УДК 538.26:539.73

ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЧНОЙ АМОРФИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ НА ИНТЕГРАЛЬНЫЕ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ КРИВЫЕ СКОЛЬЗЯЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

И. А. Шипов, М. А. Андреева

(кафедра физики твердого тела)

Расчетным путем показано, что частичная аморфизация поверхностного слоя может уменьшать абсолютные значения интенсивности интегральных кривых РД ПВО, а наиболее достоверно обнаруживается в осциллирующем поведении «хвостов» диф-ференциальных кривых РД ПВО.

В последнее время интенсивно изучаются возможности метода скользящей рентгеновской дифракции в условиях полного внешнего отражения (РД ПВО) для выявления характера нарушений кристаллической структуры поверхности, подвергнутой механической обработке, имплантации и т. д. [1--4]. Интерпретация экспериментальных интегральных кривых РД ПВО базировалась до сих пор на теоретической модели двухслойной среды: аморфная пленка+идеальный кристалл [5, 6]. В ряде случаев преимущественно при исследованиях имплантированных поверхностей такой подход приводил к определенным трудностям: подгонка теоретических кривых к экспериментальным путем сравнения их формы давала одно значение толщины аморфного слоя (L_{am}), а при сопоставлении их абсолютных интенсивностей — другое ($L_{am}^{\circ \Phi}\Phi$), причем $L_{am}^{\circ \Phi}\Phi$ оказывалось больше L_{am} на порядок [1, 2]. Для объяснения этого противоречивого результата в работах [1, 2] сделано предположение о наличия между аморфным слоем и идеальным кристаллом частично аморфизованного слоя, толщине которого и соответствует $L_{am}^{\circ \Phi \Phi}$.

Для изучения влияния частично аморфизованных слоев на кривые РД ПВО мы использовали более общую теорию [7, 8], позволяющую рассматривать произвольные профили изменения электронной плотности кристалла или аморфизации в поверхностном слое. Рассчитанные интегральные кривые РД ПВО для различных профилей аморфизации поверхностного слоя приведены на рис. 1. Изменения электронной плотности вблизи поверхности не учитывались.

Расчеты обнаруживают важный момент: частичная аморфизация слоя той же толщины, что и первоначально рассматриваемая аморфная пленка, может уменьшать (!) абсолютную интенсивность интегральной кривой РД ПВО в несколько раз, практически не изменяя ее формы (ср. кривые 1 и 3 на рис. 1). Заметим здесь, что уменьшение абсолютной интенсивности интегральных кривых РД ПВО с увеличением толцины аморфной пленки в модели аморфная пленка-идеальный кристалл происходит немонотонно (вследствие интегреренционных эффектов в пленке) и для значительного уменьшения их интенсивности необходимо увеличить толцину аморфной пленки, как правило, более чем на порядок, что и сделано в работах [1, 2]. Второй важный момент, который следует из сопоставления расчетных кривых на рис. 1, — это довольно очевидная неоднозначность в определении профиля аморфизации и толщины нарушенного слоя, возникающая при обработке интегральных кривых даже с учетом их абсолютной интенсивности.

Существенно большую информацию о нарушениях кристаллической структуры поверхностного слоя содержат дифференциальные кривые РД ПВО. Расчетные дифференциальные кривые, соответствующие профилям аморфизации 1, 2, 3 на рис. 1, обнаруживают принципиальные различия. В частности, для профиля 2 «на хвосте» дифференциальной кривой (при $\varphi_h \gg \varphi_c$, φ_h — угол выхода зеркальной дифрагированной волны, φ_c — критический угол ПВО) появляются осцилляции. Эти осцилляции, как показали расчеты, являются характерным признаком (хотя и не всегда ярко выраженным) наличия частично аморфизованного поверхностного слоя. Действительно, аморфная пленка, как известно [5], может дать осцилляции «на максимуме» дифференциальной кривой РД ПВО, но «на хвостах» дифференциальных кривых как в случае идеального кристалла, так и в случае аморфной пленки имеет место монотонный спад интенсивности. Расчеты для простейшего случая ступенчатого профиля аморфиз авции показали, что амплитуда осцилляций «на хвостах» дифференциальных кривых максимальна, когда эффективная рассеивающая способность пленки χ_h составляет приблизительно половину соответствующей величины в идеальной подложке χ_h^{id} .

Расчетные кривые, приведенные на рис. 2, иллюстрируют зависимость периода осцилляций от толщины L частично аморфизованного слоя, который оказался при-

Сблизительно равным λ/L (λ — длина волны), а также независимость периода от **этлубины** залегания этого слоя (ср. рис. 2, б и в). Замена ступенчатого профиля аморфизации линейным приводит лишь к изменению начальной фазы осцилляций, но зне их периода.



Эрис. 1. Расчетные интегральные кривые РД ЭПВО, нормированные на максимум интенсивности интегральной кривой от идеального кристалла $I^{id}_{h,max}$, для различных апрофилей аморфизации поверхностного слоя, схематически изображенных на вставке. Отражение (220) Si, Cu K_a-излучение, с-поляризация, эффективная разориентация $\psi = 0$

Рис. 2. Поведение интенсивности дифференднальных кривых РД ПВО при больших углах выхода зеркальной дифрагированной волны фл для различных профилей аморфизация поверхностного слоя; $\varphi_0 = 15'$. Кривые нормированы на максимум интенсивности соответствующих дифференциальных жривых от идеального кристалла. Расчетные параметры те же, что на рис. 1



Обнаруженные расчетным путем закономерности поведения «хвостов» диффе **ренциальных кривых РД ПВО** легко подтвердить аналитически, поскольку при Фа >Фо можно использовать кинематический предел динамической теории дифракции с глубиной, и интенсивность зеркальной дифрагированной волны I_h можно вычислить в кинематическом пределе по формуле

$$I_{h} \sim \frac{2\Phi_{h}^{2}}{\Phi_{0}} |t_{0}t_{h}|^{2} \left| \int_{0}^{L} \frac{\chi_{h}(z)}{2\Phi_{h}} \exp \{ik(\eta_{0} + \eta_{h})z\} d(kz) + \int_{L}^{\infty} \frac{\chi_{h}^{id}}{2\Phi_{h}} \exp \{ik(\eta_{0} + \eta_{h})z\} d(kz) \right|^{2},$$
(1)

тде $\Phi_{0, h} = \sin \varphi_{0, h}$, $\varphi_0 -$ угол скольжения падающей волны, $\eta_{0, h} = V \Phi_{0, h}^2 + \chi_0$, **х**о, h -фурье-компоненты восприимчивости среды, $t_{0,h} = 2\Phi_{0,h}/(\Phi_{0,h} + \eta_{0,h}) -$ френелевские амплитудные коэффициенты пропускания. Для ступенчатого профиля аморфизации ($\chi_h(z) = \text{const} \neq \chi_h^{id}$, $\chi_h \neq 0$) получаем

$$I_h \sim \frac{|t_0 t_h|^2}{2\Phi_0 |\eta_0 + \eta_h|^2} |2 \left(\chi_h^{id} - \chi_h\right) \exp\left\{i\Omega\right\} \cdot \cos\Omega + (2\chi_h - \chi_h^i)|^2, \tag{2}$$

где $\Omega - kL(\eta_0 + \eta_h)/2$. Действительно, здесь имеет место осциллирующая зависимостью от φ_h с периодом λ/L , амплитуда осцилляций максимальна при $2\chi_h = \chi_h i^{d}$. Аналогично для линейного профиля аморфизации получаем

$$I_h \sim \frac{2 |t_0 t_h|^2 |\chi_h^{id}|^2}{\Phi_0 (kL)^2 |\eta_0 + \eta_h|^4} |\exp\{i\Omega\}|^2 |\sin\Omega|^2,$$
(3)

т. е. в этом случае возникает сдвиг по фазе на $\pi/2$ по сравнению со ступенчатым: профилем, что и получилось при расчетах (см. рис. 2).

Сформулируем основные результаты модельного исследования, проведенного в данной работе.

1. Расчетным путем установлено, что наличие частично аморфизованной прослойки может существенно уменьшать абсолютные значения интенсивности интегральных кривых РД ПВО, при определенных условиях практически не изменяя их формы.

2. Профиль аморфизации поверхностного слоя может быть восстановлен повиду осцилляций «на хвостах» дифференциальных кривых РД ПВО.

В общем случае, по-видимому, возможно, используя преобразование Лапласа, восстанавливать профиль нарушений в поверхностных слоях «по хвостам» дифференциальных кривых РД ПВО в случае совершенных кристаллов аналогично тому, как это предложено для случая кинематически рассеивающих, мозаичных кристаллов [11].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Golovin A. L., Ітатоv R. М., Копdrashkina E. А.//Phys. Stat. Sol. (a). 1985. 88. Р. 505. [2] Имамов Р. М., Кондрашкина Е. А., Александров П. А. и др.//Поверхность. Физика, химия, механика. 1987. № 3. С. 41. [3] Имамов Р. М., Кондрашкина Е. А., Новиков Д. В., Степанов С. А.//Кристаллография. 1987. 32, № 4. С. 852. [4] Щеглов М. П., Кютт Р. Н., Сорокин Л. М.// //ЖТФ. 1987. 57, № 7. С. 1136. [5] Alexandrov P. A., Afanas'ev A. M., Meikonyan M. K., Stepanov S. A.//Phys. Stat. Sol. (a). 1984. 81. Р. 47. [6] Alexandrov P. A., Afanas'ev A. M., Golovin A. L. et al.//J. Appl. Cryst. 1985. 18. Р. 27. [7] Андреева М. А., Борисова С. Ф., Хапачев Ю. П.//Металлофизика. 1986. 8, № 5. С. 44. [8] Андреева М. А.//Вести. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. 27, № 6. С. 86. [9] Степанов С. А. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (ИКАН), 1985. [10] Андреева М. А.//Вести. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. 10] Андреева М. А.//Вести. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1985. [10] Андреева М. А.//Вести. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. 26; Поверхность. Физика, химия, механика. 1988. № 12. С. 17. [11] Доsch Н., Ваtterman В. W., Wack D. С.//Phys. Rev. Lett. 1986. 56, N 11. Р. 1144.

> Поступила в редакцию-03.03.89

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 6

УДК 669.863'864:538.652

МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И АНИЗОТРОПИЯ МАГНИТОУПРУГИХ СВОИСТВ ТЬ0.5 DV0.5

Г. И. Катаев, М. Р. Саттаров, А. М. Тишин

(кафедра общей физики для естественных факультетов)

По экспериментальным значениям модулей Юнга вдоль различных кристаллографических направлений в магнитных полях до 1,45 Тл в области температур магнитных превращений построена магнитная фазовая диаграмма монокристалла. Tb_{0.5}Dy_{0.5}.

Гигантская магнитострикция тяжелых редкоземельных металлов (P3M) и их сплавов обусловливает большие аномалии упругих и неупругих свойств в областях существования и исчезновения ферромагнитного (ФМ) и геликоидального антиферромагнитного (АФМ) упорядочения. Это позволяет использовать результаты исследования упругих свойств РЗМ в магнитных полях для построения их магнитных фазовых диаграмм, что и сделано в настоящей работе на примере монокристалла Tb_{0.5}Dy_{0.5}, выращенного в ГИРЕДМЕТ. В работе использовался метод изгибных автоколебаний на частотах около 2 кГц, обладающий большой точностью и позволя-