УДК 548.732

ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ СФЕРИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ НА СВЕРХРЕШЕТКЕ

Л.В. ЛЕВОНЯН, А.М. МАНУКЯН^{*}

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 7 августа 2015 г.)

Показано, что при динамической дифракции сферической рентгеновской волны на сверхрешетке с малым периодом в зависимости от структурных факторов сверхрешетки происходит фокусировка сателлитов как на разных глубинах внутри кристалла, так и на разных расстояниях от кристалла в вакууме. На основе полученных результатов предложен метод исследования сверхрешетки посредством динамической дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны. Метод основан на измерении фокусных расстояний различных сателлитов.

1. Введение

Характерной особенностью дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетках (СР) или модулированных структурах является наличие сателлитов вокруг основного дифракционного максимума, положение которого определяется усредненным по периоду СР параметром решетки. При $z_0 \ll \overline{\Lambda}$ (z_0 – период СР, $\overline{\Lambda}$ – усредненная по периоду СР экстинкционная длина кристалла) дифракционная картина представляет собой систему неперекрывающихся сателлитов, угловое расстояние между которыми обратно пропорционально периоду СР, а их ширины и интенсивности зависят от реальной структуры и толщины СР.

Особый интерес представляют искусственные полупроводниковые СР на основе гетеропереходов, которые получают поочередным нанесением друг на друга тонких слоев различных полупроводников с близкими межплоскостными расстояниями. На раннем этапе после изготовления, когда отсутствует взаимная диффузия полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя, СР могут быть описаны прямоугольной (квадратичной, если слои из разных материалов имеют одинаковую толщину) моделью. Со временем происходит взаимная диффузия полупроводниковых соединений и прямоугольная модель уже не подходит для описания. Поскольку процесс диффузии медленный, то вначале, когда между слоями гетероматериалов образуются диффузные слои, СР описывается трапециевидной моделью. Если слои СР тонкие, то вследствие взаимной диффузии материалы, из которых состоит СР, будут перекрывать друг друга по всей толщине слоя. Такие СР описываются синусоидальной или треугольной моделью. Исследования гетероэпитаксиальных СР различными рентгеновскими методами проведены в работах [1–6]. В работах [1,5] для интерпретации экспериментальных результатов учитывалось непостоянство периода СР и диффузное рассеяние на тепловых фононах и несовершенствах решетки. В работах [3,4] исследовано образование квантовых точек и проволок в СР. Влияние взаимной диффузии гетероматериалов бислоя на дифракционную картину исследовано в работе [2] при отжиге идеальной СР. В работе [7] развита динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на одномерной идеальной СР произвольной модели. На основе развитой теории получены формулы структурных факторов для разных моделей СР [8]. В работе [9] исследовано влияние взаимной диффузии гетероматериалов на дифракцию рентгеновских лучей на сверхрешетке с дефектом упаковки.

В настоящей работе проведено исследование динамической дифракции сферической рентгеновской волны на СР с малым периодом.

2. Дифракционная фокусировка рентгеновского излучения

Как известно [10–13], при дифракции сферической рентгеновской волны на монокристалле в геометрии Лауэ имеет место явление фокусировки слабопоглощаемой моды дифрагированного волнового поля как внутри кристалла, так и за пределами кристалла – в вакууме. Интенсивность дифрагированной волны на глубине *z* внутри кристалла вблизи фокальной области для симметричного случая Лауэ, когда отражающие атомные плоскости соответствуют плоскостям x =const, приближенно выражается формулой

$$I_{h}(x,z) = \frac{\exp\left(-\frac{\mu z}{\cos\theta} (1-C|\chi_{hi}|/\chi_{0i})\right)}{4L_{1}\Gamma\left(\left(L_{1}/\Gamma-z\right)^{2}+\left(z|\chi_{hi}/\chi_{hr}|\right)^{2}\right)^{\frac{1}{2}}}$$
(1)

$$\times \exp\left(-\pi \frac{zC|\chi_{hi}|}{\lambda\cos\theta} \frac{x^{2}\cot^{2}\theta}{\left(L_{1}/\Gamma-z\right)^{2}+\left(z|\chi_{hi}/\chi_{hr}|\right)^{2}}\right),$$

где λ – длина падающей волны, L_1 – расстояние между точечным источником и кристаллом, θ – угол Брэгга, $\mu = 2\pi\chi_{0i}/\lambda$ – коэффициент линейного поглощения рентгеновских лучей в кристалле, χ_0 и χ_h – коэффициенты Фурье комплексной поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$, C – фактор поляризуемости (C = 1 для σ -поляризации и $C = \cos 2\theta$ для π -поляризации), а величина Γ определяется как

$$\Gamma = \frac{\sin\theta\sin 2\theta}{C|\chi_{hr}|}.$$
(2)

Как известно из динамической теории рассеяния рентгеновских лучей, в недеформированном кристалле траектории лучей (направление вектора Пойнтинга) представляют собой прямые линии. При этом лучи, идущие в точном брэгговском направлении, распространяются вдоль отражающих атомных плоскостей. Лучи, падающие на кристалл под углом больше брэгговского угла и соответствующие слабопоглощаемой моде волнового поля, в кристалле распространяются в сторону уменьшения этого угла, а лучи, падающие под углом меньше брэгговского угла, направлены в противоположную сторону [14] (рис.1).



Рис.1. Схематическое изображение явления фокусировки внутри и вне кристалла при дифракции рентгеновского излучения от точечного источника *S*.

Поскольку для рентгеновских лучей динамическое поглощение обычно мало, т. е. $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$ [14], то как следует из формулы (1), на глубине

$$z = L_1 / \Gamma = z_F \tag{3}$$

распределение интенсивности имеет наиболее узкий и высокий пик, что соответствует дифракционной фокусировке рентгеновских лучей.

Если толщина кристалла D больше фокусной глубины z_F , то волны фокусируются внутри кристалла. При распространении излучения за кристаллом дифрагированный пучок еще раз будет стягиваться в фокальное пятно в вакууме на расстоянии кристалл–детектор (*L*₂), удовлетворяющем условию (рис.1)

$$L_{2F} = \Gamma(D - z_F). \tag{4}$$

Выражение для интенсивности дифрагированной волны в вакууме за кристаллом на расстоянии L_2 имеет вид, идентичный формуле (1), в которой произведена замена координаты z на толщину кристалла D, а расстояние источник– кристалл L_1 заменено на суммарное расстояние источник–кристалл–детектор $L_1 + L_2$, что обеспечивает фокусировку на расстоянии, определяемом выражением (4).

Как следует из формул (2)–(4), фокусная глубина в кристалле прямо пропорциональна величине $|\chi_{hr}|$, а за кристаллом – обратно пропорциональна этой же величине.

3. Особенности фокусировки в СР

Как уже было отмечено выше, при малом периоде СР дифракционная картина представляет собой систему неперекрывающихся сателлитов. В работе [7] показано, что в этом случае в пределах *m*-го сателлита СР можно рассматривать как идеальный кристалл с модифицированной Фурье-компонентой поляризуемости кристалла

$$\chi_{hm} = M_m \overline{\chi}_h \,, \tag{5}$$

где m – номер сателлита, $\overline{\chi}_h$ – усредненная по периоду СР Фурье-компонента поляризуемости кристалла и M_m – параметр, зависящий от модели СР. При этом для всех сателлитов любой модели удовлетворяются условия $M_m < 1$ и $\sum_{m=-\infty}^{\infty} M_m^2 = 1$.

Следовательно, задача дифракции сферической рентгеновской волны на СР с малым периодом будет описываться аналогично вышеизложенному для монокристалла и схематически изображаться подобно рис.1 для каждого отдельного сателлита, поскольку для разных сателлитов разными будут углы Брэгга и координаты фокусных пятен как внутри, так и вне кристалла. При этом чем меньше значение M_m , тем меньше фокусное расстояние соответствующего сателлита внутри СР и тем дальше от кристалла происходит фокусировка в вакууме за кристаллом.

В работе [8] выведены формулы для параметра M_m разных моделей СР. В частности, для квадратичной модели выражение M_m имеет вид

$$M_{m} = \begin{cases} (\varepsilon_{0}/\pi) |\sin(\pi\varepsilon_{0}/4)/(m^{2}-\varepsilon_{0}^{2}/4)|, & m = 2n, \\ (\varepsilon_{0}/\pi) |\cos(\pi\varepsilon_{0}/4)/(m^{2}-\varepsilon_{0}^{2}/4)|, & m = 2n+1, \end{cases}$$
(6)

где $\varepsilon_0 = 2kz_0 \sin \overline{\theta} \tan \overline{\theta} \Delta d/\overline{d}$ – параметр, характеризующий степень несоответствия гетероматериалов, $k = 1/\lambda$ – волновое число в вакууме и Δd – разность межплоскостных расстояний гетероструктур; усреднение проводится по периоду сверхрешетки. Как видно из выражения (6), $M_{-m} = M_m$ и поэтому для сателлитов с номерами $\pm m$ фокусные расстояния и интенсивности будут приблизительно одинаковыми.



Рис.2. Интенсивности основного максимума и первого сателлита на расстоянии кристалл–детектор, соответствующем фокусировке основного максимума: (а) m = 0 и (b) m = 1.

На рис.2 приведены графики интенсивности I основного максимума и первого сателлита на расстоянии от СР, соответствующем фокусному расстоянию основного максимума. Численные расчеты проведены для СР на основе гетероперехода GaAs–AlAs с периодом 150 нм при излучении CuK_α для квадратичной модели СР. Как видно из рисунка, ширина основного максимума приблизительно в 20 раз меньше ширины первого сателлита, а интенсивность – на 2 порядка больше.



Рис.3. Интенсивности *I* основного максимума и первого сателлита на расстоянии кристалл–детектор, соответствующем фокусировке первого сателлита: (а) m = 0 и (b) m = 1.

На рис.3 представлены интенсивности тех же максимумов на расстоянии от СР, соответствующем фокусному расстоянию первого сателлита, которое почти в 4 раза больше фокусного расстояния основного максимума. Как видно из рисунка, интенсивность основного максимума уменьшается и уширяется, в то время как интенсивность первого сателлита увеличивается и сужается.

Интенсивность сателлита под номером m = -1 в обоих случаях идентична интенсивности сателлита с m = 1, что характерно для квадратичной модели СР.

4. Заключение

Особенностью динамической дифракции сферической рентгеновской волны на СР является фокусировка сателлитов на разных глубинах внутри кристалла и на разных расстояниях от кристалла в вакууме. Эти расстояния зависят от модифицированных структурных факторов сателлитов, зависящих, в свою очередь, от модели СР. Таким образом, измерение фокусных расстояний разных сателлитов может стать основой метода определения структурных факторов СР и тем самым дать возможность уточнить, какая из моделей СР реализуется в действительности.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. А.М. Афанасьев, А.А. Зайцев, Р.М. Имамов. Кристаллография, 43, 1 (1998).
- 2. C. Engström, J. Birch et al. J. Vac. Sci. Technol. A, 17, 5 (1999).
- 3. V. Holy, J. Stangl, G. Springholz et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 34, A1 (2001).
- 4. T. Roch, V. Holy, A. Daniel et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 34, A6 (2001).
- 5. А.А. Зайцев, И.А. Субботин, Э.М. Пашаев и др. Материалы международной научной конференции «Пленки-2004», Москва, МИРЭА, 2004, с. 49.
- 6. T. Etzelstorfer et al. Appl. Cryst., 48, 262 (2015).
- 7. D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan, H.M. Petrosyan. Acta Cryst., A41, 212 (1985).
- 8. D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan, H.M. Petrosyan. Acta Cryst., A41, 218 (1985).
- 9. А.М. Манукян. Известия НАН Армении, Физика, 49, 360 (2014).
- 10. А.М. Афанасьев, В.Г. Кон. ФТТ, 19, 1775 (1977).
- 11. V.V. Aristov, V.I. Polovinkina, A.M. Afanas'ev, V.G. Kohn. Acta Cryst., A36, 1002 (1980).
- 12. Л.В. Левонян. Письма в ЖТФ, 7, 269 (1981).
- 13. L.V. Levonian. Phys. Stat. Sol. (a), 68, k199 (1981).
- 14. З.Г. Пинскер. Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.

ቡԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՍՖԵՐԻԿ ԱԼԻՔԻ ԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԳԵՐՑԱՆՑՈՒՄ

L.Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, *Հ.*Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

ծույց է տրված, որ փոքր պարբերությամբ գերցանցում ռենտգենյան սֆերիկ ալիքի դինամիկական դիֆրակցիայի դեպքում, կախված գերցանցի կառուցվածքային գործոնից, տեղի է ունենում սատելիտների կիզակետում ինչպես բյուրեղում տարբեր խորությունների վրա, այնպես էլ վակուումում` բյուրեղից տարբեր հեռավորությունների վրա։ Ստացված արդյունքների հիման վրա առաջարկված է ռենտգենյան սֆերիկ ալիքի դինամիկական դիֆրակցիայի դեպքում տարբեր սատելիտների կիզակետման հեռավորությունների չափման միջոցով գերցանցերի հետազոտման եղանակ։

DYNAMICAL DIFFRACTION OF SPHERICAL X-RAY WAVE ON SUPERLATTICE

L.V. LEVONYAN, H.M. MANUKYAN

It is shown that in the case of dynamical diffraction of a spherical X-ray wave on a shortperiod superlattice, depending on structural factors of the superlattice the satellites are focused both at different depths inside the crystal and at different distances from the crystal in vacuum. On the basis of obtained results, a method of study of superlattice structure by dynamical diffraction focusing of a spherical X-ray wave is proposed. The method is based on the measurement of focal lengths of different satellites.