

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ В СКОЛЬЗЯЩЕЙ НЕКОМПЛАНАРНОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МНОГОСЛОЙНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

© 2023 г. В. А. Бушуев¹, А. П. Орешко^{1,*}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 10.01.2023 г.

После доработки 10.01.2023 г.

Принята к публикации 18.01.2023 г.

Рассмотрено зеркальное отражение рентгеновских лучей от многослойных кристаллических структур на поверхности монокристалла в условиях скользящей некомпланарной дифракции. Получены рекуррентные соотношения нового типа. Показана высокая чувствительность угловой зависимости интенсивности зеркального отражения в области дифракции к толщинам и числу слоев, их деформации и степени аморфизации.

DOI: 10.31857/S0023476123700091, EDN: XARZAZ

ВВЕДЕНИЕ

Дифракция рентгеновских лучей на кристаллических плоскостях, почти перпендикулярных поверхности, в условиях скользящего падения широко используется для диагностики приповерхностных слоев монокристаллов [1]. Так как падающий и дифрагированный пучки составляют малые углы с поверхностью, близкие к области полного внешнего отражения, то глубина проникновения излучения в кристалл из-за эффекта зеркального отражения (ЗО) резко уменьшается, что позволяет исследовать ультратонкие слои и пленки толщиной 1–10 нм и больше.

Теория скользящей дифракции развивалась вначале для простейших случаев идеального кристалла [2, 3], кристалла с однородной аморфной [4, 5] и кристаллической пленкой (бикристалл) [6], кристаллической пленки на аморфной подложке [1, 7]. В дальнейшем для анализа скользящей дифракции в кристаллах с меняющимися по глубине параметрами развивались кинематическое приближение теории дифракции [8, 9], метод рекуррентных соотношений [10], а также различные разновидности матричных методов [11–14].

Внимание во всех работах по данной теме уделялось анализу лишь дифракционного отражения рентгеновских лучей и совершенно не исследовалась угловая зависимость интенсивности ЗО. В многочисленных работах по этой проблеме изучали в основном влияние ЗО на процесс дифрак-

ции и оставляли без внимания другой не менее интересный эффект – влияние дифракции на ЗО. Вместе с тем, как впервые было кратко отмечено в [15], а затем подробно рассмотрено теоретически [16] и обнаружено экспериментально [17, 18], угловое поведение ЗО в области дифракции при фиксированном угле скольжения весьма заметно зависит от наличия и толщины ультратонкой аморфной пленки на поверхности. В [19] в двухволновом приближении теории дифракции было рассмотрено ЗО рентгеновских лучей от многослойных аморфных и кристаллических структур на поверхности монокристалла в условиях скользящей некомпланарной дифракции.

В настоящей работе на основе рекуррентных соотношений нового типа построена точная теория ЗО от многослойных кристаллических структур в условиях скользящей брэгговской дифракции рентгеновских лучей и показана высокая чувствительность кривых ЗО к параметрам многослойных кристаллических структур.

МНОГОСЛОЙНАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

Рассмотрим задачу о зеркальном и дифракционном отражении плоской монохроматической рентгеновской волны $E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r})$ от многослойной структуры (МС), состоящей из N плоскопараллельных кристаллических слоев с толщинами d_n , фурье-компонентами поляризуемости χ_{0n} , χ_{ln}

и векторами обратной решетки $\mathbf{h}_n$, на кристаллической подложке. Излучение падает из вакуума под произвольным углом скольжения φ_0 по отношению к поверхности так, что одновременно имеет место дифракционное отражение от атомно-кристаллических плоскостей, составляющих произвольный угол ψ_n по отношению к нормали $\mathbf{n}$ к поверхности, направленной в глубь многослойной структуры вдоль оси z .

Точное решение задачи динамической дифракции возможно лишь при условии равенства тангенциальных (вдоль границы раздела слоев) компонент векторов обратной решетки каждого из слоев МС $h_{nt} = h_n$, т.е. в случае когерентного сопряжения атомно-кристаллических плоскостей на границах раздела. В противном случае необходим анализ интерференции многократно рассеянного излучения, состоящего в пленке из бесконечного набора плоских волн [6, 20].

Условие $h_{nt} = h_n$, или эквивалентное ему равенство $h \cos \psi = h_n \cos \psi_n$, накладывает ограничение на допустимые углы скоса отражающих плоскостей слоев ψ_n : $\cos \psi_n = (1 + \delta_n) \cos \psi$, где $\delta_n = \Delta a_n / a_0$ — деформация n -го слоя МС, ψ — угол наклона атомно-кристаллических плоскостей подложки.

Поле над поверхностью МС состоит из падающей, зеркально-отраженной и дифрагированной волн с амплитудами E_0 , E_S и E_h соответственно:

$$\mathbf{E}_{vac}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + \mathbf{E}_S \exp(i\mathbf{k}_S \mathbf{r}) + \mathbf{E}_h \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_S$ и $\mathbf{k}_h$ — волновые векторы падающей, зеркально-отраженной и дифрагированной волн соответственно, причем $|\mathbf{k}_0| = k_0$, где $k_0 = 2\pi/\lambda$ — длина волнового вектора в вакууме, а λ — длина волны.

Падающая рентгеновская волна возбуждает в подложке когерентную суперпозицию проходящей и дифрагированной волн:

$$\mathbf{E}_{cr}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}_0 \exp(i\mathbf{q}_0 \mathbf{r}) + \mathbf{D}_h \exp(i\mathbf{q}_h \mathbf{r}), \quad (2)$$

где D_0 и D_h — амплитуды, $\mathbf{q}_0 = \mathbf{k}_0 + k_0 \epsilon \mathbf{n}$ и $\mathbf{q}_h = \mathbf{q}_0 + \mathbf{h}$ — волновые векторы проходящей и дифрагированной волн в кристалле-подложке соответственно, а $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки кристалла-подложки. Величина ϵ находится из решения дисперсионного уравнения динамической теории дифракции, которое в общем случае является уравнением четвертой степени [16, 17].

В случае кристаллического слоя конечной толщины при решении дисперсионного уравнения нужно учитывать все четыре корня, поэтому в общем случае поле в произвольном n -м слое состоит из четырех проходящих и четырех дифрагированных волн:

$$\mathbf{E}_f^n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^4 \mathbf{A}_{0j}^n \exp(i\mathbf{a}_{0j}^n \mathbf{r}) + \sum_{j=1}^4 \mathbf{A}_{hj}^n \exp(i\mathbf{a}_{hj}^n \mathbf{r}), \quad (3)$$

где A_{0j}^n , A_{hj}^n — амплитуды, $\mathbf{a}_{0j}^n = \mathbf{k}_0 + k_0 \epsilon_{nj} \mathbf{n}$, $\mathbf{a}_{hj}^n = \mathbf{a}_{0j}^n + \mathbf{h}_n$ — волновые векторы проходящих и дифрагированных волн в n -м слое.

Условия непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей на границе раздела n -го и $n+1$ -го слоев для волн, возбужденных падающим излучением, приводят к следующей системе граничных условий (координата z в каждом n -м слое отсчитывается от его верхней границы, нумерация слоев ведется сверху вниз от границы вакуум—пленка):

$$A_{01}^n \sum_{j=1}^4 Q_j^n g_j^n = A_{01}^{n+1} \sum_{j=1}^4 Q_j^{n+1}, \quad (4.1)$$

$$A_{01}^n \sum_{j=1}^4 \Gamma_{f0j}^n Q_j^n g_j^n = A_{01}^{n+1} \sum_{j=1}^4 \Gamma_{0j}^{n+1} Q_j^{n+1}, \quad (4.2)$$

$$A_{01}^n \sum_{j=1}^4 R_j^n Q_j^n g_j^n \tau^n = A_{01}^{n+1} \sum_{j=1}^4 R_j^{n+1} Q_j^{n+1}, \quad (4.3)$$

$$A_{01}^n \sum_{j=1}^4 \Gamma_{hj}^n R_j^n Q_j^n g_j^n \tau^n = A_{01}^{n+1} \sum_{j=1}^4 \Gamma_{hj}^{n+1} R_j^{n+1} Q_j^{n+1}, \quad (4.4)$$

где Q_j^n — коэффициенты, связывающие амплитуды проходящих волн для различных решений дисперсионного уравнения в n -м слое: $A_{0j}^n = Q_j^n A_{01}^n$ ($Q_1^n = 1$), $g_j^n = \exp(ik_0 \Gamma_{0j}^n d_n)$, $\tau^n = \exp(-ik_0 \Psi_{Bn} d_n)$ — коэффициенты, учитывающие изменение фазы волн и их поглощение при распространении в n -м слое;

$$\gamma_0 = \sin \varphi_0, \quad \gamma_{h0} = \gamma_0 - \Psi_{Bn}, \quad \Gamma_{0j}^n = \gamma_0 + \epsilon_{nj}, \\ \Gamma_{hj}^n = \gamma_{h0n} + \epsilon_{nj},$$

а $\Psi_{Bn} = 2 \sin \psi_n \sin \vartheta_B$ — эффективный параметр наклона отражающих плоскостей.

Разделив уравнения (4.1)–(4.3) на (4.1), получим рекуррентную связь для коэффициентов Q_j^n в соседних слоях:

$$Q_2^n = -[T_{31}(T_{23}T_{14} - T_{24}T_{13}) + T_{33}(T_{24}T_{11} - T_{21}T_{14}) + T_{34}(T_{21}T_{13} - T_{23}T_{11})](g_1^n/g_2^n)/Q_0, \quad (5.1)$$

$$Q_3^n = -[T_{31}(T_{24}T_{12} - T_{22}T_{14}) + T_{32}(T_{21}T_{14} - T_{24}T_{11}) + T_{34}(T_{22}T_{11} - T_{21}T_{12})](g_1^n/g_3^n)/Q_0, \quad (5.2)$$

$$Q_4^n = -[T_{31}(T_{22}T_{13} - T_{23}T_{12}) + T_{32}(T_{23}T_{11} - T_{21}T_{13}) + T_{33}(T_{21}T_{12} - T_{22}T_{11})](g_1^n/g_4^n)/Q_0, \quad (5.3)$$

где введены обозначения

$$Q_0 = T_{32}(T_{23}T_{14} - T_{24}T_{13}) + T_{33}(T_{24}T_{12} - T_{22}T_{14}) + \\ + T_{34}(T_{22}T_{13} - T_{23}T_{12}),$$

$$T_{li} = \sum_{j=1}^4 (\Gamma_{0i}^n - \Gamma_{0j}^{n+1}) Q_j^{n+1},$$

$$T_{2i} = \sum_{j=1}^4 (R_i^n \tau^n - R_j^{n+1}) Q_j^{n+1},$$

$$T_{3i} = \sum_{j=1}^4 (\Gamma_{hi}^n R_i^n \tau^n - \Gamma_{hj}^{n+1} R_j^{n+1}) Q_j^{n+1}.$$

Амплитудные коэффициенты зеркального $R_S = E_S/E_0$ и дифракционного $R_h = E_h/E_0$ отражений от МС примут вид

$$R_S = \frac{\sum_{j=1}^4 (\gamma_0 - \Gamma_{0j}^1) Q_j^1}{\sum_{j=1}^4 (\gamma_0 + \Gamma_{0j}^1) Q_j^1}, \quad (6.1)$$

$$R_h = 2\gamma_0 \frac{\sum_{j=1}^4 R_j^1 Q_j^1}{\sum_{j=1}^4 (\gamma_0 + \Gamma_{0j}^1) Q_j^1}. \quad (6.2)$$

Кривая дифракционного отражения (КДО) $P_h(\Delta\vartheta) = (\sin\varphi_h/\sin\varphi_0)|R_h|^2$. Угол выхода дифрагированного излучения φ_h определяется из условия $\sin\varphi_h = -k_{hz}/k_0$. Так как нормальная компонента $k_{hz} = -(k_0^2 - k_{ht}^2)^{1/2}$, где $k_{ht} = k_{0t} + h_t$ – проекция на поверхность МС, то углы выхода φ_h не зависят от номера слоя и определяются выражением $\sin\varphi_h = [(\gamma_0 - 2\sin\psi\sin\vartheta_B)^2 + \alpha]^{1/2}$.

Область над МС и подложку удобно рассматривать как слои с номерами $n = 0$ и $n = N + 1$. Соотношения (5) решаются последовательно снизу вверх. Так как в подложке распространяются только две проходящие и две дифрагированные волны, то граничные условия, необходимые для решения (5), примут вид $Q_3^{N+1} = Q_4^{N+1} = R_3^{N+1} = R_4^{N+1} = 0$, $Q_i^{N+1} = Q_{0i}^{N+1} g_i$, $R_i^{N+1} = R_{0i} \tau_c$, где R_{0i} – амплитудный коэффициент дифракционного отражения от подложки, Q_{0i}^{N+1} – коэффициенты, связывающие амплитуды проходящих волн для различных решений дисперсионного уравнения в подложке $A_{0i}^{N+1} = Q_{0i}^{N+1} A_{01}^{N+1}$ ($i = 1, 2$); $\tau_c = \exp(-ik_0\psi_B d_N)$, $g_i = \exp(-ik_0\Gamma_{0i} d_N)$. При этом коэффициент Q_{02}^{N+1} определяется из решения уравнения

$$\sum_{j=1}^4 (\gamma_h + \Gamma_{hj}^1) R_j^1 Q_j^1 = 0, \quad (7)$$

где коэффициенты Q_j^1 с помощью рекуррентных соотношений (5) нужно выразить через Q_{02}^{N+1} .

Соотношения (5) являются новым типом рекуррентных соотношений в теории дифракции и в отличие от формул Дарвина [21] и Колпакова [22] позволяют вычислять амплитуды волн во всех слоях. Действительно, для нахождения амплитуд волн в каждом слое достаточно воспользоваться уравнением (4.1) с граничным условием

$$A_{01}^1 = \frac{2\gamma_0}{\sum_{j=1}^4 (\gamma_0 + \Gamma_{0j}^1) Q_j^1} E_0, \quad (8)$$

где предварительно нужно определить коэффициенты Q_j^1 .

Для оценки общности полученных соотношений (5) рассмотрим, как и ранее, хорошо известные частные случаи.

1. В случае МС, состоящей из аморфных слоев, в каждом слое будут распространяться только две, проходящая и зеркально отраженная от нижней границы слоя, волны, возбужденные падающим излучением. Пусть это будут волны с амплитудами A_{01}^n и $A_{02}^n = Q_2^n A_{01}^n$, при этом коэффициент Q_2^n связывает амплитуды проходящей и зеркально отраженной волн. Тогда $Q_3^n = Q_4^n = 0$, а из граничных условий следует, что и $T_{2i} = T_{3i} = T_{13} = T_{14} = 0$.

В итоге получим известное [23] рекуррентное соотношение:

$$Q_2^n = \frac{r_{n,n+1} + Q_2^{n+1}}{1 + r_{n,n+1} Q_2^{n+1}} (g_1^n)^2, \quad (9)$$

где $r_{n,n+1} = (\Gamma_{f01}^n - \Gamma_{f01}^{n+1})/(\Gamma_{f01}^n + \Gamma_{f01}^{n+1})$ – френелевские коэффициенты отражения от границы раздела слоев с индексами n и $n + 1$ и учтена связь, возникающая для нормальных компонент волновых векторов волн, распространяющихся в аморфной среде: $\Gamma_{01}^n = -\Gamma_{02}^n = (\gamma_0^2 + \chi_{0n})^{1/2}$.

2. В случае больших углов скольжения $\varphi_{0,h} > (2-3)\varphi_c$, когда можно пренебречь влиянием ЗО на дифракционное отражение, в каждом слое кристаллической МС распространяются только две проходящие и две дифрагированные волны. Пусть это будут волны с амплитудами A_{01}^n и $A_{02}^n = Q_2^n A_{01}^n$. Тогда $Q_3^n = Q_4^n = 0$, а из граничных условий следует, что $T_{li} = T_{3i} = 0$.

Для коэффициентов Q_2^n , связывающих амплитуды проходящих волн в каждом слое, получим рекуррентные соотношения вида [19]:

$$Q_2^n = -[(u_{n1} - w_{n+1})/(u_{n2} - w_{n+1})](g_1^n/g_2^n), \quad (10)$$

где

$$u_{nj} = t^n R_j^n(1+), \quad w_{n+1} = R_1^{n+1} + R_2^{n+1} Q_2^{n+1}.$$

Соотношения (10) разрешаются начиная с нижнего слоя с граничными условиями $Q_2^{N+1} = 0$, $g_j^0 = 1$, $R_1^{N+1} = R_0 \tau_c$, где R_0 – амплитудный коэффициент дифракционного отражения от подложки.

Использование общих соотношений (5), (6) для описания картины зеркального и дифракционного отражения от кристаллической МС встречает определенные трудности, возникающие из-за необходимости разрешения (7) для нахождения граничного условия Q_2^{N+1} в кристаллической подложке. В связи с этим для описания зеркального и дифракционного отражения от кристаллической МС более удобным оказывается иной способ, впервые предложенный для описания ЗО от бикристалла [24]. Для иллюстрации этого способа рассмотрим сначала зеркальное и дифракционное отражение от двухслойной кристаллической пленки на поверхности совершенного кристалла, а затем полученные результаты обобщим на случай произвольного числа слоев.

Запишем граничные условия на границе вакуум–слой 1 в виде:

$$E_0 + E_S = \sum_{j=1}^4 A_{0j}^1, \quad \gamma_0(E_0 - E_S) = \sum_{j=1}^4 \Gamma_{0j}^1 A_{0j}^1, \quad (11)$$

$$E_h = \sum_{j=1}^4 R_j^1 A_{0j}^1, \quad -\gamma_h E_h = \sum_{j=1}^4 \Gamma_{hj}^1 R_j^1 A_{0j}^1.$$

На границе слой 1–слой 2 в виде:

$$\sum_{j=1}^4 A_{0j}^1 g_j^1 = \sum_{j=1}^4 A_{0j}^2, \quad \sum_{j=1}^4 \Gamma_{0j}^1 A_{0j}^1 g_j^1 = \sum_{j=1}^4 \Gamma_{0j}^2 A_{0j}^2,$$

$$\sum_{j=1}^4 R_j^1 A_{0j}^1 g_j^1 \tau^1 = \sum_{j=1}^4 R_j^2 A_{0j}^2, \quad (12)$$

$$\sum_{j=1}^4 \Gamma_{hj}^1 R_j^1 A_{0j}^1 g_j^1 \tau^1 = \sum_{j=1}^4 \Gamma_{hj}^2 R_j^2 A_{0j}^2,$$

а на границе слой 2–подложка в виде:

$$\sum_{j=1}^4 A_{0j}^2 g_j^2 = \sum_{l=1}^2 D_{0l} g_l, \quad \sum_{j=1}^4 \Gamma_{0j}^2 A_{0j}^2 g_j^2 = \sum_{l=1}^2 \Gamma_{0l} D_{0l} g_l,$$

$$\sum_{j=1}^4 R_j^2 A_{0j}^2 g_j^2 \tau^2 = \sum_{l=1}^2 R_{0l} D_{0l} g_l \tau_c, \quad (13)$$

$$\sum_{j=1}^4 \Gamma_{hj}^2 R_j^2 A_{0j}^2 g_j^2 \tau^2 = \sum_{l=1}^2 \Gamma_{hl} R_{0l} D_{0l} g_l \tau_c,$$

где $g_l = \exp(ik_0 \Gamma_{0l} d_2)$, $\tau_c = \exp(-ik_0 \Psi_{B2} d_2)$, а $l = 1, 2$; координата z в n -м слое отсчитывается от его верхней границы, а нумерация слоев ведется сверху вниз от границы вакуум–пленка.

Выразив из (13.3), (13.4) $D_{01} g_1$ и $D_{02} g_2$, преобразуем (13.1), (13.2) к виду

$$\sum_{j=1}^4 T_{1j}^2 A_{0j}^2 g_j^2 = 0, \quad \sum_{j=1}^4 T_{2j}^2 A_{0j}^2 g_j^2 = 0,$$

где $T_{lj}^2 = R_{0l}(\Gamma_{0l} - \Gamma_{0j}^2) \tau_c - R_j^2(\Gamma_{hl} - \Gamma_{hj}^2) \tau_f^2$ и $j = 1-4$; $l = 1, 2$; $k = 3, 4$.

Выразим амплитуды A_{03}^2 , A_{04}^2 через A_{01}^2 и A_{02}^2 :

$$A_{03}^2 = U_{13}^2 A_{01}^2 + U_{23}^2 A_{02}^2, \quad A_{04}^2 = -U_{14}^2 A_{01}^2 - U_{24}^2 A_{02}^2, \quad (14)$$

где

$$U_{jk}^2 = \frac{T_{1j}^2 T_{24,23}^2 - T_{2j}^2 T_{14,13}^2 g_j^2}{T_{14}^2 T_{23}^2 - T_{24}^2 T_{13}^2 g_k^2}. \quad (15)$$

Подставим полученные выражения для амплитуд A_{03}^2 и A_{04}^2 в (12.3), (12.4), выразим отсюда оставшиеся амплитуды A_{01}^2 , A_{02}^2 через A_{0j}^2 и, подставив все эти выражения в (12.1), (12.2), получим

$$\sum_{j=1}^4 T_{1j}^1 A_{0j}^1 g_j^1 = 0, \quad \sum_{j=1}^4 T_{2j}^1 A_{0j}^1 g_j^1 = 0, \quad (16)$$

где

$$T_{lj}^1 = R_l^2(W_{2l}^2 - \Gamma_{0j}^1 W_{1l}^2) - R_j^1(V_{2l}^2 - \Gamma_{hj}^1 V_{1l}^2) \tau^1, \quad (17)$$

и введены обозначения ($n = 2$)

$$W_{1j}^n = 1 + U_{j3}^n - U_{j4}^n,$$

$$W_{2j}^n = \Gamma_{0j}^n + U_{j3}^n \Gamma_{03}^n - U_{j4}^n \Gamma_{04}^n,$$

$$V_{1j}^n = R_j^n + U_{j3}^n R_3^n - U_{j4}^n R_4^n, \quad (18)$$

$$V_{2j}^n = \Gamma_{hj}^n R_j^n + U_{j3}^n \Gamma_{h3}^n R_3^n - U_{j4}^n \Gamma_{h4}^n R_4^n,$$

$$R_l^n = (V_{12}^n V_{21}^n - V_{11}^n V_{22}^n)/(W_{12}^n W_{21}^n - W_{11}^n W_{22}^n).$$

Выразим теперь амплитуды A_{03}^1 , A_{04}^1 через A_{01}^1 и A_{02}^1 . Связь определяется выражениями (14), (15), где верхний индекс 2 нужно заменить на 1. Используя (11.3), (11.4), находим связь между амплитудами A_{01}^1 и A_{02}^1 : $A_{02}^1 = Q^1 A_{01}^1$, где

$$Q^1 = -(V_{11}^1 \gamma_h + V_{21}^1)/(V_{12}^1 \gamma_h + V_{22}^1). \quad (19)$$

Теперь из системы (11) легко можно получить следующие выражения для амплитудных коэффициентов зеркального и дифракционного отражений:

$$R_S = \frac{\gamma_0 - \gamma_0^1}{\gamma_0 + \gamma_0^1}, \quad R_h = (1 + R_S)\gamma_h^1, \quad (20)$$

где

$$\gamma_0^1 = \frac{W_{21}^1 + Q^1 W_{22}^1}{W_{11}^1 + Q^1 W_{12}^1}, \quad \gamma_h^1 = \frac{V_{11}^1 + Q^1 V_{12}^1}{W_{11}^1 + Q^1 W_{12}^1}. \quad (21)$$

Из вида и метода решения системы граничных условий сразу становится ясно, как можно провести обобщение полученных результатов на случай произвольного числа слоев N . В каждом слое, начиная снизу, от границы пленка–подложка, нужно найти величины T_{lj}^n, T_{jk}^n ($j = 1-4, l = 1, 2, k = 3, 4$), связывающие между собой амплитуды проходящих волн в n -м слое:

$$T_{lj}^n = R_l^{n+1}(W_{2l}^{n+1} - \Gamma_{0j}^n W_{1l}^{n+1}) - R_j^n(V_{2l}^{n+1} - \Gamma_{hj}^n V_{1l}^{n+1})\tau^n, \quad (22)$$

$$U_{jk}^n = \frac{T_{lj}^n T_{24,23}^n - T_{2j}^n T_{14,13}^n g_j^n}{T_{14}^n T_{23}^n - T_{24}^n T_{13}^n g_k^n}. \quad (23)$$

В качестве начальных условий в случае кристаллической подложки следует взять:

$$R_l^{N+1} = R_{0l} t_c, \quad W_{2l}^{N+1} = G_{0l}, \quad W_{1l}^{N+1} = 1, \\ V_{2l}^{N+1} = G_{hl}, \quad V_{1l}^{N+1} = 1.$$

При таком выборе начальных условий амплитудные коэффициенты зеркального и дифракционного отражений от многослойной кристаллической структуры на поверхности монокристалла примут вид (20).

Полученные соотношения (20)–(23) также позволяют вычислять амплитуды волн в каждом слое кристаллической МС. Из (14) следует, что амплитуды волн в произвольном n -м слое S связаны соотношениями

$$A_{03}^n = U_{13}^n A_{01}^n + U_{23}^n A_{02}^n, \quad A_{04}^n = -U_{14}^n A_{01}^n - U_{24}^n A_{02}^n, \quad (24)$$

а связь между амплитудами волн A_{01}^n, A_{02}^n в n -м слое и амплитудами волн A_{0j}^{n+1} ($j = 1-4$) в $n + 1$ -м слое МС определяется из условия непрерывности полей на границе раздела n -го и $n + 1$ -го слоев МС:

$$A_{01,02}^{n+1} = \pm \frac{\sum_{j=1}^4 (W_{22,21}^{n+1} - \Gamma_{0j}^n W_{12,11}^{n+1}) A_{0j}^n g_j^n}{W_{11}^{n+1} W_{22}^{n+1} - W_{21}^{n+1} W_{12}^{n+1}} f_{1,2}^{n+1}, \quad (25)$$

где $f_{1,2}^n = 1, f_{1,2}^{n+1} = (g_{1,2})^{-1}$. Решение рекуррентных соотношений (25) проводится сверху вниз от границы вакуум–верхний слой МС с привлечением граничного условия $A_{02}^1 = Q^1 A_{01}^1$, где

$$A_{01}^1 = \frac{2\gamma_0}{W_{11}^1 + W_{21}^1 + Q^1(W_{12}^1 + W_{22}^1)} E_0, \quad (26)$$

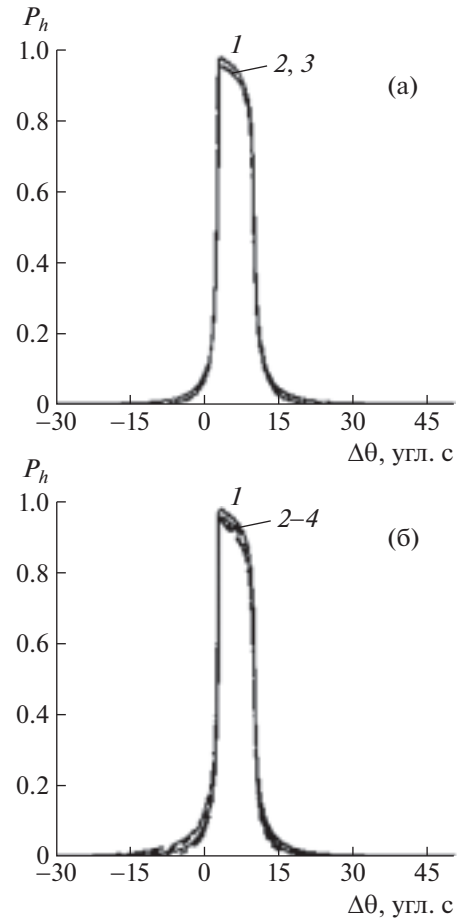


Рис. 1. Влияние числа (а) и деформации (б) слоев на вид кривых дифракционного отражения от МС Si(кристаллический)/Si(аморфный) в зависимости от угловой отстройки $\Delta\theta$ от угла Брэгга подложки. Толщины слоев $d_1 = 1.0, d_2 = 1.5$ нм; а – число бислоев: идеальный кристалл (1), $N = 10$ (2), 11 (3), деформация $\delta = 0$; б – деформация $\delta \times 10^{-4}$: 1 – идеальный кристалл, 2–4, 3–6, 4–0, 10 бислоев. SiK_α -излучение, отражение Si(220), $\psi = 3^\circ$, угол скольжения $\varphi_0 = 50^\circ$.

а Q^1 определяется (19). Рекуррентные соотношения (25) позволяют также найти амплитуды проходящих волн в кристалле-подложке: $D_{1,2} = A_{01,02}^{N+1}$.

Обсудим чувствительность ЗО в условиях скользкой дифракции к параметрам многослойных периодических структур, которые состоят из чередующихся слоев кристаллического и аморфного кремния с толщинами 1.0 и 1.5 нм соответственно. Интерес именно к такой МС был вызван тем обстоятельством, что КДО (рис. 1) оказываются нечувствительными ввиду малой толщины МС, а в традиционном методе рентгеновской рефлектометрии – ввиду равенства ну-

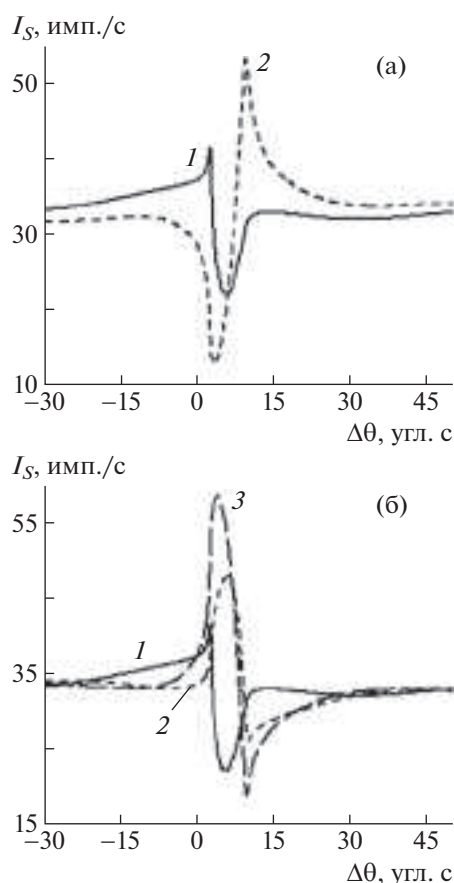


Рис. 2. Влияние числа (а) и деформации (б) слоев на вид кривых зеркального отражения от МС Si(кристаллический)/Si(аморфный) в зависимости от угловой отстройки $\Delta\theta$ от угла Брэгга подложки. Толщины слоев $d_1 = 1.0$, $d_2 = 1.5$ нм; а – число бислоев: $N = 10$ – сплошные линии 1, $N = 11$ – штриховые линии 2, деформация $\delta = 0$; б – деформация $\delta \times 10^{-4}$: 1 – 0, 2 – 4, 3 – 6, 10 бислоев. $\text{CuK}\alpha$ -излучение, отражение Si(220), $\psi = 3^\circ$, угол скольжения $\varphi_0 = 50^\circ$. Интенсивность падающего излучения $I_0 = 10^5$ имп./с.

левых фурье-компонент поляризуемостей подложки и каждого из слоев МС [19].

На рис. 2а показано, как меняются угловые зависимости интенсивности ЗО в условиях скользкой дифракции с изменением числа слоев. Видно, что форма кривых $I_S(\Delta\theta)$ кардинально изменяется при увеличении числа слоев всего на один бислой. Рисунок 2б демонстрирует чувствительность кривых ЗО к изменению деформации кристаллических слоев в МС.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развита точная теория зеркального отражения рентгеновских лучей при одновременном выполнении условий скользкой брэгговской дифракции

от совершенного монокристалла с многослойной кристаллической структурой на поверхности. Полученные рекуррентные соотношения, описывающие угловые зависимости интенсивности ЗО рентгеновских лучей в условиях скользкой дифракции от многослойных кристаллических поверхностных структур, являются новым типом рекуррентных соотношений в теории дифракции и в отличие от формул Дарвина [21] и Колпакова [22] позволяют вычислять амплитуды волн во всех слоях МС.

Показана высокая информативность угловых зависимостей интенсивности ЗО в условиях скользкой брэгговской дифракции к толщинам и числу слоев МС на поверхности совершенного монокристалла, их деформации и степени аморфизации, что может быть использовано для интерпретации экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М.: Наука, 1989. 152 с.
2. Afanas'ev A.M., Melkonyan M.K. // Acta Cryst. A. 1983. V. 39. № 2. P. 207.
<https://doi.org/10.1107/S0108767383000471>
3. Aleksandrov P.A., Afanasiev A.M., Stepanov S.A. // Phys. Status Solidi. A. 1984. V. 86. № 1. P. 143.
<https://doi.org/10.1002/pssa.2210860114>
4. Aleksandrov P.A., Afanasiev A.M., Melkonyan M.K., Stepanov S.A. // Phys. Status Solidi. A. 1984. V. 81. № 1. P. 47.
<https://doi.org/10.1002/pssa.2210810103>
5. Aleksandrov P.A., Afanas'ev A.M., Golovin A.L. et al. // J. Appl. Cryst. 1985. V. 18. № 1. P. 27.
<https://doi.org/10.1107/S0021889885009712>
6. Александров П.А., Степанов С.А. // Поверхность. 1986. № 6. С. 117.
7. Александров П.А., Афанасьев А.М., Степанов С.А. // Поверхность. 1984. № 8. С. 9.
8. Шипов И.А., Андреева М.А. // ЖТФ. 1989. Т. 59. № 9. С. 169.
9. Меликян О.Г. // Кристаллография. 1991. Т. 36. Вып. 3. С. 549.
10. Пунегов В.И., Ладанов А.В. // Поверхность. 1990. № 4. С. 45.
11. Andreeva M.A., Rocete K., Khapachev Yu.P. // Phys. Status Solidi. A. 1985. V. 88. № 2. P. 455.
<https://doi.org/10.1002/pssa.2210880207>
12. Андреева М.А. // Вестн. МГУ. Сер. 3. 1986. Т. 27. № 6. С. 86.
13. Степанов С.А. // Кристаллография. 1994. Т. 39. № 2. С. 221.

14. *Stepanov S., Kohler R.* // J. Phys. D. 1994. V. 27. № 9. P. 1922.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/27/9/016>
15. *Афанасьев А.М., Имамов Р.М.* // Кристаллография. 1995. Т. 40. № 3. С. 446.
16. *Бушув В.А., Орешко А.П.* // ФТТ. 2001. Т. 43. № 5. С. 906.
17. *Бушув В.А., Имамов Р.М., Мухамеджанов Э.Х., Орешко А.П.* // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 3. С. 501.
18. *Bushuev V.A., Imatov R.M., Mukhamedzhanov E.K., Oreshko A.P.* // J. Phys. D. 2002. V. 35. P. 1422.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/35/12/320>
19. *Бушув В.А., Орешко А.П.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 2002. № 1. С. 67.
20. *Ulyanenko A.P., Stepanov S.A., Pietsch U., Köhler R.* // J. Phys. D. 1995. V. 28. P. 2522.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/12/020>
21. *Darwin C.G.* // Philos. Mag. 1914. V. 27. № 3. P. 675.
22. *Колпаков А.В.* Динамическая дифракция рентгеновских лучей. М.: МГУ, 1989. 158 с.
23. *Parratt L.G.* // Phys. Rev. 1954. V. 95. № 2. P. 359.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.359>
24. *Орешко А.П., Бушув В.А.* // Вестн. МГУ. Сер. 3: Физика, астрономия. 2003. № 5. С. 40.