

УДК 548.732

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ СО СЛУЧАЙНЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ ПАРАМЕТРОВ СТРУКТУРЫ

И. Р. Прудников

(кафедра физики твердого тела)

Развита статистическая теория кинематической рентгеновской дифракции в полупроводниковых композиционных сверхрешетках (СР) $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}/\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ и т. д. со случайными флуктуациями толщины периода или концентрации твердого раствора в слоях СР. Получены аналитические выражения для угловых зависимостей когерентной и некогерентной (диффузной) компонент интенсивности рассеянного излучения. Приведены оценки влияния диффузного поглощения когерентного поля в СР на интенсивности сателлитов.

Введение

Твердотельные сверхрешетки (СР) из полупроводниковых материалов широко используются при создании различных приборов и устройств микро- и оптоэлектроники [1]. Развитие теории рентгеновской дифракции (РД) в СР необходимо для разработки методов неразрушающего контроля их строения и представляет собой важную проблему дифракционной кристаллооптики. В настоящее время достаточно полно развита теория РД (как кинематическая, так и динамическая) в одномерных СР со строго периодическим законом изменения электронной плотности и/или периода кристаллической решетки [2—5]. Однако многие СР из-за несовершенства технологии их изготовления характеризуются различными дефектами строения и отклонениями от периодического закона изменения параметров структуры. Тем не менее количество публикаций, посвященных теоретическому исследованию или численному моделированию РД в таких неидеальных СР, относительно невелико [6—10].

Одной из моделей строения неидеальных СР является модель случайных флуктуаций (отклонений от среднего значения) толщины периода и/или концентрации твердого раствора в слоях СР (композиционные СР типа $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}/\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ и т. д. [1]). Численное моделирование кинематической РД на подобной неидеальной СР проведено в работах [8, 9]. Согласно [8, 9] флуктуации толщины периода приводят к ослаблению интенсивностей сателлитов, причем у сателлитов больших порядков интенсивность ослабляется сильнее, чем у сателлитов малых порядков. В [8] не содержится никаких заключений о влиянии флуктуаций концентрации твердого раствора на интенсивность отраженного излучения, а в [9] указано только, что это влияние несущественно.

В настоящей статье проведено последовательное аналитическое решение задачи кинематической РД на СР со случайными флуктуациями толщины периода или концентрации твердого раствора в ее слоях и получены выражения, описывающие угловые распределения когерентной и некогерентной интенсивностей рассеянного излучения.

Вычисление когерентной и полной интенсивностей

Рассмотрим задачу двухволновой РД по Брэггу в симметричной геометрии на СР со случайными флуктуациями толщины периода T

или концентрации твердого раствора x . Будем считать, что каждый период СР состоит из двух монокристаллических полупроводниковых слоев с толщинами l_I и l_{II} , где $T=l_I+l_{II}$. Представим выражения для указанных параметров в виде

$$T_j = \langle T \rangle + \delta T_j, \quad l_{Ij} = \langle l_I \rangle + \delta l_{Ij}, \quad l_{IIj} = \langle l_{II} \rangle + \delta l_{IIj}, \quad (1)$$

$$x_j = \langle x \rangle + \delta x_j, \quad (2)$$

где T_j и x_j — толщина j -го периода и концентрация, отвечающая слою твердого раствора в j -м периоде соответственно; j — номер периода, отсчитываемый от входной поверхности СР; $j=1, \dots, N$, где N — полное число периодов в СР; l_{Ij} и l_{IIj} — толщины полупроводниковых слоев, образующих j -й период; $\langle T \rangle$ и $\langle x \rangle$ — средняя толщина периода СР и средняя концентрация твердого раствора в ее слоях, где знак $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение; $\langle l_I \rangle$ и $\langle l_{II} \rangle$ — средние толщины полупроводниковых слоев, $\langle T \rangle = \langle l_I \rangle + \langle l_{II} \rangle$; δT_j , δl_{Ij} , δl_{IIj} , δx_j — флуктуационные (случайные) компоненты соответствующих параметров, где $\delta T_j = \delta l_{Ij} + \delta l_{IIj}$, $\langle \delta T_j \rangle = 0$, $\langle \delta l_{Ij} \rangle = 0$, $\langle \delta l_{IIj} \rangle = 0$, $\langle \delta x_j \rangle = 0$. Согласно (1) и (2) флуктуации толщины периода и концентрации твердого раствора зависят только от номера периода j , т. е. рассматриваемая задача является одномерной.

Выражение для комплексного коэффициента отражения (ККО) СР в кинематическом приближении можно представить в виде [5]: $R_N = r_1 + t_1^2 R_{N-1}$, где r_1 — ККО первого периода СР, t_1 — комплексный коэффициент пропускания (ККП) первого периода СР, R_{N-1} — ККО структуры, состоящей из $(N-1)$ периодов. Используя эту формулу как рекуррентное соотношение, выразим ККО R_N через ККО r_j и ККП t_j отдельных периодов ($j=1, \dots, N$):

$$R_N = \sum_{j=1}^N S_j, \quad (3)$$

где $S_j = r_j \prod_{k=0}^{j-1} t_k^2$, $t_0 \equiv 1$. В отсутствие флуктуаций ($\delta l_{Ij} = 0, \delta l_{IIj} = 0, \delta x_j = 0$)

$r_j = r$, $t_j = t$ ($j=1, \dots, N$), где r и t — ККО и ККП одного периода в случае идеально периодической СР, и выражение (3) является суммой N членов геометрической прогрессии [5].

В соответствии с представлениями (1), (2) ККО СР R_N напомним в виде суммы

$$R_N = \langle R_N \rangle + \delta R_N, \quad (4)$$

где $\langle R_N \rangle$ описывает когерентную, а δR_N — некогерентную (диффузную) компоненту рассеянной на СР рентгеновской волны, $\langle \delta R_N \rangle = 0$. Найдем явное выражение для когерентной составляющей $\langle R_N \rangle$. Для этого проведем статистическое усреднение формулы (3): $\langle R_N \rangle = \sum_{j=1}^N \langle S_j \rangle$,

где $\langle S_j \rangle = \left\langle r_j \prod_{k=0}^{j-1} t_k^2 \right\rangle$. Будем считать, что толщины отдельных полупроводниковых слоев СР (концентрации твердого раствора, отвечающие отдельным слоям) статистически независимы друг от друга, т. е.

$$\langle \delta l_{Ij} \delta l_{Ik} \rangle = 0, \quad \langle \delta l_{IIj} \delta l_{IIk} \rangle = 0, \quad \langle \delta x_j \delta x_k \rangle = 0,$$

где $i \neq j$, $i, j = 1, \dots, N$, и $\langle \delta l_{ij} \delta l_{ii} \rangle = 0$, где $i, j = 1, \dots, N$. Это предположение справедливо, если значения параметров (1), (2) какого-либо слоя в СР никак не влияют на значения аналогичных параметров любого другого слоя СР. В таком случае имеем $\langle S_j \rangle = \langle r_j \rangle \prod_{k=0}^{j-1} \langle t_k^2 \rangle$.

Предположим также, что параметры T_j , l_{ij} , l_{ii} и x_j являются пространственно однородными [11]. Тогда одномерные плотности вероятности этих величин не зависят от номера периода j . Следовательно, не зависят от номера j и средние значения $\langle r_j \rangle$, $\langle t_j^2 \rangle$. Поэтому окончательно для когерентной компоненты $\langle R_N \rangle$ получаем следующее выражение:

$$\langle R_N \rangle = \langle r \rangle \sum_{j=1}^N \langle t^2 \rangle^{j-1} = \langle r \rangle (1 - \langle t^2 \rangle^N) / (1 - \langle t^2 \rangle), \quad (5)$$

где $\langle r \rangle = \langle r_j \rangle$, $\langle t^2 \rangle = \langle t_j^2 \rangle$ ($j = 1, \dots, N$).

Найдем явный вид $\langle r \rangle$ и $\langle t^2 \rangle$. Рассмотрим сначала модель флуктуаций толщины периода (1), т. е. положим в (2) $\delta x_j = 0$. Выражения для ККО r_j и квадрата ККП t_j^2 j -го периода имеют вид [5]

$$r_j = r_{1j} + t_{1j}^2 r_{2j}, \quad t_j^2 = t_{1j}^2 t_{2j}^2, \quad (6)$$

где r_{1j} и r_{2j} — ККО первого и второго слоев, образующих j -й период, t_{1j}^2 и t_{2j}^2 — ККП этих слоев, $r_{pj} = A_p \left\{ \frac{\exp(i\varphi_p l_{pj}) - 1}{\varphi_p} \right\}$, $t_{pj}^2 = \exp(i\varphi_p l_{pj})$, $A_p = \pi C_p \chi_p^g / (\lambda \sin \vartheta_{Bp})$, $\varphi_p = k(2 \cos \vartheta_{Bp} \Delta \vartheta_p + \chi_p^0 / \sin \vartheta_{Bp})$, $\Delta \vartheta_p = \vartheta - \vartheta_{Bp}$, $p = I, II$, где λ — длина волны излучения, χ_p^0 — фурье-компоненты поляризуемости, C — поляризационный множитель, ϑ_B — угол Брэгга, $\Delta \vartheta$ — угловая отстройка от угла Брэгга, $k = 2\pi/\lambda$ — волновой вектор. Пусть вероятности параметров l_{ij} и l_{ii} распределены по нормальному (гауссовскому) закону. Тогда усредняя (6), имеем

$$\langle r \rangle = \langle r_I \rangle + \langle t_I^2 \rangle \langle r_{II} \rangle, \quad \langle t^2 \rangle = \langle t_I^2 \rangle \langle t_{II}^2 \rangle, \quad (7a)$$

где

$$\langle r_{I,II} \rangle = A_{I,II} (\Phi_{I,II} - 1) / \varphi_{I,II}, \quad \langle t_{I,II}^2 \rangle = \Phi_{I,II}, \quad (7b)$$

$\Phi_{I,II} = \exp\{i \operatorname{Re} \varphi_{I,II} \langle l_{I,II} \rangle\} \exp\{-\mu_{I,II} \langle l_{I,II} \rangle + (1/2) (\operatorname{Re} \varphi_{I,II} \sigma_{I,II})^2\}$, $\mu_{I,II} = 2\pi \operatorname{Im} \chi_{I,II}^0 / (\lambda \sin \vartheta_{B,II})$ — коэффициенты фотоэлектрического поглощения в первом и втором слоях, $\sigma_{I,II}^2 = \langle (\delta l_{I,II})^2 \rangle$ — дисперсии толщин слоев l_{ij} и l_{ii} . Для простоты положим $\sigma_I^2 = \sigma_{II}^2 = \sigma^2$. Дисперсия периода $\sigma_T^2 = \sigma_I^2 + \sigma_{II}^2 = 2\sigma^2$. Использование гауссовского распределения при усреднении (6) не является обязательным. Выбор конкретного закона распределения вероятностей для усреднения должен быть связан с информацией о способе изготовления СР. Заметим, что в формуле (7б) фигурируют функции $\Phi_{I,II}$, которые представляют собой характеристические функции случайных параметров l_{ij} и l_{ii} . Характеристические функции известны в аналитическом виде для многих законов распределения вероятностей [12].

В соответствии с (7а, б) и (5) флуктуации периода (1) приводят к диффузному поглощению когерентного поля в кристалле со СР и ослаблению интенсивности когерентной компоненты рассеянной волны. Под диффузным поглощением будем подразумевать отток части

интенсивности когерентной компоненты поля, вызванный диффузным рассеянием. Перепишем выражение для $\langle t^2 \rangle$ (7а) в виде $\langle t^2 \rangle = t^2 E$, где $t^2 = \exp\{i(\varphi_I \langle l_I \rangle + \varphi_{II} \langle l_{II} \rangle)\}$ — квадрат ККП одного периода СР в отсутствие флуктуаций ($\delta l_{Ij} = 0$, $\delta l_{IIj} = 0$),

$$E = \exp \left\{ -\frac{1}{2} ((\text{Re } \varphi_I)^2 + (\text{Re } \varphi_{II})^2) \sigma^2 \right\}. \quad (8)$$

С учетом этого обозначения (5) примет вид

$$\langle R_N \rangle = \langle r \rangle \sum_{j=1}^N (t^2)^{j-1} E^{j-1} = \langle r \rangle (1 - t^{2N} E^N) / (1 - t^2 E). \quad (9)$$

Функция $E^{j-1} = \exp\{- (1/2) \{ (\text{Re } \varphi_I)^2 + (\text{Re } \varphi_{II})^2 \} \sigma^2 (j-1)\}$ в (9) представляет собой статический фактор Дебая—Валлера, который в средах со слоистой неоднородностью зависит от номера слоя j [13]. Напомним, что при кинематической РД на кристалле с однородно распределенными дефектами когерентная интенсивность рассеянной волны $I_c = \exp(-L) I_0$, где $\exp(-L)$ — статический фактор Дебая—Валлера, I_0 — интенсивность отражения от идеального кристалла [14]. Согласно формуле (9) в случае РД на СР выражение для когерентной интенсивности $I_c = \langle |R_N|^2 \rangle$ нельзя представить в такой же форме, что и I_c , так как фактор Дебая—Валлера является переменной величиной и его нельзя вынести за знак суммы в (9).

Исследуем влияние диффузного поглощения на интенсивности максимумов отраженного излучения — сателлитов. Угловое положение сателлита с номером m определяется из условия [5] $\text{Re } \varphi_I \langle l_I \rangle + \text{Re } \varphi_{II} \langle l_{II} \rangle = 2\pi m$, $m = 0, \pm 1, \dots$. Если величина рассогласования $\varepsilon = (a_{II} - a_I) / a_I$ периодов кристаллической решетки первого (a_I) и второго (a_{II}) слоев мала: $\varepsilon \ll 1$, то из указанного соотношения следует

$$\text{Re } \varphi_{II} \approx (2\pi m \mp \Delta\varphi \langle l_{II} \rangle) / \langle T \rangle,$$

где $\Delta\varphi = k(2\varepsilon \sin \theta_{\text{ВЛ}} + \delta\chi / \sin \theta_{\text{ВЛ}})$, $\delta\chi = \chi_{II}^0 - \chi_I^0$. В случае, когда период СР достаточно мал и выполняется неравенство $\Delta\varphi \langle l_{II} \rangle \ll 2\pi$, имеем для $\text{Re } \varphi_{II}$: $\text{Re } \varphi_{II} \approx \mp (\Delta\varphi \langle l_{II} \rangle) / \langle T \rangle$ при $m = 0$, $\text{Re } \varphi_{II} \approx 2\pi m / \langle T \rangle$ при $|m| \geq 1$. Подставляя эти выражения в (8), получаем

$$\left. \begin{aligned} E &= \exp \left\{ - \left[\frac{\Delta\varphi (\langle l_I \rangle^2 + \langle l_{II} \rangle^2)^{\frac{1}{2}} \sigma}{\sqrt{2} \langle T \rangle} \right]^2 \right\} & (m=0), \\ E &= \exp \left\{ - \left[\frac{2\pi m \sigma}{\langle T \rangle} \right]^2 \right\} & (|m| \geq 1). \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Формулы (10), (9) показывают, что величина диффузного поглощения увеличивается с ростом $|m|$. Поэтому чем выше порядок сателлита, тем сильнее ослабление его интенсивности, вызванное диффузным поглощением. Этот вывод согласуется с результатами численного моделирования РД на СР с флуктуациями толщины периода [8, 9]. Согласно (10), (9) диффузным поглощением можно пренебречь, если $E^N \approx 1$

или $N \{ \Delta\varphi (\langle l_I \rangle^2 + \langle l_{II} \rangle^2)^{\frac{1}{2}} \sigma / (\sqrt{2} \langle T \rangle) \}^2 \ll 1$ для $m=0$ и $N (2\pi m \sigma / \langle T \rangle)^2 \ll 1$ для $|m| \geq 1$. Рассмотрим, например, отражение (400) излучения CuK_α от СР $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с $\langle T \rangle = 218 \text{ \AA}$, $\langle l_I \rangle = 96 \text{ \AA}$, $\langle l_{II} \rangle = 122 \text{ \AA}$, $\langle x \rangle = 0,3$, $N = 20$ [9]. В рассматриваемом случае диффузным поглощением когерентной волны можно пренебречь при условии $\sigma^2 \ll 1,6 \cdot 10^4 \text{ \AA}^2$

для $m=0$, $\sigma^2 \ll 60 \text{ \AA}^2$ для $m=\pm 1$, $\sigma^2 \ll 15 \text{ \AA}^2$ для $m=\pm 2$. Таким образом, уже при достаточно малой величине стандартного отклонения $\sigma=6 \text{ \AA}$ влияние диффузного поглощения на интенсивности спутников с номерами $|m| \geq 1$ является существенным.

Исследуем теперь задачу РД на СР со случайными флуктуациями концентрации (2) (полагаем в (1) $\delta l_j=0$, $\delta l_{IIj}=0$) и найдем явный вид $\langle r \rangle$ и $\langle t^2 \rangle$, фигурирующих в (5). Для определенности рассмотрим СР GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Пусть слой GaAs имеет толщину l_I , а слой твердого раствора Al_xGa_{1-x}As — толщину l_{II} . Учитывая (2), ККО r_j и квадрат ККП t_j^2 j -го периода запишем в виде (ср. с (6))

$$r_j = r_I + t_I^2 r_{IIj}, \quad t_j^2 = t_I^2 t_{IIj}^2, \quad (11)$$

где ККО r_I и ККП t_I не зависят от концентрации x_j и являются детерминированными функциями. Фурье-компоненты поляризуемости χ_{IIj}^{0g} и период кристаллической решетки a_{IIj} твердого раствора зависят от x_j и, следовательно, являются флуктуирующими параметрами. Поэтому коэффициенты r_{IIj} и t_{IIj} имеют вид

$$r_{IIj} = iA_{IIj} \int_0^{l_{II}} \exp\{i\varphi_{IIj}z\} dz, \quad t_{IIj}^2 = \exp\{i\varphi_{IIj}l_{II}\},$$

где A_{II} и φ_{II} определены ранее (см. пояснения к формуле (6)). ККО r_{IIj} для удобства дальнейших вычислений представлен в интегральной форме. Разложим A_{IIj} и φ_{IIj} в ряд по флуктуациям δx_j и ограничимся линейными по δx_j членами разложения:

$$A_{IIj} \approx A_{II} + (\partial A_{IIj}/\partial x_j) \delta x_j, \quad \varphi_{IIj} \approx \varphi_{II} + (\partial \varphi_{IIj}/\partial x_j) \delta x_j,$$

где A_{II} и φ_{II} — значения рассматриваемых параметров в отсутствие флуктуаций ($\delta x_j=0$). Будем считать, что $A_{IIj} \approx A_{II}$, т. е. пренебрегаем малой добавкой к ККО r_{IIj} , связанной с флуктуациями амплитуды A_{IIj} . Дифференцируя функцию φ_{IIj} по x_j и учитывая только члены первого порядка малости, получим

$$\left. \frac{\partial \varphi_{IIj}}{\partial x_j} \right|_{x_j=x} = 2k \sin \vartheta_{BII} \mathcal{H} \varepsilon_0,$$

где ε_0 — относительное рассогласование периодов кристаллической решетки GaAs и AlAs, $\mathcal{H} = (c_{11} + 2c_{12})/c_{11}$ — множитель, который учитывает действие возникающих в СР упругих сил, c_{11} , c_{12} — упругие постоянные твердого раствора Al_xGa_{1-x}As [9]. Тогда, принимая во внимание, что $A_{IIj} \approx A_{II}$, $\varphi_{IIj} \approx \varphi_{II} + 2k \sin \vartheta_{BII} \mathcal{H} \varepsilon_0 \delta x_j$, и усредняя (11) так же как и (6), имеем

$$\langle r \rangle = r_I + t_I^2 \langle r_{II} \rangle, \quad \langle t^2 \rangle = t_I^2 \langle t_{II}^2 \rangle, \quad (12)$$

где $\langle r_{II} \rangle = \{iA_{II} l_{II} \sqrt{\pi}/(2u\sigma_x)\} \exp(-v) \{\text{erf}(iv) - \text{erf}(iv - u\sigma_x)\}$, $\langle t_{II}^2 \rangle = \exp\{i\varphi_{II} l_{II}\} \exp\{-(\mu_{II} l_{II} + u^2 \sigma_x^2)\}$, $u = \sqrt{2} k \sin \vartheta_{BII} \mathcal{H} \varepsilon_0 l_{II}$, $\sigma_x^2 = \langle (\delta x_j)^2 \rangle$ — дисперсия концентрации, $v = \varphi_{II} l_{II}/(2u\sigma_x)$, $\text{erf}(y)$ — интеграл вероятностей [15]. При выводе формулы для $\langle r_{II} \rangle$ сначала была проведена операция усреднения, а затем — операция интегрирования по z .

Из (12) следует, что флуктуации концентрации (2), так же как и флуктуации толщины периода (1), приводят к диффузному рассеянию поля в СР. Однако в случае модели (2) диффузное поглощение когерентного поля в СР не зависит от порядка спутника, т. е. ослаб-

ление интенсивности одинаково для всех максимумов. Согласно (12) и (5) влиянием диффузного поглощения можно пренебречь, если $\sigma_x^2 \ll \ll (Nu^2)^{-1}$. Для отражения (400) излучения $\text{Cu}K_\alpha$ от СР с $T=218 \text{ \AA}$, $l_I=96 \text{ \AA}$, $l_{II}=122 \text{ \AA}$, $\langle x \rangle=0,3$, $N=20$ диффузное поглощение несущественно, когда $\sigma_x^2 \ll 0,05$.

В соответствии с представлением (4) полная интенсивность отраженного от СР излучения $I_t = \langle |R_N|^2 \rangle$ является суммой когерентной ($I_c = \langle |R_N|^2 \rangle$) и диффузной ($I_d = \langle |\delta R_N|^2 \rangle$) интенсивностей: $I_t = I_c + I_d$.

Найдем явное выражение для I_t . Согласно (3) $I_t = \sum_{i,j=1}^N \langle S_j S_i^* \rangle$, где

$$\langle S_j S_i^* \rangle = \left\langle r_j \prod_{k=0}^{j-1} t_k^* \cdot r_i^* \prod_{p=0}^{i-1} (t_p^*)^2 \right\rangle. \quad \text{Для упрощения дальнейших вычислений}$$

будем пренебрегать фотоэлектрическим поглощением поля в СР. В этом случае произведение $t_j t_j^* = 1$ и выражение для $\langle S_j S_i^* \rangle$ примет вид

$$\langle S_j S_i^* \rangle = \begin{cases} \langle |r|^2 \rangle & (j=i), \\ \langle r \rangle \langle t^2 r^* \rangle \langle t^2 \rangle^{j-i-1} & (j>i), \\ \langle r^* \rangle \langle (t^*)^2 r \rangle \langle (t^*)^2 \rangle^{i-j-1} & (j<i), \end{cases} \quad (13)$$

где $\langle |r|^2 \rangle = \langle |r_j|^2 \rangle$, $\langle t^2 r^* \rangle = \langle t_j^2 r_j^* \rangle$ ($j=1, \dots, N$). При выводе (13) были использованы те же допущения, что и при выводе (5). В (13) фигурируют корреляторы $\langle t^2 r^* \rangle$ и $\langle (t^*)^2 r \rangle$. Появление этих корреляторов связано с тем, что в выражении для $S_j S_i^*$ встречается произведение двух коэффициентов; t_k^2 и r_i^* (или $(t_p^*)^2$ и r_j) с одинаковыми значениями индексов k и i (p и j). Указанные коэффициенты являются статистически зависимыми и их следует усреднять совместно. Используя (13), нетрудно получить для I_t следующую формулу:

$$I_t = N \langle |r|^2 \rangle + 2 \text{Re } \Psi, \quad (14)$$

где $\Psi = \left(\frac{\langle r \rangle \langle t^2 r^* \rangle}{1 - \langle t^2 \rangle} \right) \left(N + \frac{\langle t^2 \rangle^N - 1}{1 - \langle t^2 \rangle} \right)$. В отсутствие флуктуаций из (5) и (14) находим: $I_t = I_c = I_0$, где I_0 — интенсивность волны, отраженной от идеально периодической СР с периодом $\langle T \rangle$ и концентрацией твердого раствора $\langle x \rangle$. Вычисление явного вида $\langle |r|^2 \rangle$ и $\langle t^2 r^* \rangle$ в (14) проводится по аналогии с выводом (7а) и (12). Так, в случае модели (1)

$$\begin{aligned} \langle |r|^2 \rangle &= \langle |r_I|^2 \rangle + \langle |t_I|^4 \rangle \langle |r_{II}|^2 \rangle + 2 \text{Re} (\langle r_I (t_I^*)^2 \rangle \langle r_{II} \rangle^*), \\ \langle t^2 r^* \rangle &= \Phi_I \Phi_{II} (G_I^* + G_{II}^* \Phi_I^* \exp \{ (\text{Re } \Phi_I \sigma)^2 \}), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\langle |r_{I,II}|^2 \rangle = 2 |A_{I,II} / \Phi_{I,II}| (1 - \text{Re } \Phi_{I,II})$, $\langle r_I (t_I^*)^2 \rangle \approx (A_I / \Phi_I) (1 - \Phi_I^*)$, $\langle |t_I|^4 \rangle \approx 1$, $G_{I,II} \approx (A_{I,II} / \Phi_{I,II}) (\Phi_{I,II} \exp \{ (\text{Re } \Phi_{I,II} \sigma)^2 \} - 1)$, $\langle r_{II} \rangle$ определен в (7б). В случае модели (2)

$$\begin{aligned} \langle |r|^2 \rangle &= |r_I|^2 + |t_I|^4 \langle |r_{II}|^2 \rangle + 2 \text{Re} (r_I (t_I^*)^2 \langle r_{II} \rangle^*), \\ \langle t^2 r^* \rangle &= t_I^2 (r_I^* \langle t_{II}^2 \rangle - (A_{II}^* / A_{II}) \langle r_{II} \rangle), \end{aligned} \quad (16)$$

где $\langle |r_{II}|^2 \rangle = \left\{ \frac{|A_{II}| l_{II}}{\sqrt{2} u \sigma_x} \right\}^2 \cdot [\sqrt{\pi} \xi \text{erf}(\xi) + \exp(-\xi^2) - i \sqrt{\pi} \nu_r \text{erf}(i\nu_r) - \exp(\nu_r^2) + \text{к. с.}]$, $\nu_r = \text{Re } \nu$, $\xi = i\nu_r + u\sigma_x$, к. с. — комплексно сопряженные, $\langle r_{II} \rangle$, $\langle t_{II}^2 \rangle$ определены ранее (см. пояснения к (12)).

Таким образом, формулы (5), (14), (7а), (12), (15), (16) полностью определяют I_c и I_t . При этом величину диффузной интенсивности можно найти с помощью формулы $I_d = I_t - I_c$. Рассчитанные по формуле (14) (с учетом и фотоэлектрического поглощения) угловые зависимости полной интенсивности для модели (1) приведены на рис. 1

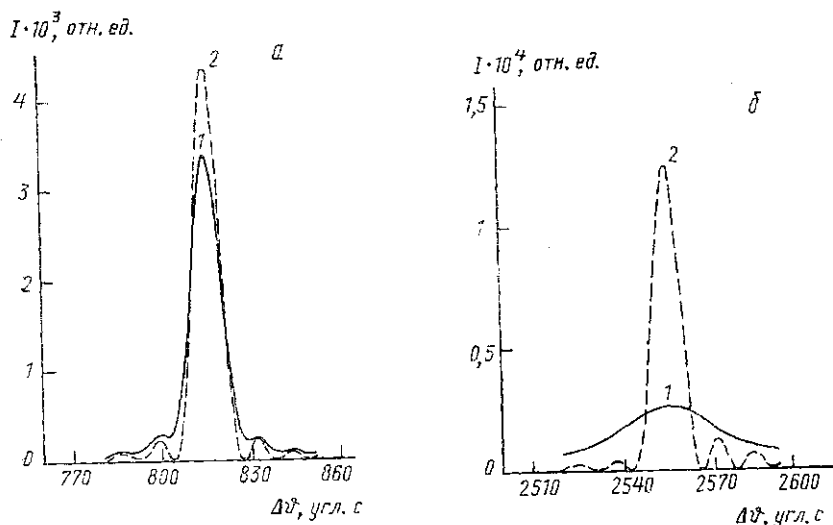


Рис. 1. Угловые распределения интенсивностей спутников (для модели (1)) с номерами $m=1$ (а) и 3 (б) в случае отражения (400) излучения $\text{Cu K}\alpha$ (сигма-поляризация) от СР $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($\Delta\phi$ — угловая отстройка от угла Брэгга, равного $33,03^\circ$): 1 — полная интенсивность I_t для стандартного отклонения $\sigma=4 \text{ \AA}$, 2 — интенсивность отражения I_0 от идеальной СР ($\sigma=0$). Средние параметры СР: $\langle l_I \rangle = 96 \text{ \AA}$, $\langle l_{II} \rangle = 122 \text{ \AA}$, $\langle x \rangle = 0,3$, $N=75$

и для модели (2) — на рис. 2. Из рис. 1 следует, что с увеличением порядка спутника усиливается ослабление его максимальной интен-

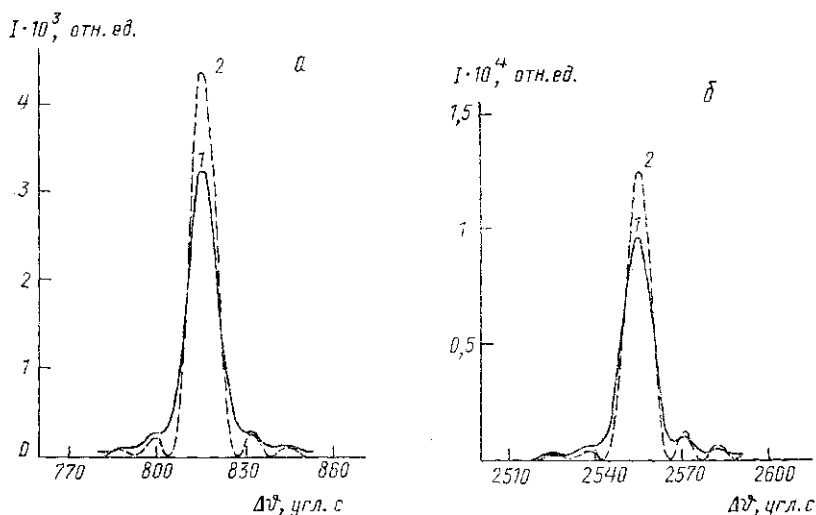


Рис. 2. Угловые распределения интенсивностей спутников (для модели (2)) с $m=1$ (а) и 3 (б): 1 — интенсивность I_t для $\sigma_x=0,1$, 2 — интенсивность I_0 ($\sigma=0$). Порядок отражения, излучение и средние параметры СР те же, что и для рис. 1

сивности: $I_0/I_t \approx 1,35$ для $m=1$, $I_0/I_t \approx 4,9$ для $m=3$. Согласно рис. 2 ослабление максимальной интенсивности не зависит от порядка сателлита: $I_0/I_t \approx 1,3$. На рис. 3 представлены угловые распределения интенсивностей I_c , I_d для моделей (1), (2).

В заключение отметим, что в настоящей статье исследовано влияние флуктуации каждого из параметров (1), (2) на спектр отраженного от СР излучения. Однако полученные общие формулы (5), (14) справедливы и в случае одновременных флуктуаций толщины периода и концентрации твердого раствора в слоях СР. Изменится только явный вид фигурирующих в этих формулах средних величин. Кроме того, упомянутые выше формулы справедливы также для более сложных моделей СР, например, для трапециевидной [3]. Эта модель описывает СР с переходными слоями.

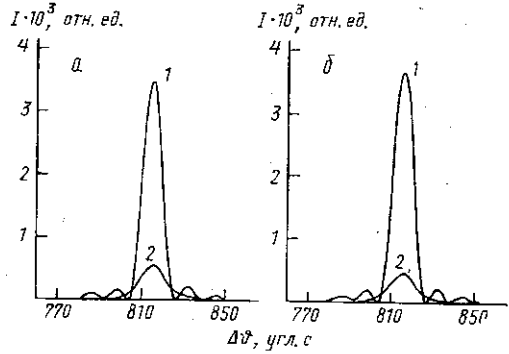


Рис. 3. Угловые распределения когерентной I_c (1) и диффузной I_d (2) интенсивностей сателлита с $m=1$; а — для модели (1), $\sigma_x=2 \text{ \AA}$; б — для модели (2), $\sigma_x=0,05$. Порядок отражения, излучение и средние параметры СР те же, что и для рис. 1

ЛИТЕРАТУРА

1. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М., 1989.
2. Энтин И. Р. // ЖЭТФ. 1979. 77, № 1 (7). С. 214.
3. Vardanyan D. M., Manoukyan H. M., Petrosyan H. M. // Acta Cryst. 1985. A41. P. 212.
4. Хапачев Ю. П., Чуховский Ф. Н. // Металлофизика. 1991. 13, № 7. С. 65.
5. Колпаков А. В., Прудников И. Р. Дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках: М., 1992.
6. Chrzan D., Dutta P. // J. Appl. Phys. 1986. 59, N 5. P. 1504.
7. Siemens V. M., Gay J. G. // Phys. Rev. 1987. B35. P. 9337.
8. Speriosu V. S., Vreeland T., Jr. // J. Appl. Phys. 1984. 56, N 6. P. 1591.
9. Appel A., Bonse U., Staudenmann J. L. // Z. f. Phys. B. 1990. 81. P. 371.
10. Пунегов В. И. // Тез. докл. Всесоюз. науч. семинара. М., 1990. С. 86.
11. Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И. Введение в статистическую радиофизику. Ч. 2. Случайные поля. М., 1978.
12. Рытов С. М. Введение в статистическую радиофизику. Ч. 1. Случайные процессы. М., 1976.
13. Афанасьев А. М., Александров П. А., Имамов Р. М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М., 1989.
14. Кривоглаз М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев, 1983.
15. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М., 1978.

Поступила в редакцию
14.11.94