

01;06;07

©1995.

ВЛИЯНИЕ ГРАДИЕНТА ДЕФОРМАЦИИ МЕЖДУ СЛОЯМИ СВЕРХРЕШЕТОК НА ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

А.А.Дышечков, Д.А.Тарасов, Ю.П.Ханачев

Развитие динамической дифракции рентгеновских лучей для одномерно модулированных периодических кристаллических структур — ультразвуковых и твердотельных сверхрешеток (СР) [1,2] выявило ряд принципиально новых особенностей формирования рентгенодифракционного (РД) спектра сателлитов от СР, не проявляющихся в кинематическом подходе. Так, в частности, сателлиты могут оказываться на разных расстояниях друг от друга, несимметрично от основного максимума и иметь различные угловые ширины [3]. При этом, вообще говоря, указанные выше качественные отличия проявляются в различной степени в зависимости от конкретного выбора модели СР.

Выберем в качестве критерия, определяющего влияние динамических эффектов при рассеянии в СР, величину градиента деформации в интерфейсе (области между слоями СР). Ясно, что прямоугольная модель представляет собой предельный случай. С другой стороны, примером СР с малой величиной градиента в интерфейсе является гармоническая модель. В связи с этим представляет интерес выяснить вопрос, в какой из моделей указанные выше особенности динамической дифракции проявляются в наибольшей степени.

В данной работе поставленная задача решается методом зонных диаграмм [3], позволяющим наиболее естественно рассматривать образование РД спектра СР для разных моделей. В основе метода зонных диаграмм лежит тот фундаментальный факт, что система дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами (система Такаги для СР) имеет в пространстве структурных параметров СР зоны устойчивых и неустойчивых решений, разделенные переходными областями. Каждая из зон устойчивости или неустойчивости характеризуется определенными соотношениями между параметрами и может быть сопоставлена с определенным угловым интервалом РД спектра от СР при надлежащей физической интерпретации.

Рассмотрим вначале гармоническую модель СР, изменение деформации в которой по направлению нормали к поверхности СР задается следующим образом:

$$\varepsilon(\tau) = \varepsilon_0 \cos 2\tau, \quad (1)$$

где ε_0 — амплитуда деформации, $\tau = \pi z/T$ — нормированная на период СР T -координата по нормали в глубину кристалла. Такая модель предполагает выбор начала отсчета угла от положения основного РД максимума. Перейдем с помощью стандартных преобразований от системы Такаги к дифференциальному уравнению второго порядка с периодическими комплексными коэффициентами — уравнению Хилла. Используем подход, предложенный в [3]. Применяя методы теории возмущений, получим аналитические выражения для переходных кривых. Возможность построения двумерной зонной диаграммы обусловлена выбором параметра разложения в теории возмущений, который для симметричной геометрии дифракции по Брэггу имеет вид

$$\xi = \frac{2T\varepsilon_0 \sin \theta_B}{\lambda}, \quad (2)$$

где λ — длина волны падающего излучения, θ_B — угол Брэгга. Выбор именно такого параметра разложения позволяет провести единую параметризацию для уравнения Хилла. Зонная диаграмма для этого уравнения приведена на рис. 1. Здесь же приведена геодезическая линия, смысл которой состоит в том, что она отвечает различным значениям постоянного коэффициента S в уравнении Хилла и параметра ξ при одних и тех же значениях угловой переменной $\Delta\theta$, определяющей отклонение от угла Брэгга. Пересечения переходных кривых с геодезической линией определяют угловые интервалы формирования основного РД максимума и сателлитов от СР [3]. В итоге для угловых ширин сателлитов первого и второго порядка имеем следующее выражение:

$$\Delta\theta(m) = \begin{cases} \frac{1}{2}\Delta\theta(0)\xi Q(m), & m = \pm 1, \\ \frac{1}{8}\Delta\theta(0)\xi^2 Q(m), & m = \pm 2, \end{cases} \quad (3)$$

где

$$Q(m) = \left(1 + \left(\frac{T}{\pi m \Lambda_{\text{ext}}} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}},$$

$$\Delta\theta(0) = \frac{2\lambda}{\pi \Lambda_{\text{ext}}}$$

— ширина основного максимума для идеального кристалла, Λ_{ext} — длина экстинкции. Формула (3) совпадает с приведенным в [2] выражением, но только для ширин сателлитов первого порядка.

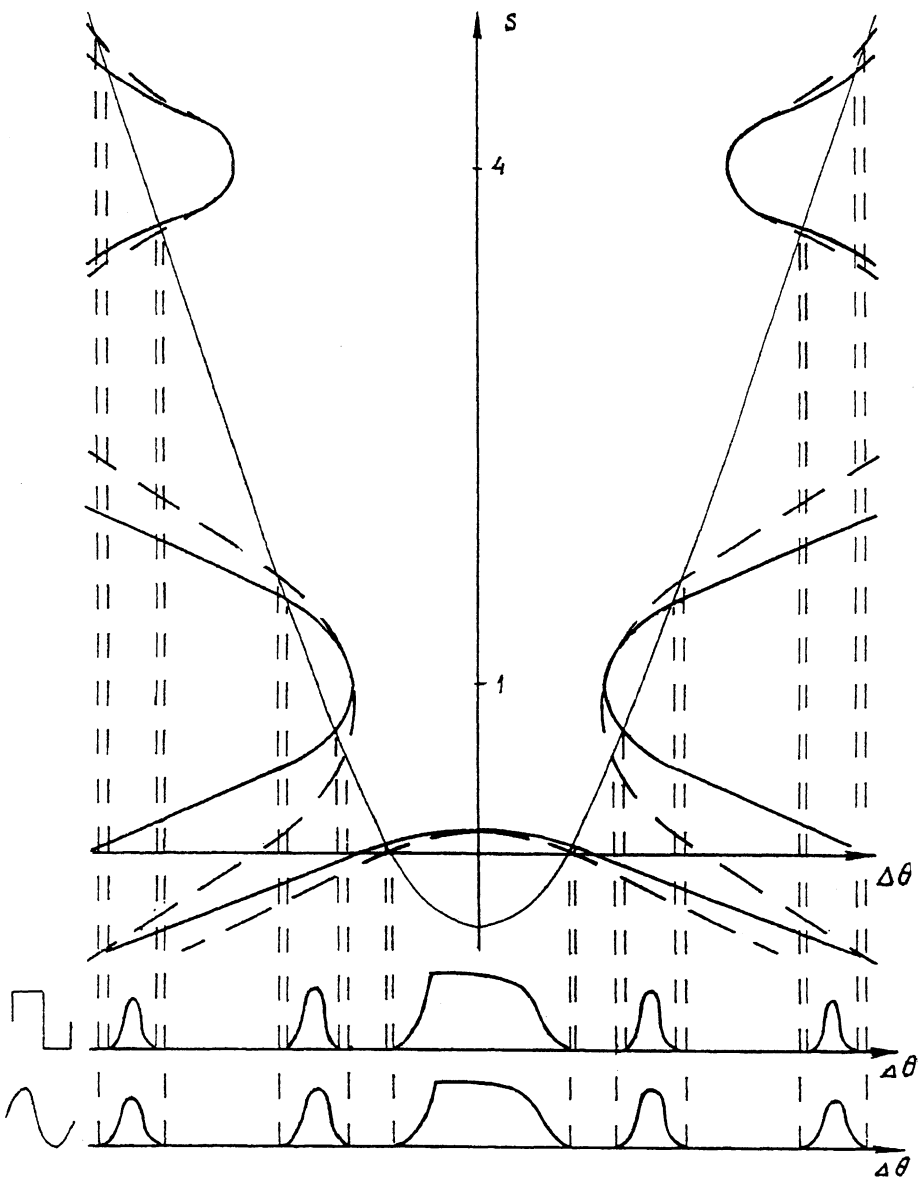


Рис. 1. Зонные диаграммы для гармонической (сплошная линия) и прямоугольной (пунктирная линия) моделей СР. Показано образование основного РД максимума и спутников в случае дифракции по Брэггу.

Рассмотрим СР с прямоугольным законом изменения деформации

$$\varepsilon(\tau) = \begin{cases} \varepsilon_0, & 0 \leq \tau < \pi/2, \\ -\varepsilon_0, & \pi/2 \leq \tau \leq \pi. \end{cases} \quad (4)$$

Переходные кривые для этой модели показаны на рис. 1 пунктирными линиями. Геодезическая кривая имеет тот же вид. Угловые ширины спутников m -го порядка выражаются через $\Delta\theta(0)$ следующим образом:

$$m = \Delta\theta(m) = \begin{cases} \Delta\theta(0) \frac{2}{\pi m^2} \xi Q(m), & m = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots; \\ \delta\theta(0) \frac{1}{m^2} \xi^2 Q(m), & m = \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots \end{cases} \quad (5)$$

Поскольку величина Q учитывает динамические эффекты при рассеянии посредством фактора T/Λ_{ext} , то выражения (3) и (5) принципиально отличаются от аналогичных формул [5].

Как известно, кинематической теории угловые ширины основного РД максимума и всех спутников одинаковы. Отклонения от этой закономерности могут быть вызваны динамическим характером рассеяния в СР, как это видно из (3), (5). Однако, как следует из этих формул, величина указанных отличий зависит от конкретной модели СР. Следовательно, по отношениям ширин $\Delta\theta(0)$, $\Delta\theta(\pm 1)$, $\Delta\theta(\pm 2)$ можно судить о том, для какой из рассматриваемых моделей влияние динамических эффектов проявляется в наибольшей степени. Найденные с этой целью отношения ширин $\Delta\theta(0)$, $\Delta\theta(\pm 1)$, $\Delta\theta(\pm 2)$ для обеих моделей приведены в таблице.

Данные таблицы схематически изображены диаграммой на рис. 2, где показаны отношения ширин спутников в сравнении с кинематическим значением, равным единице, сплошной линией — для гармонической СР, пунктиром — для прямоугольной СР.

Из диаграммы видно, что особенности формирования единого волнового поля в СР с малым градиентом дефор-

Отношения ширин спутников $\Delta\theta(\pm m)$ и основного максимума $\Delta\theta(0)$ для гармонической и прямоугольной моделей СР

Модель СР	$\frac{\Delta\theta(0)}{\Delta\theta(\pm 1)}$	$\frac{\Delta\theta(0)}{\Delta\theta(\pm 2)}$	$\frac{\Delta\theta(\pm 1)}{\Delta\theta(\pm 2)}$
Гармоническая	$2 \frac{1}{\xi Q(\pm 1)}$	$8 \frac{1}{\xi^2 Q(\pm 2)}$	$4 \frac{Q(\pm 1)}{\xi Q(\pm 2)}$
Прямоугольная	$\frac{\pi}{2} \frac{1}{\xi Q(\pm 1)}$	$4 \frac{1}{\xi^2 Q(\pm 2)}$	$\frac{8}{\pi} \frac{Q(\pm 1)}{\xi Q(\pm 2)}$

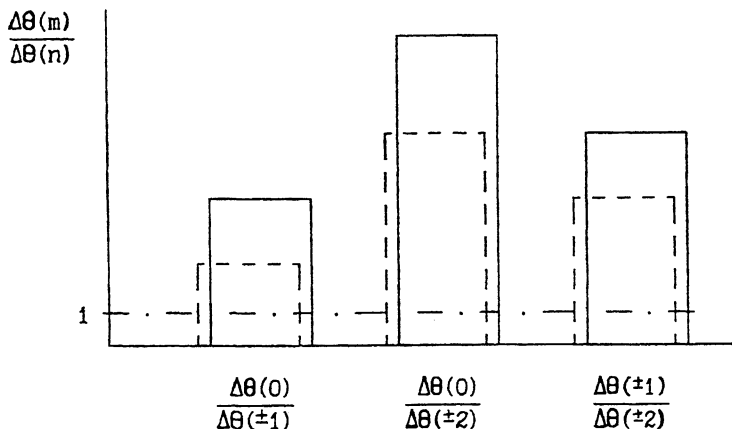


Рис. 2. Отношения ширин основного РД максимума и спутников: кинематическая дифракция (единица для обеих моделей); динамическая дифракция (сплошная линия — гармоническая модель, пунктирная линия — прямоугольная модель).

магии между слоями (таких, как гармоническая СР) приводят к тому, что динамические эффекты изменения ширин основного максимума и спутников оказываются более резко выражены, чем у СР с большим градиентом деформации (прямоугольная СР).

Таким образом, полученные результаты позволяют по отношению ширин спутников судить о величине градиента деформации в области интерфейса.

Список литературы

- [1] Хапачев Ю.И., Чутовский Ф.Н. // *Металлофизика*. 1991. Т. 13. № 7. С. 65–85.
- [2] Колпаков А.В., Прудников И.Р. // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия*. 1991. Т. 32. № 4. С. 3–29.
- [3] Kharachev Yu.P. // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1983. V. 120. P. 155–163.
- [4] Kharachev Yu.P., Kolpakov A.V. // *Acta Cryst.* 1978. V. A34. Part S4. P. 230.
- [5] Vardanyan D.M., Manoukyan H.M., Petrosyan H.M. // *Acta Cryst.* 1985. V. A41. P. 218–222.

Кабардино-Балкарский
госуниверситет
Нальчик

Поступило в Редакцию
14 января 1995 г.