má požadovanou střední hodnotu 1 a směrodatnou odchylku $\sigma = \sqrt{2/\nu}$.

Středování přes různé velikosti teček lze provést až po zpětné Fourierově transformaci intenzity, neboť jde jen o přesunutí pořadí integrálů. Fourierova transformace intenzity rozptýlené na kvantových tečkách s velikostí danou parametrem t je $I_0^{FT}(x, y, Q_z, t)$, která se získá ze vztahů (51), (52) a (53) nahrazením parametrů a, b, c parametry at, bt, ct . Výsledná Fourierova transformace rozptýlené intenzity od všech velikostí teček je střední hodnotou intenzity $I_0^{FT}(x, y, Q_z, t)$ přes parametr t

$$I^{FT}(x, y, Q_z) = \int_0^\infty dt I_1^{FT}(x, y, Q_z, t) f_\nu(t). \quad (54)$$

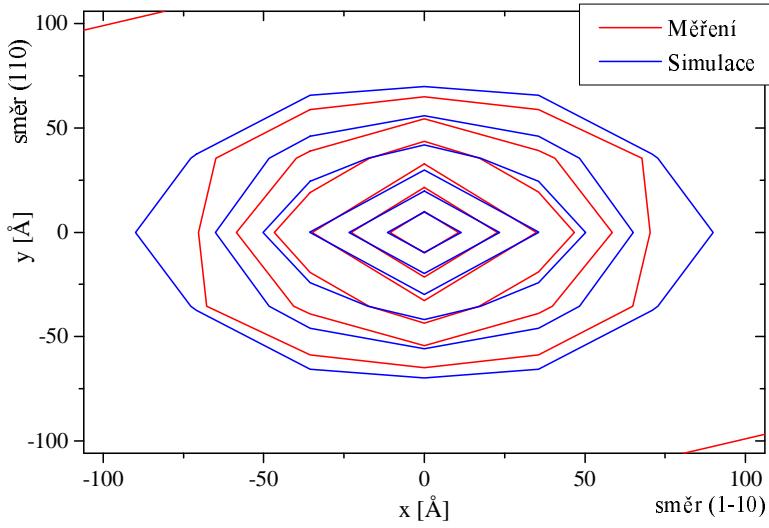
Tento integrál jsem opět počítal numericky. Výsledná Fourierova transformace intenzity závisí na středních velikostech poloos a, b, c a směrodatné odchylce rozdělení velikostí kvantových teček σ , celkem tedy čtyřech parametrech.

Centrální část Fourierovy transformace obou map jsem fitoval závislostí danou vztahem (54) pomocí Marquart-Lavenbergovy metody (viz např. [8]). Porovnání fitované závislosti a naměřené je v obrázcích 17 a 18. V obrázcích jsou vykresleny izolinie Fourierovy transformace naměřené mapy v centrální části a na fitovaná funkce poodle vztahu (54). Vypočtená závislost dobře odpovídá výsledkům měření. Z fitu jsem získal tyto hodnoty středních parametrů velikostí teček: $a =$



Obrázek 17: Vzorek InP/GaInP: porovnání Fourierovy transformace naměřené mapy intenzity a její simulace pro $Q_z = 0,053 \text{ Å}^{-1}$. Vrstevnice jsou vyneseny v lineární škále.

$(84 \pm 3) \text{ Å}, b = (68 \pm 3) \text{ Å}, c = (10 \pm 20) \text{ Å}$ a hodnotu směrodatné odchylky rozdělení velikostí teček $\sigma = (0.10 \pm 0.08)$. Výsledné střední rozdíly teček a, b jsou určeny poměrně přesně, mají chybu 4 % a 5 %. Střední výška teček c je zatížena velkou chybou, lepšího výsledku by bylo možné dosáhnout,



Obrázek 18: Vzorek InP/GaInP: porovnání Fourierovy transformace naměřené mapy intenzity a její simulace pro $Q_z = 0,081 \text{ Å}^{-1}$. Vrstevnice jsou vyneseny v lineární škále.

měřením pro více hodnot Q_z . Výška tečky nemůže být záporná a také musí být větší než jedna monovrstva, proto parametr c může nabývat hodnot z intervalu 3 až 30 Å , tedy $c = (16 \pm 13) \text{ Å}$. Ale zřejmě je výška kvantových teček mnohem menší než šířka a délka.

V první naměřené mapě se díky hloubce vniku projevují téměř výhradně tečky na povrchu vzorku (asi 90 % celkové intenzity), v druhé mapě se projevuje i vliv teček uvnitř vzorku (asi 35 % celkové rozptýlené intenzity). Simulace stejně dobře odpovídá pro obě měření, z čehož lze usoudit, že rozměry teček uvnitř vzorku a na povrchu se téměř neliší.

Pro zjištění rozložení poloh teček jsem simuloval přímo mapu rozptýlené intenzity v reciprokém prostoru pomocí korelační funkce poloh teček – viz obrázky 19 a 20. Parametry tvarové funkce jsou již určeny, a její Fourierova transformace je dána vztahem (51). Intenzita v reciprokém prostoru je dána vztahem (52), pro započtení různých velikostí kvantových teček je podle vztahu (33) nutno spočítat střední hodnotu Fourierovy transformace tvarové funkce a také střední hodnotu čtverce její velikosti, což je při známých parametrech tvarové funkce už poměrně jednoduché. Zbývá tedy ještě korelační funkce p . Maxima korelační funkce leží v krystalografických směrech [100] a [010], které s osou x svírají úhly 45° a 135° . Již je výše uvedeno, že vzdálenosti všech čtyř maxim od středu jsou stejné, a tedy kvantové tečky tvoří zhruba čtvercovou mřížku. Pro účely této simulace jsem otočil mapu intenzity o 45° , aby maxima korelační funkce ležela v osách x a y .

Korelační funkce poloh je dána vztahem (19). Střední hodnoty vektorů $\langle \vec{L} \rangle$ a $\langle \vec{M} \rangle$ leží ve směrech maxim, tedy [100] a [010]. Střední hodnotu vektoru $\langle \vec{L} \rangle$ jsem předpokládal ve směru osy x a její velikost D , tedy $\langle \vec{L} \rangle = [D, 0, 0]$. Rozdělení $P_L(\vec{L})$ jsem předpokládal ve tvaru součinu nezávislých rozdělení ve směrech x, y

$$P_L(\vec{L}) = P_1(L_x)P_2(L_y).$$

Stejně jsem předpokládal střední hodnotu $\langle \vec{M} \rangle = [0, D, 0]$, protože vzdálenost maxim od počátku v naměřené mapě i v její Fourierově transformaci je ve směrech [100] i [010] je stejná. Podobně i rozdělení vektorů \vec{M} jsem předpokládal ve tvaru

$$P_M(\vec{M}) = P_3(M_x)P_4(M_y).$$

Korelační funkce závisí na charakteristických funkcích obou rozdělení $P_L(\vec{L}), P_M^{FT}(\vec{M})$. Charakte-

ristická funkce rozdělení $P_L(\vec{L})$ se spočte jako

$$P_L^{FT}(\vec{Q}) = \int dL_x P_1(L_x) e^{-iQ_x L_x} \int dL_y P_2(L_y) e^{-iQ_y L_y} = P_1^{FT}(Q_x) P_2^{FT}(Q_y)$$

jde o součin charakteristických funkcí rozdělení $P_1(L_x)$ a $P_2(L_y)$. Rozdělení P_1 jsem předpokládal opět ve tvaru rozdělení χ^2 , protože složky L_x mohou nabývat jen kladných hodnot. Rozdělovací funkci χ^2 lze přeskálovat tak, aby mělo střední hodnotu D

$$P_1(L_x) = \frac{\nu}{D\Gamma(\frac{\nu}{2})2^{\nu/2}} \left(\frac{L_x \nu}{D} \right)^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{L_x \nu}{2D}}$$

Rozdělení P_1 má směrodatnou odchylku $\sigma_{||} = D\sqrt{\frac{2}{\nu}}$. Charakteristická funkce rozdělení P_1 je

$$P_1^{FT}(Q_x) = \frac{1}{(1 + 2iQ_x D / \nu)^{\nu/2}}.$$

Pro rozdělení $P_2(L_y)$ jsem předpokládal Gaussovo rozdělení se směrodatnou odchylku σ_{\perp} a střední hodnotou 0

$$P_2(L_y) = \frac{1}{\sigma_{\perp} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{L_y^2}{2\sigma_{\perp}^2}}$$

Rozdělení P_2 má charakteristickou funkci

$$P_2^{FT}(Q_y) = e^{-\frac{Q_y^2 \sigma_{\perp}^2}{2}}.$$

Charakteristická funkce rozdělení $P_L(\vec{L})$ je

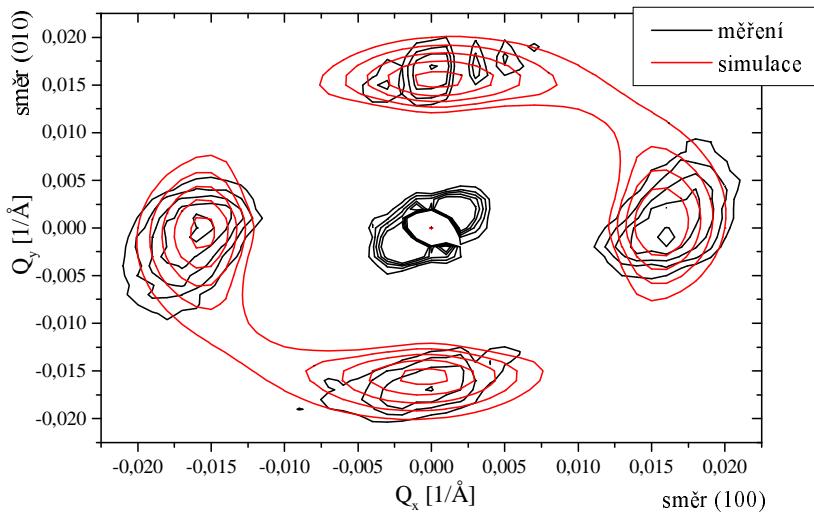
$$P_L^{FT}(\vec{Q}) = \frac{e^{-\frac{Q_x^2 \sigma_{\perp}^2}{2}}}{(1 + 2iQ_x D / \nu)^{\nu/2}}$$

V případě vektoru \vec{M} jsem naopak předpokládal P_3 jako normalní rozdělení a P_4 jako rozdělení χ^2 . Směrodatné odchylky a střední hodnoty těchto rozdělení jsem předpokládal stejně jako u rozdělení P_2, P_1 (tedy $P_3(x) = P_2(x)$ a $P_4(x) = P_1(x)$). Charakteristická funkce rozdělení P_M potom je

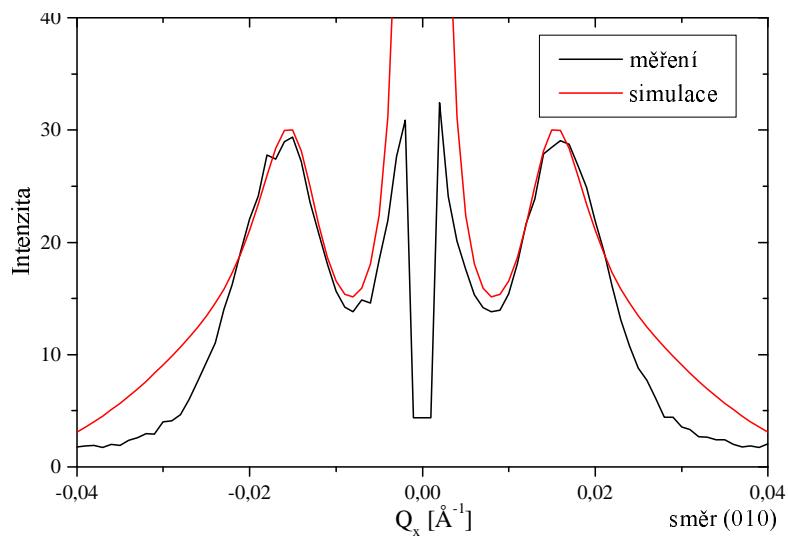
$$P_M^{FT}(\vec{Q}) = \frac{e^{-\frac{Q_x^2 \sigma_{\perp}^2}{2}}}{(1 + 2iQ_y D / \nu)^{\nu/2}}.$$

Celkem vstupují do této simulace tři parametry: $D, \sigma_{||}$ a σ_{\perp} . Výsledná střední vzdálenost teček je $D = (400 \pm 20) \text{ \AA}$. Směrodatné odchylky v obou směrech vyšly stejné a rovny $\sigma_{||} = (120 \pm 30) \text{ \AA}$, $\sigma_{\perp} = (120 \pm 40) \text{ \AA}$. Výsledná simulace je v obrázku 19, kde jsou izolinie v naměřené mapě intenzity v reciprokém prostoru a simulace této mapy. Simulace v obrázku poměrně dobře odpovídá měření. Okrajové části maxim odpovídají méně, protože předpoklad nezávislosti složek vektorů vzájemné polohy (např. pro vektor \vec{L} rozdělení rozdělovací funkce na dvě nezávislé složky $P_L(\vec{L}) = P_1(L_x)P_2(L_y)$) je poměrně hrubou approximací. Řez naměřenou mapou ve směru [010] a jeho simulace je v obrázku 20. Simulace dobře odpovídá v oblasti maxim, ale ve větší vzdálenosti naměřená křivka vykazuje větší pokles. Tento rozdíl je způsoben tím, že skutečné rozdělení $P_1(L_x)$ (a také $P_4(M_y)$) klesá pro malou vzdálenost rychleji než rozdělení χ^2 . Pravděpodobnost nalezení kvantové tečky ve vzdálenosti menší než velikost jednotlivých teček je nulová, ale rozdělení χ^2 dává nenulovou pravděpodobnost. Po provedení Fourierovy transformace se tento jev projeví rychlejším poklesem měřené intenzity s rostoucí vzdáleností od počátku v reciprokém prostoru.

Pro tyto kvantové tečky jsem získal parametry tvaru kvantových teček, směrodatnou odchylku rozdělení jejich velikostí, střední vzdálenost teček a směrodatné odchylky od středních vektorů jejich vzájemné polohy. Dobře byly určeny horizontální rozměry teček, jejich výška je určena s velikou chybou, protože měření není na výšku teček citlivé. Vzájemná poloha teček je určena také dosti přesně. První měření (pro $Q_z = 0.053 \text{ \AA}^{-1}$) zachytilo téměř výhradně tečky na povrchu vzorku, druhé měření (pro $Q_z = 0.081 \text{ \AA}^{-1}$) zachytilo částečně i tečky uvnitř vzorku. Můžeme tedy usuzovat, že tečky uvnitř vzorku mají parametry blízké tečkám na povrchu.



Obrázek 19: Vzorek InP/GaInP: intenzita rozptýleného záření v reciprokém prostoru a její simulace pomocí korelační funkce poloh teček pro $Q_z = 0.053 \text{ \AA}^{-1}$. Ve středu je v naměřených datech maximum dané spekulární odrazem záření. Vrstevnice jsou vyneseny v lineárním měřítku.

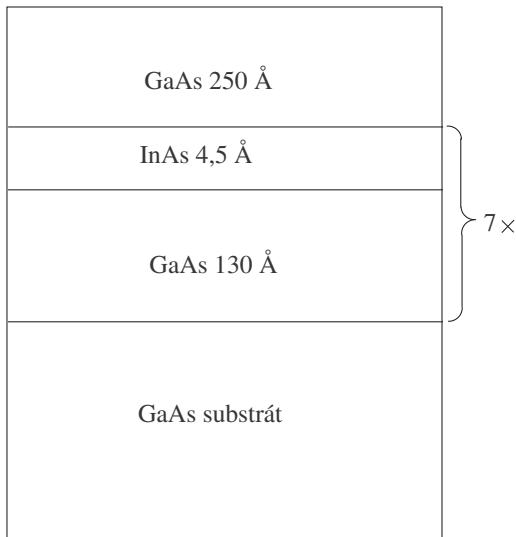


Obrázek 20: Vzorek InP/GaInP: řez mapou v reciprokém prostoru ve směru [010] a jeho simulace pomocí korelační funkce poloh teček pro $Q_z = 0.053 \text{ \AA}^{-1}$

6 Vzorek s multivrstvou InAs/GaAs

6.1 Popis vzorku

Vzorek byl vyroben metodou Metal-Organic chemical vapour deposition (MOCVD) na Fyzikálním ústavu (FzÚ AVČR) v Praze.



Obrázek 21: Scháma vzorku s multivrstvou InAs/GaAs

Substrátem je GaAs s povrchem v krystalografické rovině (001). Na substrátu je nanesena multivrstva se sedmkrát opakovanou periodou – viz obrázek 21. Každou periodu tvorí 130 Å tlustá vrstvou GaAs a 4,5 Å tlustá vrstva InAs. Multivrstva je pokryta krycí vrstvou GaAs o tloušťce 250 Å. Vrstva InAs tvoří kvantové tečky, které jsou tedy v sedmi vrstvách uvnitř vzorku, a rovněž na povrchu vznikly kvantové objekty.

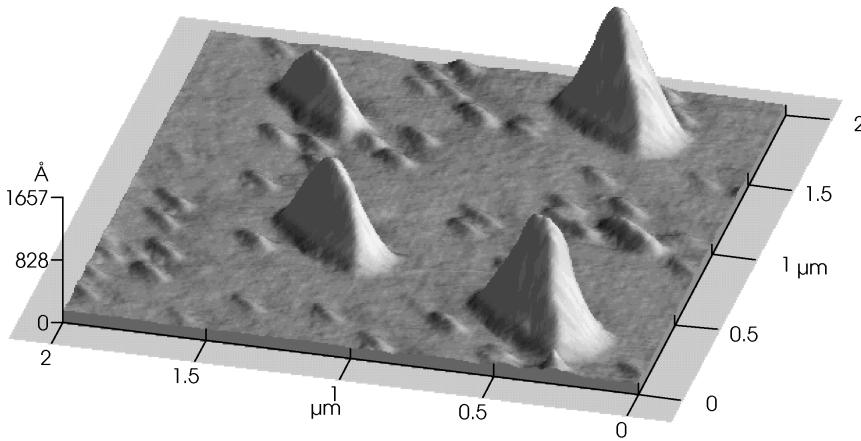
6.2 Měření AFM

Dostal jsem k dispozici výsledky z měření povrchu metodou AFM (Atomic Force Microscopy – mikroskop atomové síly), která provedl M. Meduňa na univerzitě v Linzi.

Příklad získaného profilu povrchu vzorku je v obrázku 22. Z obrázku 22 je zřejmé, že na povrchu jsou kvantové tečky ve tvaru pyramid dvojí velikosti. Směr, ve kterém jsou pyramidy protaženy, má Millerovy indexy [1-10]. Změřil jsem rozměry asi 50 pyramid a získal jsem střední hodnoty rozměrů. Pro velké pyramidy: délka ve směru [1-10] $l = (4840 \pm 750)$ Å, šířka ve směru [110] $d = (2130 \pm 540)$ Å, a výška ve směru [001] $v = (940 \pm 340)$ Å. Pro malé pyramidy: délka $l = (1440 \pm 220)$ Å, šířka $d = (590 \pm 90)$ Å, a výška $v = (67 \pm 21)$ Å. Malé pyramidy jsou tedy ve vodorovných rozměrech asi 4× menší, výšku však mají menší 14 ×. Z výsledků měření AFM rovněž vyplývá (obr. 22), že pyramidy nejsou na povrchu vzorku žádným způsobem uspořádány, ale jsou rozloženy víceméně náhodně.

6.3 Měření GISAXS

Měření GISAXS provedli M. Meduňa a Z. Bochníček na ESRF v Grenoblu na beamline ID10B. Parametry tohoto zdroje jsou uvedeny v kapitole 4. Při měření bylo použito záření o vlnové délce 1.549 Å pro osm různých úhlů dopadu a výstupu:



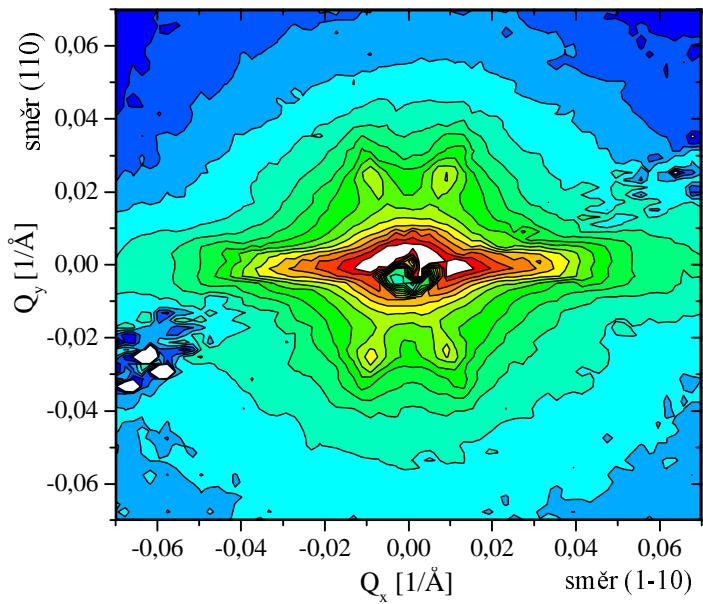
Obrázek 22: Povrch vzorku GaAs/InAs podle AFM

pořadí měření	úhel dopadu α_i °	úhel výstupu α_f °	Q_z \AA^{-1}	hloubka vniku Å
1	0.89	0.11	0.07078	24,2
2	0.95	0.35	0.09203	661
3	1.05	0.55	0.11326	1510
4	1.16	0.74	0.13449	2028
5	1.28	0.92	0.15573	2466
6	0.70	0.30	0.07078	83,2
7	0.93	0.67	0.11326	1711
8	1.19	1.01	0.15573	2530

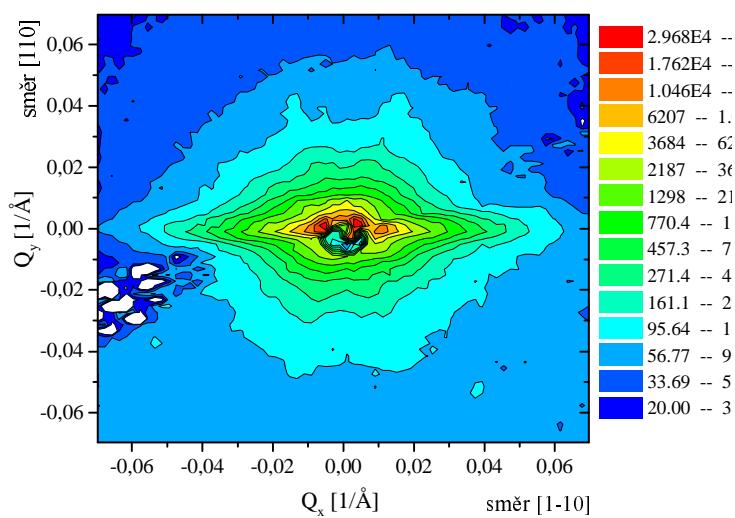
Dvě naměřené mapy jsou v obrázcích 23 a 24. Souřadná osa Q_x má krystalografický směr [1-10], osa Q_y [110] a osa Q_z má směr [001]. V naměřených mapách je ve středu centrální maximum, které odpovídá spekulárně odraženému záření, minimum v jeho okolí je způsoben trnem stínícím toto odražené záření. Většinu rozptýlené intenzity tvoří difuzní rozptyl na drsných rozhraních, který tvoří silné pozadí, v němž zaniká pro větší Q_z veškerá struktura. Proto také nejsou zobrazeny mapy pro větší Q_z . V mapě intenzity v reciprokém prostoru pro $Q_z = 0,0708 \text{ \AA}^{-1}$ jsou jasně patrná vedlejší maxima, která jsou ve směrech svírajících s osou Q_y úhel $\pm(20\pm 1)^\circ$. S rostoucím Q_z se tato maxima ztrácejí v difuzním rozptylu na drsných rozhraních. V řezech vedených přes tato maxima jsou zachytitelná ještě pro $Q_z = 0.1134 \text{ \AA}^{-1}$. Tato maxima se vzdalují od středu $Q_x = Q_y = 0$ přímo úměrně rostoucímu Q_z , jsou tedy umístěna v přímkách vycházejících z počátku $Q_x = Q_y = Q_z = 0$ a svírajících s osou Q_z úhel $(24,8 \pm 0,5)^\circ$. Tyto přímky odpovídají krystalografickým směrům s indexy [125] nebo [126]. Protože tato maxima výrazně závisí na Q_z , jsou dáná tvarem teček. Pro tečky ve tvaru pyramid jsou maxima tvarové funkce ve směrech kolmých na stěny pyramidy. Je nepravděpodobné, že by stěny pyramidy měly krystalografické indexy právě [125], a proto se domnívám, že stěny pyramid nejsou dány nějakou určitou krystalografickou rovinou. V naměřené mapě je ještě protažená struktura ve směru osy Q_x , jejíž původ nebyl uspokojivě vysvětlen.

6.4 Zpracování měření GISAXS

V tomto případě jsem fitoval přímo mapu v reciprokém prostoru. Pro náhodně rozložené tečky je korelační funkce poloh teček $p(\vec{r})$ konstantní a úměrná pouze hustotě jejich rozložení. Intenzita v reciprokém prostoru je dána v approximaci DWBA vztahem (50), která pro $p(\vec{r}) = \text{konst.}$ závisí pouze na tvarové funkci teček. Tečky jsem předpokládal ve tvaru jehlanu (obrázek 25) s podstavou

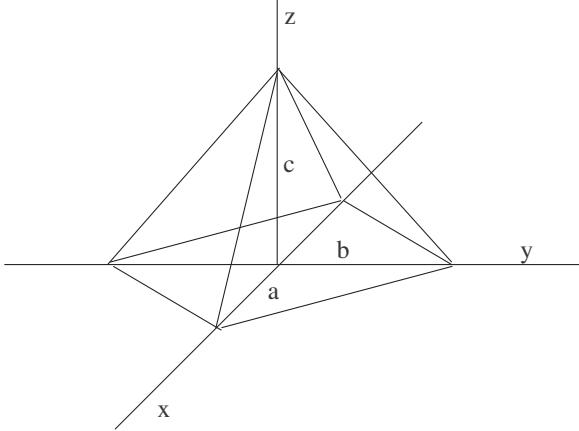


Obrázek 23: Vzorek GaAs/InAs – mapa intenzity v reciprokém prostoru pro $Q_z = 0,0708 \text{ \AA}^{-1}$. Intenzita je vynesena v logaritmické škále, rozdíl mezi sousedními vrstevnicemi je 1,5.



Obrázek 24: Vzorek GaAs/InAs – mapa intenzity v reciprokém prostoru pro $Q_z = 0,0920 \text{ \AA}^{-1}$. Intenzita je vynesena v logaritmické škále, rozdíl mezi sousedními vrstevnicemi je 1,7.

kosočtverce s úhlopříčkami délky $2a, 2b$ ve směrech os x, y a výškou c ve směru osy z . Polohy maxim v naměřených mapách určují orientaci stěn pyramid a vzájemné poměry parametrů a, b a c . Potom zbývá jediný volný parametr, a to je velikost pyramidy.



Obrázek 25: Schéma pyramidy

Fourierova transformace tvarové funkce jehlanu se spočte jako

$$F^{FT}(\vec{Q}) = \int d^3\vec{r} F(\vec{r}) e^{-i\vec{Q}\vec{r}}$$

$$F^{FT}(\vec{Q}) = \int_0^c dz e^{-iQ_z z} \left[\int_{a(z/c-1)}^0 dx e^{-iQ_x x} \int_{b(z/c-x/a-1)}^{b(1-z/c+x/a)} e^{-iQ_y y} + \right.$$

$$\left. + \int_0^{a(1-z/c)} dx e^{-iQ_x x} \int_{b(z/c+x/a-1)}^{b(1-z/c-x/a)} dY e^{-iQ_y y} \right]$$

Vztah se trochu zjednoduší použitím substituce $X = \frac{x}{a}, Y = \frac{y}{b}, Z = \frac{z}{c}$ a $q_x = Q_x a, q_y = Q_y b, q_z = Q_z c$

$$F^{FT}(\vec{Q}) = abc \int_0^1 dZ e^{-iq_z Z} \left[\int_{Z-1}^0 dX e^{-iq_x X} \int_{Z-X-1}^{1-Z+X} e^{-iq_y Y} + \right.$$

$$\left. + \int_0^{1-Z} dX e^{-iq_x X} \int_{Z+X-1}^{1-Z-X} dY e^{-iq_y Y} \right].$$

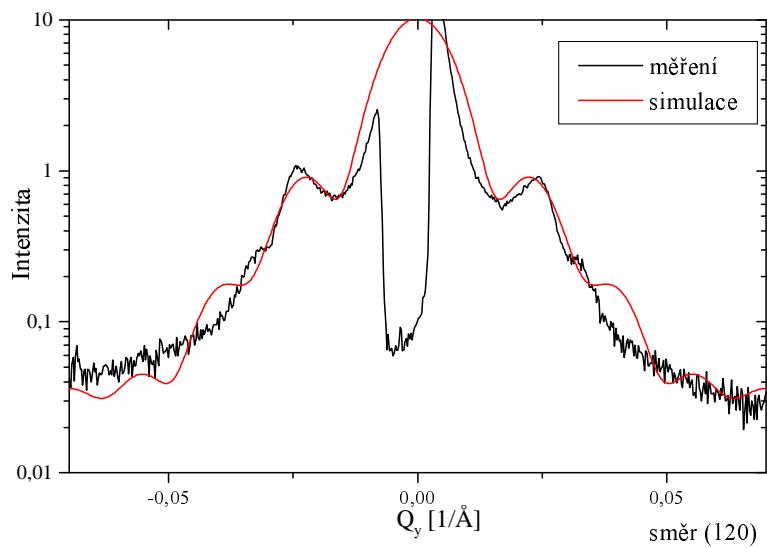
Po provedení integrací je Fourierova transformace tvarové funkce rovna

$$F^{FT}(\vec{Q}) = 4abc \left[\frac{iq_z e^{iq_z}}{(q_z^2 - q_x^2)(q_z^2 - q_y^2)} + \frac{-iq_z \cos q_y + q_y \sin q_y}{(q_z^2 - q_y^2)(q_y^2 - q_x^2)} + \frac{iq_z \cos q_x - q_x \sin q_y}{(q_z^2 - q_x^2)(q_y^2 - q_x^2)} \right] \quad (55)$$

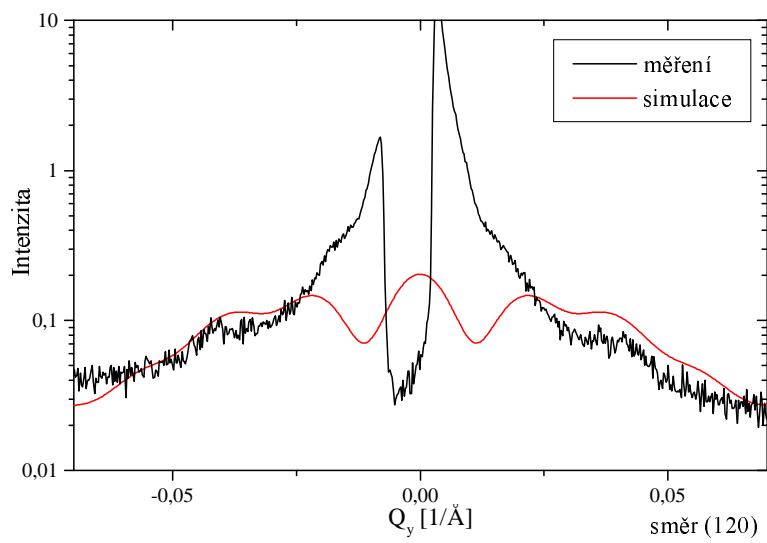
Tato Fourierova transformace tvarové funkce nabývá maxim v bodech $\pm q_x = \pm q_y = q_z$, což jsou opravdu směry kolmé na stěny pyramid. Ze srovnání s naměřenými polohami maxim vychází podmínky pro poměry parametrů a, b, c

$$\frac{b}{a} = 0.364 \pm 0.020, \frac{c}{b} = 0.345 \pm 0.008.$$

Rozptýlenou intenzitu v reciprokém prostoru jsem fitoval vztahem (50), do nějž jsem dosadil za tvarovou funkci z (55). Korelační funkci jsem položil rovnu konstantě. Rozptylem na kvantových tečkách jsou dána prakticky pouze laterální maxima, většinu ostatní intenzity způsobuje rozptyl na drsných rozhraních.



Obrázek 26: Vzorek GaAs/InAs – řez naměřenou mapou intenzity v reciprokém prostoru a jeho simulace pro $Q_z = 0,0708 \text{ \AA}^{-1}$



Obrázek 27: Vzorek GaAs/InAs – řez naměřenou mapou intenzity v reciprokém prostoru a jeho simulace pro $Q_z = 0,0920 \text{ \AA}^{-1}$

Výsledné srovnání fitované závislosti s měřením je v obrázcích 26 a 27, kde jsou řezy naměřenou a simulovanou mapou intenzity v reciprokém prostoru přes laterální maxima. Z tohoto fitu vysly hodnoty parametrů $a = (585 \pm 80) \text{ \AA}$, $b = (220 \pm 30) \text{ \AA}$, $c = (76 \pm 10) \text{ \AA}$. Pro srovnání s AFM ještě uvedu délku $l = 2a = (1170 \pm 160) \text{ \AA}$, šířku $d = 2b = (440 \pm 60) \text{ \AA}$ a výšku $v = c = (76 \pm 10) \text{ \AA}$ (viz obrázek 25). Tyto výsledky se dobře odpovídají menším kvantovým tečkám na povrchu.

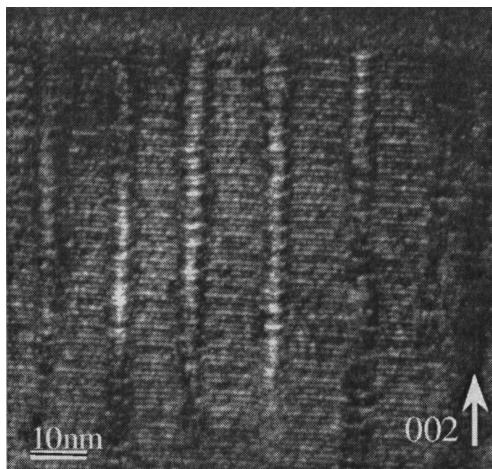
Středování přes velikosti pyramid jsem neprováděl, protože další parametr už patrně výsledek příliš nezlepší. Zanedbal jsem také rozptyl na velkých pyramidách, protože podle měření AFM mají jinou orientaci stěn než malé pyramidy, takže maxima Fourierovy transformace tvarové funkce jsou v jiném směru a také je velkých pyramid asi $6\times$ menší počet. Proto je v oblasti naměřených maxim rozptýlená intenzita na velkých pyramidách mnohem slabší než na malých pyramidách.

Na tomto vzorku jsem určil tvar pyramidových kvantových teček a jejich střední rozměry. Obě měření, kde je patrný rozptyl na kvantových tečkách a byla použita pro zpracování, mají poměrně malou hloubku vniku rtg. záření. Měření pro $Q_z = 0.0708 \text{ \AA}^{-1}$ zaznamenalo převážně pouze objekty na povrchu (hloubka vniku 24.2 \AA), měření pro $Q_z = 0.0920 \text{ \AA}^{-1}$ je více ovlivněno rozptylem na tečkách uvnitř vzorku, ale tento rozptyl činí jen asi 15 % celkové intenzity rozptýleného záření. Tyto rozměry dobrě odpovídají menším objektům na povrchu z měření na AFM. Disperzi velikostí jsem neurčil, protože většina naměřených dat je způsobena rozptylem na drsných rozhraních, a rozptylem na kvantových tečkách je dán pouze malý počet naměřených hodnot. Rozdělení poloh kvantových teček je na tomto vzorku náhodné.

7 Krátkoperiodická multivrstva InAs/AlAs

Poslední zpracované měření se týkalo vzorku s mnohokrát opakovánou krátkoperiodickou multivrstvou InAs/AlAs, který neobsahuje kvantové tečky ale soustavu kvantových drátů. Vlivem elastického napětí v heteroepitaxní multivrstvě dochází k periodické modulaci tvaru jednotlivých rozhraní vrstev. Protože jsou vrstvy velmi tenké (1 až 2 monovrstvy), mění se vlivem modulace tvaru rozhraní lokální tloušťka vrstev ve velkém rozsahu vzhledem k jejich střední tloušťce.

Na tomto vzorku k jevu, kdy větší lokální tloušťku vrstvy jednoho materiálu kompenzuje menší lokální tloušťka vrstvy druhého materiálu tak, že součet obou lokálních tloušťek je přibližně konstantní (obr. 35A). Tento jev se označuje jako laterální modulace složení (Lateral Composition Modulation – LCM), protože ve směru rovnoběžném s povrchem se periodicky mění lokální tloušťky jednotlivých vrstev a tím i lokální chemické složení multivrstvy. V obrázku 28 je zobrazen příčný řez v TEM (Transmisní Elektronová mikroskopie) na podobném vzorku, kde jsou jasně viditelné oblasti jednotlivých převládajících materiálů. V měřeném vzorku (povrch (001)) byla



Obrázek 28: Vzorek podobný zpracovávanému vzorku InAs/AlAs, příčný řez v TEM, převzato z práce [19]

laterální periodická modulace zaznamenána ve směru [100], ve směru kolmém [010] jsou lokální tloušťky téměř konstantní, takže multivrstva tvoří soustavu periodicky uspořádaných kvantových drátů (oblasti větší lokální tloušťky) protažených ve směru [010]. Takovouto laterální modulaci potvrzují výsledky z měření klasické koplanární difracce, GID a TEM – viz [6,10 a 19].

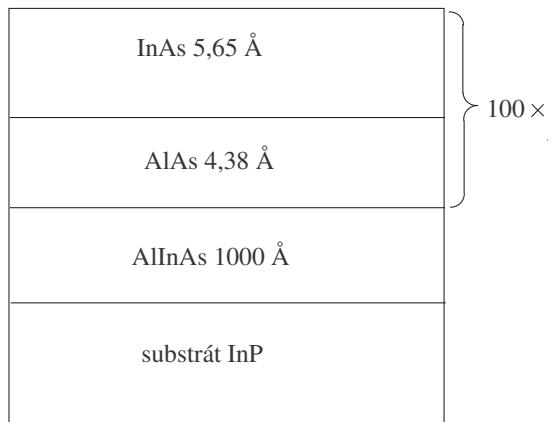
Vznik takovéto periodické struktury je vysvětlen v článku [5] pomocí kinetické teorie růstu.

7.1 Popis vzorku

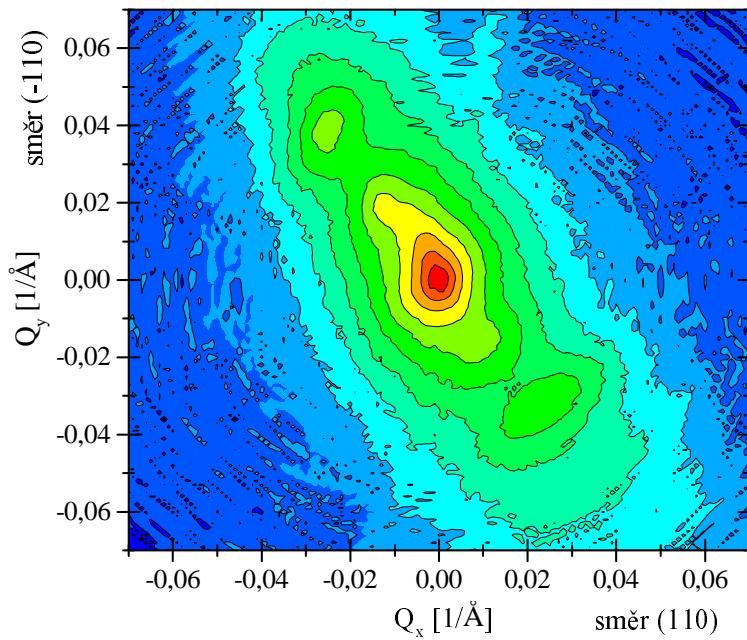
Vzorky byly vyrobeny metodou Molecular Beam Epitaxy (MBE) na University of Houston, Texas, USA. Schéma vzorku je na obrázku 29. Na substrátu InP s povrchem v rovině (001) je nanesena vrstva AlInAs, s koncentrací hliníku a india, která odpovídá střední koncentraci těchto prvků v multivrstvě. Tato podkladová vrstva má tloušťku 1000 Å. Vlastní multivrstvu tvoří stokrát opakována dvojvrstva AlAs a InAs. Vrstva InAs má střední tloušťku 5,65 Å a vrstva AlAs 4,38 Å. Perioda multivrstvy je $D = 10,03 \text{ \AA}$.

7.2 Měření GISAXS

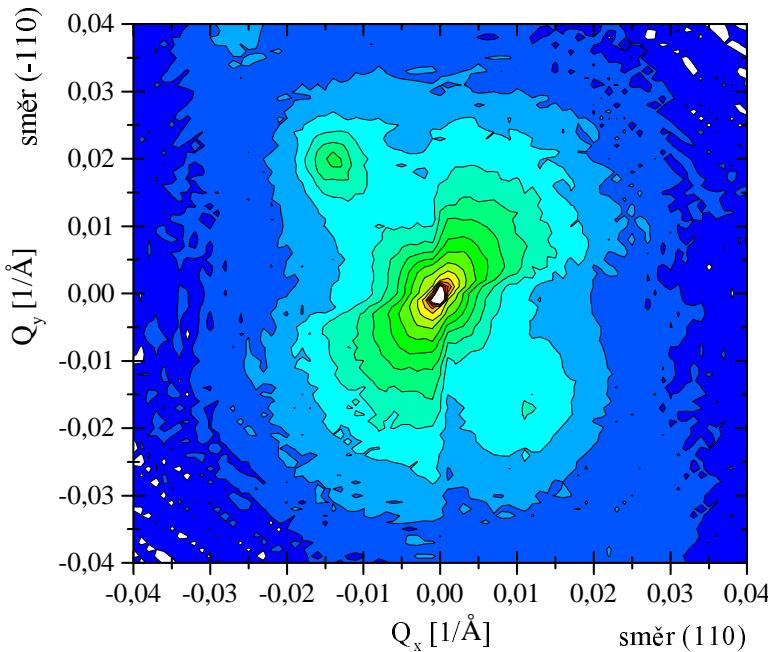
Zpracovával jsem výsledky měření, které provedli J. Li a J. Stangl opět na ESRF v Grenoblu na beamline ID10B. Parametry zařízení jsou uvedeny v kapitole 4. Celkem byla na vzorku provedena tři měření pro různá Q_z při vlnové délce $\lambda = 1.5448 \text{ \AA}$:



Obrázek 29: Schéma vzorku s multivrstvou InAa/AlAs



Obrázek 30: Mapa naměřené intenzity na vzorku InAs/AlAs pro $Q_z = 0,6496 \text{ \AA}^{-1}$. Intenzita je vynesena v logaritmické škále, rozdíl mezi sousedními vrstevnicemi je 1,58.



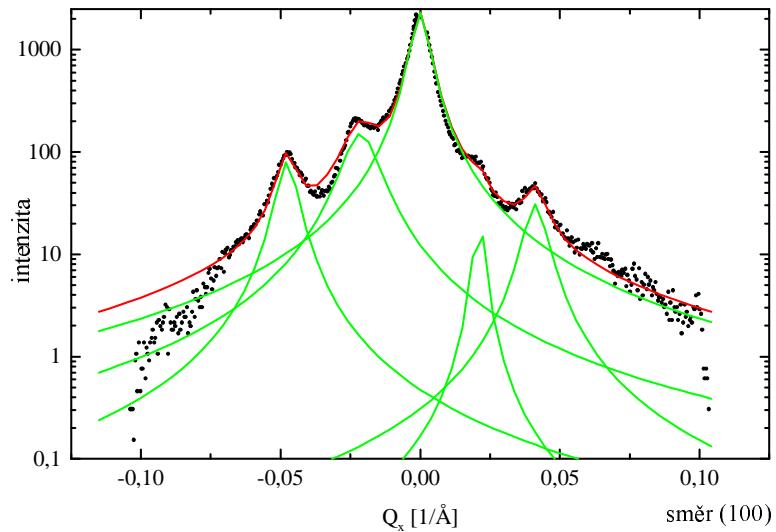
Obrázek 31: Mapa naměřené intenzity na vzorku InAs/AlAs pro $Q_z = 0,3349 \text{ \AA}^{-1}$. Intenzita je vynesena v logaritmické škále, rozdíl mezi sousedními vrstevnicemi je 1,51.

pořadí měření	úhel dopadu α_i	úhel výstupu α_f	Q_z	hloubka vniku
	°	°	\AA^{-1}	Å
1	0.27	0.13	0.02839	17.8
2	2.36	2.36	0.33497	3178
3	4.68	4.48	0.64956	6197

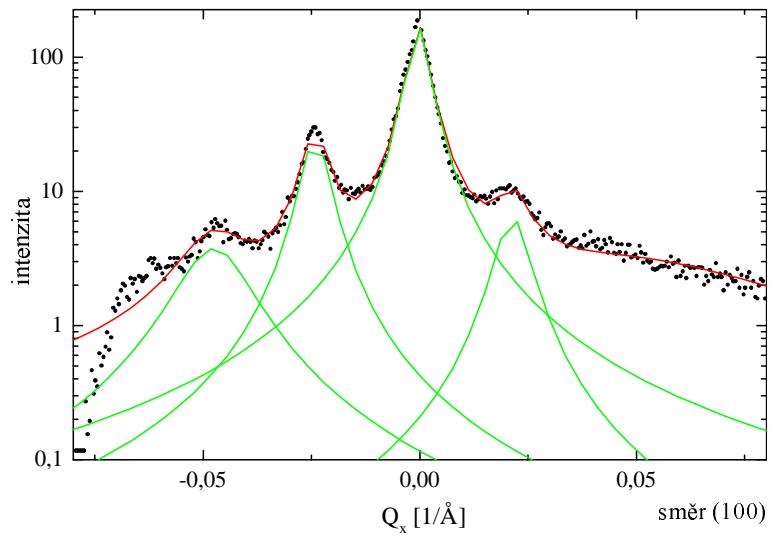
Naměřené mapy intenzity jsou v obrázcích 30 a 31. Ve středu map (pro $Q_x = Q_y = 0$) je maximum odpovídající spekulárnímu odrazu. V mapě pro $Q_z = 0.6496 \text{ \AA}^{-1}$ jsou dvě maxima prvního řádu (blíže středu) a dvě maxima druhého řádu ve směru [100] (obrázek 30). V mapě pro $Q_z = 0.3349 \text{ \AA}^{-1}$ jsou ve směru [100] zřetelná pouze dvě maxima prvního řádu a jedno maximum druhého řádu je na horním okraji obrázku 31. Ve třetí mapě pro $Q_z = 0.0284 \text{ \AA}^{-1}$ jsou zřetelná pouze dvě maxima prvního řádu, tato mapa není zobrazena. Maxima prvního řádu ve všech mapách mají stejnou vzdálenost od počátku, maxima druhého řádu dvojnásobnou. Polohy maxim odpovídají periodě $L = (280 \pm 10) \text{ \AA}$ ve směru [100]. Stejnou periodu vykazují měření GID, koplanární difrakce a také AFM povrchu (viz [10]). V naměřených mapách není žádná jiná zřetelná struktura.

7.3 Zpracování

Abych získal intenzity jednotlivých maxim, provedl jsem řezy naměřenými mapami přes maxima (obrázky 32 a 33). Jednotlivá maxima jsem označil indexy. Indexem 0 je označeno spekulární maximum ve středu mapy, které je dáno zrcadlovým odrazem a rozptylem na drsnostech a závisí také na jiných parametrech než jen tvarech jednotlivých rozhraní. Pro určení periodické struktury multivrstvy jej nelze použít. Indexy -1 a 1 jsou označena maxima prvního řádu (nejblíže středu mapy) a indexy -2 a 2 označují druhá maxima v pořadí od středu mapy. Záporné indexy -1 a -2 označují maxima v oblasti záporné hodnoty Q_x a kladné hodnoty Q_y , kladné indexy 1 a 2 v opačné oblasti. Vzniklými řezy jsem proložil součet Lorentzových profilů, každý Lorentzův profil odpovídá jednomu maximu. V tabulce jsou vypsány poměry intenzit některých maxim.



Obrázek 32: Vzorek InAs/AlAs – proložení Lorentzových profilů řezem přes maxima pro $Q_z = 0,6496 \text{ \AA}^{-1}$



Obrázek 33: Vzorek InAs/AlAs – proložení Lorentzových profilů řezem přes maxima pro $Q_z = 0,3349 \text{ \AA}^{-1}$

Uvádí pouze poměry intenzit maxim pro stejné Q_z , protože intenzity maxim pro různá Q_z se liší o multiplikativní konstantu, jejíž přesnou hodnotu neznáme. Intenzitami maxim jsou označeny plochy pod příslušnými Lorentzovými peaky.

Q_z	I_{-2}/I_{-1}	I_1/I_{-1}	I_2/I_{-2}
\AA^{-1}	–	–	–
0.028	–	0.95 ± 0.08	–
0.335	0.40 ± 0.07	0.31 ± 0.07	–
0.649	0.31 ± 0.05	0.05 ± 0.03	0.43 ± 0.13

Z tabulky je zřejmé, že maxima stejného řádu ale různého znaménka nemají stejnou intenzitu.

Rozptyl jsem simuloval pomocí teorie DWBA. Pro rozptyl na poruchách uvnitř vzorku byl odvozen vztah (40)

$$I(\vec{Q}) = A|t_i t_f|^2 \langle |\Delta\chi^{FT}(\vec{q})|^2 \rangle, \quad (56)$$

kde $\Delta\chi(\vec{r})$ je odchylka elektrické susceptibility v bodě \vec{r} od střední susceptibility ve vzorku. Pro zjednodušení výpočtu jsem zvolil souřadnou soustavu odlišnou od soustavy v obrázcích 30 a 31. Souřadná osa z bude bez změny nadále označovat směr kolmý na povrch – [001], osa x bude označovat směr [100], to je směr maxim a osa y bude označovat směr [010], t.j. směr kolmý na směr maxim. Tuto souřadnou soustavu budu používat až do konce kapitoly. Od původní soustavy se liší otočením kolem osy z .

Předpokládal jsem, že susceptibilita nezávisí na poloze ve směru osy y . Potom by se snadno provedla integrace přes y při Fourierově transformaci susceptibility

$$\Delta\chi^{FT}(\vec{q}) = \int d^3\vec{r}\Delta\chi(x, z)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = 2\pi\delta(q_y) \int dx dy \Delta\chi(x, z) e^{-i(q_x x + q_z z)}$$

Ve skutečnosti nejsou maxima ve směru osy y nekonečně úzká, aby odpovídala δ -funkci, ale mají konečnou šířku, kterou způsobuje omezená délka kvantových drátů. Místo δ -funkce ve skutečnosti vystupuje jiná funkce $f(q_y)$, která má maximum pro $q_y = 0$. Protože jsem se zabýval pouze řezy, kde je $q_y = 0$, je tato funkce v celém řezu konstantou a dále jsem se jí nezabýval.

V ostatních směrech má multivrstva dvojí peridicitu: ve směru osy z (směr růstu) má periodu $D = 10,03 \text{\AA}$, navíc je susceptibilita periodická ještě ve směru osy x s již uvedenou periodou $L = 280 \text{\AA}$. Strukturu multivrstvy lze proto v rovině xz popsat pomocí dvouozměrné periodické mřížky (obr. 34). Jednotkové vektory mřížky jsou $\vec{a}_1 = (L, 0, 0)$ a $\vec{a}_2 = (0, 0, D)$. V každém mřížovém bodě je umístěn segment o délce L v ose x a výšce D v ose z . Horní hranici segmentu tvoří horní rozhraní vrstvy InAs a dolní hranici dolní rozhraní vrstvy AlAs, což jsou zároveň hranice sousedních segmentů. Boční hranice tvoří roviny kolmé na osu x . Takto zvolené segmenty pokrývají celou rovinu xz bez překryvů.

Funkci $\Delta\chi(x, z)$ lze popsat jako součet příspěvků od jednotlivých segmentů

$$\Delta\chi(x, z) = \sum_{n_1, n_2} F(x - x_{n_1}, z - z_{n_2}),$$

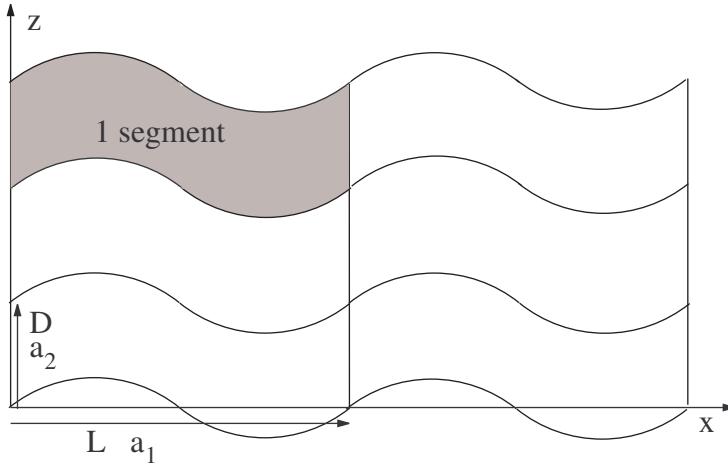
kde n_1, n_2 jsou indexy označující jednotlivé segmenty v periodické mřížce a funkce $F(x, z)$ je odchylka elektrické susceptibility v segmentu umístěném v počátku souřadné soustavy, mimo tento segment nabývá hodnoty 0. Souřadnice x_{n_1}, z_{n_2} vyjadřují polohu segmentu označeného těmito indexy $x_{n_1} = n_1 L$ a $z_{n_2} = n_2 D$.

Obdobně jako v kapitole 3.2 se Fourierova transformace susceptibility rozpadne na součin dvou funkcí

$$|\Delta\chi^{FT}(q_x, q_z)|^2 = |F^{FT}(q_x, q_z)|^2 G(q_x, q_z), \quad (57)$$

kde funkce $G(q_x, q_z)$ je čtvercem absolutní hodnoty součtu přes počet segmentů

$$G(q_x, q_z) = \left| \sum_{n_1, n_2} e^{-i(n_1 q_x x + n_2 q_z z)} \right|^2.$$



Obrázek 34: Dvojrozměrná mřížka složená z jednotlivých segmentů

Pro nekonečnou dokonalou (ideální) mřížku by funkce $G(\vec{q})$ byla rovna součtu nekonečně úzkých δ funkcí umístěných v uzlech reciproké mřížky. Reciproká mřížka má jednotkové vektory $\vec{a}_1^* = (2\pi/L, 0, 0)$, $\vec{a}_2^* = (0, 0, 2\pi/D)$. Intenzity všech maxim v ideální funkci G jsou stejné

$$G(q_x, q_z) = \sum_{m_1, m_2 = -\infty}^{\infty} \delta(q_x - m_1 \frac{2\pi}{L}) \delta(q_z - m_2 \frac{2\pi}{D})$$

Protože mřížka v přímém prostoru není konečná ani dokonalá, jsou maxima rozšířena. Tato rozšíření jsou approximována lorentzovskými profily (obr. 32 a 33). Integrální intenzity (tedy plochy pod Lorentzovými křivkami) maxim funkce $G(\vec{q})$ jsou konstantní i v případě nedokonalé mřížky. Nedokonalá mřížka způsobí pouze rozšíření maxim, ale nikoliv snížení jejich intenzity. Proto jsem předpokládal, že v integrální intenzitě každého maxima se funkce $G(q_x, q_z)$ projeví jako multiplikativní člen, který nezávisí na q_x , ale může být závislý na q_z .

Intenzity maxim v jednotlivých uzlech reciproké mřížky jsou modulovány Fourierovou transformací susceptibility jednoho segmentu $|F^{FT}(q_x, q_z)|^2$

$$F^{FT}(q_x, q_z) = \int dx \int dz F(x, z) e^{-i(q_x x + q_z z)}. \quad (58)$$

Pro výpočet funkce $F^{FT}(q_x, q_y)$ budu používat toto označení: index A označuje vrstvu InAs a index B vrstvu AlAs, tedy χ_A je susceptibilita vrstvy InAs, t_A její střední tloušťka, χ_B susceptibilita AlAs a t_B střední tloušťka vrstvy AlAs. Celková perioda multivrstvy je $D = t_A + t_B$. Pro popis tvaru rozhraní jsem používal funkce $U_n(x)$ vyjadřující odchylku polohy skutečného rozhraní od středního rozhraní (viz obr. 35A). Funkce $U_1(x)$ je odchylka souřadnice z horního rozhraní vrstvy InAs (AlAs nad rozhraním, InAs pod rozhraním – horní hranice segmentu) od střední polohy tohoto rozhraní v závislosti na souřadnici x . Funkce $U_2(x)$ je odchylkou skutečné polohy spodního rozhraní vrstvy InAs (InAs je nad rozhraním, AlAs pod – uvnitř segmentu) od středního rozhraní a $U_3(x)$ popisuje dolní rozhraní AlAs (AlAs nad rozhraním, InAs pod, jde spodní hranici segmentu). Protože je periodická struktura multivrstvy, jsou také funkce $U_1(x), U_2(x), U_3(x)$ periodické s periodou L . Zvolil jsem si počátek souřadné soustavy tak, že střední poloha horního rozhraní segmentu byla $z = 0$, potom je skutečná poloha prvního (horního) rozhraní v segmentu $U_1(x)$, poloha druhého rozhraní je $U_2(x) - t_A$ a poloha spodního rozhraní segmentu je $U_3(x) - D$ (obr.35A). Uvnitř každé z vrstev (mezi prvním a druhým a druhým a třetím rozhraním) je susceptibilita konstantní, takže Fourierovu transformaci F^{FT} lze napsat jako

$$F^{FT}(\vec{q}) = \int_0^L dx e^{-iq_x x} \left[\int_{U_1(x)}^{U_2(x) - t_A} dz \chi_A e^{-iq_z z} + \int_{U_2(x) - t_A}^{U_3(x) - D} dz \chi_B e^{-iq_z z} \right]$$

$$F^{FT}(\vec{q}) = \frac{i}{q_z} \int_0^L dx e^{-iq_x x} \left[\chi_A e^{-iq_z(U_2(x)-t_A)} - \chi_A e^{-iq_z U_1(x)} + \right. \\ \left. \chi_B e^{-iq_z(U_3(x)-D)} - \chi_B e^{-iq_z(U_2(x)-t_A)} \right]$$

Ještě jsme zavedli substituce $X = 2\pi x/L$, $q_x = n2\pi/L$, takže v uzlu reciproké mřížky (maximum funkce $G(\vec{q})$) nabývá n hodnoty indexu příslušného maxima

$$F^{FT}(\vec{q}) = \frac{iL}{2\pi q_z} \int_0^{2\pi} dX e^{-inX} \left[(\chi_A - \chi_B) e^{iq_z t_A} e^{-iq_z U_2(X)} - \right. \\ \left. - \chi_A e^{-iq_z U_1(X)} + \chi_B e^{iq_z D} e^{-iq_z U_3(X)} \right] \quad (59)$$

Pro další výpočet již musíme uvažovat s konkrátními tvary funkcí $U_n(X)$. Předpokládal jsem postupně různé modely, které jsou po řadě očíslovány.

7.3.1 Modely 1A a 1B

Předpokládal jsem, že všechna rozhraní mají stejný tvar, pouze jsou proti sobě posunutá. Podle původních představ (viz obrázek 35A,B) jsou funkce $U_1(X)$ a $U_2(X)$ posunuté proti sobě o polovinu periody - $U_2(X) = U_1(X - \pi)$. Funkce $U_1(X)$ a $U_3(X)$ nejsou vzájemně posunuté vůbec - $U_3(X) = U_1(X)$ (obrázek 35A – označují jako model 1A), nebo měly být vzájemně posunuté o polovinu periody $U_3(X) = U_1(X - \pi) = U_2(X)$ (obr. 35B – model 1B). V modelu 1B nemá dvojrozměrná mřížka v přímém prostoru ve směru osy z periodu D ale dvojnásobnou $2D$. V modelech 1A a 1B jsou funkce $U_n(X)$ prosté sinusovky, jde o první členy Fourierových řad, do kterých lze funkce U_1, U_2, U_3 rozvést. V těchto modelech má ale struktura multivrstvy rovinu symetrii kolmou na osu x . Druhá mocnina velikosti Fourierovy transformace funkce s touto symetrií je symetrická vůči záměně $x \rightarrow -x$. Potom intenzity maxim nezávisí na znaménku indexu ($I_1 = I_{-1}, \dots$), ale pro naměřené hodnoty to neplatí (viz tabulka na straně xl). Modely 1A i 1B tedy neodpovídají výsledkům měření.

Model 1B neodpovídá ještě z jiného důvodu. K popisu multivrstvy je možné zavést funkci relativní koncentrace AlAs $b(X)$ v závislosti na poloze v ose x

$$b(X) = \frac{t_B + U_2(X) - U_3(X)}{t_A + t_B},$$

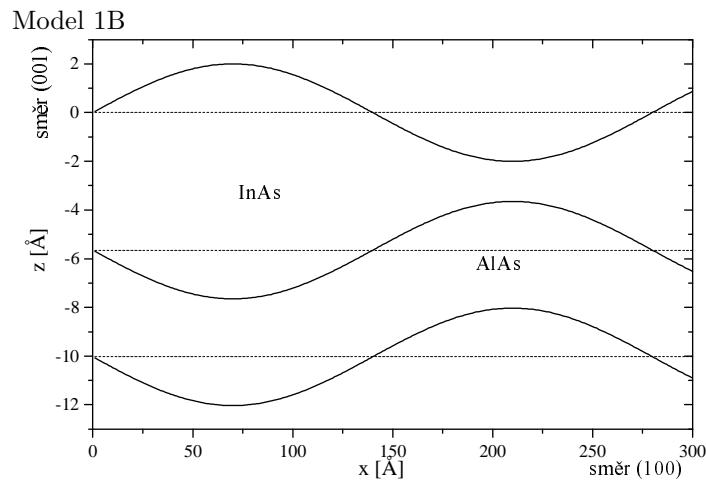
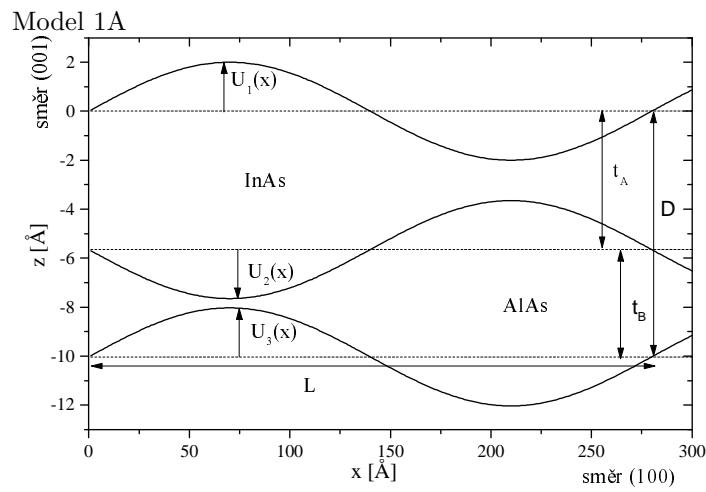
což je vlastně poměr lokální tloušťky vrstvy AlAs ku tloušťce periody multivrstvy. V modelu 1B je tato funkce konstantní, avšak z měření GID a koplanární difrakce (podle [10]) vyplývá, že funkce $b(X)$ konstantní není. To je závažný argument proti modelu 1B a modelům z něj vycházejícím, se kterými jsem přesto pracoval.

7.3.2 Model 2

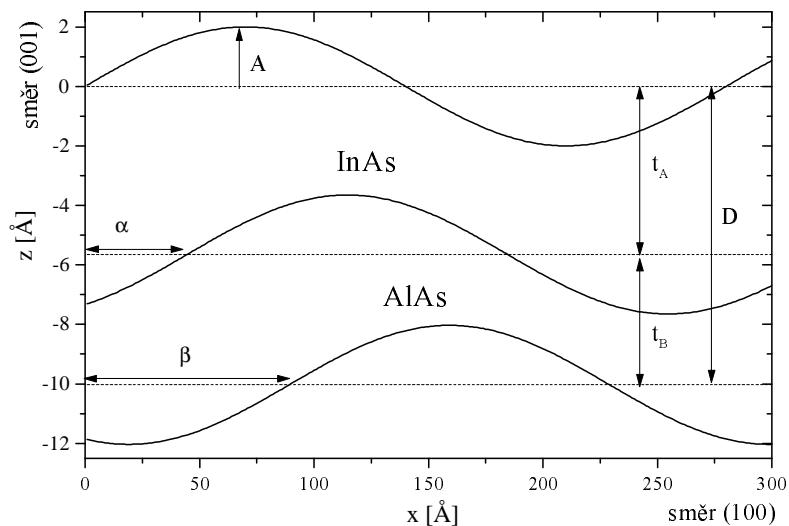
Protože modely 1A ani 1B nemohou odpovídat skutečnosti, vytvořili jsme model 2, který je zobecněním modelů 1A a 1B. Funkce U_1, U_2, U_3 jsou stále prostými sinusovkami, které jsou ale navzájem obecně posunuté (viz obrázek 36).

$$U_1(X) = P \sin(X), \quad U_2(X) = P \sin(X - \alpha), \quad U_3(X) = P \sin(X - \beta), \quad (60)$$

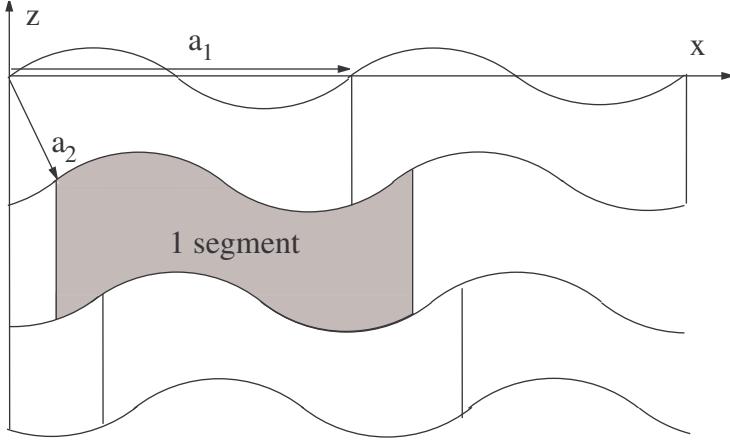
kde amplituda P je společná všem rozhraním, α a β jsou fázové posuny druhého a třetího rozhraní oproti prvnímu. Pro obecnou hodnotu β se změní dvojrozměrná mřížka podle obrázku 37. Vzniká tak nepravoúhlá mřížka s mřížovými vektory $\vec{a}_1 = (L, 0, 0)$ a $\vec{a}_2 = (\frac{\beta}{2\pi}L, 0, D)$. Ale podle měření koplanární difrakce tvoří maxima reciproké mřížky pravoúhlou mříž. Do pravoúhlé mřížky přechází pouze pro $\beta = 0$ (obdoba modelu 1A) nebo $\beta = \pi$ (obdoba modelu 1B). Z tohoto důvodu jsou tedy možné hodnoty parametru β pouze 0 a π . Intenzita rozptýleného záření se spočte podle



Obrázek 35: Původní představa struktury multivrstvy při approximaci jednotlivých rozhraní prostou sinusovkou. Plné čáry jsou skutečná rozhraní, čárkované jsou vyznačena střední rozhraní vrstev



Obrázek 36: Schéma modelu 2

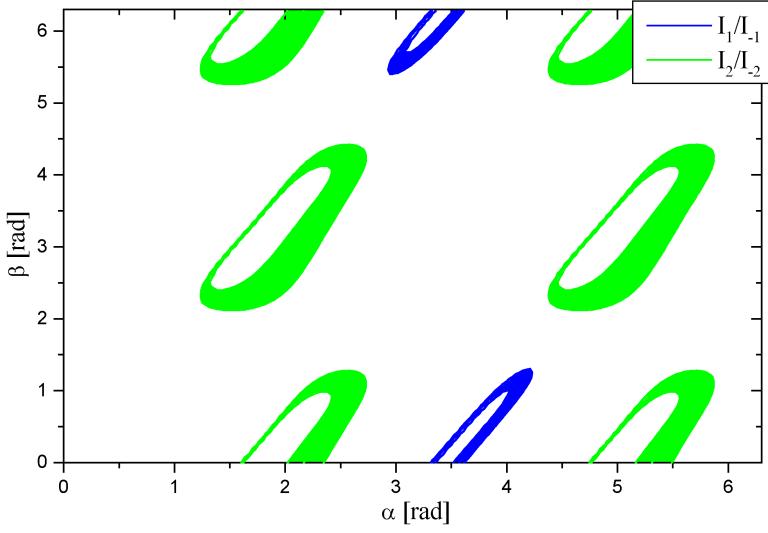


Obrázek 37: Obecná dvojrozměrná mřížka složená z jednotlivých segmentů v modelu 2

vztahu (56), kam se dosadí za Fourierovu transformaci susceptibility ze vztahů (57) a (59). Intenzity maxim jsou dány hodnotou funkce $F^{FT}(\vec{q})$ v bodě reciproké mřížky. Tato funkce se spočte dosazením z (60) do (59)

$$\begin{aligned}
 F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \int_0^{2\pi} dX e^{-inX} \left[(\chi_A - \chi_B) e^{iq_z t_A} e^{-iq_z P \sin(X-\alpha)} - \right. \\
 &\quad \left. - \chi_A e^{-iq_z P \sin(X)} + \chi_B e^{iq_z D} e^{-iq_z P \sin(X-\beta)} \right] \\
 F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \left[(\chi_A - \chi_B) e^{iq_z t_A} \int_0^{2\pi} dX e^{-i(nX+q_z P \sin(X-\alpha))} - \right. \\
 &\quad \left. - \chi_A \int_0^{2\pi} dX e^{-i(nX+q_z P \sin(X))} + \chi_B e^{iq_z D} \int_0^{2\pi} dX e^{-i(nX+q_z P \sin(X-\beta))} \right] \\
 F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \left[(\chi_A - \chi_B) e^{iq_z t_A} e^{-in\alpha} - \chi_A + \chi_B e^{iq_z D} e^{-in\beta} \right] \\
 &\quad \int_0^{2\pi} dX e^{-i(nX+q_z P \sin(X))} \\
 F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{q_z} \left[(\chi_A - \chi_B) e^{iq_z t_A} e^{-in\alpha} - \chi_A + \chi_B e^{iq_z D} e^{-in\beta} \right] J_n(q_z P), \tag{61}
 \end{aligned}$$

kde J_n je Besselova funkce n -tého rádu. Poměry intenzit stejněho rádu (například I_1/I_{-1} nebo I_2/I_{-2}) jsou dány pouze hodnotami parametrů α a β , protože pro celá n platí $J_n(x) = J_{-n}(x)$. Poměry intenzit maxim různého rádu určuje navíc ještě parametr P . V obrázku 38 jsou vynezeny v závislosti na parametrech α a β pásy odpovídající naměřeným poměrům intenzit maxim I_1/I_{-1} a I_2/I_{-2} pro $Q_z = 0.6496 \text{ \AA}^{-1}$. V obrázku jsou pro oba poměry pásy vyjadřující oblasti naměřených hodnot poměrů intenzit. Uvnitř se hodnota poměru intenzit maxim v rámci chyby shoduje s naměřenými hodnotami (viz tabulka na straně xl). Pro každý poměr vyhovují naměřeným hodnotám intenzit hodnoty parametrů α a β uvnitř pásu. Má-li jedna dvojice parametrů odpovídat oběma naměřeným hodnotám poměru intenzit, musí bod daný touto dvojicí parametrů ležet v průniku obou pásů. V obrázku 38 se pásy příslušející naměřeným poměrům nikde neprotínají, a proto nevyhovuje naměřeným hodnotám žádná dvojice parametrů α, β . Také model 2 neodpovídá skutečné strukture.



Obrázek 38: Pásy pro naměřené hodnoty poměrů intenzit v závislosti na parametrech posunutí v modelu 2

7.3.3 Model 3A a 3B

V modelech 3A,B jsme funkce $U_n(X)$ vyjádřili pomocí dalšího člena Fourierovy řady, do níž lze periodické funkce $U_n(X)$ rozvést. Vyšli jsme z původních modelů 1A a 1B a přidáním druhého člena jsme vytvořili modely 3A a 3B.

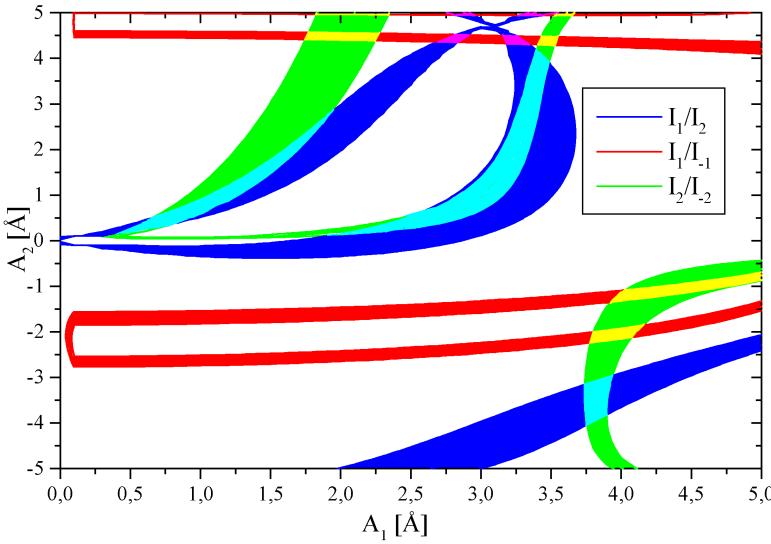
Model 3A je zobecněním modelu 1A

$$\begin{aligned} U_1(X) &= A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X), \quad U_2(X) = -A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X) \\ U_3(X) &= A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X) \end{aligned} \tag{62}$$

Mohli bychom použít tvar $U_1(X) = A_1 \sin(X) + A_2 \cos(2X)$, ale takovýto tvar má stálou rovinu symetrie kolmou k ose x , a proto nemůže fungovat ze stejných důvodů jako model 1A. Také je možné použít tvar s oběma členy druhého rádu $U_1(X) = A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X) + A_3 \cos(2X)$, ale vzhledem k počtu naměřených hodnot poměrů intenzit jsou tři parametry příliš mnoho. Ze stejného důvodu (počet parametrů) jsem neuvažoval možnost posunutí funkce $U_2(X)$ oproti $U_1(X)$ o jinou hodnotu než o π .

Potom se Fourierova transformace funkce F spočte dosazením (62) do (59)

$$\begin{aligned} F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \int_0^{2\pi} dX e^{-inX} \left[e^{-iq_z(-t_A - A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} (\chi_A - \chi_B) + \right. \\ &\quad \left. + e^{-iq_z(-D + A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} \chi_B - e^{-iq_z(A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} \chi_A \right] \\ F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \int_0^{2\pi} dX \left[e^{iq_z t_A} e^{-inX - iq_z(-A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} (\chi_A - \chi_B) + \right. \\ &\quad \left. + e^{iq_z D} e^{-inX - iq_z(A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} \chi_B - e^{-inX - iq_z(A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} \chi_A \right] \\ F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \int_0^{2\pi} dX \left[e^{-inX - iq_z(-A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} e^{iq_z t_A} (\chi_A - \chi_B) + \right. \\ &\quad \left. + e^{-inX - iq_z(A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X))} (e^{iq_z D} \chi_B - \chi_A) \right] \end{aligned} \tag{63}$$



Obrázek 39: Pásy pro naměřené hodnoty poměrů intenzit v modelu 3A. V oblastech, kde se protínají dva různé pásy jsem zvolil jiné barvy – v místě protnutí červeného a zeleného pásu je použita žlutá barva, červený a modrý dávají fialovou a modrý a zelený dávají dohromady azurovou modř.

Tento integrál jsem už počítal numericky. Pásy odpovídající naměřeným poměrům intenzit na parametrech A_1 a A_2 jsou vyneseny v obrázku 39. V tomto případě jsou vyneseny pásy odpovídající všem třem nezávislým poměrům intenzit pro $Q_z = 0.6496 \text{ \AA}^{-1}$. Také v obrázku 39 se všechny tři pásy neprotínají v jediném bodě, a proto nevyhovuje měření žádná dvojice hodnot parametrů v rozumných mezích A_1 , A_2 (amplitudy rozhraní nemohou být větší než tloušťky vrstev). Model 3A tedy neodpovídá skutečnosti.

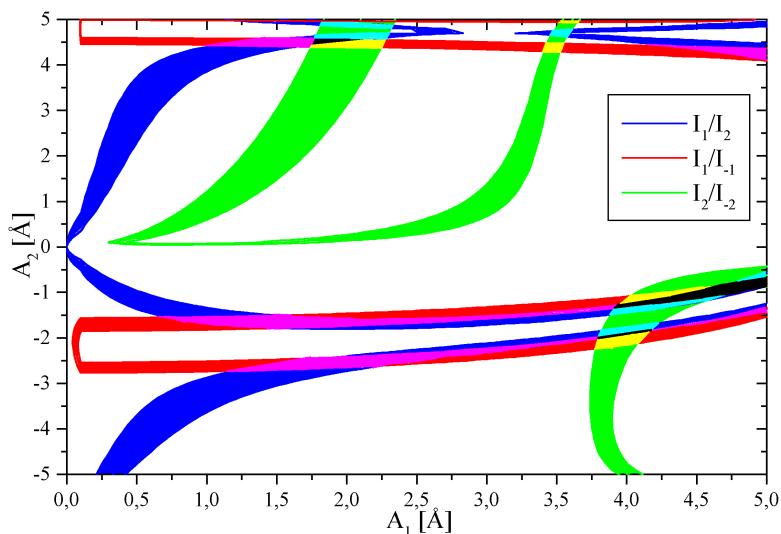
Model 3B je odvozen z modelu 1B stejným způsobem jako model 3A z 1A

$$\begin{aligned} U_1(X) &= A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X), \quad U_2(X) = -A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X) \\ U_3(X) &= -A_1 \sin(X) + A_2 \sin(2X) - D \end{aligned} \quad (64)$$

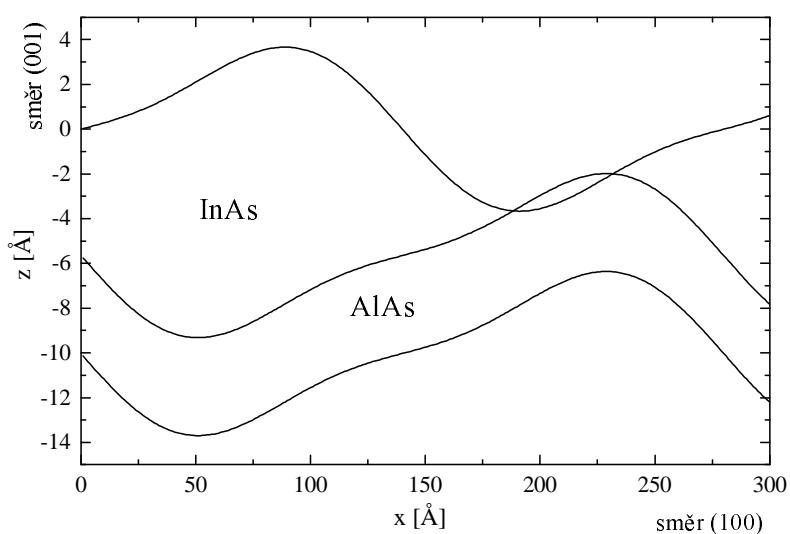
Fourierova transformace susceptibility jednoho segmentu se spočte dosazením z (64) do (59)

$$\begin{aligned} F^{FT}(\vec{q}) &= \frac{iL}{2\pi q_z} \int_0^{2\pi} dX \left[-\chi_A e^{-inX-iq_z(A_1 \sin(X)+A_2 \sin(2X))} + \right. \\ &\quad \left. + e^{-inX-iq_z(-A_1 \sin(X)+A_2 \sin(2X))} (e^{iq_z t_A} \chi_A - \chi_B e^{iq_z t_A} + e^{iq_z D} \chi_B) \right] \end{aligned} \quad (65)$$

Také tento integrál jsem počítal numericky. Pásy odpovídající naměřeným poměrům intenzit maxim pro $Q_z = 0.6496 \text{ \AA}^{-1}$ jsou vyneseny v obrázku 40. V obrázku jsou dvě oblasti, kde se protínají všechny pásy. V první oblasti pro hodnoty parametrů $A_1 = (1.6 \pm 0.2) \text{ \AA}$ a $A_2 = (4.6 \pm 0.1) \text{ \AA}$, ale zde je hodnota parametru A_2 příliš velká, aby tento model byl přijatelný. V druhé oblasti, kde parametry vyhovují naměřeným intenzitám, mají amplitudy hodnoty $A_1 = (3.8 \pm 0.3) \text{ \AA}$ a $A_2 = (-1.4 \pm 0.4) \text{ \AA}$. Profil vrstev pro tyto hodnoty parametrů je v obrázku 41. Ani tyto hodnoty parametrů neodpovídají skutečnosti z několika důvodů. Amplitudy rozhraní A_1 , A_2 jsou příliš velké, takže tloušťka vrstvy InAs je místo až záporná, což je zjevně chybný výsledek. Dalším důvodem je, že relativní koncentrace AlAs $b(x)$ je konstantní, což neodpovídá výsledkům z jiných měření (viz [10]).



Obrázek 40: Pásy odpovídající naměřeným hodnotám poměrů intenzit v modelu 3B. V místech proknutí pásů jsou zvoleny stejné barevné kombinace jako v obrázku 39, navíc černá označuje průnik všech pásů.



Obrázek 41: Profil vrstev pro výsledné hodnoty v modelu 3B

7.3.4 Model 4 – schodkový

Dále bychom mohli přidávat další členy Fourierovy řady do funkcí $U_n(X)$, ale vedlo by to jen k neúměrnému růstu počtu parametrů. Harmonické funkce popisující rozhraní jsou také jen poměrně hrubou approximací skutečnosti, pokud se jejich amplitudy pohybují rádově ve velikostech atomů. Proto jsme nakonec použili model 4, kdy rozhraní jsou dána monoatomárními schodky. Monoatomární schodky na povrchu krystalu vznikají, když povrch svírá malý úhel s nízkoindexovou krystalovou rovinou – v našem případě (001). Úhel mezi nejbližší nízkoindexovou rovinou a povrchem se nazývá miscut, který je na tomto vzorku $\gamma = 1,8^\circ$. Směr miscutu, to je směr kolmý na hrany monoatomárních schodků, je na tomto vzorku stejný jako směr periodické modulace [100]. Střední výška schodku v AlAs a InAs je rovna střední vzdálenosti rovin (001) $v = 2.9 \text{ \AA}$. Na periodu L při miscutu γ připadají právě tři monoatomární schodky o výšce v . Délky jednotlivých schodků jsem označil po řadě L_1, L_2, L_3 a platí $L = L_1 + L_2 + L_3$. Nezávislé jsou pouze délky dvou schodků, třetí se dopočítá $L_3 = L - L_1 - L_2$. Kratší stěny schodků jsou prakticky kolmé k povrchu a jejich průmět do směru osy x (rádově 10^{-1} \AA) jsme zanedbali. Model 4 vychází z modelu 1A, kde jsou rozhraní dána lineárně rostoucí funkcí, která v místě kratší strany skokem sníží hodnotu o v (obr. 43)

$$U_1(x) = \begin{cases} \tan(\gamma)x & 0 \leq x < L_1 \\ \tan(\gamma)x - v & L_1 \leq x < L_2 \\ \tan(\gamma)x - 2v & L_2 \leq x < L \end{cases}$$

$$U_2(x) = U_1\left(x - \frac{L}{2}\right), \quad U_3(x) = U_1(x) \quad (66)$$

Intenzita se opět spočte ze vztahu (56) dosazení z (59). Vztah (59) je možné napsat jako součet tří integrálů

$$F^{FT}(\vec{q}) = \frac{i}{q_z} \left[(\chi_A - \chi_B) e^{iq_z t_A} \int_0^L dx e^{-i(q_x x + q_z U_2(x))} - \right.$$

$$\left. - \chi_A \int_0^L dx e^{-i(q_x x + q_z U_1(x))} + \chi_B \int_0^L dx e^{iq_z D} e^{-i(q_x x + q_z U_3(x))} \right]$$

Každý z těchto integrálů se spočte obdobným způsobem, uvádíme proto jen výpočet druhého integrálu I

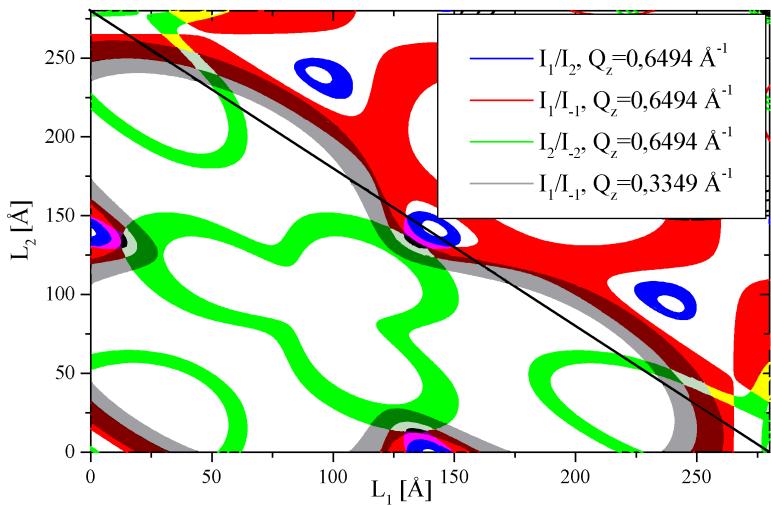
$$I = \int_0^L dx e^{-i q_x x} e^{-i q_z U_1(x)} = \int_0^{L_1} dx e^{-i(q_x + \tan(\gamma)q_z)x} +$$

$$+ e^{iq_z v} \int_{L_1}^{L_1 + L_2} dx e^{-i(q_x + \tan(\gamma)q_z)x} + e^{2iq_z v} \int_{L_1 + L_2}^L dx e^{-i(q_x + \tan(\gamma)q_z)x}$$

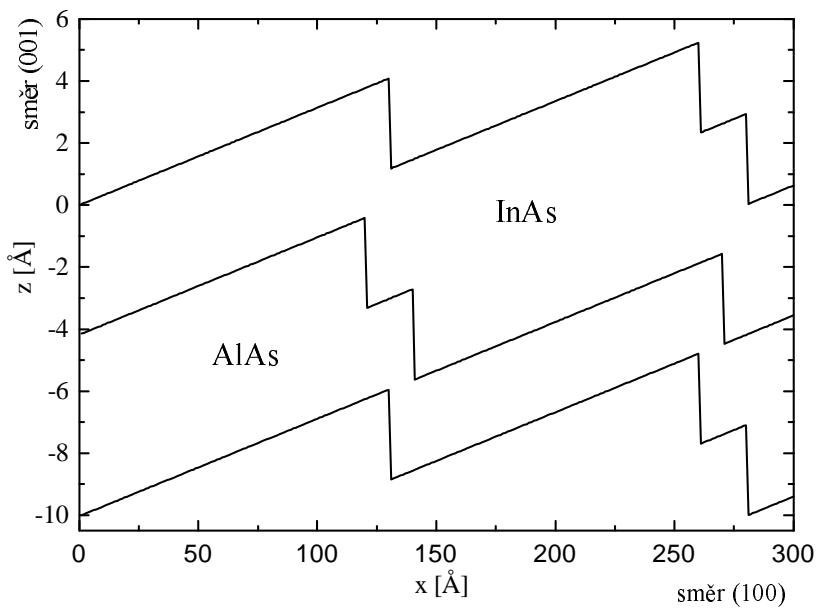
Pro zjednodušení ještě označíme $r = q_x + q_z \tan(\gamma)$

$$I_1 = \frac{i}{r} \left[e^{-irL_1} - 1 + e^{iq_z v} e^{-irL_1} (e^{-irL_2} - 1) + e^{2iq_z v} (e^{-irL} - e^{-ir(L_1 + L_2)}) \right] \quad (67)$$

Do obrázku 42 jsem vynesl pásy odpovídající naměřeným hodnotám intenzit v závislosti na parametrech – délkách schodků. V tomto případě jsem vynesl poměry jak pro $Q_z = 0.6496 \text{ \AA}^{-1}$ tak i pro $Q_z = 0.3349 \text{ \AA}^{-1}$. V obrázku 42 se protínají všechny čtyři pásy odpovídající naměřeným poměrům dokonce ve třech oblastech. Schodkový model odpovídá experimentu pro délky schodků: $L_1 = L_2 = (132 \pm 6) \text{ \AA}$ a $L_3 = (16 \pm 6) \text{ \AA}$ nebo $L_2 = L_3 = (132 \pm 6) \text{ \AA}$ a $L_1 = (16 \pm 6) \text{ \AA}$ nebo $L_1 = L_3 = (132 \pm 6) \text{ \AA}$ a $L_2 = (16 \pm 6) \text{ \AA}$. Tyto tři oblasti jsou zřejmě ekvivalentní zámeně počátku číslování schodků. Pás odpovídající naměřenému poměru intenzit I_1/I_{-1} pro $Q_z = 0.028 \text{ \AA}^{-1}$ není vynesen, protože by pokryval téměř celý obrázek včetně míst překryvů vynesených pásů. Určené hodnoty parametrů odpovídají tedy měřením pro všechny tři hodnoty Q_z . Profil multivrstvy pro výsledné délky schodků je v obrázku 43.



Obrázek 42: Pásy pro naměřené hodnoty poměrů intenzit ve schodkovém modelu. Jsou zvoleny stejné barevné kombinace jako v obr. 39, v místech protnutí se šedým pásem jsou zvoleny tmavé barvy, černá označuje oblast protnutí všech čtyř pásů. Uhlopříčka z levého horního do pravého dolního rohu omezuje délky schodků podmínkou $L_1 + L_2 + L_3 = L$. Oblast nad uhlopříčkou nemá fyzikální význam.



Obrázek 43: Profil multivrstvy pro výsledné parametry ve schodkovém modelu

Výsledné parametry schodkového modelu jsem srovnal s výsledky z GID a koplanární difrakce pomocí funkce relativní koncentrace AlAs $b(x)$. Tuto funkci lze rozvést do Fourierovy řady

$$b(x) = b_0 + b_1 \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + b_2 \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right) + b_3 \cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right) + \dots$$

První člen Fourierovy řady funkce b_1 má z výsledných parametrů schodkového modelu hodnotu $b_1 = 0.177 \pm 0.009$. Z koplanární difrakce vychází parametr $b_1 = 0.15 \pm 0.01$, a z GID $b_1 = 0.16 \pm 0.01$ (viz [10]). Schodkový model dobře odpovídá naměřeným hodnotám i výsledkům z jiných metod měření. Navíc jsme z měření GISAXS získali pravděpodobný tvar jednotlivých rozhraní.

8 Závěr

Zpracoval jsem data naměřená metodou GISAXS na třech různých vzorcích.

V případě vzorku s multivrstvou InP/GaInP se podařilo určit parametry tvaru, velikosti a rozložení kvantových teček. Naměřeným datům dobře odpovídá model tečky ve tvaru poloviny elipsoidu s hlavními osami ve směrech [1-10], [110] a ve směru růstu [001]. Získal jsem střední velikosti poloos, ve směru [1-10] $a = (84 \pm 3)$ Å, ve směru [110] $b = (68 \pm 3)$ Å a ve směru [001] $c = (10 \pm 20)$ Å. Také jsem určil rozptyl velikostí kvantových teček, směrodatná odchylka rozdelení velikostí teček je $\sigma = (10 \pm 8)\%$. Na tomto vzorku jsou kvantové tečky samovolně uspořádány, nejbližší sousední kvantové tečky se nacházejí ve směrech [100] a [010] ve střední vzdálenosti (400 ± 20) Å. Také jsem určil směrodatné odchylky od středního vektoru vzájemné polohy sousedních kvantových teček - ve směru středního vektoru vzájemné polohy sousední tečky $\sigma_{\parallel} (120 \pm 30)$ Å a ve směru kolmém $\sigma_{\perp} (120 \pm 40)$ Å. Výška kvantových teček je určena s velkou chybou, k dosažení lepšího výsledku by bylo třeba provést více měření pro různá Q_z . Tyto výsledky jsem neměl možnost srovnat s výsledky z jiných metod měření. Tvary a rozmístění kvantových teček by se daly srovnat především s měřením AFM pro tečky na povrchu. K ověření tvaru a velikostí teček uvnitř vzorku lze provést měření transmisní elektronové mikroskopie (TEM). Pro zjištění kvality optoelektronických aplikací kvantových teček je třeba provést přímo optická měření vzorku, například reflexní spektrum v závislosti na vlnové délce pro určení energie optického přechodu mezi diskrétními stavami v kvantové tečce. Optické vlastnosti kvantových teček nezávisí pouze na tvaru kvantových teček ale také na deformačním poli v jejich okolí, které ovlivňuje pásovou strukturu v polovodiči. Deformační pole v okolí kvantových teček lze také určit také pomocí klasické koplanární difrakce nebo GID. Pro specifikaci vlastností vzorku poskytuje GISAXS měření důležité informace o tvarech a velikostech kvantových teček, jak na povrchu, tak i uvnitř vzorku a jejich rozmístění, ale nepodává informace o deformačním poli, které silně ovlivňuje optické vlastnosti vzorku. K úplné specifikaci kvantových teček v multivrstvě je tedy nutné metodu GISAXS zkombinovat ještě s jinými metodami, z metod rtg. rozptylu jde např. o GID.

Pro vzorek s multivrstvou InAs/GaAs naměřená data odpovídají tečkám ve tvaru pyramid s délkou ve směru [1-10] (1170 ± 160) Å, šírkou ve směru [110] (440 ± 60) Å a výškou ve směru růstu [001] (76 ± 10) Å. Kvantové tečky v tomto vzorku jsou rozloženy náhodně na povrchu substrátu. Kvůli malému počtu použitelných naměřených hodnot jsem nezískal hodnotu disperze velikostí kvantových teček, protože převážná většina naměřených je dána především rozptylem na drsných rozhraních. Bohužel rozptyl na kvantových tečkách je patrný pouze pro malé hodnoty Q_z , a tedy i pro malé hloubky vniku, takže výsledky se v tomto případě převážně týkají pouze teček na povrchu. Pro tento vzorek jsem výsledky GISAXS srovnal s měřením na AFM. Podle AFM jsou na povrchu pyramidy dvojí velikosti. Větší pyramidy mají střední délku ve směru [1-10] $l = (4840 \pm 750)$ Å, střední šířku ve směru [110] $d = (2130 \pm 540)$ Å a střední výšku ve směru [001] $v = (940 \pm 340)$ Å. Takto obrovské pyramidy si vzhledem ke své velikosti označit za kvantové tečky nelze. Malé pyramidy mají střední délku $l = (1440 \pm 220)$ Å, střední šířku $d = (590 \pm 90)$ Å a střední výšku $v = (67 \pm 21)$ Å. Tyto malé pyramidy už můžeme označit za kvantové tečky. Výsledky z měření GISAXS dobře odpovídají rozměrům těchto malých pyramid na povrchu vzorku. Kvůli malé hloubce vniku použitelných měření nepodává GISAXS dostatečnou informaci o tečkách uvnitř vzorku. Pro zjištění tvaru odděleně oddeformačního pole kvantových teček uvnitř vzorku je

možné provést měření TEM. Na tomto vzorku byla provedena sada optických měření pod vedením prof. Humlíčka (např. [17] a [18]). Neznám dosud všechny podrobné výsledky těchto měření, proto uvádím pouze, že kvantové tečky v tomto vzorku vyzařují na optickém přechodu a tento vzorek má vlastnosti pro využití v polovodičovém laseru. Pomocí optických měření lze získat parametry kvantových teček uvnitř vzorku, ale optické vlastnosti jsou silně ovlivněny také deformačním polem v okolí kvantových teček. Optická měření nedovolují samostatně zkoumat tvary teček a deformační pole. Samostatnou informaci o deformačním poli je možné získat z některých metod měření rtg. difrakce (klasická koplanární difrakce, GID). Na tomto vzorku se podařilo určit pouze tvar a střední velikost kvantových teček na povrchu, pro kvantové tečky uvnitř vzorku nepodává metoda GISAXS spolehlivé informace. Výsledky z metody GISAXS na tomto vzorku dobře odpovídají dosažitelným výsledkům z měření na AFM.

Pro vzorek s krátkoperiodickou multivrstvou InAs/AlAs jsem z měření GISAXS metodou určil tvary rozhraní jednotlivých vrstev, které jsou dány monoatomárními schodky. Podél směru [100] se periodicky opakují trojice schodků – vždy dva dlouhé $L_{1,2} = (132 \pm 6)$ Å a jeden krátký $L_3 = (16 \pm 6)$ Å, celková délka periodicky se opakující trojice schodků je $L = (280 \pm 10)$ Å. Výška každého monoatomárního schodku je $v = 2,93$ Å a sousední rozhraní jsou oproti sobě posunuty o polovinu periody 140 Å. Tvary rozhraní vrstev určují tvary a rozložení soustavy kvantových drátů. Použitý model je pouze poměrně hrubým přiblžením skutečnosti, protože susceptibilita se na rozhraních vrstev nemění skokem ale pozvolněji. Přechodová oblast, kde se susceptibilita mění, má šířku srovnatelnou zhruba s rozměry atomů. V tomto případě, kdy tloušťka vrstev se pohybuje v rozmezí jedné až dvou monovrstev může tento efekt hrát velkou roli. Tvar jednotlivých rozhraní při těchto rozměrech může být ovlivněn deformačním polem v multivrstvě. Tento model tvořený monoatomárními schodky dobře odpovídá výsledkům získaným z jiných metod měření rtg difrakce (klasická koplanární difrakce a GID) a také měření AFM. Bylo by zajímavé také srovnat výsledky s měřením TEM. Měření koplanární rtg. difrakce a GID dávají také deformační pole v multivrstvě. Pomocí metod rtg. rozptylu byl získán jak tvar kvantových drátů, tak i deformační pole v multivrstvě. Tyto výsledky by bylo možné srovnat s výsledky optických měření.

Ve všech vzorcích se mi podařily určit tvary rozhraní mezi různými materiály, což mohou být hranice kvantových teček či kvantových drátů. Použitá metoda měření (GISAXS) podává informace pouze o tvarech a velikostech objektů jiného materiálu, je citlivá na změny chemického složení. Metoda GISAXS umožňuje narozdíl od jiných metod nedestruktivní zkoumání chemického složení odděleně od deformačního pole v krystalu, na něž není citlivá. Pro zkoumání deformačního pole je vhodné použít klasickou rtg. difrakci nebo GID. Pro optické vlastnosti je důležité jak chemické složení tak i deformační pole a nelze je zkoumat odděleně. Tvar povrchu lze zkoumat pomocí AFM, ale tato metoda je omezena pouze na povrch vzorku.

Literatura

1. V. Holý, U. Pietsch, T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg 1999, 256 str.
2. J. Stangl, V. Holý, T. Roch, A. Daniel, G. Bauer, J. Zhu, K. Brunner, G. Abstreiter, *Phys. Rev. B* **62**, 7229 (2000).
3. J. Stangl, V. Holý, P. Mikulík, G. Bauer, I. Kegel, T. H. Metzger, O. G. Schmidt, C. Lange, K. Eberl, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3785 (1999).
4. V. Holý, J. Stangl, G. Springholz, M. Pinczelits, G. Bauer, I. Kegel, T. H. Metzger, *Physica B* **283**, 65 (2000).
5. L. E. Shilkrot, D. J. Srolovitz, J. Tersoff, *Phys. Rev. B* **62**, 8397 (2000).
6. J. H. Li, V. Holý, Z. Zhong, J. Kulik, S. C. Moss, A. G. Norman, A. Mascarenhas, J. L. Reno, D. M. Follstaedt, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 219 (2001).
7. G. Springholz, V. Holý, M. Pinczelits, G. Bauer, *Science* **282**, 734 (1998).
8. J. Humlíček, *Základní metody numerické matematiky*, skripta UJEP Brno, 1981, 171 str.
9. Libovolná učebnice optiky, např. J. Kuběna, *Úvod do optiky*, skripta MU Brno, 1994, 182 str.
10. J. H. Li, V. Holý, M. Meduňa, S. C. Moss, Y. Zhang, A. Mascarenhas, D. M. Follstaedt, bude publikováno.
11. S. Stepanov, jeho webová stránka <http://sergey.bio.aps.anl.gov> uvádí indexy lomu a susceptibility pro rtg záření.
12. H. Lüth, *Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2001, 559 str.
13. P. Y. Yu, M. Cordona, *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2001, 639 str.
14. Informace o synchrotronu ESRF poskytuje webové stránky <http://www.esrf.fr>
15. J. H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: an introduction*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998, 438 str.
16. A. P. Alivisatos, *Science* **271**, 933 (1996).
17. J. Dressler, *Diplomová práce*, PřF MU Brno, 2002.
18. V. Křápek, *Diplomová práce*, PřF MU Brno, 2002.
19. R. D. Twesten, D. M. Follstaedt, S. R. Lee, E. D. Jones, J. L. Reno, J. Mirecki Millunchick, A. G. Norman, S. P. Ahrinkiel, A. Mascarenhas, *Phys. Rev. B* **60**, 13619 (1992).