

УДК 548.732

МОДИФИЦИРОВАННАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В МЕТОДЕ СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН

А. В. ЕСАЯН

Ереванский физический институт

(Поступила в редакцию 24 марта 1989 г.)

На основании динамической теории дифракции рентгеновских лучей в скользящей Брэгг-Лауэ геометрии теоретически исследованы особенности кривых дифракционного отражения и угловые зависимости интенсивности выхода вторичных излучений при наличии зеркального отражения от поверхности монокристалла. Построена модифицированная динамическая теория дифракции рентгеновских лучей, которая базируется на перенормировках параметров обычной динамической теории, найдены простые аналитические выражения для интенсивности дифрагированной волны, волновых полей в кристалле, а также для интенсивностей выхода фотоэлектронов с различных глубин.

1. Введение

Сравнительно недавно для анализа структурного совершенства приповерхностных слоев монокристаллов, поверхность которых составляет небольшой угол скоса ($\sim 4^\circ$) по отношению к кристаллографическим плоскостям стала использоваться скользящая схема Брэгг-Лауэ геометрии (см., напр., [1]). В этой геометрии падающий и дифрагированный рентгеновские лучи скользят под малыми углами (Φ_0 и Φ_h соответственно) к поверхности (см. рис. 1). В такой схеме легко реализуется асимметричная дифракция, так как простым изменением угла падения можно менять в широких пределах параметр асимметрии и переходить из геометрии Брэгга в геометрию Лауэ. Специфика дифракции в этой геометрии находит свое яркое отражение при регистрации вторичных излучений, сопровождающие дифракционное рассеяние [3—5].

При углах выхода $\Phi_h \sim \Phi_c$ (Φ_c — критический угол зеркального отражения) в данной схеме дифракции играет роль эффект зеркального отражения (30), и пользоваться формулами обычной динамической теории (ДТ) уже нельзя. В ряде работ [6, 7] построена модифицированная динамическая теория (МДТ) для процесса дифракции, позволяющей практически для всех углов рассчитать интенсивность брэгговского отражения.

В той области параметра асимметрии $|\beta|$, где интенсивность дифракционно отраженной волны становится малой, внутри кристалла еще продолжается сложный процесс перераспределения волновых полей, и естественно возникает задача построения МДТ, которая наряду с дифракционным процессом описывала бы и структуру волновых полей в кристалле,

а тем самым и специфику выхода вторичных излучений, решению которой посвящена данная работа.

2. Дифракция рентгеновских лучей при учете эффекта зеркального отражения

В схеме дифракции, изображенной на рис. 1, отражающие плоскости почти перпендикулярны поверхности кристалла. При углах падения $\Phi_0 < |\tilde{\psi}| = 2 \cdot |\psi| \sin \theta_B$ (где ψ - угол скоса, θ_B - угол Брэгга) реализуется случай дифракции в геометрии Брэгга, а при больших углах

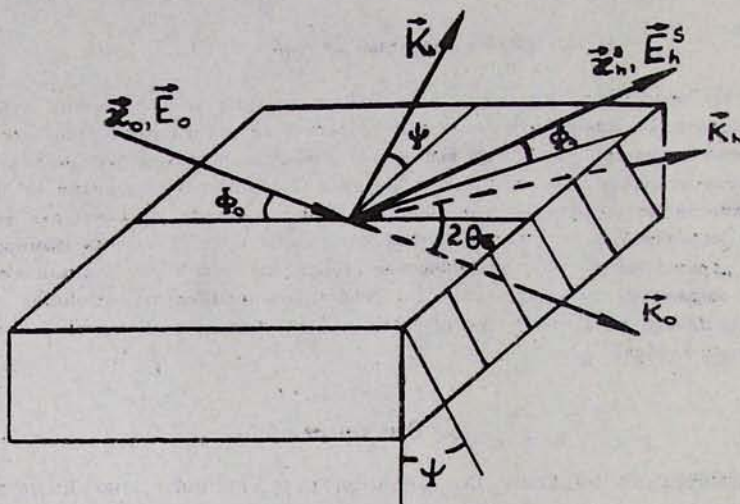


Рис. 1 Схема дифракции рентгеновских лучей в скользящей Брэгга-Лауэ геометрии. θ_B - угол Брэгга, Φ_0 - угол падения, Φ_h - угол выхода дифрагированного пучка, ψ - угол скоса отражающих плоскостей. K_h - вектор обратной решетки

$\Phi_0 > |\tilde{\psi}|$ - дифракция в геометрии Лауэ. При $\Phi_h \sim \Phi_c = \sqrt{|\chi_0|}$ (χ_0 - Фурье-компонента поляризуемости), необходимо учитывать эффекты 30. Когда $\Phi_0 \gg \Phi_c$, то можно пренебречь зеркальным отражением падающей волны, но необходимо учитывать эффекты 30 для дифрагированной волны.

В этом случае волновые поля в кристалле ищутся в виде:

$$D_0(\mathbf{r}) = \sum_{i=1,2} D_0^{(i)} \exp(i \kappa_0 \mathbf{r} + i \kappa_0 \varepsilon_0^{(i)} z / \tilde{\Phi}_0), \quad (1)$$

$$D_h(\mathbf{r}) = \sum_{i=1,2} D_h^{(i)} \exp(i \mathbf{K}_h \mathbf{r}) \exp(i \kappa_0 \mathbf{r} + i \kappa_0 \varepsilon_0^{(i)} z / \tilde{\Phi}_0),$$

где κ_0 - волновой вектор падающей волны в вакууме, \mathbf{K}_h - вектор обратной решетки, а $\varepsilon_0^{(i)}$ находятся из дисперсионного уравнения (см., напр., [6]):

$$y((y + \delta)^2 - \tilde{\Phi}_h^2) - \delta_0^3 = 0, \quad (2)$$

где

$$y = \frac{2\varepsilon_0 - \gamma_0}{2\tilde{\Phi}_0}. \quad (3)$$

Здесь

$$\tilde{\Phi}_{0,h} = (\Phi_{0,h}^2 + \gamma_0)^{1/2}, \quad \delta = \tilde{\Phi}_0 - |\tilde{\psi}|, \quad \delta_0 = \left(\frac{c^2 \gamma_h \gamma_{\bar{h}}}{2\tilde{\Phi}_0} \right)^{1/3}$$

а c — поляризационный фактор.

Дисперсионное уравнение (2) имеет три корня, из которых y_1, y_2 имеют положительную мнимую часть, а $\text{Im } y_3 < 0$.

С учетом граничных условий для амплитуд дифрагированных волн и их производных находим:

$$R_h = \left(\frac{\Phi_h}{\Phi_0} \right)^{1/2} \frac{E_h^s}{E_0^s}, \quad E_h^s = \frac{c \gamma_h}{y_3 (\Phi_h - \delta - y_3)} E_0^s, \quad (4)$$

$$\text{и} \quad D_h^{(1)} = \frac{\Phi_h + \delta + y_2}{y_2 - y_1} E_h^s, \quad D_0^{(1)} = \frac{c \gamma_{\bar{h}}}{2\tilde{\Phi}_0 \cdot y_1} D_h^{(1)}$$

$$D_h^{(2)} = - \frac{\Phi_h + \delta + y_1}{y_2 - y_1} E_h^s, \quad D_0^{(2)} = \frac{c \gamma_{\bar{h}}}{2\tilde{\Phi}_0 \cdot y_2} \cdot D_h^{(2)}. \quad (5)$$

Совокупность формул (1), (4), (5) описывает дифракционное рассеяние в обоих случаях геометрии Брэгга и геометрии Лауэ.

3. Модифицированная динамическая теория

Расчет полей по формулам (1)—(5) связан с решением уравнения третьего порядка. В действительности же для E_h^s можно почти для всех углов пользоваться модифицированной теорией, суть которой состоит в следующем.

Будем рассматривать случай дифракции в геометрии Брэгга ($\delta < 0$). При углах

$$|\delta| \gg |\delta_0| \quad (6)$$

один из корней дисперсионного уравнения (2) с положительной мнимой частью, соответствующий затуханию в глубь кристалла моде,

$$y_2 \approx -\delta + \tilde{\Phi}_h, \quad (7)$$

а корни y_1, y_3 находятся из решения квадратного уравнения:

$$y(y + \delta + \tilde{\Phi}_h) + \delta_0^3 / (\tilde{\Phi}_h - \delta) = 0. \quad (8)$$

Для величины ε_0 уравнение (8) представляет собой дисперсионное уравнение ДТ (см., напр., [1])

$$(2\varepsilon_0 - \chi_0)(2\varepsilon_0/\tilde{\beta} - \chi_0 + \tilde{\alpha}) = c^2 \chi_n \chi_{\bar{n}}, \quad (9)$$

где

$$\tilde{\beta} = \frac{2\tilde{\Phi}_0}{\delta - \tilde{\Phi}_h},$$

$$\tilde{\alpha} = \delta^2 - \tilde{\Phi}_h^2 + \chi_0 \frac{\tilde{\beta} - 1}{\tilde{\beta}} = \alpha - \frac{\chi_0}{\tilde{\beta}}. \quad (10)$$

Уравнение (9) отличается от стандартного уравнения ДТ ([2]), тем, что вместо параметров $\tilde{\beta}$ и $\tilde{\alpha}$ в дисперсионное уравнение входят

$$\beta = -\Phi_0/\Phi_h$$

и

$$\alpha = -2 \sin 2\theta_B (\theta - \theta_B) = (\Phi_0 - |\psi|)^2 - \Phi_h^2. \quad (11)$$

Параметр β есть фактор асимметрии, а α определяет отклонение от брэгговского угла. Таким образом уравнение (9) отличается от стандартного уравнения перенормировкой параметров β и α .

С учетом неравенства (6) можно в формуле (4) заменить $\Phi_h - \delta - y_3$ на $\Phi_h - \delta - y_3^0$, где $y_3^0 = -\tilde{\Phi}_h - \delta$ есть выражения для корня y_3 вдали от брэгговской дифракции. В результате для коэффициента отражения P_R имеем:

$$P_R(\theta) = |R_h|^2, \quad \text{где } R_h = \frac{\sqrt{|\beta|} c \chi_n}{2\varepsilon_0^{(3)} - \chi_0} \cdot f(\Phi_h), \quad (12)$$

а

$$f(\Phi_h) = \frac{2\Phi_h}{\Phi_h + \tilde{\Phi}_h}. \quad (13)$$

Формула (12) отличается от результата ДТ не только наличием перенормированных параметров $\tilde{\beta}$ и $\tilde{\alpha}$ в корне $\varepsilon_0^{(3)}$, но и наличием дополнительного множителя $f(\Phi_h)$, который описывает качественно новый эффект-наличие поверхностного брэгговского пика [6].

При $\Phi_h \gg \Phi_c$ параметры Φ_h и $\tilde{\Phi}_h$ близки, и поэтому фактор $f(\Phi_h)$ становится равным единице, а параметры $\tilde{\beta}$ и $\tilde{\alpha}$ совпадают с параметрами β и α соответственно, а дифракционное рассеяние описывается формулами ДТ.

Что же касается структуры волновых полей в кристалле, то здесь существенной является то обстоятельство, что при выполнении условия (6), оказывается, что корень y_1 удовлетворяет неравенству

$$|y_1| \ll |y_2| \quad (14)$$

Именно это обстоятельство позволяет получить простые выражения для амплитуды полей внутри кристалла:

$$D_h^{(1)} = \frac{\Phi_h + \bar{\Phi}_h}{\bar{\Phi}_h - \delta} E_h^s, \quad D_0^{(1)} = E_0, \quad (15)$$

$$D_h^{(2)} = -\frac{\Phi_h + \delta}{\bar{\Phi}_h - \delta} E_h^s, \quad D_0^{(2)} \approx 0.$$

Отметим, что при $\Phi_h \sim \Phi_c$ и $|\delta| \ll \Phi_c$ (но неравенство (6) ещё предполагается выполненным), как следует из (15), амплитуды $D_h^{(1)}$ и $D_h^{(2)}$ могут намного превосходить амплитуду дифрагированной волны на поверхности кристалла E_h^s , и следовательно на кривых выхода вторичных излучений можно ожидать существенно больших по амплитуде пиков.

Рассмотрим выход фотоэлектронов, глубина выхода которых

$$L_e \gg L_p = \frac{1}{z_0 |\operatorname{Re}(y_2 - y_1)|}, \quad (16)$$

где L_p длина, на которой происходят маятниковые колебания [2]. Для описания угловой зависимости интенсивности выхода фотоэлектронов $\chi(\theta)$ можем использовать общую формулу для случая дифракции в геометрии Лауэ (см., напр. [3]). Условие (16) позволяет пренебречь интерференционным членом в $\chi(\theta)$. Если, кроме этого предположить, что $L_e \ll L_{ex}^{(1)}, L_{ex}^{(2)}$, где

$$L_{ex}^{(1,2)} = \frac{1}{z_0 \operatorname{Im}(y_{1,2} + z_0/2 \bar{\Phi}_0)}, \quad (17)$$

длины затухания первой и второй мод соответственно, то для $\chi(\theta)$ в области дифракционного отражения с учетом (15) имеем:

$$\chi(\theta) = 1 + \left| \frac{\Phi_c^2 + 2\delta^2}{2\delta^2} \right| |E_h^s|^2 + 2e_h \operatorname{Re} \left(\frac{\sqrt{\Phi_c^2 + \delta^2} - \delta}{-2\delta} E_h^s \right), \quad (18)$$

где $e_h = \frac{\gamma_{lh}}{\gamma_{lo}}$, а для χ^{max} получим:

$$\chi^{max} \approx \frac{2\Phi_0}{\delta} \frac{|\Phi_c^2 + 2\delta^2|}{|\sqrt{\Phi_c^2 + \delta^2} - \delta|^2}. \quad (19)$$

На рис. 2 представлена кривая зависимости максимальных значений χ^{max} от $|\delta|$. Как видно из рис. в МДТ при $|\delta| \rightarrow 0$ $\chi^{max} \rightarrow \infty$, т. е. выход фотоэлектронов с конечных не равных нулю глубин может достигать сколь угодно больших значений. Интересно, что этот результат остается и в точной теории, если пренебречь процессом поглоще-

ния. Таким образом, если в ДТ по мере увеличения L_e пик $\alpha(\theta)$ падает, то в МДТ пик на кривой $\alpha(\theta)$ растет, и лишь затем при $L_e \gg L_{ex}^{(1)}$ начинает падать. С помощью (15) можно описывать и другие случаи, при произвольном соотношении между L_e и L_p , $L_{ex}^{(1)}$, $L_{ex}^{(2)}$ (рис. 3).

К точным уравнениям (4), (5) следует обращаться только тогда, когда угол выхода Φ_h близок к Φ_c :

$$|\Phi_h - \Phi_c| \leq \frac{\Phi_c}{2} \left(\frac{\Phi_c}{2\tilde{\psi}} \right)^{2/3} \quad (20)$$

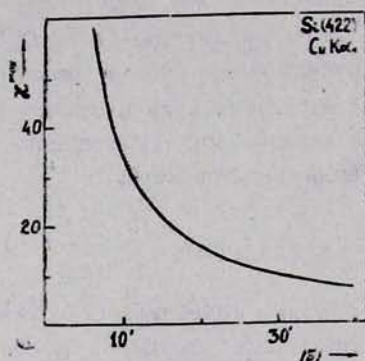


Рис. 2 Зависимость максимального значения выхода фотоэлектронов z^{\max} от углов $|\beta|$ для монокристалла кремния Si (422—отражение, Си $K\alpha_1$ —излучение). $|\tilde{\psi}| = 330'$.

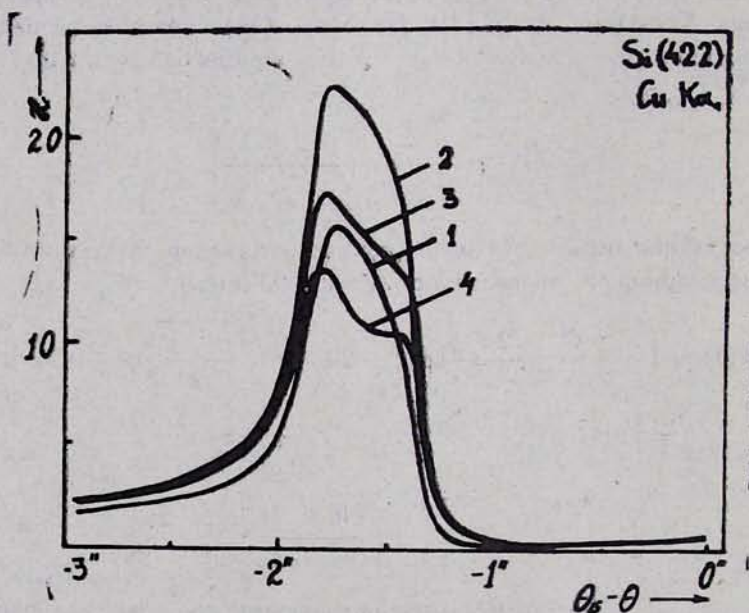


Рис. 3. Угловая зависимость выхода фотоэлектронов при различных значениях L_e : (1) 0., (2) 0.01, (3) 0.05, (4) 0.1 мкм ($\Phi_0 = 320'$, $|\tilde{\psi}| = 330'$).

В заключение автор выражает благодарность А. М. Афанасьеву за постановку задачи и постоянный интерес к работе.

1. Афанасьев А. М., Александров П. А., Имамов Р. М. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. М.: Изд. Наука, 1986, с. 92.
2. Пиксер Э. Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Изд. Наука, 1982, с. 390.
3. Afanasev A. M. et al. Phys. Stat. Sol. (a) 98, 367 (1986).
4. Кружлов М. В., Созонтов Е. А., Соломин И. К. ФТТ, 27, 2732 (1985).
5. Afanasev A. M. et al. Phys. Stat. Sol. (a) 104, K 73 (1987).
6. Афанасьев А. М. и др. Поверхность, 12, 35 (1988).
7. Афанасьев А. М., Меликян О. Г. Кристаллография, 34, 28 (1989).

ԿԱՆԳՈՒՆ ԱՂԻՔՆԵՐԻ ՄԵԹՈԴՈՎ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՄՈԴՈՆՑԻԿԱՑՎԱԾ ԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆ

Ա. Վ. ԵՍԱՅԱՆ

Ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի դինամիկական տեսության հիման վրա, Բրեգ-Լավոե սահուն երկրաչափության դեպքում տեսականորեն ուսումնասիրված են դիֆրակցիոն անդրադարձման կորերի առանձնահատկությունները և երկրորդային ճառագայթման ելքի ինտենսիվության կախվածությունը միաբյուրեղի մակերևույթից հայելային անդրադարձման առկայության դեպքում: Կատուցված է ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի մոդիֆիկացված դինամիկական տեսության, որը հիմնվում է սովորական դինամիկական տեսության գործակիցների վերանորմավորման վրա: Գտնված են վերլուծական արտահայտություններ դիֆրակցված ալիքի ինտենսիվության, բյուրեղում ալիքային դաշտերի, ինչպես նաև տարբեր խորություններից ֆոտոէլեկտրոնների ելքի ինտենսիվության համար:

MODIFIED DYNAMICAL THEORY OF X-RAY DIFFRACTION IN THE METHOD OF STANDING X-RAY WAVES

A. V. YESAYAN

Using the dynamical theory of X-ray diffraction, the peculiarities of diffractive reflection curves as well as angular dependences of secondary radiation yield intensity in the presence of mirror reflection from the single crystal surface are theoretically studied within the grazing Bragg-Lave geometry. A modified dynamical theory based on the renormalization of coefficients of the conventional dynamical theory is constructed, and simple analytical expressions for the intensity of a diffracted wave, for the wave fields in the crystal as well as for the intensities of photoelectron yield from various depths are found.