

УДК 539.26;548.73

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В УСЛОВИЯХ ПОЛНОГО ВНЕШНЕГО ОТРАЖЕНИЯ НА БИКРИСТАЛЛЕ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА РАССОГЛАСОВАНИЯ РЕШЕТОК

Александров П. А., Степанов С. А.

В последние годы возник большой интерес к физике дифракции рентгеновских лучей в условиях полного внешнего отражения (ПВО); проведен ряд важных экспериментальных исследований [1–4], также интенсивно разрабатывается теория [5–8].

Дифракция в условиях ПВО в первую очередь интересна тем, что появилась возможность исследовать структурное совершенство тонких (~ 10 – 100 Å) поверхностных слоев кристаллов. Резкое сокращение толщины слоев, исследуемых в этой геометрии, приводит к тому, что уравнения Такаги – Топена становятся неприменимыми. Иными словами, изменение волновых полей в кристалле происходит на расстояниях, сравнимых с межатомными, и поэтому при рассмотрении дифракции на нарушенной структуре не могут быть опущены вторые производные амплитуд полей.

К сожалению, последовательной общей теории дифракции в этой геометрии в настоящее время не существует, поэтому теоретические работы в данном направлении связаны с важными для практики модельными ситуациями. Рассмотрены задачи дифракции в условиях ПВО на кристалле с поверхностной аморфной пленкой [7], на кристаллической пленке и на бикристалле с большой разницей в параметрах решетки [8]. В указанных работах дифракционные кривые проанализированы в зависимости от угла выхода излучения из кристалла в связи с экспериментальным удобством такой схемы измерений, проводимых в угловом диапазоне порядка минут [2].

Однако возможности этой схемы в определении деформаций кристаллической решетки не изучены. В настоящей работе предложена методика, позволяющая исследовать разность в межатомных расстояниях кристаллической пленки и кристалла-подложки на уровне $\Delta a/a \sim 10^{-5}$ – 10^{-6} , используя измерения по углу выхода из кристалла.

Пусть кристаллический слой и подложка содержат плоскости, перпендикулярные поверхности, на которых реализуется дифракция в условиях ПВО. Тогда при больших различиях в межплоскостных расстояниях ($\Delta a/a \geq 10^{-4}$ – 10^{-5}) при выполнении условия Брэгга для подложки наблюдается дифракционное рассеяние только от подложки, а кристаллическая пленка будет восприниматься как аморфная, и наоборот. В схеме измерения по углу выхода Φ_h коллимация по углам Брэгга отсутствует, поэтому дифракционная кривая по Φ_h является простым наложением отражений от пленки и от подложки и состоит из двух частично перекрывающихся пиков (рис. 1, кривая 2), один из которых соответствует отражению от пленки, а другой – от подложки. Важно отметить, что расстояние между двумя пиками связано главным образом с толщиной пленки, а не с разностью межатомных расстояний, которую непосредственно из кривой на рис. 1 определить нельзя. Для определения больших значений

$\Delta a/a$ следует использовать дифракционную кривую по углу Брэгга, которая в этом случае состоит из двух полностью разделенных пиков отражений от пленки и от подложки, расстояние между которыми пропорционально $\Delta a/a$.

Иная ситуация складывается при рассогласованиях $\Delta a/a \sim 10^{-5} - 10^{-6}$, когда пики от пленки и от подложки начинают перекрываться по углам Брэгга. Измерения по углу Брэгга в данной геометрии при этом становятся практически невозможными, так как требуют точной двойной коллимации падающего пучка. В то же время кривые по углу выхода при

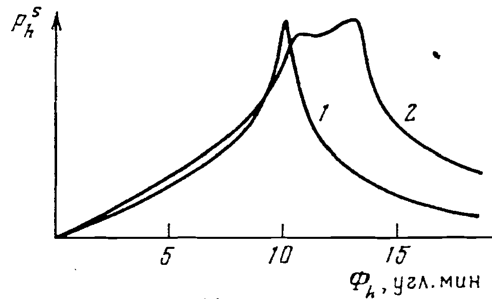


Рис. 1

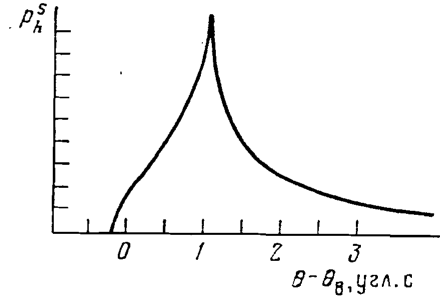


Рис. 2

Рис. 1. Дифракционные кривые по углу выхода в условиях полного внешнего отражения для совершенного кристалла (1) и для бикристалла с большой разностью межплоскостных расстояний (2). Расчет выполнен для Si; отражение (220), Cu K_{α} -излучение, σ -поляризация, угол падения $\Phi_0=4$, $t=50$ А

Рис. 2. Дифракционная кривая в зависимости от отклонения от угла Брэгга для совершенного монокристалла Si, рассчитанная при тех же условиях, что и кривая 1 рис. 1

уменьшении $\Delta a/a$ в этом диапазоне будут демонстрировать переход от кривой 2 (рис. 1) к кривой от идеального кристалла (рис. 1, кривая 1) и, следовательно, позволят в принципе определить величину рассогласования решеток.

Чтобы определить интервал изменений межплоскостного расстояния, доступных для измерения с помощью дифракционных кривых по углу выхода, рассмотрим физику многократного дифракционного рассеяния на бикристалле с малым $\Delta a/a$.

Обозначим через κ_0 , E_0 соответственно волновой вектор и амплитуду рентгеновской волны, дифрагирующей на бикристалле, а через $\alpha^{пл}$ и $\alpha^{пл}$ — параметры отклонения этой волны от условий Брэгга в пленке и в подложке:

$$\alpha^{пл,пл} = \frac{(\kappa_0 + K_h^{пл,пл})^2 - \kappa_0^2}{\kappa_0^2} \approx -2 \sin(2\theta_B) (\theta - \theta_B^{пл,пл}). \quad (1)$$

Здесь $K_h^{пл}$, $K_h^{пл}$ — соответственно векторы обратной решетки; $\theta_B^{пл}$, $\theta_B^{пл}$ — углы Брэгга, соответствующие пленке и подложке.

При дифракции на бикристалле с большой разницей межплоскостных расстояний волновое поле над входной поверхностью кристалла может быть записано в виде

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}) = & E_0 \exp[i(\kappa_0 \Phi_0 z + \kappa_0 \rho)] + E_0^s \exp[i(-\kappa_0 \Phi_0 z + \kappa_0 \rho)] + \\ & + E_h^{s(0)} \exp\{i[-\kappa_0 \Phi_h^{(0)} z + (\kappa_0 + K_h^{пл}) \rho]\} + E_h^{s(1)} \exp\{i[-\kappa_0 \Phi_h^{(1)} z + (\kappa_0 + K_h^{пл}) \rho]\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь Φ_0 — угол падения, ρ — координатный вектор вдоль поверхности кристалла; z — координата вдоль внутренней нормали к поверхности; E_0^s ,

$E_h^{s(0)}$, $E_h^{s(1)}$ — амплитуды зеркально-отраженной и зеркально-дифрагированной волн; $\Phi_h^{(0,1)}$ — углы выхода зеркально-дифрагированных волн, определяемые из условий

$$\Phi_h^{(0,1)2} = \Phi_0^2 - \alpha^{пд,пд}. \quad (3)$$

Поскольку разность межплоскостных расстояний предполагается большой:

$$|\alpha^{пд} - \alpha^{пп}| \gg 2|\chi_h| \quad (4)$$

(χ_h — поляризуемость кристалла), то волна κ_0 не может одновременно удовлетворять условиям дифракции на пленке и подложке, т. е. либо $|\alpha^{пп}| \gg 2|\chi_h|$, либо $|\alpha^{пд}| \gg 2|\chi_h|$, одним из полей $E_h^{s(0)}$, $E_h^{s(1)}$ можно пренебречь.

При малой разности параметров решетки

$$|\alpha^{пд} - \alpha^{пп}| \ll 2|\chi_h| \quad (5)$$

структура волнового поля существенно усложняется, так как оба поля $E_h^{s(0)}$ и $E_h^{s(1)}$ возбуждаются одновременно и, кроме того, появляются многократные дифракционные рассеяния из пленки в подложку и обратно:

$$E(\mathbf{r}) = E_0 \exp[i(\kappa_0 \Phi_0 z + \kappa_0 \rho)] + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_0^{s(n)} \exp\{i[-\kappa_0 \Phi_s^{(n)} z + (\kappa_0 + \Delta K_h n) \rho]\} + E_h^{s(n)} \exp\{i[-\kappa_0 \Phi_n^{(n)} z + (\kappa_0 - K_h^{пп} + \Delta K_h n) \rho]\}. \quad (6)$$

Здесь

$$\Delta K_h = K_h^{пд} - K_h^{пп}. \quad (7)$$

Интерференция многократно рассеянных волн $E_h^{s(n)}$ по существу формирует переход от кривой 1 к кривой 2 (рис. 1) при уменьшении согласования решеток.

Другая особенность состоит в появлении малоуглового рассеяния (незеркальных волн) в направлении, близком к зеркально-отраженному пучку. Соотношения для углов выхода $\Phi_h^{(n)}$ и $\Phi_s^{(n)}$ могут быть получены из граничных условий для волновых векторов:

$$\Phi_s^{(n)2} = \Phi_0^2 - \Delta \alpha_s n, \quad (8)$$

$$\Phi_h^{(n)2} = \Phi_0^2 - \alpha^{пп} - \Delta \alpha_h n = \Phi_0^2 - \alpha^{пд} - \Delta \alpha_h (n-1). \quad (9)$$

Здесь

$$\Delta \alpha_s = \frac{(\kappa_0 + \Delta K_h)^2 - \kappa_0^2}{\kappa_0^2} \approx \frac{2\kappa_0 \Delta K_h}{\kappa_0^2} \quad (10)$$

-- параметр, определяющий отличие углов выхода волн $E_0^{s(n)}$ при $n \neq 0$ от угла выхода зеркально-отраженного пучка;

$$\Delta \alpha_h = \alpha^{пд} - \alpha^{пп} \approx \frac{2\kappa_h \Delta K_h}{\kappa_0^2} \approx \Delta \alpha_s + \frac{2K_h \Delta K_h}{\kappa_0^2} = \Delta \alpha_s + 8 \sin^2 \theta_B \frac{\Delta a}{a}. \quad (11)$$

Как следует из выражения (11), параметры $\Delta \alpha_h$ и $\Delta \alpha_s$ различаются между собой только при $\Delta a/a \neq 0$.

Таким образом, изучение распределения интенсивности зеркально-отраженного пучка в зависимости от угла выхода из кристалла, так же как анализ формы дифракционных кривых по углу выхода может дать информацию о малых изменениях параметра решетки в приповерхностном слое.

Поскольку в указанных измерениях определяются два различных параметра рассогласования $\Delta\alpha_s$ и $\Delta\alpha_h$, то совместный анализ даст информацию как об угле поворота вектора обратной решетки поверхностного слоя, так и о величине $\Delta a/a$.

Оценим диапазон $\Delta a/a$, измеряемый с помощью кривых по углу выхода. Верхняя граница соответствует началу перекрывания максимумов по углу Брэгга, т. е. $(\Delta a/a)_{\max} \sim |\chi_h|$.

Особенности дифракции в условиях ПВО приводят к тому, что форма максимумов отлична от кривых Дарвина. А именно, при общей ширине основания $\Delta\alpha \sim |\chi_h|$ максимумы отражения имеют форму не «столиков», а острых пиков с полушириной верхушки $\Delta\alpha \sim |\chi_{ih}|$ (рис. 2), где χ_{ih} — мнимая часть поляризуемости кристалла. Очевидно, что переход от кривой 1 к кривой 2 (рис. 1) практически закончится при $(\Delta a/a)_{\min} \sim |\chi_{ih}|$.

Таким образом,

$$|\chi_{ih}| \leq \Delta a/a \leq |\chi_h|. \quad (12)$$

Например, для отражения (220) от монокристалла Si при использовании $\text{CuK}\alpha$ -излучения

$$4 \cdot 10^{-7} < \Delta a/a < 10^{-5}, \quad (13)$$

т. е. возможно измерение $\Delta a/a$ в широких пределах в слоях толщиной $\sim 10-100 \text{ \AA}$.

Подчеркнем, что для выполнения указанных экспериментов необходима достаточно «острая» форма максимумов. Это возможно только при малых углах падения $\Phi_0 \leq (|\chi_0 - \chi_h|)^{1/2}$ (в рассматриваемом примере $\Phi_0 \leq 8^\circ$).

Авторы выражают признательность А. М. Афанасьеву и Р. М. Имамову за полезные обсуждения и ценные замечания в процессе работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Marra W. C., Eisenberger P., Cho A. Y. J. Appl. Phys., 1979, v. 50, p. 6927.
2. Golovin A. L., Imatov R. M., Stepanov S. A. Acta Crystallogr., 1984, v. A40, p. 225.
3. Golovin A. L., Imatov R. M. Phys. Stat. Sol. (a), 1983, v. 77, p. K91.
4. Golovin A. L., Imatov R. M. Phys. Stat. Sol. (a), 1984, v. 80, p. K65.
5. Afanas'ev A. M., Melkonyan M. K. Acta Crystallogr., 1983, v. A39, p. 207.
6. Александров П. А., Афанасьев А. М., Степанов С. А. Кристаллография, 1984, т. 29, с. 197.
7. Alexandrov P. A., Afanas'ev A. M., Melkonyan M. K., Stepanov S. A. Phys. Stat. Sol. (a), 1984, v. 81, p. 47.
8. Александров П. А., Афанасьев А. М., Степанов С. А. Поверхность, 1984, № 8, с. 9.

Институт кристаллографии АН СССР,
Москва

Принята в печать
21.II.1985

X-RAY DIFFRACTION UNDER SPECULAR REFLECTION CONDITIONS ON BICRYSTALS AND THE DETERMINATION OF LATTICE SPACING MISFITS

Alexandrov P. A., Stepanov S. A.

The potentiality of determination of lattice spacing small variations ($\Delta a/a \leq 10^{-5}-10^{-6}$) in thin surface layers of crystals by X-ray diffraction under specular reflection conditions has been theoretically studied. It has been shown that the small variations of lattice spacings in layers as small as $\sim 10-100 \text{ \AA}$ display explicitly in the shape of diffraction curves taken depending on the angle of emergence of the diffracted waves from the crystal surface and cause small angle scattering in the direction of a specularly reflected beam.