

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.734

АЛЕКСАНДРОВ П. А., МЕЛКОНЯН М. К., СТЕПАНОВ С. А.

СТРУКТУРА ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ ПРИ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В УСЛОВИЯХ ПОЛНОГО ВНЕШНЕГО ОТРАЖЕНИЯ

Дифракция рентгеновских лучей в условиях полного внешнего отражения (РДПВО) является новым мощным методом исследования структуры поверхностных кристаллических слоев. Принципиальная идея этого метода была предложена в [1], теория для совершенных кристаллов построена в [2], а экспериментальная схема осуществлена в [3].

В методе РДПВО падающий рентгеновский пучок, с одной стороны, удовлетворяет условию дифракции Лауэ для плоскостей, перпендикулярных к поверхности кристалла, а с другой, — образует малый угол Φ_0 с поверхностью и претерпевает полное внешнее отражение. При этом дифрагированная волна распространяется в кристалле под малым углом к поверхности и также претерпевает полное внешнее отражение: из кристалла под малым углом Φ_h выходит зеркально отраженная дифрагированная волна, образующая с обычной зеркально отраженной волной угол $2\theta_B$ (рис. 1).

В работе дан теоретический анализ соотношения амплитуд волновых полей в кристалле при РДПВО, а также исследована глубина проникновения излучения в кристалл в зависимости от угла падения Φ_0 при выполнении точного условия Брэгга ($\alpha=0$; $\alpha=-2 \sin(2\theta_B)(\theta-\theta_B)$) — стандартный параметр отклонения от условия Брэгга

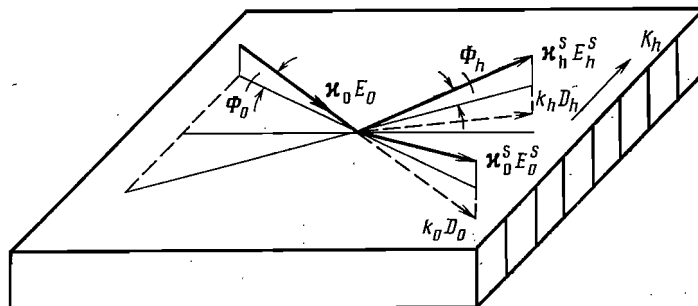


Рис. 1. Схема дифракции рентгеновских лучей в условиях полного внешнего отражения

Вертикальными линиями обозначены отражающие плоскости

в динамической теории) и от α при фиксированных Φ_0 . Для простоты принималась во внимание только σ -поляризация. В [2] показано, что угол Φ_h определяется не только углом падения, но и отклонением от условия Брэгга; а именно имеет место следующее соотношение:

$$\Phi_h^2 = \Phi_0^2 - \alpha. \quad (1)$$

Соотношение (1) позволяет записывать интенсивность отраженной дифрагированной волны как функцию угла выхода, что гораздо проще с экспериментальной точки зрения [3]. Поэтому в настоящей работе зависимость от параметра α рассматривается так же, как зависимость от угла Φ_h .

Анализ амплитуд волновых полей и глубины их проникновения дает возможность определить при каких значениях углов Φ_0 и Φ_h интенсивность отраженной дифрагированной волны наиболее чувствительна к нарушениям в тонких поверхностных слоях.

При РДПВО в кристалле возбуждаются два волновых поля [2], каждое из которых состоит из проходящей D_0 и дифрагированной D_h волн. Глубины проникновения полей определяются по формуле (для каждого из полей проходящая и дифрагированная волны имеют одинаковую глубину проникновения)

$$l_i = \frac{\lambda}{2\pi \operatorname{Im} u_i}, \quad (2)$$

где

$$u_i = \sqrt{\Phi_0^2 + \chi_0 - \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha^2}{4} + \chi_h \chi_{\bar{h}}}}, \quad i = 1, 2. \quad (3)$$

Здесь $\chi_0, \chi_h, \chi_{\bar{h}}$ — соответствующие Фурье-компоненты тензора поляризуемости, λ — длина волны падающего излучения.

Мы видим, что при $\alpha=0$ существуют два характерных угла падения, связанные с обращением u_i в нуль (при отсутствии поглощения): $\Phi_1 = \sqrt{|\chi_0 - \chi_h|}$ и $\Phi_2 = \sqrt{|\chi_0 + \chi_h|}$; Φ_1 соответствует критическому углу полного внешнего отражения для первого волнового поля, а Φ_2 — для второго поля. В случае бездифракционного рассеяния ($\chi_h = 0$) существует один критический угол полного внешнего отражения $\Phi_{кр} = \sqrt{|\chi_0|}$, причем $\Phi_1 < \Phi_{кр} < \Phi_2$. Появление двух критических углов понятно с физической точки зрения: полю, для которого реализуется эффект Бормана, соответст-

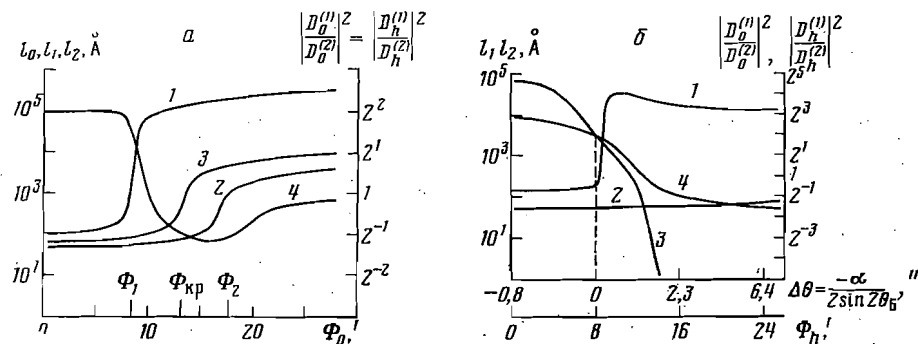


Рис. 2. Изменение глубины проникновения волновых полей и отношения их интенсивностей в зависимости от угла падения ($\alpha=0$) (а) и отклонения от условия Брэгга для $\Phi_0 = 8' < \Phi_1$ (б)

а: 1 — глубина проникновения первого поля, 2 — второго поля, 3 — глубина проникновения без дифракции, 4 — отношение квадратов амплитуд волновых полей $\left| \frac{D_h^{(1)}}{D_h^{(2)}} \right|^2 = \left| \frac{D_0^{(1)}}{D_0^{(2)}} \right|^2$,

б: 1, 2 — то же, что на рис. 2, а, 3 — отношение квадратов модулей амплитуд проходящих волн, 4 — дифрагированных волн

ует малая эффективная амплитуда взаимодействия с атомами вещества, а значит и меньший критический угол; для второго поля, наоборот, характерно сильное взаимодействие, и, следовательно, больший критический угол. Ранее на возможность появления двух критических углов при дифракционном рассеянии указывалось в [4]. На рис. 2, а в качестве примера приведены зависимости глубин проникновения обоих полей от угла падения при $\alpha=0$, рассчитанные для Si (отражение (220), Си K_α -излучение). Для сравнения приведена угловая зависимость глубины проникновения излучения в кристалл без дифракции

$$l_0 = \frac{\lambda}{2\pi \operatorname{Im} \sqrt{\Phi_0^2 + \chi_0}}.$$

Для рассматриваемого случая критические углы имеют следующие значения: $\Phi_1 = 8,4'$, $\Phi_{кр} = 13,3'$, $\Phi_2 = 16,8'$. При $\Phi_0 < \Phi_1$ оба поля проникают в кристалл на малую глубину ($l_1 \sim 100$ А, $l_2 \sim 50$ А), причем выполняется соотношение

$$l_1 > l_0 > l_2 \quad (4)$$

($l_0 \sim 70$ А). За границей области полного внешнего отражения глубина проникновения полей резко возрастает, но условие (4) сохраняется. Например, при $\Phi_0 = 20'$ $l_1 = 26$ мкм, $l_0 = 6000$ А, $l_2 = 2000$ А. Таким образом, можно считать, что РДПВО имеет наибольшую чувствительность к тонким слоям при углах падения $\Phi_0 < \Phi_1$.

Для определения вкладов первого и второго полей в интенсивность отраженной дифрагированной волны I_h^s проанализируем соотношение их интенсивностей на поверхности кристалла

$$I_h^s = |D_h^{(1)} + D_h^{(2)}|^2,$$

$$\left| \frac{D_h^{(1)}}{D_h^{(2)}} \right|^2 = \left| \frac{u_2 + \Phi_0}{u_1 + \Phi_0} \right|^2. \quad (5)$$

Соответствующий график представлен на рис. 2, а. Согласно формулам (3) и (5), в случае $\alpha=0$ при уменьшении угла падения отношение интенсивностей стремится

к величине $\left| \frac{\chi_0 + \chi_h}{\chi_0 - \chi_h} \right| \approx 1$. При изменении угла падения от Φ_1 до Φ_2 отношение

(3) уменьшается, и при $\Phi_0 = \Phi_2$ интенсивность второго поля на поверхности превышает интенсивность первого поля. Причина уменьшения относительного вклада первого поля в отраженную дифрагированную волну состоит в том, что при $\Phi_0 > \Phi_1$ для первого поля перестают выполняться условия полного внешнего отражения, и оно проникает в глубь кристалла. При $\Phi_0 > \Phi_2$ аналогичное явление имеет место для второго поля, и отношение интенсивностей полей стремится к единице. В целом можно сказать, что оба поля вносят сравнимый вклад в интенсивность отраженной дифрагированной волны во всем диапазоне углов.

Зависимость распределения волновых полей в кристалле от параметра α имеет различный вид для различных углов падения. Тем не менее можно сформулировать закономерности, общие для всех углов Φ_0 . В силу соотношения (1) при $\alpha > \Phi_0^2$ угол Φ_h становится мнимым, что соответствует эффекту полного внутреннего отражения для дифрагированной волны (см. [5, 6]). В данной работе мы рассматриваем только область $\alpha < \Phi_0^2$.

При отклонениях от точного условия Брэгга в сторону положительных α ($\Phi_h \rightarrow 0$) основную роль играет первое поле, но вклады обоих полей в интенсивность отраженной дифрагированной волны сравнимы (рис. 2, б). Глубины проникновения первого и второго полей меньше соответствующих значений при $\alpha = 0$ (сравните рис. 2, а и б). В области $\alpha \approx 0$ ($\Phi_h \approx \Phi_0$) первое поле имеет максимальную глубину проникновения, что является аналогом эффекта Бормана.

Для отрицательных значений α ($\Phi_h > \Phi_0$) глубина проникновения первого поля относительно велика ($l_1 \approx 1$ мкм) при любых углах падения, но вклад его в интенсивность отраженной дифрагированной волны падает (рис. 2, б, кривая 4). Тем не менее, если не рассматривать очень больших отклонений от точного условия Брэгга, то вклады полей сравнимы. Следовательно, для исследования тонких поверхностных слоев толщиной $\sim 10-100$ Å необходимо выбирать углы падения в интервале $\Phi_0 < \Phi_1$ и анализировать изменение интенсивности отраженной дифрагированной волны для углов выхода $\Phi_h < \Phi_0$; при $\Phi_h > \Phi_0$ метод чувствителен к нарушениям в относительно толстых слоях (~ 1000 Å - 1 мкм).

При больших отклонениях от точного условия Брэгга в сторону отрицательных α ($\Phi_h \gg \Phi_0$) в кристалле остается только проходящая волна $D_0^{(2)}$, глубина проникновения которой стремится к глубине проникновения в случае бездифракционного рассеяния, а остальные волны ($D_0^{(1)}$, $D_h^{(1)}$, $D_h^{(2)}$) исчезают. Таким образом, происходит предельный переход к случаю без дифракции.

Авторы выражают благодарность А. М. Афанасьеву и Р. М. Имамову за постоянный интерес к работе и ценные замечания, а также А. Н. Чузо за помощь в расчетах.

Литература

1. *Marrá 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 Engineering Congress ISIAT'83 and IPAT'83. Kyoto, 1983, p. 1913; Phys. stat. solidi, a, 1983, 77, k91.
4. *Барышевский В. Г.* Письма в Ж. техн. физ., 1976, 2, 112.
5. *Bedynska T.* Phys. status solidi, a, 1973, 19, 365.
6. *Андреев А. В., Козьев Э. К., Матвеев Ю. А., Пономарев Ю. В.* Письма в Ж. эксперим. и теор. физ., 1982, 35, 412.

Институт кристаллографии
АН СССР

Поступила в редакцию
7.II.1983