

УДК 548.734.2

АЛЕКСАНДРОВ П. А., АФАНАСЬЕВ А. М., СТЕПАНОВ С. А.

ФАКТОР АСИММЕТРИИ ПРИ ДИФРАКЦИИ  
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В УСЛОВИЯХ ПОЛНОГО  
ВНЕШНЕГО ОТРАЖЕНИЯ

Задача динамической дифракции рентгеновских лучей в условиях полного внешнего отражения на плоскостях, перпендикулярных входной поверхности, решена с учетом малых разориентаций отражающих плоскостей. Показано, что при разориентациях в сторону падающего пучка можно получить непрерывный переход от дифракции в геометрии Брэгга к дифракции в геометрии Лауэ для одного и того же дифракционного отражения путем изменения угла между падающим пучком и поверхностью кристалла. Продемонстрирована уникально высокая чувствительность дифракции в условиях полного внешнего отражения к малым разориентациям отражающих плоскостей.

Данная работа посвящена развитию динамической теории рассеяния рентгеновских лучей для дифракции на кристаллах в условиях полного внешнего отражения.

Рентгеновская схема дифракции в условиях полного внешнего отражения была предложена в [1]. В этой схеме падающий рентгеновский пучок направляется на кристалл так, что реализуются дифракционные условия в геометрии Лауэ для плоскостей, перпендикулярных входной поверхности,

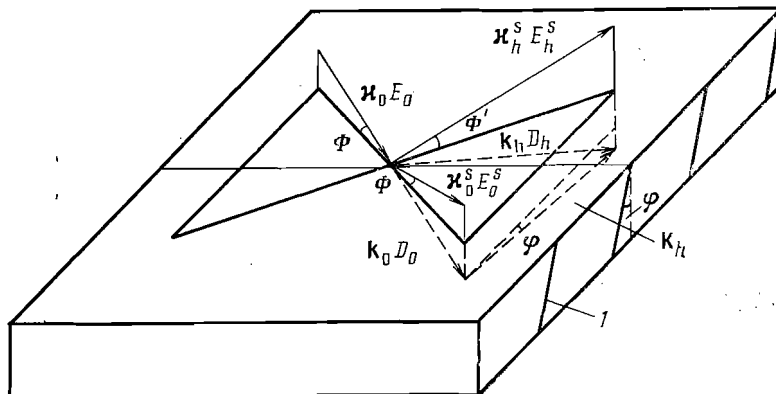


Рис. 1. Схема асимметричной дифракции в условиях полного внешнего отражения

1 — отражающие плоскости. Случай  $\varphi=0$  соответствует симметричной дифракции и рассмотрен в [1—3]

и одновременно он образует малый угол  $\Phi$  с поверхностью (рис. 1). Малая величина угла падения — порядка значения критического угла полного внешнего отражения — обуславливает интенсивное зеркальное отражение падающей и дифрагированной волны от поверхности кристалла, что дает в принципе возможность исследования кристаллической структуры тонких поверхностных слоев, толщиной от нескольких десятков ангстрем и больше.

В [2] построена динамическая теория дифракции в условиях полного внешнего отражения для совершенных кристаллов. При этом показано, что угол выхода  $\Phi'$  зеркально отраженной дифрагированной волны зависит от того, насколько точно выполнено условие Брэгга. Иными словами, существует строгое соотношение между углами  $\Phi$  и  $\Phi'$  и параметром  $\alpha$ ,

определяющим отклонение от точного условия дифракции,

$$\alpha = \Phi^2 - \Phi'^2, \quad (1)$$

где

$$\alpha = \frac{(\kappa_0 + \mathbf{K}_h)^2 - \kappa_0^2}{\kappa_0^2} \approx -2 \sin 2\theta_B (\theta - \theta_B), \quad (2)$$

$\kappa_0$  — волновой вектор падающей рентгеновской волны,  $\mathbf{K}_h$  — вектор обратной решетки.

Реализация соотношения (1) открывает принципиально новые экспериментальные возможности. На его основе в [3] проведен эксперимент, в котором интенсивность  $P_h^s$  зеркально отраженной дифрагированной волны записывалась как функция угла  $\Phi'$ , а не как функция угла  $\theta$ . В этой методике относительно грубые измерения по углам  $\Phi$  и  $\Phi'$  с точностью до угловых минут отражают очень малые деформации кристаллической решетки, соответствующие изменениям параметра  $\alpha$  на доли угловых секунд.

Наряду с подтверждением основных теоретических положений работы [2] в [3] наблюдались также заметные различия между теоретическими расчетами и экспериментальными измерениями, стимулирующие дальнейшее развитие теории.

В данной работе задача о дифракции в условиях полного внешнего отражения на совершенных кристаллах решена с учетом малой разориентации отражающих плоскостей от направления нормали к поверхности.

Оказалось, что разориентация на малые углы  $\varphi$  порядка углов  $\Phi$ ,  $\Phi'$  значительно изменяет угловую зависимость величины  $P_h^s$ .

Этот факт может иметь важное значение при сравнении экспериментальных данных с теоретическими расчетами поскольку, например, для кремния и германия при использовании  $\text{Cu K}\alpha$ -излучения интенсивное зеркальное отражение возникает при углах падения  $\Phi \leq 10' - 20'$ , в то время как точность, с которой может быть задана ориентация при резке кристаллов, составляет  $\varphi \sim \pm 30'$ , а точность, с которой можно измерить разориентацию известными рентгеновскими методами и тем самым произвести выборку образцов, составляет  $\varphi \sim \pm 15'$ .

Рассмотрим схему дифракции, представленную на рис. 1. Для простоты будем считать, что падающее излучение поляризовано перпендикулярно плоскости рассеяния, образуемой векторами  $\mathbf{k}_0$  и  $\mathbf{k}_h$  ( $\sigma$ -поляризация).

Рассматривая условия непрерывности тангенциальных компонент волновых векторов на входной поверхности кристалла, а также связь между векторами  $\mathbf{k}_0$  и  $\mathbf{k}_h$  с учетом разориентации отражающих плоскостей на малый угол  $\varphi$  от направления нормали к поверхности, получаем следующее соотношение, связывающее угол выхода зеркально отраженной дифрагированной волны  $\Phi'$  с углом падения  $\Phi$  и параметром  $\alpha$  отклонения от точного условия Брэгга

$$\alpha = (\Phi + \Psi)^2 - \Phi'^2, \quad (3)$$

где

$$\Psi = 2\varphi \sin \theta_B \quad (4)$$

— эффективный угол разориентации.

Основные уравнения динамической теории с учетом разориентации можно преобразовать к следующему виду (см., например, [2]):

$$(u^2 - \Phi^2) D_0 = \chi_0 D_0 + \chi_h D_h, \quad (5)$$

$$[(u + \Psi)^2 - \Phi'^2] D_h = \chi_0 D_h + \chi_h D_0,$$

где  $u = k_{0z}/\kappa_0$  — параметр, подлежащий определению.

Дисперсионное уравнение в данном случае является не биквадратным, как в [2], а общим уравнением четвертого порядка относительно  $u$

$$(u^2 - \Phi^2 - \chi_0) [(u + \Psi)^2 - \Phi'^2 - \chi_0] - \chi_h \chi_h = 0. \quad (6)$$

Уравнение (6) удобнее всего решать численно методом касательных.

Из четырех его корней  $u^{(i)}$  следует выбрать два, для которых  $\text{Im } u^{(i)} > 0$  (приближение толстого кристалла).

Легко показать, что уравнение (6) всегда имеет два корня с положительной мнимой частью и два — с отрицательной. В самом деле, при  $\chi_{i0} = -\chi_{ih} = \Psi = 0$  уравнение (6) переходит в биквадратное уравнение с действительными коэффициентами, которое всегда имеет два корня с положительной мнимой частью и два — с отрицательной. Рассмотрим зависимость корней уравнения (6) от параметров  $\chi_{i0}$ ,  $\chi_{ih}$ ,  $\Psi$  и допустим, что при некоторых значениях  $\chi_{i0}$ ,  $\chi_{ih}$ ,  $\Psi \neq 0$  знак мнимой части какого-либо из корней меняется на противоположный. Соответственно при этих значениях параметров уравнение (6) имеет действительный корень. Однако непосредственной подстановкой легко проверить, что ни при каких физически допустимых значениях этих параметров действительный корень не может одновременно удовлетворить действительной и мнимой части уравнения (6). Это и доказывает, что уравнение (6) всегда имеет два корня с положительной мнимой частью и два — с отрицательной.

Для того чтобы определить амплитуды  $E_h^s$  и  $E_0^s$ , необходимо использовать условия непрерывности тангенциальных составляющих электрических и магнитных полей на входной поверхности кристалла.

Первые условия имеют вид

$$\Phi(E_0 - E_0^s) = u^{(1)}D_0^{(1)} + u^{(2)}D_0^{(2)}, \quad (7a)$$

$$-\Phi' E_h^s = (u^{(1)} + \Psi)D_h^{(1)} + (u^{(2)} + \Psi)D_h^{(2)}.$$

Вторые условия в данном случае эквивалентны, с точностью до первых членов разложения по  $\Phi$  и  $\Phi'$ , условиям непрерывности нормальных компонент электрических полей

$$E_0 + E_0^s = D_0^{(1)} + D_0^{(2)}, \quad (7b)$$

$$E_h^s = D_h^{(1)} + D_h^{(2)}.$$

Решая совместно (5) и (7), находим

$$E_h^s = \frac{-2\Phi W^{(1)}W^{(2)}(u^{(2)} - u^{(1)})E_0}{\chi_h[W^{(2)}(u^{(1)} + \Phi)(u^{(2)} + \Psi + \Phi') - W^{(1)}(u^{(2)} + \Phi)(u^{(1)} + \Psi + \Phi')]} \quad (8)$$

где

$$W^{(i)} = u^{(i)2} - \Phi^2 - \chi_0, \quad i=1, 2.$$

Наконец,

$$P_h^s = \left| \frac{E_h^s}{E_0} \right| \frac{\Phi'}{\Phi}. \quad (9)$$

### 1. Положение дифракционного максимума при асимметрии

Для исследования уравнения (6) и его корней перейдем от переменной  $u$  и переменной  $\delta$ , согласно

$$\delta = u - \sqrt{\Phi^2 + \chi_0}. \quad (10)$$

Переменная характеризует отклонение нормальной компоненты вектора  $k_0$  от нормальной компоненты обычного преломленного вектора  $k$ , соответствующего отражению без дифракции:

$$\delta = (k_{0z} - k_z) / \chi_0.$$

Уравнение (6) с учетом (10) преобразуется следующим образом:

$$\delta(\delta + 2\sqrt{\Phi^2 + \chi_0})[\delta(\delta + 2\sqrt{\Phi^2 + \chi_0} + 2\Psi) + \beta] - \chi_h \chi_h = 0, \quad (11)$$

где

$$\beta = \alpha - 2\Psi(\Phi - \sqrt{\Phi^2 + \chi_0}) \quad (12)$$

— параметр отклонения от точного условия Брэгга при асимметричной

дифракции. Для параметра  $\beta$  справедливо соотношение

$$\beta = (\sqrt{\Phi^2 + \chi_0} + \Psi)^2 - (\sqrt{\Phi'^2 + \chi_0})^2. \quad (13)$$

При достаточно больших значениях углов  $\Phi$ ,  $\Phi' \gg \Phi_0 = \sqrt{|\chi_0|}$  соотношение (12) переходит в стандартное соотношение динамической теории (см., например, [4])

$$\beta = \alpha - \chi_0 \left( 1 \mp \frac{\Phi'}{\Phi} \right) \quad (14)$$

(знак «+» соответствует  $\Phi + \Psi < 0$ ).

Соотношение (12), в отличие от (14), определяет конечный сдвиг дифракционного максимума в пределе  $\Phi \rightarrow 0$  от положения максимума кине-

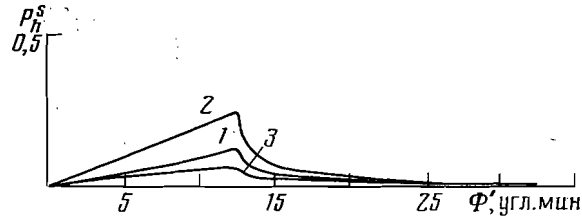


Рис. 2. Дифрактограммы в геометрии Лауэ при разориентации в сторону зеркально отраженного пучка

Кремний, (220)-отражение,  $\text{CuK}\alpha$ -излучение,  $\Phi = 30'$  ( $\Psi = 24'$ ); 1 —  $\Phi = 5'$ , 2 —  $10'$ , 3 —  $15'$

матической дифракции. Этот результат совпадает с результатом, полученным в [5], и обусловлен учетом явления полного внешнего отражения для падающей волны.

Характер уравнения (11) существенно зависит от знака разориентации  $\Psi$ . Если рассматривать это уравнение как параметрическое, зависящее от параметров  $\Phi$  и  $\beta(\Phi')$  при фиксированных значениях разориентации  $\Psi$ , то при  $\Psi > 0$  уравнение (11) содержит две особые точки:  $\Phi = \Phi_0$  и  $\beta = 0$ , соответствующие границе полного внешнего отражения и дифракционному максимуму; при  $\Psi < 0$  в уравнении возникает еще одна особая точка  $\Phi = \sqrt{\Phi_0^2 + \Psi^2} = \Phi_{\text{вЛ}}$ . Ниже эти два случая рассмотрены отдельно.

## 2. Асимметричная дифракция Лауэ при наклоне отражающих плоскостей в сторону зеркально отраженного пучка ( $\Psi > 0$ )

Если  $\Psi > 0$  (пусть также  $\Psi > \Phi_0$ ), то в силу соотношения (13) невозможно направить падающий пучок на кристалл таким образом, чтобы одновременно выполнялись точное условие дифракции ( $\beta = 0$ ) и условие полного внешнего отражения для дифрагированной волны ( $\Phi' < \Phi_0$ ). Поэтому при разориентации в сторону зеркально отраженного пучка ( $\Psi > 0$ ) происходит переход к асимметричной дифракции в геометрии Лауэ, сопровождающийся быстрым снижением интенсивности отраженной дифрагированной волны, по сравнению со случаем симметричной дифракции в геометрии Лауэ ( $\Psi = 0$ ), и при  $\Psi \gg \Phi_0$  для любых углов падения будет выполняться условие  $P_h^s(\Phi, \Phi') \ll 1$  (рис. 2).

## 3. Асимметричная дифракция Брэгга при наклоне отражающих плоскостей в сторону падающего и зеркально отраженного дифрагированного пучка ( $\Psi < 0$ )

При  $\Psi < 0$  картина дифракции значительно усложняется. Как нетрудно понять из рис. 1, при углах падения  $\Phi < \Phi_{\text{вЛ}}$  нормальная компонента вектора  $k_h$  является отрицательной:

$$\text{Re } k_{hz} = \text{Re } k_{0z} + K_{hz} < 0 \quad (K_{hz} = K_h \Phi < 0).$$

Поэтому дифрагированный пучок выходит через входную поверхность кристалла, что соответствует дифракции в геометрии Брэгга. В этом диапазоне углов падения  $\Phi$  волна  $\lambda_h^s$  — это обычная (не зеркально отраженная) дифрагированная волна в вакууме.

В зависимости от значения угла падения  $\Phi$  можно выделить три характерные области.

1. При углах падения  $0 < \Phi < \Phi_0$  падающая волна испытывает полное внешнее отражение, соответственно часть интенсивности переходит к зер-

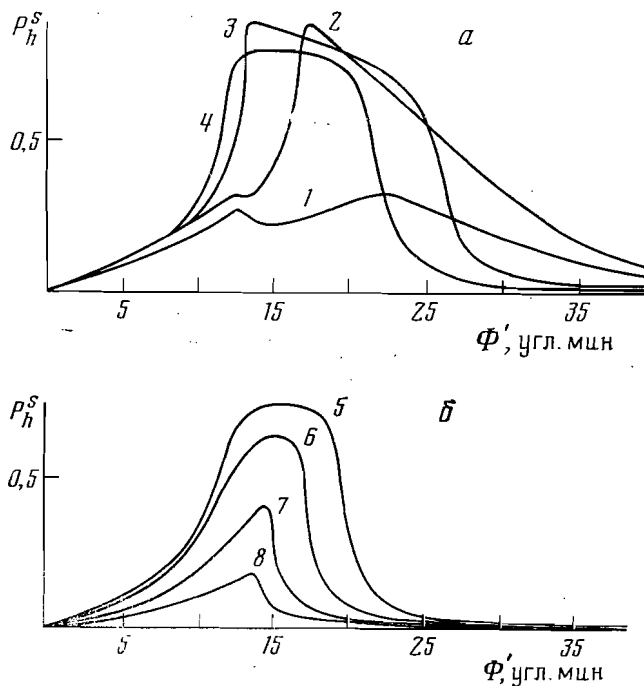


Рис. 3. Диффрактограммы в геометрии Брэгга при разориентации в сторону падающего и зеркально отраженного дифрагированного пучков;  $\varphi = -30'$  ( $\psi = -24'$ )

*a* — формирование столика Дарвина при увеличении угла падения: 1 —  $\Phi = 10$ , 2 — 13, 3 — 17, 4 — 20'; *б* — переход из геометрии Брэгга в геометрию Лауэ при дальнейшем увеличении угла падения (граница перехода  $\Phi_{BL} = 27,5'$ ): 5 —  $\Phi = 22$ , 6 — 25, 7 — 30, 8 — 35'

кально отраженной волне, и интенсивность в брэгговском максимуме относительно невелика (рис. 3, кривая 1).

2. При углах падения  $\Phi_0 < \Phi < \Phi_{BL} = \sqrt{\Phi_0^2 + \Psi^2}$  интенсивность в брэгговском максимуме может достигать единицы, и если  $|\Psi| \gg \Phi_0$ , то в этом диапазоне углов падения зависимость  $P_h^s(\Phi')$  имеет форму, похожую на «столики» Дарвина при угловой ширине в несколько минут (рис. 3, кривые 3—5).

3. При угле падения  $\Phi \approx \Phi_{BL}$  происходит переход к дифракции в геометрии Лауэ, и при  $\Phi > \Phi_{BL}$  из кристалла вновь выходит не сама дифрагированная волна, а ее зеркальная компонента, интенсивность которой быстро уменьшается с увеличением угла падения (рис. 3, кривые 7—8).

Таким образом, наблюдается непрерывный переход от дифракции в геометрии Брэгга к дифракции в геометрии Лауэ для одной и той же плоскости отражения в результате изменения угла падения рентгеновского излучения на кристалл.

#### 4. Чувствительность к малым разориентациям

Полученные результаты свидетельствуют об уникальной чувствительности дифракции в условиях полного внешнего отражения к малым отклонениям от точной ориентации отражающих плоскостей. Из анализа,

проведенного в разделах 2–3, следует, что наибольшие различия должны проявляться в интервале углов падения

$$\Phi_0 < \Phi < \Phi_{BL} = \sqrt{\Phi_0^2 + \Psi^2},$$

т. е. при  $\Phi \approx \Phi_0$  (если  $|\Psi| \ll \Phi_0$ ).

На рис. 4 представлены кривые  $P_h^s(\Phi')$  для угла  $\Phi = 14'$ , рассчитанные для (220)-отражения  $\text{Cu } K_\alpha$ -излучения от монокристаллов кремния ( $\Phi_0 = 13,34'$ ) и разориентаций  $\varphi = \pm 5'$  ( $\Psi = \pm 4'$ ). Рисунок 4 показывает, что разориентация всего в  $5'$  обуславливает изменение интенсивности на 25%.

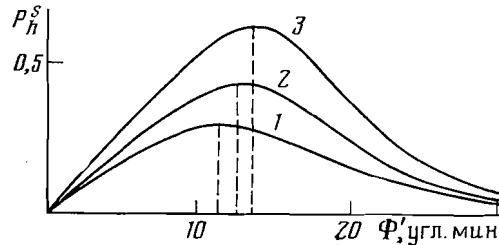


Рис. 4. Влияние малой разориентации на интенсивность кривых  $P_h^s(\Phi')$  ( $\Phi = 14'$ )  
1 —  $\varphi = 5'$ , 2 — 0, 3 —  $5'$

Согласно этим данным в экспериментах по дифракции в условиях полного внешнего отражения необходимо предъявлять повышенные требования к точности ориентации поверхности исследуемых кристаллов относительно отражающих плоскостей, а также к прецизионности обработки поверхности. В частности, определенные расхождения между теоретическими расчетами и экспериментальными измерениями, наблюдавшиеся в [3], по-видимому, обусловлены слабыми отклонениями поверхности образца от плоскости (111), возникающими в результате резки и обработки поверхности.

Авторы выражают благодарность Р. М. Имамову за полезные обсуждения и интерес к работе.

#### Литература

1. Marra W. C., Eisenberger P., Cho A. Y. J. Appl. Phys., 1979, 50, 6927.
2. Afanas'ev A. M., Melkonyan M. K. Acta cryst., A, 1983, 39, 207.
3. Imatov R. M., Golovin A. L., Stepanov S. A., Afanas'ev A. M. In: Proc. Int. Ion engng congr. ISIAI'83 and IPAT'83. Kyoto, 1983, p. 1913; Phys. status solidi, a, 1983, 77, k91.
4. Пинскер Э. Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982.
5. Kishino A., Kohra K. Japan. J. Appl. Phys., 1971, 10, 551.

Институт кристаллографии  
АН СССР

Поступила в редакцию  
7.II.1983