Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 18, вып. 5, 286—290 (1983)

УДК 548.733

ДИНАМИЧЕСКОЕ ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ОТ ОДНОМЕРНОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ

Д. М. ВАРДАНЯН, А. М. МАНУКЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 20 апреля 1982 г.)

Теоретически рассмотрена дифракция рентгеновских лучей на одномерной сверхрешетке без выбора конкретной модели для ее элемента. Получены формулы для амплитуд отражения и прохождения сверхрешетки. Показано, что независимо от модели для элемента сверхрешетки имеют место явления полного отражения рентгеновских лучей и экстинкции, которые являются результатом многократных отражений рентгеновских лучей от границ между элементами сверхрешетки. Определены направления и ширины дифракционных максимумов.

Одномерные сверхрешетки (СР), получаемые методами эпитаксиального роста, имеют широкие перспективы применения в микроэлектронике и вычислительной технике [1]. При этом важное значение имеет степень совершенства СР, которая исследуется различными методами рентгеновского и электронномикроскопического анализа [2].

В работах [3, 4] рассмотрено кинематическое приближение дифракции рентгеновских лучей (РЛ) на СР, т. е. когда пренебрегают многократными отражениями волнового поля внутри кристалла от отражающих плоскостей и от границ элементов СР. В работах [5, 6] рассмотрена динамическая дифракция РЛ на гармонической СР и показано отличие двух разных приближений: динамического (система дифференциальных уравнений Такаги) и кинематического (борновское приближение теории рассеяния). В работе [7] задача динамической дифракции РЛ на СР прямоугольной модели решена методом Дарвина [8], причем в качестве элемента СР взят идеальный кристаллический слой. Характерной особенностью дифракции РЛ на СР является появление ряда дифракционных максимумов на кривой отражения, положения и ширины которых зависят от периода СР (толщины элемента) и от свойств границы раздела элементов СР.

В настоящей работе рассматривается динамическое отражение РЛ от одномерной СР в случае Брэгга без предварительного выбора модели для ее элемента. В качестве элемента СР могут быть взяты идеальный кристаллический слой, гетеропереход двух кристаллических слоев, слой с гармоническим или линейным изменением межплоскостного расстояния и т. д.

1. Пусть плоская монохроматическая рентгеновская волна падает на СР, состоящую из N одинаковых кристаллических слоев, которые мы назовем элементами СР. Введем следующие обозначения: Φ_{hN} и Φ_{0N} — соответственно амплитуды отражения и прохождения СР, Φ_h, $\Phi_{\bar{h}}$ и Φ_0, $\Phi_{\bar{0}}$ —

соответственно амплитуды отражения и прохождения элемента СР, $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки. Учитывая многократные отражения рентгеновской волны на границах элементов и складывая волны, отраженные от всех элементов, получаем рекуррентные уравнения

$$\Phi_{hN} = \frac{\Phi_h + \Phi_{h(N-1)}(\Phi_0 \Phi_{\bar{0}} - \Phi_h \Phi_{\bar{h}})}{1 - \Phi_{\bar{h}} \Phi_{h(N-1)}}, \tag{1}$$

$$\Phi_{0N} = \frac{\Phi_0 \Phi_{0(N-1)}}{1 - \Phi_{\bar{h}} \Phi_{h(N-1)}}. \tag{2}$$

Решая уравнения (1) и (2), получаем

$$\Phi_{hN} = \left(\frac{\Phi_h}{\Phi_{\bar{h}}}\right)^{1/2} \frac{\sin N\theta}{\sin (N\theta + \theta_1)}, \tag{3}$$

$$\Phi_{0N} = \left(\frac{\Phi_0}{\Phi_{\bar{0}}}\right)^{N/2} \frac{\sin \theta_1}{\sin (N\theta + \theta_1)}, \tag{4}$$

где

$$\cos \theta = \xi = \frac{1 + \Phi_0 \Phi_{\bar{0}} - \Phi_h \Phi_{\bar{h}}}{2 (\Phi_0 \Phi_{\bar{0}})^{1/2}}, \tag{5}$$

$$\cos \theta_1 = \xi_1 = \frac{1 - (\Phi_0 \Phi_{\bar{0}} - \Phi_h \Phi_{\bar{h}})}{2 (\Phi_h \Phi_{\bar{h}})^{1/2}}. \tag{6}$$

Функции Φ_{0N} и Φ_{hN} выражаются через полиномы Чебышева второго рода $U_n(z) = \sin(n \arccos z)/\sin(\arccos z)$, что характерно для задач о распространении волн [9] и переходном излучении частицы в слоистых средах [10].

Если сопоставить формулы (3) и (4) с формулами для амплитуд отражения и прохождения идеальной кристаллической пластины толщиной z_0 [8], то можно увидеть их полное совпадение при замене в (3) и (4) $N\theta \to z_0 \sqrt{s^2 - \beta^2}$ и $\xi_1 \to s/\beta$, где

$$s = 2k \cos \theta_B \left(\theta - \theta_B - \frac{\chi_0}{\sin 2\theta_B}\right)$$

— параметр, пропорциональный отклонению от исправленного угла Брэгга, $k = 1/\lambda$ — волновое число, $\beta = kC(\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2}/\sin \theta_B$, C — поляризационный фактор, χ_0, χ_h, $\chi_{\bar{h}}$ — коэффициенты фурье-разложения поляризуемости кристалла.

Таким образом, в СР роль параметра, зависящего от угла падения, играет параметр $\xi_1(s)$, который зависит еще от толщины элемента (периода СР) и типа выбранной для элемента модели.

2. Пусть число элементов бесконечно ($N \to \infty$).

а) При $|\xi_1| > 1$ из (3) получаем

$$\Phi_{h\infty} = \left(\frac{\Phi_h}{\Phi_{\bar{h}}}\right)^{1/2} (\xi_1 \mp \sqrt{\xi_1^2 - 1}), \tag{7}$$

где верхний знак соответствует области $\xi_1 > 1$ (области типа III), а нижний — области $\xi_1 < -1$ (области типа I). Коэффициент отражения

$$R_{h-} = (|\xi_1| - \sqrt{\xi_1^2 - 1})^2 \quad (8$$

быстро падает с увеличением ξ_1.

б) При $|\xi_1| \leqslant 1$ (области типа II)

$$\Phi_{h-} = \left(\frac{\Phi_h}{\Phi_{\bar{h}}}\right)^{1/2} (\xi_1 - i\sqrt{1-\xi_1^2}), \quad (9)$$

а коэффициент отражения

$$R_{h-} = 1. \quad (10)$$

Таким образом, в непоглощающей СР с бесконечным числом элементов в областях углов падения, удовлетворяющих условию $|\xi_1(s)| \leqslant 1$, происходит полное отражение РЛ, что является следствием многократных отражений волны от границ элементов. Это явление аналогично явлению полного отражения РЛ от идеального непоглощающего полубесконечного кристалла в случае Брэгга, являющегося следствием многократных отражений волны от отражающих плоскостей. Центры областей полного отражения находим из уравнения

$$\xi_1(s) = 0. \quad (11)$$

Корни уравнения (11) обозначим через s_m (m — целое число). Они зависят от периода СР и от выбранной модели элемента.

Предположим, что при определенных условиях функцию $\xi_1(s)$ в окрестностях точек s_m можно аппроксимировать линейной функцией [7]

$$\xi_1 = M_m(s - s_m)/\beta, \quad (12)$$

где

$$M_m = \beta \left.\frac{d\xi_1}{ds}\right|_{s=s_m}. \quad (13)$$

Такая аппроксимация справедлива, если

$$|s - s_m| \ll \frac{M_m}{\left.\frac{d^2\xi_1}{ds^2}\right|_{s=s_m}}. \quad (14)$$

Ширина m-ой области полного отражения, определяемая из условия $|\xi_1| \leqslant 1$, равна

$$\Delta_m = 2/|M_m| \quad (15)$$

или в угловых единицах

$$\Delta\theta_m = \Delta\theta_{\text{массив.}}/|M_m|, \quad (16)$$

где $\Delta\theta_{\text{массив.}}$ — ширина полного отражения полубесконечного идеального кристалла, являющаяся величиной порядка нескольких угловых секунд.

Поскольку $\Delta\theta_{\text{массив.}}$ прямо пропорциональна коэффициенту фурье-разложения поляризуемости кристалла χ_h, коэффициент фурье-разложения поляризуемости СР равен

$$\chi_{hm} = \chi_h/|M_m|. \quad (17)$$

Эффект полного отражения связан с экспоненциальным убыванием волнового поля с глубиной (экстинкция) [8]. В идеальных кристаллах это явление обусловлено отражением от отражающих плоскостей в области углов падения $|s| \leqslant \beta$. В СР экстинкция происходит в областях углов падения $|\xi_1| \leqslant 1$ и обусловлена отражением от границ слоев. Поскольку коэффициент экстинкции в идеальных кристаллах $\sigma_e \sim \chi_h$, то коэффициент экстинкции в СР будет в $|M_m|$ раз меньше:

$$\sigma_{em} = \sigma_e/|M_m|, \tag{18}$$

а экстинкционная длина, т. е. глубина, на которой интенсивность волнового поля уменьшается в e раз, будет в $|M_m|$ раз больше:

$$\Lambda_m = |M_m|\,\Lambda_0, \tag{19}$$

где Λ_0 — экстинкционная длина идеального кристалла. Λ_m показывает эффективную глубину проникновения плоской рентгеновской волны в СР при углах падения s_m, которые определяются из уравнения (11). Из формулы (19) находим условие, при котором число элементов в СР для данного угла падения можно считать бесконечным:

$$D = Nz_0 \gg \Lambda_m, \tag{20}$$

где D — толщина СР.

3. Поскольку формула для амплитуды отражения РЛ от СР получается из соответствующей формулы для идеального кристалла путем замены в последней параметра s на ξ_1, то для учета поглощения РЛ в СР достаточно в соответствующих формулах для идеального поглощающего кристалла, приведенных в [11], сделать замену $P_r = \mathrm{Re}(s/\beta) \to \xi_{1r}$ и $P_i = \mathrm{Im}(s/\beta) \to \xi_{1i}$.

Для СР с бесконечным числом элементов коэффициент отражения имеет следующий вид

$$R_m = E_m - \sqrt{E_m^2 - 1}, \tag{21}$$

где

$$E_m = \sqrt{1 + (\xi_{1r}^2 + \xi_{1i}^2)^2 - 2(\xi_{1r}^2 - \xi_{1i}^2)} + \xi_{1r}^2 + \xi_{1i}^2. \tag{22}$$

При падении рентгеновской волны в направлении s_m, т. е. при $\xi_{1r} = 0$ имеем

$$R_m(s_m) = [R_{\text{ид.}}(0)]^{|M_m|}, \tag{23}$$

где $R_{\text{ид.}}(0)$ — коэффициент отражения идеального поглощающего массивного кристалла при падении рентгеновской волны под исправленным углом Брэгга. Поскольку $R_{\text{ид.}} < 1$, то при сравнительно больших $|M_m|$ интенсивность отражения порядка m будет весьма мала.

4. Явления полного отражения РЛ и экстинкции характерны для любой СР и обусловлены многократными отражениями волны на границах элементов СР. Если даже в элементе СР рассеяние РЛ носит кинематический характер, т. е. можно пренебречь многократными отражениями волны от отражающих плоскостей, то при достаточно большом числе слоев рассеяние на границах элементов СР носит динамический характер. На практике обычно период СР меньше экстинкционной длины идеального кристалла, и для амплитуд отражения и прохождения одного элемента СР можно применить кинематические формулы. Это обстоятельство очень важно, поскольку кинематическая теория рассеяния РЛ на реальных кристаллах хорошо развита [12].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Шик А. Я.* Физика и техника полупроводников, 8, 1841 (1974).
2. *Mattews I. W., Blakeslee A. E.* J. Crystal Growth, 27, 118 (1974); 29, 273 (1975); 32, 265 (1976).
3. *Bőhm H.* Acta Crystallogr., A31, 622 (1975).
4. *Segmüller A., Blakeslee A. E.* J. Appl. Crystallogr., 6, 19 (1973).
5. *Хапачев Ю. П.* и др. Кристаллография, 24, 430 (1979).
6. *Энтин И. Р.* ЖЭТФ, 77, 214 (1979).
7. *Vardanyan D. M., Manoukyan H. M.* Phys. Stat. Sol. (a), 69, 475 (1982).
8. *Иверонова В. И., Ревкевич Г. П.* Теория рассеяния рентгеновских лучей, Изд. МГУ, М., 1978.
9. *Fleck I. A.* J. Appl. Phys., 34, 2997 (1963).
10. *Аракелян В. А., Гарибян Г. М., Нальян Э. А.* Изв. АН АрмССР, Физика, 4, 287 (1968).
11. *Пинскер З. Г.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах, Изд. Наука, М., 1974.
12. *Кривоглаз М. А.* Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами, Изд. Наука, М., 1967.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁՈՒՄԸ ՄԻԱՉԱՓ ԳԵՐՑԱՆՑԻՑ

Դ. Մ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Հ. Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Տեսականորեն դիտարկված է միաչափ գերցանցի վրա ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի խնդիրը, առանց կոնկրետացնելու գերցանցի տարրի որևէ մոդել։ Գտնված են գերցանցի անցման և անդրադարձման գործակիցները։ Ցույց է տրված, որ անկախ տարրի մոդելի ընտրությունից տեղի ունեն ռենտգենյան ճառագայթների լրիվ անդրադարձման և էքստինկցիայի երևույթները, որոնք տարրերի միջև գտնվող սահմաններից ռենտգենյան ալիքի բազմակի անդրադարձումների հետևանք են։ Որոշված են դիֆրակցիոն մաքսիմումների ուղղությունները և լայնությունները։

DYNAMIC REFLECTION OF *X*-RAYS FROM AN ONE-DIMENSIONAL SUPERLATTICE

D. M. VARDANYAN, A. M. MANUKYAN

The diffraction of *X*-rays in an one-dimensional superlattice regardless of the choice of a specific model of its element is theoretically considered. The possibility of obtaining formulae for reflection and transmission amplitudes is shown taking into account multiple reflections of *X*-rays from boundaries of superlattice elements. The effective coefficient of Fourier expansion of superlattice polarizability as well as the extinction coefficient and the extinction length are obtained.