

СКОЛЬЗЯЩАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛЕ С ПРОФИЛИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

© 2012 г. А. Ю. Гаевский^{1,2}, И. Э. Голентус¹, В. Б. Молодкин¹

¹ Институт металлофизики НАН Украины, Киев

² НТУУ “Киевский политехнический институт”, Украина

E-mail: transilv@mail.ru

Поступила в редакцию 29.08.2011 г.

Исследована динамическая дифракция рентгеновских лучей, падающих под скользящими углами на кристалл, имеющий профилированную поверхность в виде одномерной решетки субмикронного масштаба. Для некопланарной дифракции в условиях полного внешнего отражения учтено взаимодействие зеркально отраженной и дифрагированной волн, а также решеточных гармоник. Показана хорошая сходимости принятого приближения по числу учитываемых гармоник. Выяснено влияние угловой расходимости падающего пучка на вид кривых отражения.

Кристаллы с поверхностью, сформированной в виде одно- или двумерных решеток субмикронного масштаба, являются базовыми элементами для многих устройств оптоэлектроники, рентгеновской оптики. Структура такого рода поверхностных решеток (ПР) чаще всего исследуется рентгеновскими методами, использующими условия скользящей дифракции (GID – *grazing incidence diffraction*) [1, 2], и теоретическими методами, основанными на кинематическом приближении типа DWBA – *distorted wave Born approximation* [3–5], или на каком-либо варианте динамической теории [6–9]. Однако в динамической теории скользящей дифракции на ПР, как правило, не учитывается кристаллическая структура рассеивателя [10, 11]. Анализу совместной динамической дифракции на кристаллической и поверхностной решетках в скользящей геометрии посвящена настоящая работа.

УРАВНЕНИЯ ПОЛЯ ДЛЯ КРИСТАЛЛА С ПОВЕРХНОСТНЫМ ПРОФИЛЕМ

Пусть плоская поперечно поляризованная электромагнитная волна с волновым вектором (в.в.) $\mathbf{K} = (\mathbf{K}_{\parallel}, K_z)$ и частотой ω падает из вакуума на кристалл. На поверхности кристалла создана одномерная решетка с периодом $\sim (10^3 - 10^4)a$, где a – период кристаллической решетки. Процессы рассеяния включают дифракцию на кристаллической и на поверхностной решетках. Периодичность поверхности приводит к тому, что в обратном пространстве вблизи брэгговских стержней (*crystal truncation rods* – CTR) в латеральном направлении ПР появляется тонкая структура решеточных стержней (*grating truncation rods* – GTR). Эта сложная структура точек в обратном

пространстве может быть исследована с помощью высокоразрешающей рентгеновской дифракции.

Принято различать случаи компланарной и некопланарной дифракции в зависимости от того, лежит ли вектор дифракции \mathbf{H} в плоскости падения или нет [1, 6]. При падении под малыми углами вблизи сферы Эвальда могут оказаться лишь векторы $\mathbf{K} + \mathbf{H}$ с векторами \mathbf{H} , лежащими в плоскости, перпендикулярной плоскости падения, т.е. при скользящей дифракции исследуются окрестности брэгговских стержней ($hk0$).

Введем декартовы координаты x, y, z , и базисные векторы элементарной кристаллической ячейки (a_x, a_y, a_z) направим вдоль соответствующих осей координат. Будем считать, что поверхность вдоль x имеет прямоугольный профиль (рис. 1) с периодом d , соразмерным кристаллической решетке (точнее, d/a_x – целое), а вдоль направления y профиль не меняется. Далее пусть плоскость $z = 0$ совпадает с кристаллографической плоскостью, а вектор \mathbf{H} , отвечающий дифракции на кристаллической решетке, параллелен оси y , т.е. будем исследовать окрестности брэгговских точек ($0k0$).

Распределение поля внутри кристалла описывается уравнением Максвелла:

$$\text{rot rot } \mathbf{E} - K^2 \mathbf{E} = K^2 \frac{4\pi i}{\omega} \mathbf{j}, \quad (1)$$

где $K = \omega/c$, $\frac{4\pi i}{\omega} \mathbf{j} = \chi \mathbf{E}$, \mathbf{j} – плотность тока, обусловленного поляризацией в электромагнитном поле, $\chi(\mathbf{r})$ – восприимчивость кристалла. Волновой вектор падающей волны равен $\mathbf{K} = \mathbf{K}_{\parallel} - K_z \mathbf{n}$, где \mathbf{n} – нормаль к поверхности, направленная вне кристалла, \mathbf{K}_{\parallel} – тангенциальная компонента в.в.

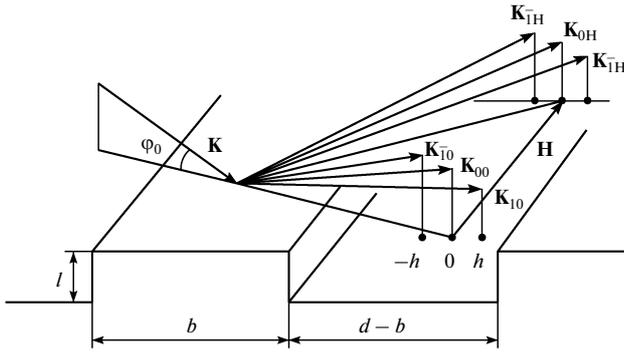


Рис. 1. Геометрия волн при скользящей некомпланарной дифракции на кристалле с ПР.

В обратном пространстве помимо узлов обратной кристаллической решетки имеются узлы обратной ПР, которые смещены относительно первых на векторы, кратные базисному вектору $\mathbf{h} = \left(\frac{2\pi}{d}, 0, 0\right)$. Вектор дифракции на кристаллической решетке $\mathbf{H} = (0, H, 0)$ перпендикулярен вектору \mathbf{h} . Представим поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и восприимчивость $\chi(\mathbf{r})$ в виде разложения по векторам обратных решеток кристаллического слоя \mathbf{G}_{\parallel} и поверхностно-профиля $p\mathbf{h}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{K}_{\parallel}\rho) \sum_{\mathbf{Q}} \mathbf{E}_{\mathbf{Q}}(z) \exp(i\mathbf{Q}\rho), \\ \chi(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{Q}} \chi_{\mathbf{Q}}(z) \exp(i\mathbf{Q}\rho), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\mathbf{r} = \rho + z\mathbf{n}$, $\mathbf{Q} = \mathbf{G}_{\parallel} + p\mathbf{h}$, p – целое. Вектор \mathbf{Q} , как и векторы \mathbf{h} и \mathbf{G}_{\parallel} , лежит в плоскости $z = 0$. Отметим, что в $\chi_{\mathbf{Q}}(z)$ учтена через вектор \mathbf{Q} периодичность обеих решеток (кристаллической и поверхностной), а под зависимостью от z будем понимать изменение средней плотности материала с изменением z (этот подход аналогичен принятому в [11]).

Рассматриваемую систему, в которой распространяются электромагнитные волны, разобьем на три области: вакуум (I), область поверхностного рельефа (II) и собственно кристалл (III). Соответственно восприимчивость запишем в виде

$$\chi(\rho, z) = \begin{cases} 0, & z \geq 0 \\ s(x)\chi^{\infty}(\rho), & 0 > z \geq -l, \\ \chi^{\infty}(\rho), & -l > z \end{cases} \quad (3)$$

где l – высота одномерного профиля, $\chi^{\infty}(\rho)$ – восприимчивость бесконечного объемного кристалла, в которой опущена несущественная для данной задачи зависимость от z . Функция $s(x)$ в (3) описывает форму поверхности и принимает значение 1 внутри материала рассеивателя и 0 – в вакууме.

Уравнение (1) после соответствующих преобразований в каждой отдельной области сводится к системе линейных однородных дифференциальных уравнений для компонент вектора $\mathbf{E}_{\mathbf{Q}}(z)$. Решения этих уравнений ищем в виде плоских волн $\mathbf{E}_{\mathbf{Q}}(z) = \mathbf{E}_{\mathbf{Q}} e^{-ik_{Qz}z}$, что приводит к следующей системе для амплитуд:

$$\begin{aligned} \frac{k_{\mathbf{Q}z}^2(z) - K^2}{K^2} \mathbf{E}_{\mathbf{Q}}(z) &= \frac{(\mathbf{k}_{\mathbf{Q}}(z), \mathbf{E}_{\mathbf{Q}}(z))}{K^2} \mathbf{k}_{\mathbf{Q}}(z) + \\ &+ \sum_{\mathbf{Q}'} \chi_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'}(z) \mathbf{E}_{\mathbf{Q}'}(z), \end{aligned} \quad (4)$$

где зависимость от z в величинах, входящих в уравнение, подразумевается в том смысле, что

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\mathbf{Q}}(z) &= \begin{cases} \mathbf{E}_{\mathbf{Q}}, & 0 > z > -l, \\ \tilde{\mathbf{E}}_{\mathbf{Q}}, & -l > z, \end{cases} \\ \mathbf{k}_{\mathbf{Q}}(z) &= \mathbf{K}_{\mathbf{Q}\parallel} - \mathbf{n} \begin{cases} k_{Qz}, & 0 > z > -l, \\ \tilde{k}_{Qz}, & -l > z, \end{cases} \end{aligned}$$

где $\mathbf{K}_{\mathbf{Q}\parallel} = \mathbf{K}_{\parallel} + \mathbf{Q}$, и величины для области III помечены значком тильда.

Рассмотрим σ – поляризованную падающую волну (\mathbf{E} лежит в плоскости падения). Тогда условие $\text{div}\mathbf{D}(\mathbf{r}) = 0$ приводит к соотношению

$$(\mathbf{k}_{\mathbf{Q}}, \mathbf{E}_{\mathbf{Q}}) = - \left(\mathbf{k}_{\mathbf{Q}}, \sum_{\mathbf{Q}'} \chi_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} \mathbf{E}_{\mathbf{Q}'} \right) \approx -k_{Qz} \sum_{\mathbf{Q}'} \chi_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} E_{\mathbf{Q}'},$$

подставив которое в (4) и пренебрегая первым слагаемым в правой части уравнения (оно в $k_{Qz}/K \approx \Phi_0 \ll 1$ раз меньше второго слагаемого), приходим к следующей системе скалярных уравнений для фурье-компонент $E_{\mathbf{Q}}(z)$:

$$\frac{k_{\mathbf{Q}z}^2(z) - K^2}{K^2} E_{\mathbf{Q}}(z) = \sum_{\mathbf{Q}'} \chi_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'}(z) E_{\mathbf{Q}'}(z). \quad (5)$$

Вследствие непрерывности тангенциальных компонент в.в. на границе раздела областей I и II справедливо равенство $k_{\mathbf{Q}z}^2 - K^2 = k_{Qz}^2 - K_{Qz}^2$. Величины k_{Qz} определяются из дисперсионного уравнения – условия существования решения системы (5). С компонентами k_{Qz} связаны модули векторов $\mathbf{k}_{\mathbf{Q}}$ волн в кристалле:

$$k_{Qz} = \begin{cases} \pm\sqrt{k_{\mathbf{Q}}^2 - K_{\mathbf{Q}\parallel}^2}, & k_{\mathbf{Q}}^2 \geq K_{\mathbf{Q}\parallel}^2 \\ \pm i\sqrt{K_{\mathbf{Q}\parallel}^2 - k_{\mathbf{Q}}^2}, & k_{\mathbf{Q}}^2 < K_{\mathbf{Q}\parallel}^2. \end{cases} \quad (6)$$

В области II учитываются оба знака перед корнем в (6), а в области III необходимо выбирать знак “+”, чтобы прошедшая волна затухала при $z \rightarrow -\infty$.

Как следует из (5), амплитуды $E_{\mathbf{Q}}(z)$ принимают заметные значения для тех \mathbf{Q} , для которых малы разности $k_{\mathbf{Q}}^2 - K^2$. При скользящем падении рентгеновских лучей это возможно, если $\mathbf{G}_{\parallel} = \mathbf{0}$, \mathbf{H} ,

причем \mathbf{H} удовлетворяет условию брэгговской дифракции, т.е. вектор \mathbf{Q} равен $\mathbf{Q} = p\mathbf{h} + q\mathbf{H}$, где $q = 0, 1$, а индекс p принимает целочисленные значения. Соответственно для Фурье-компонент восприимчивости в области II получим

$$\chi_{\mathbf{Q}}^{\text{II}} \equiv \chi_{pq}^{\text{II}} = \frac{1}{L_x L_y} \int dx \int dy s(x) \chi^{\infty}(x, y) \times \exp \left[-i \left(2\pi \frac{px}{d} + qHy \right) \right],$$

после интегрирования в плоскости xu по образцу размером $L_x \times L_y$ будем иметь

$$\chi_{pq}^{\text{II}} = \frac{\sin \pi p s_0}{\pi p} \chi_q^{\infty}, \quad (7)$$

где $s_0 = b/d$ – относительная плотность материала в области II. Равенство (7) получается в предположении $|p| \ll \frac{d}{a_x}$, которое справедливо для реальных решеток и гармоник p , актуальных в процессе рассеяния. При $p = 0$ это равенство дает среднюю фурье-компоненту восприимчивости $\chi_{0q}^{\text{II}} = s_0 \chi_q^{\infty}$.

Перепишем (5) в виде двух уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{k_{p0}^2 - K^2}{K^2} E_{p0}(z) &= \\ &= \sum_{p'} [\chi_{p-p',0}(z) E_{p'0}(z) + \chi_{p-p',\bar{H}}(z) E_{p'H}(z)], \\ \frac{k_{pH}^2 - K^2}{K^2} E_{pH}(z) &= \\ &= \sum_{p'} [\chi_{p-p',H}(z) E_{p'0}(z) + \chi_{p-p',0}(z) E_{p'H}(z)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь и в дальнейшем для индекса $q = 1$ используется обозначение H , например $\chi_{p1} \equiv \chi_{pH}$.

Поскольку в областях II и III, для которых записаны уравнения (8), зависимость восприимчивости от z отсутствует, аргумент z при фурье-амплитудах напряженности опущен. Вводя безразмерную z -компоненту в.в. прошедшей волны $u = \frac{k_{00,z}}{K}$ и параметр $\alpha = \frac{k_{0H}^2 - k_{00}^2}{K^2} = -2\Delta\theta \sin 2\theta_B$, описывающий, как известно, отклонение $\Delta\theta$ падающего луча от брэгговского угла в плоскости xu [1, 2], будем иметь следующие выражения для резонансных факторов в уравнениях (8):

$$\begin{aligned} \frac{k_{p0}^2 - K^2}{K^2} &= \frac{|\mathbf{k}_{00} + p\mathbf{h}|^2 - K^2}{K^2} \approx u^2 - \Phi_0^2 + p\beta, \\ \frac{k_{pH}^2 - K^2}{K^2} &= \frac{|\mathbf{k}_{0H} + p\mathbf{h}|^2 - K^2}{K^2} \approx u^2 - \Phi_0^2 + \alpha + p\beta, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\beta = \frac{2h}{K} \cos \theta_B$. В итоге уравнения (8) приводят к следующему виду:

$$\begin{aligned} (w - p\beta)E_{p0} + \sum_{p'(\neq p)} \chi_{p-p',0} E_{p'0} + \sum_{p'} \chi_{p-p',\bar{H}} E_{p'H} &= 0, \\ (w - \alpha - p\beta)E_{pH} + \\ + \sum_{p'} \chi_{p-p',H} E_{p'0} + \sum_{p'(\neq p)} \chi_{p-p',0} E_{p'H} &= 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где $w = \Phi_0^2 - u^2 + \chi_{00}$. Эта система однородных уравнений относительно E_{p0}, E_{pH} имеет решение при определенных значениях w и соответственно u , вычисляемых из дисперсионного уравнения порядка $2P$ (P – число учитываемых гармоник p).

РАСЧЕТ ИНТЕНСИВНОСТИ СКОЛЬЗЯЩЕЙ ДИФРАКЦИИ

В области II решение для поля $E(\mathbf{r})$ будем искать в виде блоховской волны, причем в разложении (2) ограничимся приближенной записью, оставив кроме прошедшей волны E_{00} с в.в. \mathbf{k}_{00} две ближайшие гармоники с в.в. $\mathbf{k}_{\bar{1}0} = \mathbf{k}_{00} - \mathbf{h}$, $\mathbf{k}_{10} = \mathbf{k}_{00} + \mathbf{h}$ и волны, которые образованы из $\mathbf{k}_{00}, \mathbf{k}_{10}, \mathbf{k}_{\bar{1}0}$ дифракцией на вектор $\mathbf{H} = (0, H, 0)$. В итоге для поля в области II будем иметь шесть компонент:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_{00}\mathbf{r}} \left(E_{00} + E_{0H} e^{iHr} + E_{\bar{1}0} e^{-ihr} + \right. \\ \left. + E_{\bar{1}H} e^{i(\mathbf{H}-\mathbf{h})\mathbf{r}} + E_{10} e^{ihr} + E_{1H} e^{i(\mathbf{H}+\mathbf{h})\mathbf{r}} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Чтобы обеспечить выполнение граничных условий на границе раздела I–II, поле в вакууме также нужно представить шестью волнами (рис. 1), которые имеют те же тангенциальные компоненты в.в., что и волны в области II (рис. 2). Учитывая перечисленные гармоники в (10), получим следующее дисперсионное уравнение в матричном виде:

$$\begin{vmatrix} w & \chi_{0\bar{H}} & \chi_{\bar{1}0} & \chi_{\bar{1}\bar{H}} & \chi_{10} & \chi_{1\bar{H}} \\ \chi_{0H} & w - \alpha & \chi_{\bar{1}H} & \chi_{\bar{1}0} & \chi_{1H} & \chi_{10} \\ \chi_{10} & \chi_{1\bar{H}} & w - \beta & \chi_{0\bar{H}} & \chi_{20} & \chi_{2\bar{H}} \\ \chi_{1H} & \chi_{10} & \chi_{0H} & w - \beta - \alpha & \chi_{2H} & \chi_{20} \\ \chi_{\bar{1}0} & \chi_{\bar{1}\bar{H}} & \chi_{\bar{2}0} & \chi_{\bar{2}\bar{H}} & w + \beta & \chi_{0\bar{H}} \\ \chi_{\bar{1}H} & \chi_{\bar{1}0} & \chi_{\bar{2}H} & \chi_{\bar{2}0} & \chi_{0H} & w + \beta - \alpha \end{vmatrix} = 0. \quad (12)$$

Можно показать, что это уравнение имеет шесть действительных корней w_i ($i = 1, \dots, 6$), которым соответствуют двенадцать значений

$$u_i^{(1,2)} = \pm \sqrt{\Phi_0^2 + \chi_{00} s_0 - w_i}, \quad (13)$$

и соответственно шесть дисперсионных поверхностей.

Рассмотрим геометрию дисперсионных поверхностей для скользящего рассеяния в кристалле с периодическим профилем (рис. 1). Эти поверхности строятся аналогично двухволновому случаю [12], однако центры сфер радиуса nK (n – показатель преломления) располагаются не толь-

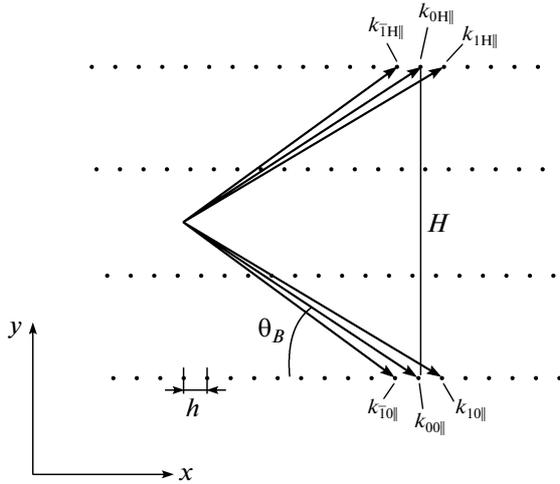


Рис. 2. Тангенциальные компоненты волновых векторов 6-волнового приближения.

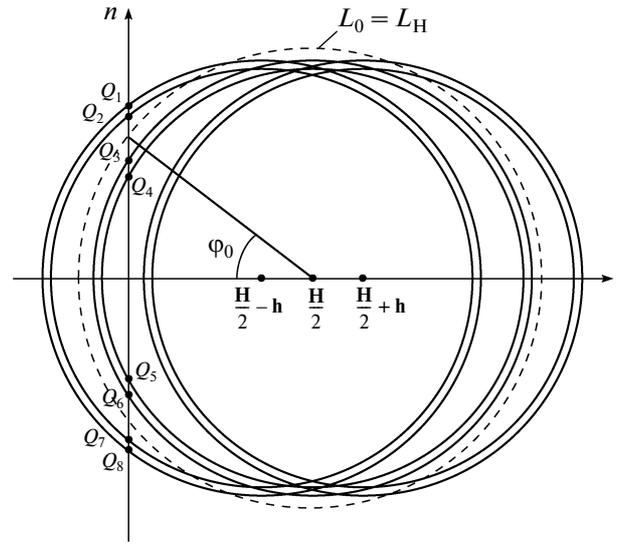


Рис. 3. Дисперсионные поверхности (сплошные линии) и точки возбуждения внутренних (Q_1-Q_4) и внешних (Q_5-Q_8) волн для скользящего рассеяния на ПР. Пунктирная окружность – сечение сфер L_0 и L_H радиуса K [12].

ко в узлах \mathbf{O} и \mathbf{H} , но и в узлах $\mathbf{O} \pm \mathbf{h}$, $\mathbf{H} \pm \mathbf{h}$. Благодаря тому что отношение параметров χ_{pq} и β в дисперсионном уравнении (12) мало $\left(\frac{\chi_{pq}}{\beta}\right) \sim 10^{-3}-10^{-2}$, при качественном анализе можно учитывать взаимодействие гармоник, различающихся вектором \mathbf{H} и не разделенных параметром β или 2β . Это отвечает расщеплению сфер, проведенных из пар узлов (\mathbf{O}, \mathbf{H}) , $(\mathbf{O} - \mathbf{h}, \mathbf{H} - \mathbf{h})$, $(\mathbf{O} + \mathbf{h}, \mathbf{H} + \mathbf{h})$ и связанных через матричный элемент χ_{0H} . Таким образом, если не учитывать менее существенные искажения поверхностей, вызванные другими матричными элементами χ_{pq} , сечение дисперсионных поверхностей плоскостью xz , равноудаленной от узлов \mathbf{O}, \mathbf{H} , в случае чисто брэгговского отражения будет выглядеть, как показано на рис. 3.

Для волн в области III (собственно кристалл) геометрия векторов, согласно граничным условиям, такая же, как в области II. Однако векторы гармоник с $p = \pm 1$ уже не связаны рассеянием на компонентах Фурье χ_{pq} , соответствующих узлам обратной решетки поверхностного рельефа, поскольку такой решетки просто нет. Решения будем искать в виде трех групп волн:

$$\begin{aligned} \tilde{E}(\mathbf{r}) = & e^{i\mathbf{k}_{00}\mathbf{r}}(\tilde{E}_{00} + \tilde{E}_{0H}e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}}) + \\ & + e^{i\mathbf{k}_{10}\mathbf{r}}(\tilde{E}_{10} + \tilde{E}_{1H}e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}}) + e^{i\mathbf{k}_{10}\mathbf{r}}(\tilde{E}_{10} + \tilde{E}_{1H}e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}}). \end{aligned}$$

Поэтому в III система уравнений типа (12) распадается на три независимые подсистемы:

$$\begin{cases} (\tilde{w}_p - p\beta)\tilde{E}_{p0} + \chi_H^\infty \tilde{E}_{pH} = 0, \\ \chi_H^\infty \tilde{E}_{p0} + (\tilde{w}_p - p\beta - \alpha)\tilde{E}_{pH} = 0. \end{cases} \quad (p = 0, \pm 1), \quad (14)$$

где $\tilde{w}_p = \Phi_0^2 + \chi_0^\infty - \tilde{u}_p^2$, $\tilde{u}_p = \frac{\tilde{k}_{p0}^z}{K}$. Приравняв нулю детерминант каждой из систем (14), получим

$$\tilde{w}_p^{(1,2)} = p\beta + \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \chi_H^\infty \chi_H^\infty}.$$

Оставляем решения \tilde{u}_p , которые не возрастают в глубину кристалла:

$$\tilde{u}_p^{(1,2)} = \sqrt{\Phi_0^2 + \chi_0^\infty - \tilde{w}_p^{(1,2)}}. \quad (15)$$

Уравнения для амплитуд поля (10) и (14) теперь необходимо дополнить граничными условиями:

$$\delta_{p0}\delta_{q0}E_0 + E_{pq}^s = \sum_{j=1}^{12} E_{pq}^{(j)}, \quad \text{при } z = 0 \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{pq}(\delta_{p0}\delta_{q0}E_0 - E_{pq}^s) &= \sum_{j=1}^{12} u^{(j)} E_{pq}^{(j)}, \\ \sum_{j=1}^{12} E_{pq}^{(j)} e^{iu^{(j)}Kl} &= \tilde{E}_{pq}^{(1)} + \tilde{E}_{pq}^{(2)}, \end{aligned} \quad \text{при } z = -l \quad (17)$$

где угол выхода Φ_{pq} определяется равенством

$$\Phi_{pq}^2 = \Phi_{00}^2 - p\beta - q\alpha, \quad q = 0, 1, \quad (18)$$

которое при $p = 0, q = 1$ переходит в известное равенство двухволнового приближения для скользящей дифракции: $\Phi_H^2 = \Phi_0^2 - \alpha$ [7, 9].

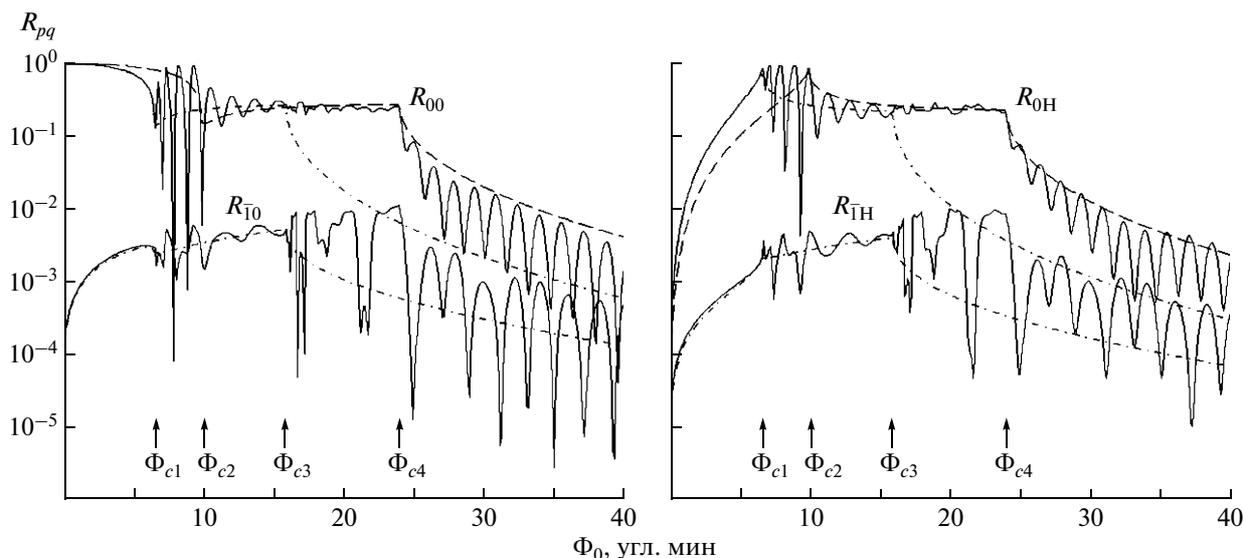


Рис. 4. Интенсивность отраженных волн как функция угла падения Φ_0 при $\alpha = 0$ для (220)-отражения в Ge (сплошные линии – кристалл с решеткой на поверхности; штриховые – гладкий кристалл; штрихпунктирные – поверхностный профиль неограниченной высоты).

Приведем численные результаты решения граничной задачи (16)–(18). На рис. 4 сплошными линиями показаны зависимости от Φ_0 коэффициента отражения

$$R_{pq} = \frac{\Phi_{pq}}{\Phi_0} \left| \frac{E_{pq}^s}{E_0} \right|^2, \quad (19)$$

полученные для четырех компонент 00 , $\bar{1}0$, $0H$ и $\bar{1}H$. В работе анализировалось (220) – отражение в кристалле Ge с направлением $[1\bar{1}0]$, совпадающим с осью x . Одномерный профиль имел геометрические параметры: $d = 15000$, $b = 6600$ и $l = 1500 \text{ \AA}$. Как видим, на всех графиках рис. 4, показанных сплошными линиями, присутствуют осцилляции различной амплитуды. Они обусловлены интерференцией волн, отраженных от верхнего края рельефа и подложки.

С целью более детальной интерпретации кривых отражения от кристалла с ПР рассчитаны две дополнительные задачи. Первая – это отражение от одной гладкой подложки (задача Афанасьева–Мелконян [6]), которое описывается графиками R_{00} и R_{0H} на рис. 4 (пунктирные линии). Вторая задача – отражение от неограниченно высоких выступов ($l \rightarrow \infty$), соответствующие графики показаны штрихпунктирными линиями. На кривых R_{00} , R_{0H} имеются особенности при значениях углов, отвечающих точкам возбуждения на дисперсионных поверхностях:

$$\Phi_{c1} = \sqrt{s_0 (|\chi_{0l}| - |\chi_{Hl}|)}, \quad \Phi_{c3} = \sqrt{s_0 (|\chi_{0l}| + |\chi_{Hl}|)} \quad (20)$$

– углы для точек возбуждения на дисперсионных ветвях в области II (средняя пара окружностей с

центром в точке $\mathbf{H}/2$ на рис. 3). А для области III аналогичные углы выражаются как [6, 10]:

$$\Phi_{c2} = \sqrt{|\chi_{0l}| - |\chi_{Hl}|}, \quad \Phi_{c4} = \sqrt{|\chi_{0l}| + |\chi_{Hl}|}. \quad (21)$$

При малых углах падения $\Phi_0 < \Phi_{c1}$ все волны в области II быстро затухают, не достигая подложки, поэтому кривые для профиля конечной и бесконечной высоты (сплошные и штрихпунктирные) практически совпадают. Значения $\Phi_{c1} < \Phi_0 < \Phi_{c2}$ отвечают случаю, когда на внешней дисперсионной поверхности нулевого порядка возбуждаются волны, которые свободно проходят в область II, а достигнув подложки, практически полностью отражаются от нее. При этом на всех сплошных кривых для зеркально отраженных и зеркально дифрагированных волн имеются осцилляции. Когда $\Phi_0 > \Phi_{c2}$, то начинают возбуждаться волны в подложке, и осцилляции слегка ослабевают. По мере приближения к Φ_{c4} – углу, отвечающему верхней границе области полного внешнего отражения для подложки, осцилляции становятся незначительными. В этом диапазоне нарастает амплитуда прошедших волн. При $\Phi_0 > \Phi_{c4}$ снова появляются осцилляции, поскольку сравниваются по интенсивности волны, отраженные от верхнего края ПР и от подложки. Результирующая кривая (сплошная линия) проходит ниже кривой отражения от гладкой подложки (пунктирная линия).

Расчетные данные на рис. 4 для дифракционных максимумов 00 , $\bar{1}0$, $0H$ и $\bar{1}H$ относятся к приближению шести волн (13), при котором помимо гармоник $p = 0, -1$ учитываются гармоники

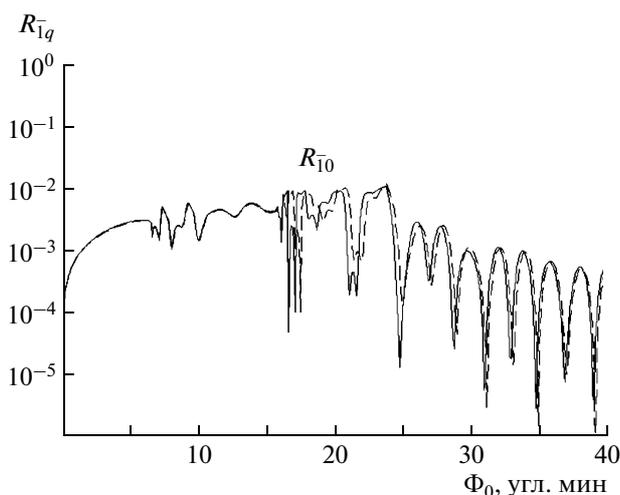


Рис. 5. Сравнение кривых отражения $R_{\bar{T}H}$, рассчитанных в 6-волновом и 4-волновом приближениях (сплошная и штриховая линии соответственно).

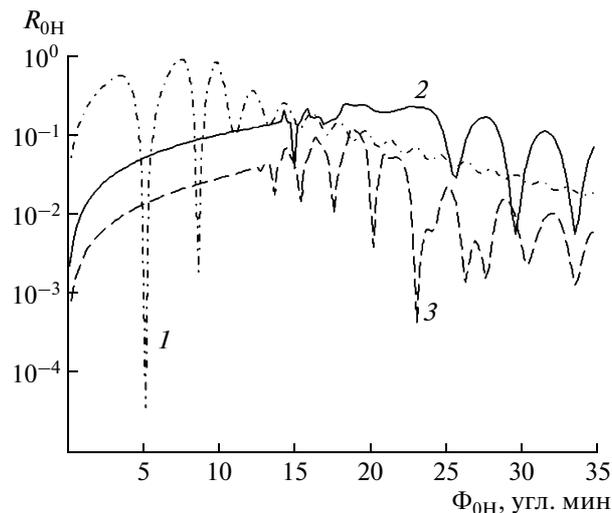


Рис. 6. Зависимость коэффициента отражения R_{0H} от угла выхода Φ_{0H} при различных углах падения Φ_0 : 1 – 10°, 2 – 20°, 3 – 30°.

с $p = 1$. Однако ввиду малости отношений $\left| \frac{\chi_{pq}}{\beta} \right| \ll 1$ последние не сильно влияют на результирующие кривые. Для проверки этого положения, а заодно и для проверки обоснованности 6-волнового приближения были рассчитаны интенсивности максимумов без учета гармоник $p = 1$, т.е. в приближении четырех волн. На рис. 5 в качестве примера приведено сравнение кривых $R_{\bar{T}H}$, полученных в 6- и в 4-волновом приближениях. Расхождение между кривыми имеется только в области углов падения $\Phi_{c3} < \Phi_0 < \Phi_{c4}$. При $\Phi_0 < \Phi_{c3}$ кривые практически совпадают, а при $\Phi_0 > \Phi_{c4}$ различаются мало и ведут себя с изменением Φ_0 одинаково. На рис. 6 приведены расчетные интенсивности в зависимости от угла выхода Φ_{0H} при фиксированном угле падения $I(\Phi_{0H}) = |R_{0H}(\alpha)|^2$ (кривые качания).

Оценим период осцилляций на кривых отражения R_{00} и R_{0H} в области $\Phi_0 > \Phi_{c4}$ (рис. 4). Эти осцилляции обусловлены интерференцией волн, отраженных от верхнего и нижнего краев области II. Разность фаз между отраженными волнами равна [13]:

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi l}{\lambda} n \sin \Phi_i = 2Klu, \quad (22)$$

где Φ_i – угол преломления, отсчитываемый от поверхности. Величину u можно положить $u \approx \Phi_0$, если считать, что дисперсия в рассматриваемой области углов отсутствует. Тогда из условия $\Delta\varphi = 2\pi$ получим оценку для периода осцилля-

ций: $\frac{\lambda}{2l} \sim 5 \times 10^{-4}$, что согласуется с графиками, приведенными на рис. 4.

В случае дисперсии в.в. прошедшей волны расщепляется по нормали к поверхности на несколько компонент. Ограничимся приближением двух сильных волн 00 и $0H$. Таким образом получим расщепление для прошедшей волны на две компоненты с амплитудами $E_{00}^{(1)}$ и $E_{00}^{(2)}$. Для оценки будем считать, что после отражения от подложки и выхода в вакуум каждая из этих компонент получает набег фаз по отношению к отраженной от поверхности $z = 0$, аналогичный (22), где вместо u необходимо подставлять $u^{(j)}$. Однако величины $u^{(j)}$ являются не только функциями угла падения Φ_0 , но и отклонения α от точного брэгговского положения, что объясняет наличие осцилляций на кривых рис. 6. При $\alpha \gg |\chi_H|$, $\Phi_{0H}^2 \gg |\chi_0 s_0|$ и фиксированном Φ_0 получаем $u^{(1)} \approx \sqrt{\Phi_{0H}^2 + \chi_0 s_0} \approx \Phi_{0H}$, $u^{(2)} \approx \sqrt{\Phi_0^2 + \chi_0 s_0} = \text{const}$, т.е. устанавливается шаг осцилляций по углу выхода, аналогичный шагу на графиках рис. 4.

В поведении коэффициента $R_{\bar{T}H}$ (рис. 7) имеется интересная особенность, а именно: при $\alpha = \beta$ вектор выходящей дифрагированной волны $\bar{T}H$ занимает, согласно (18), брэгговское положение для падающего луча: $\Phi_{\bar{T}H} = \Phi_{00}$. Это приводит к значительному усилению внешней волны $E_{\bar{T}H}$, которое наблюдается при отклонениях от брэгговского положения $\Delta\theta \approx -\frac{h}{H} \approx -28''$. Это можно сказать и в случае отклонений $\Delta\theta$ противополож-

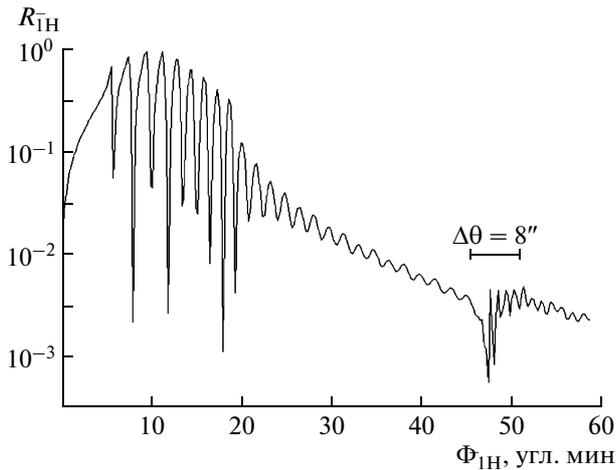


Рис. 7. Зависимость коэффициента отражения $R_{\bar{1}H}$ от угла выхода при фиксированном угле падения $\Phi_0 = 10'$.

ного знака, когда значительно усиливается волна E_{1H} .

На рис. 7 вблизи положения $\alpha = 0$, которой отвечает $\Phi_{\bar{1}H} \approx 48'$, имеется область, соответствующая брэгговскому положению гармоники $\bar{1}H$ по отношению к волне $\bar{1}0$. В этой области шириной $\sim 8''$ наблюдается небольшое увеличение коэффициента отражения, которому предшествует со стороны малых углов резкое понижение $R_{\bar{1}H}$.

Как следует из (18), при скользящем рассеянии (Φ_0 мало) угол выхода Φ_{0H} в сильной степени зависит от α . Поэтому с целью приближения рассматриваемой модели к реальным условиям эксперимента учтена возможная расходимость пада-

ющего пучка. В экспериментах по GID реальными являются значения расходимости порядка нескольких секунд. На рис. 8 сплошными линиями показаны интегральные кривые отражения для пучка с углом расходимости $8''$. На рисунке для сравнения приведены кривые отражения, как и на рис. 4 (пунктирные линии). Из сравнения кривых видим, что осцилляции в области $\Phi_{cl} < \Phi_0 < \Phi_{c3}$ при учете расходимости сглаживаются, и как показал расчет, они вовсе исчезают, когда $|\Delta\theta| \approx 1''$.

ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В работе теоретически исследовано скользящее рассеяние рентгеновских лучей в кристалле, на поверхности которого имеется решетка одномерного прямоугольного профиля. Атомные слои считались перпендикулярными поверхности, а вектор дифракции \mathbf{H} в кристалле располагался параллельно выступам на поверхности. Для нахождения поля внутри кристалла и поля отраженных волн использован подход динамической теории рассеяния, согласно которому рассеянная волна представляется в виде линейной комбинации блоховских волн, удовлетворяющих граничным условиям и получаемых как решения задачи на собственные значения. Показано, что для реально получаемых ПР микронного масштаба и скользящей геометрии рассеяния хорошим приближением является учет дифракции на кристаллической решетке на вектор \mathbf{H} и учет первых порядков дифракции на ПР на векторы $\pm \mathbf{h}$. Это отвечает модели шести волн, которые отличаются на векторы дифракции $\mathbf{Q} = p\mathbf{h} + q\mathbf{H}$ с $p = -1, 0, 1$ и $q = 0, 1$. Учет гармоник более высоких порядков

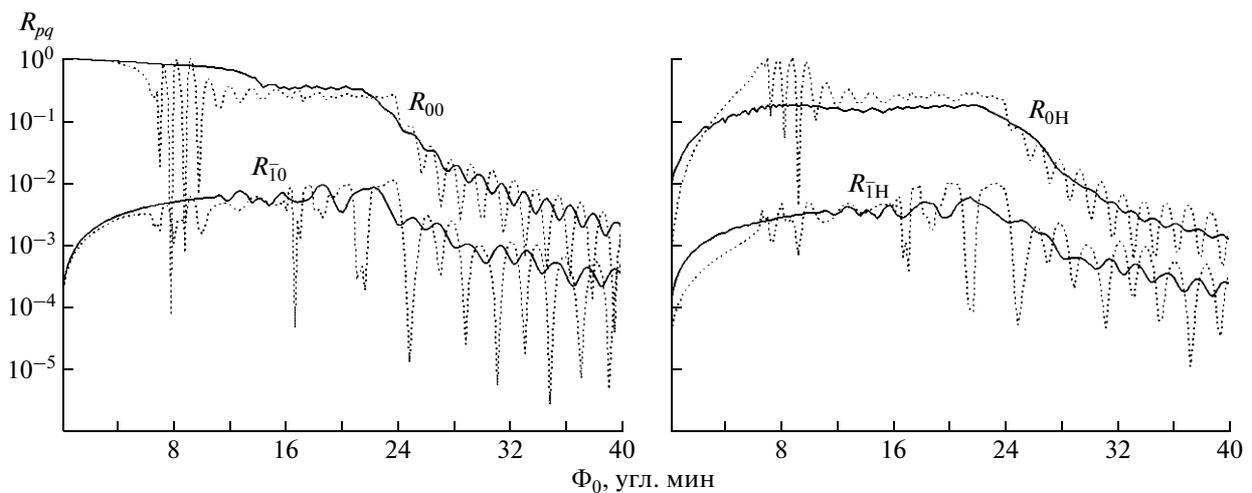


Рис. 8. Интегральная интенсивность отраженных волн как функция угла падения Φ_0 при разных значениях угловой расходимости падающего пучка: сплошные линии – интегрирование в пределах $-4'' \leq \Delta\theta \leq 4''$; пунктирные – нулевая расходимость ($\Delta\theta = 0$).

дает поправку к рассматриваемым волнам на уровне отношения $|\chi_{pq}/\beta|$. Вследствие малости этого отношения шесть дисперсионных поверхностей в области точек возбуждения внутренних волн располагаются парами, причем каждая пара близких поверхностей отвечает различным значениям p (рис. 5). Благодаря сложной конфигурации дисперсионных поверхностей в системе имеется множество критических углов (по два критических угла для каждой пары p), и это приводит к особенностям в поведении амплитуд рассеяния.

В предположении узкого падающего пучка получены графики интенсивности отражения порядков 00 , $\bar{1}0$, $0H$ и $\bar{1}H$ в зависимости от угла падения Φ_0 (кривые качания) и кривые сканирования по углу выхода при фиксированном Φ_0 . Полученные кривые можно качественно понять путем построения дисперсионных поверхностей для скользящей геометрии падающих лучей. Характерным для всех типов дифракционных кривых (качания и сканирования) является наличие в определенных интервалах углов Φ_0 осцилляций, которые обусловлены интерференцией волн, отраженных от верхнего края рельефа и от подложки. Этих осцилляций нет при углах падения $\Phi_0 < \Phi_{c1}$ (все волны затухают, не достигая подложки), и они ослаблены при $\Phi_{c3} < \Phi_0 < \Phi_{c4}$ (волны эффективно возбуждаются в подложке, отражение от подложки слабое).

Исследование поведения коэффициента отражения $R_{\bar{1}H}$ при отклонении падающего луча от положения Брэгга показало, что интенсивность отражения резко возрастает при $\alpha = \beta$, т.е. когда вектор дифрагированной волны $\bar{1}H$ занимает брэгговское положение для падающего луча: $\Phi_{\bar{1}H} = \Phi_{00}$.

При учете угловой расходимости падающего пучка в плоскости, параллельной поверхности, кривые зависимости интенсивности отражения от угла падения видоизменяются, т.е. происходит сглаживание осцилляций в диапазоне углов $\Phi_{c1} < \Phi_0 < \Phi_{c3}$. Это сглаживание проявляется при углах расходимости порядка нескольких секунд и тем сильнее выражено, чем более неидеален рентгеновский пучок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М.: Наука, 1989. 152 с.
2. Pietsch U., Holy V., Baumbach T. High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers. New York: Springer Verlag, 2004. 408 p.
3. Vineyard G.H. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. P. 4146.
4. Kaganer V.M., Stepanov S.A., Köhler R. // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 16369.
5. Baumbach G.T., Tixier S., Pietsch U., Holy V. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 16848.
6. Afanas'ev A.M., Melkonyan M.K. // Acta Cryst. A. 1983. V. 39. P. 207.
7. Ulyanekov A.P., Stepanov S.A., Pietsch U., Köhler R. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1995. V. 28. P. 2522.
8. Бушувев В.А., Орешко А.П. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтр. исслед. 2002. № 1. С. 67.
9. Пунегов В.И. Теория рассеяния рентгеновских лучей на латеральных структурах. Сыктывкар: Изд-во Сыктывкар. ун-та, 2007. 220 с.
10. Tolan M., Press W., Brinkop F., Kotthaus J.P. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 2239.
11. Mikulik P., Baumbach T. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 7632.
12. Durbin M., Gog T. // Acta Cryst. A. 1989. V. 45. P. 132.
13. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с.