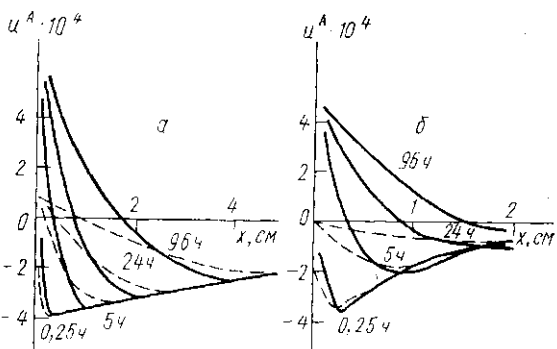


в основном атомы сорта  $A$ , обогащая собой приповерхностный слой. Вследствие этого в первоначально однородном сплаве возникают градиенты концентраций атомов обоих сортов и начинается процесс взаимной диффузии, который затормаживает релаксацию системы к равновесному распределению. Релаксация неравновесных вакансий, более быстрая, чем характерный масштаб времени взаимной диффузии, приводит к тому, что в конечном состоянии образуется поверхностный слой, обогащенный одним из компонентов бинарного сплава. Этот

Распределение избыточной концентрации атомов сорта  $A$  по глубине в зависимости от времени при  $\alpha=10$  (а) и  $100 \text{ м}^{-1}$  (б),  $D_A \gg D_B$  (сплошные кривые), и  $D_A \approx D_B$  (пунктирные)



результат имеет значение для практики как способ регулирования состава поверхностного слоя.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Назаров А. В., Гуров К. П. // ФММ. 1972. 34. С. 936—941. [2] Назаров А. В., Гуров К. П. // ФММ. 1974. 37. С. 497—503. [3] Назаров А. В., Гуров К. П. // ФММ. 1974. 38. С. 486—492. [4] Гуров К. П. Основания кинетической теории. М., 1966. [5] Гуров К. П., Гусак А. М. // ФММ. 1981. 52. С. 603—611. [6] Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М., 1966.

Поступила в редакцию  
03.10.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 5

УДК 548.732

## РАЗВИТИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В НЕПРЕРЫВНО-СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛАХ

А. В. Колпаков, В. И. Пуногов

(кафедра физики твердого тела)

В настоящее время широко используется рентгенодифракционный метод исследования непрерывно-слоистых кристаллов, под которыми понимают объекты с плавно меняющимся периодом кристаллической решетки по толщине образца. Примерами таких кристаллов могут служить неоднородные эпитаксиальные пленки, ионно-имплантированные и диффузионные приповерхностные слои. Для решения обратной задачи восстановления строения искаженных приповерхностных слоев по рентгенодифракционным данным необходимо детальное физическое понимание процесса дифракции на такого рода объектах.

В данной работе на основе общих оптических принципов дифракции дана физическая интерпретация процесса рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с линейным изменением периода решетки (ЛИПР).

Согласно развитой в работах [1, 2] динамической теории дифракции рентгеновских лучей в кристалле произвольной толщины  $l$  с ЛИПР характер дифракции определяется отношением  $l_1/l_{\text{ext}}$ , где  $l_{\text{ext}}$  — длина первичной экстинкции, а  $l_1 = a^{3/2} (\Delta n)^{-1/2}$  — новый характерный параметр, определяющий толщину слоя, в котором рассеянные на разной глубине рентгеновские волны из-за линейного изменения периода решетки  $a$  по толщине на величину  $\Delta n$  получают монотонно нарастающий от 0 до  $\pi$  фазовый сдвиг;  $n$  — порядок дифракционного отражения.

Величина отношения  $l_1/l_{\text{ext}}$  соответствует различным предельным случаям дифракции [2]:  $l_1/l_{\text{ext}} \rightarrow \infty$  — идеальный кристалл;  $l_1/l_{\text{ext}} \gg 1$  — слабые искажения (эikonальное приближение);  $l_1/l_{\text{ext}} \sim 1$  — сильно искаженный кристалл. Кинематическая

дифракция отвечает выполнению следующих условий:  $l_1/l_{ext} \ll 1$  или  $l/l_{ext} \ll 1$ . Последние условия могут выполняться и одновременно.

В следующем слое толщиной  $l_2$  фазы рассеянных на атомных плоскостях волн меняются от  $\pi$  до  $2\pi$  и т. д., причем в кристалле с ЛИПР набег фазы является квадратичной функцией координаты  $z$ . Таким образом, при каждом данном отклонении  $\Delta\theta$  угла скольжения падающего на кристалл луча от угла Брэгга  $\theta_0$ , который отвечает точно выполнению условия дифракции на самом верхнем периоде кристаллической решетки, кристалл с ЛИПР можно разбить на фазовые слои, в некотором смысле подобные зонам Френеля в оптике (рис. 1, а). Толщина фазового слоя  $l_m$  с номером  $m$ , где  $m=1, 2, 3, \dots$ , определяется выражением  $l_m = l_1 \times (\sqrt{m} - \sqrt{m-1})$ . Каждому такому слою можно приписать средний параметр решетки  $a_m = a + \Delta a l_1 \sqrt{m}(2a)^{-1}$ . Толщины слоев с ростом  $m$  уменьшаются, так что определяющий вклад в дифракционную интенсивность дает первый слой  $l_1$ .

Верхняя граница первого слоя, таким образом, определяется условием точного выполнения закона Вульфа—Брэгга для лежащего на ней периода решетки. Этот период для краткости будем называть брэгговским. На нижней границе первого слоя находится атомный период, который отражает волны с фазовым сдвигом  $\pi$  относительно брэгговского периода. Поэтому, например, для кристалла с  $\Delta a > 0$  изменение угловой отстройки  $\Delta\theta$  в сторону больших углов скольжения ( $\Delta\theta > 0$ ) приводит к вы-

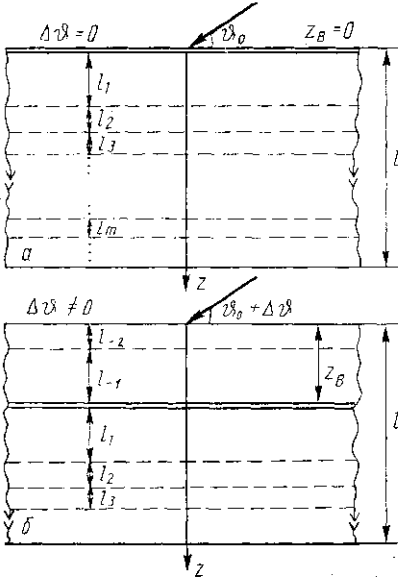


Рис. 1. Фазовые слои в кристалле с ЛИПР: брэгговский период находится на поверхности кристалла (а) и на глубине  $z_B$  внутри кристалла (б)

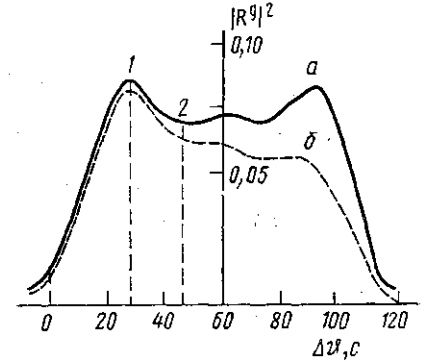


Рис. 2. Теоретические КДО от неоднородных кристаллов с ЛИПР толщиной  $l=0,8$  мкм системы  $Al_xGa_{1-x}As$ : а — прозрачный кристалл; б — кристалл с поглощением ( $CuK_{\alpha 1}$ -излучение, отражение (004),  $\sigma$ -поляризация,  $l_1=0,35$  мкм)

ходу пучка рентгеновских лучей из брэгговского положения и, следовательно, уменьшению рассеянной интенсивности. При уменьшении угла скольжения ( $\Delta\theta < 0$ ) брэгговский период, а с ним и вся структура фазовых слоев перемещаются в глубь кристалла на расстояние  $z_B = n \operatorname{ctg} \theta_0 (l_1^2/a) |\Delta\theta|$  от входной поверхности (рис. 1, б). Величина брэгговского атомного периода при  $\Delta\theta \neq 0$  равна  $a + \Delta a [n \operatorname{ctg} \theta_0 (l_1/a)^2 \times |\Delta\theta|]$ . При этом через входную поверхность кристалла поочередно входят симметрично расположенные относительно брэгговского периода минус первый ( $l_{-1}$ ), минус второй ( $l_{-2}$ ) и т. д. фазовые слои.

Таким образом, для кристалла с ЛИПР фазовые слои расположены симметрично относительно брэгговского периода. С изменением направления падения рентгеновских лучей эти слои перемещаются по кристаллу. Осцилляции на кривой дифракционного отражения (КДО) [2] вызваны входением в кристалл и одновременным выходом из него синфазных или антифазных первому фазовому слою полупериодных слоев. Симметричный вид КДО от непоглощающего кристалла с ЛИПР толщиной  $l$  [2] объясняется симметричной структурой фазовых слоев относительно брэгговского периода, расположенного посередине кристалла. Угловая отстройка при этом равна  $\Delta\theta_c = -(\Delta a \operatorname{tg} \theta_0 (2a^2)^{-1})$ . При учете фотоэлектрического поглощения воз-

никает угловая асимметрия КДО, которая вызвана тем, что интенсивность дифракционного поля уменьшается по мере перемещения первого фазового слоя в глубину кристалла (рис. 2).

Угловые положения осцилляций КДО от кристалла с ЛИПР в случае конечно-го непоглощающего кристалла зависят как от  $l_1$  так и от  $l_2$  и могут быть определены с помощью численных методов расчета соответствующих уравнений [2]. В случае кристалла с достаточно большой эффективной поглощающей толщиной экстремумы осцилляций КДО расположены на угловых расстояниях  $\Delta\vartheta_m = a \operatorname{tg} \vartheta_0 (4m - 1)^{1/2} / (2l_1 n)$ , где  $m = 1, 2, 3, \dots$  — номер экстремума на КДО. Это же выражение определяет положения осцилляций для полубесконечного кристалла.

При  $m = 1$ ,  $\Delta\vartheta_1 = a\sqrt{3} \operatorname{tg} \vartheta_0 (2l_1 n)^{-1}$ , что соответствует перемещению брэгговского периода на расстояние  $l_1$  в глубину кристалла, т. е. входу в кристалл синфазного первого минус первого слоя толщиной  $l_{-1} = l_1$  (см. рис. 1, б). Значение дифракционной интенсивности на КДО в этом случае соответствует осцилляционному максимуму (точка 1 на рис. 2). При  $\Delta\vartheta_2 = a\sqrt{7} \operatorname{tg} \vartheta_0 (2l_1 n)^{-1}$  в кристалл входит антифазный первый минус второй слой толщиной  $l_{-2} = l_2$ , при этом на КДО появляется локальный минимум (точка 2 на рис. 2) и т. д.

Модель кристалла с ЛИПР можно использовать для конструирования стартового приближения при решении обратных задач восстановления неоднородно-слоистых кристаллов, профили деформаций которых в разумных пределах аппроксимируются постоянным градиентом. При этом реальный профиль деформации заменяется линейной функцией и в первом приближении все рассмотрение дифракции проводится, как для кристалла с ЛИПР.

Согласно значениям  $\Delta\vartheta_m$  для кристалла с ЛИПР,  $l_1$  выражается через угловые расстояния между соседними экстремумами КДО  $\delta_m = \Delta\vartheta_{m+1} - \Delta\vartheta_m$  в виде

$$l_1 = \frac{a}{\delta_m \operatorname{ctg} \vartheta_0 \cdot n} \left( \sqrt{m + \frac{3}{4}} - \sqrt{m - \frac{1}{4}} \right). \quad (1)$$

Считая, что дальний пик на осцилляционной структуре экспериментальной КДО соответствует дифракции на первом фазовом слое у входной поверхности, для экспериментальных значений  $\delta_m$  по формуле (1) определяем  $l_1$  и соответственно  $\Delta a$ . Толщина всего искаженного слоя  $l$  определяется затем через  $l_1$  из выражения  $l = (l_1^2/a) n \operatorname{ctg} \vartheta_0 \cdot \Delta\Omega$ , где  $\Delta\Omega$  — угловая ширина дифракционного спектра, соответствующая перемещению брэгговского периода от входной до выходной поверхности искаженного слоя.

Указанная процедура использована для построения стартового приближения при решении обратной задачи восстановления строения имплантированных ионами Si слоев GaAs и неоднородных эпитаксиальных пленок системы  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/(001)\text{GaAs}$  с предположительно постоянным градиентом состава. При этом исходная невязка для ионно-имплантированных слоев оказалась порядка 30%, а для неоднородных пленок — менее 20%.

Использование стартового приближения эффективно уменьшает затраты машинного времени при решении обратной задачи и снижает вероятность попадания в локальный минимум невязки.

Полученные в настоящей работе результаты могут быть непосредственно использованы при исследовании рассеяния света в жидких холестерических кристаллах с линейным изменением шага спиральной структуры [3], нейтронов в градиентных кристаллах [4], мягкого рентгеновского излучения на многослойных зеркалах [5] и т. д.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Колпаков А. В., Пунегов В. И. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3, Физ. Астрон. 1984. 25. № 6. С. 64—67. [2] Kolpakov A. V., Punegov V. I. // Solid State Comm. 1985. 54. P. 573—578. [3] Беляков В. А., Сонин А. С. Оптика холестерических жидких кристаллов. М., 1982. [4] Albertini G. et al. // Acta Cryst. 1977. A33. P. 360—365. [5] Гапонов С. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1985. 41. С. 53—55.

Поступила в редакцию  
03.12.85