

04; 05

© 1991 г.

КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ НА ДЕФЕКТНОЙ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКЕ С ПОСТОЯННЫМ ГРАДИЕНТОМ ДЕФОРМАЦИИ

В. И. Пунегов

В рамках статистического подхода к проблеме дифракции рентгеновских лучей в кристаллах построена кинематическая теория рассеяния на дефектной эпитаксиальной пленке с постоянным градиентом деформации кристаллической решетки по глубине пленки. Получены аналитические выражения для углового распределения когерентно и диффузно рассеянных волн. Исследуется асимптотическое поведение профиля диффузного фона при больших угловых отстройках. На основе численных расчетов анализируется формирование полной кривой дифракционного отражения (КДО) в зависимости от толщины пленки, градиента деформации решетки, степени аморфизации (статического фактора Дебая—Валлера) и размеров дефектов (корреляционной длины Като). Установлено, что важным фактором, влияющим на вид полной КДО, является слоистая неоднородность распределенных по пленке дефектов. Показано влияние послыстного изменения концентрации и размеров дефектов на профиль рентгенодифракционного спектра.

Введение

Известно, что кривые дифракционного отражения (КДО) рентгеновских лучей от эпитаксиальных пленок с градиентом состава (деформацией решетки) по глубине имеют осцилляционную структуру [1, 2]. Физическое объяснение формирования осцилляционной структуры КДО от кристаллов с постоянным градиентом деформации дано в [3]. В основе этой физической интерпретации лежит формализм построения фазовых слоев, аналогичных зонам Френеля—Шустера в оптике видимого диапазона [4, 5]. Модель кристалла с постоянным градиентом деформации по глубине или, что одно и то же, с линейным изменением параметра решетки (ЛИПР) использовалась для приближенного вычисления структурных характеристик ионно-имплантированных [6] и эпитаксиальных [6, 7] слоев.

Кинематическая теория дифракции на кристалле с ЛИПР была построена для объяснения уширения дифракционных максимумов многокомпонентных неоднородных монокристаллических пленок [8]. Более общая динамическая теория дифракции на такой структуре развита в [2].

Однако теории [2, 8] представлены в так называемом когерентном приближении. Мелкомасштабная дефектная структура неоднородного по глубине твердого раствора не учитывалась. Шаг в направлении решения этой проблемы был сделан в работе [7] и сводился к введению статического фактора с определенным законом его изменения по глубине в выражении для когерентной интенсивности. Диффузное рассеяние на дефектах в этой работе не рассматривалось.

Дефектность (аморфизованность) пленочной структуры может быть учтена статистическими методами в теории дифракции [9]. В рамках динамического рассеяния этот подход успешно реализован для кристаллов со слоистой неоднородностью [10], эпитаксиальной пленки [11], одномерно деформированного кристалла [12], гармонической сверхрешетки [13, 14], неидеальной гетероструктуры [15] и нарушенного лазерным воздействием приповерхностного слоя кристалла [16].

Целью настоящей работы является развитие кинематической теории дифракции на неидеальной, одномерно деформированной пленке. На примере простой модели постоянного градиента деформации при наличии флуктуационных атомных смещений исследуется влияние диффузного рассеяния на формирование полной КДО.

Основные уравнения теории

Рассмотрим симметричную брэгговскую дифракцию рентгеновских лучей на монокристаллической пленке со среднестатистическим линейным изменением параметра решетки по ее глубине. Для определенности примем следующий

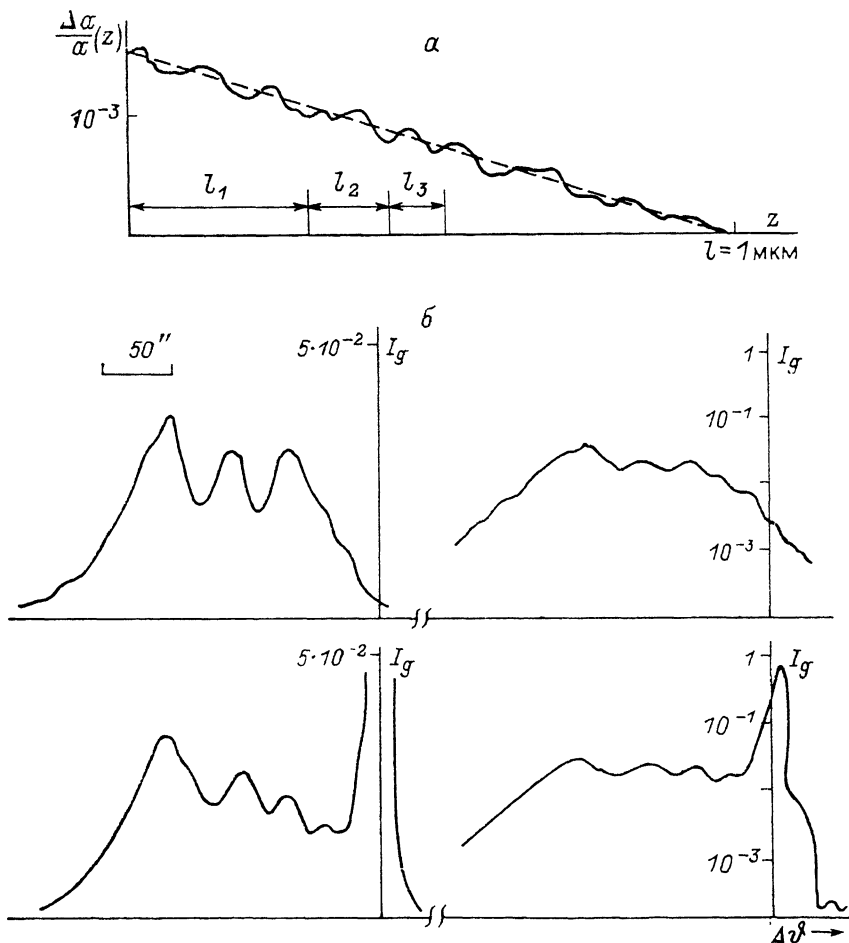


Рис. 1. Профиль деформации пленки (а) и расчетные КДО (б) без (сверху) и при наличии подложки.

$$l = 1 \text{ мкм}, l_1 = 0.30 \text{ мкм}, E = 1.0.$$

закон одномерного изменения межплоскостного расстояния вдоль координаты z , перпендикулярной к поверхности пленки:

$$a(z) = a - (\Delta a/a)z, \quad (1)$$

где a — параметр решетки на входной поверхности, Δa — рассогласование параметров решетки между двумя соседними атомными периодами, знак минус перед линейным членом указывает на отрицательный градиент деформации (уменьшение параметра решетки в глубь пленки).

Модель кристалла с ЛИИР может быть задана и через деформацию решетки относительно подложки [7].

Градиент изменения межплоскостного расстояния может быть не строго постоянным, а иметь незначительные мелкомасштабные флуктуационные отклонения, вызванные микродефектами (рис. 1, а). В этой ситуации флуктуирующее рассогласование параметра решетки представим в виде суммы

$$\Delta a = \langle \Delta a \rangle + \delta a, \quad (2)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение; δa — случайная величина, которая в общем случае зависит от координаты z .

Согласно (1) и (2), запишем присутствующее в уравнениях дифракции на деформированном кристалле поле атомных смещений [12]

$$g\mathbf{u} = g\langle \mathbf{u} \rangle + g\delta\mathbf{u}, \quad (3)$$

где $g\langle \mathbf{u} \rangle = -\pi (z^2/l_1^2)$; g — вектор дифракции; $l_1 = a^3 (n\langle \Delta a \rangle)^{-1}$; — толщина первого фазового слоя [2, 3]; n — порядок дифракционного отражения.

Физический смысл l_1 детально обсуждался в [3].

Пусть на пленку толщиной l под углом скольжения ϑ падает плоская монохроматическая σ -поляризованная волна. Обобщение решения задачи на случай рассеяния неполяризованного излучения не представляет большого труда. Эпитаксиальные пленки обычно создаются на толстых совершенных кристаллах (подложках). Дифракционное рассеяние в совершенной подложке имеет динамический характер и хорошо изучено [17]. В данной работе мы рассмотрим процесс дифракции в отдельной пленке, а в численных расчетах КДО учтем также дифракцию в подложке. С этой целью используем процедуру «спинания решений», описанную в работе [18].

В кинематическом приближении амплитудный коэффициент отражения одномерно деформированной пленки

$$R = i\sigma_g \int_0^l e^{i(\eta z - g\mathbf{u})} dz \quad (4)$$

зависит от значения углового параметра $\eta = (2\pi/\lambda \sin \vartheta_0)(\chi_0 + \sin 2\vartheta_0 \Delta \vartheta)$, где λ — длина волны падающего излучения, ϑ_0 — начало отсчета угловой отстройки $\Delta \vartheta = \vartheta - \vartheta_0$. Обычно за ϑ_0 принимают брэгговский угол подложки. В общепринятых обозначениях [17] $\sigma_g = \pi \chi_g C / (\lambda \sin \vartheta_0)$; χ_0, χ_g — фурье-компоненты поляризуемости соответственно в направлении прохождения и дифракции.

Статистическое усреднение (4) с учетом (3) дает решение для когерентной компоненты амплитудного коэффициента отражения

$$R^c = \langle R \rangle = i\sigma_g \int_0^l \exp\{i(\eta z + \pi z^2/l_1^2)\} E(z) dz, \quad (5)$$

где $E(z) = \langle \exp\{-ig\delta\mathbf{u}(z)\} \rangle = \exp\{-L(z)\}$ — статический фактор Дебая-Валлера.

Если концентрация дефектов медленно изменяется по толщине пленки или является постоянной величиной, то статфактор E в (5) можно вынести за знак интеграла. В этом случае решение (5) запишется через интегралы Френеля $C(u)$ и $S(u)$ [8]. Угловое распределение когерентно рассеянной интенсивности $I_g^c(\Delta\vartheta) = |R^c|^2$ имеет следующее аналитическое выражение:

$$I_g^c(\Delta\vartheta) = |\sigma_g|^2 (l_1^2/2) e^{-2L} \{ [C(u_1) - C(u_0)]^2 + [S(u_1) - S(u_0)]^2 \}, \quad (6)$$

где $u_0 = \eta l_1 / (\pi \sqrt{2})$, $u_1 = u_0 + \sqrt{2} l / l_1$.

Из (5) непосредственно следует физический смысл l_1 : при нулевом значении угловой переменной ($\eta=0$) на глубине $z=l_1$ от поверхности пленки из-за линейного изменения периода решетки рассеянная волна будет иметь фазовый сдвиг, равный π , относительно волны, отраженной от входной поверхности.

Обычное условие кинематической дифракции $l \ll l_{\text{ext}}$, где l_{ext} — экстинкционная длина. Для дефектного кристалла с ЛИПР, помимо этого условия, кинематическая дифракция реализуется при $l_1 \ll l_{\text{ext}}$, а также при $\exp(-2L) \ll 1$. Все эти условия могут выполняться одновременно.

В терминах фазовых слоев может быть объяснена и дифракция в недеформированном кристалле ($gu=0$). В данном случае толщины фазовых слоев для конкретной угловой отстройки равны и обратно пропорциональны значению η . При $\eta=0$ формируется единый, синфазно отражающий фазовый слой или, иными словами, выполняется точное условие Вульфа—Брэгга. В кристалле с постоянным градиентом деформации изменение угловой отстройки $\Delta\theta$ приводит к перемещению брэгговского условия по глубине кристалла, т. е. перемещению фазовых слоев [3]. Для непоглощающего кристалла конечной толщины с ЛИПР кривая дифракционного отражения имеет симметричный вид, в точности совпадающий с угловым распределением интенсивности дифрагированной на щели световой волны [5]. Фотоэлектрическое поглощение рентгеновских лучей отвечает за асимметрию КДО [3]. Кроме фотопоглощения асимметрия КДО может быть вызвана неоднородным распределением дефектов по толщине пленки. Исследование этой проблемы будет дано в отдельной публикации. Профили КДО от пленки с ЛИПР в отсутствие и при наличии подложки различаются. Это различие также может быть объяснено построением (движением) фазовых слоев.

В отсутствие дефектов в пленке, т. е. при $E=1$, выражение (6) переходит в известное решение [8].

Диффузное рассеяние

Интенсивность диффузно рассеянных волн находится из соотношения [19]

$$I_g^d(\Delta\theta) = \langle RR^* \rangle - \langle R \rangle \langle R^* \rangle. \quad (7)$$

Подставляя в (7) решения (4) и (5) и проводя несложные преобразования, получаем

$$I_g^d(\Delta\theta) = |\sigma_g|^2 \int_0^l (1 - E^2) \operatorname{Re} \{ \tau(\eta, z) \} dz, \quad (8)$$

где

$$\tau(\eta, z) = \int_0^\infty G(\xi, z) \exp \{ i [(\eta + 2\pi z/l_1^2) \xi + (\pi/l_1^2) \xi^2] \} d\xi \quad (9)$$

— комплексная корреляционная длина, определяющая угловое распределение диффузно рассеянных волн, причем $\tau(0, 0) \ll l$.

Статистическое распределение микродефектов в пленке задается корреляционной функцией [12]

$$G(\xi, z) = (1 - E^2)^{-1} \langle \langle e^{-i\xi [\delta u(x+\xi) - \delta u(x)]} \rangle \rangle - E^2. \quad (10)$$

Выражение (8), описывающее угловое распределение диффузно рассеянных волн, следует также из более общих соотношений, полученных в рамках статистической динамической теории дифракции [12]. Корреляционная функция (10) зависит от типа дефектов. Для однородного распределения микродефектов в кристалле получены аналитические выражения корреляционных функций сферических аморфных кластеров в отсутствие упругих полей вне кластера [11] и дефектов кулоновского типа [20]. Соотношения для указанных корреляционных функций имеют довольно громоздкий вид (см., например, [20]), что в конечном итоге приводит к более громоздким выражениям корреляционных длин, а задача нахождения точных формул для диффузного фона может быть практически неразрешимой. Хотя корреляционная длина, например, для однородно распределенных по пленке с ЛИПР сферических аморфных кластеров выражается через специальные функции [21], угловое распределение ин-

интенсивности некогерентно рассеянных волн поддается лишь численному анализу. Поэтому в дальнейшем мы искусственно введем одну из наиболее простых корреляционных функций без указания модели дефектов.

Однородное распределение дефектов по глубине пленки

Рассмотрим вначале наиболее простой вариант задачи — однородное распределение дефектов по толщине пленки. С целью упрощения проблемы, как отмечалось выше, не будем задаваться конкретной моделью дефектов. Через корреляционную функцию вида [12] $G = \exp(-\pi \xi^2 / (4\tau^2))$ введем известную характеристику среды — корреляционную длину Като τ [9], величина которой характеризует средний размер дефектов. Совершенно очевидно, что для градиентной пленки практически всегда выполняется условие $\tau/l_1 \ll 1$. Поэтому с точностью до малых членов порядка $(\tau/l_1)^2$ получаем выражение для реальной части корреляционной длины

$$\operatorname{Re} \{ \tau(\eta, z) \} = \tau \exp(-y^2), \quad (11)$$

где $y = (\tau/\sqrt{\pi})(\eta + 2\pi z/l_1^2)$.

Подставляя (11) в (8), приходим к аналитическому решению для углового распределения интенсивности диффузно рассеянных волн

$$I_g^d(\Delta\theta) = |\sigma_g|^2 (1 - E^2) l_1^2 \{ \operatorname{erf}(y_1) - \operatorname{erf}(y_0) \} / 4, \\ y_0 = \tau\eta/\sqrt{\pi}, \quad y_1 = y_0 + 2\sqrt{\pi} \tau l / l_1^2. \quad (12)$$

Здесь

$$\operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-x^2) dx$$

— интеграл вероятности [22]. По своей структуре угловые переменные y_1 , y_0 в (12) аналогичны соответствующим переменным u_1 , u_0 в решении для углового распределения когерентно рассеянных волн (см. (6)), причем роль толщины первого фазового слоя в (12) играет корреляционная длина Като τ .

Переход к кристаллу с постоянным по толщине пленки межплоскостным расстоянием осуществляется при $\Delta a \rightarrow 0$, т. е. при $l_1 \rightarrow \infty$, при этом в (11) угловая переменная y теряет зависимость от координаты z : $y = \tau\eta/\sqrt{\pi}$. В этом случае угловое распределение интенсивности диффузно рассеянных волн

$$I_g^d(\Delta\theta) = \tau |\sigma_g|^2 (1 - E^2) l \exp(-y^2) \quad (13)$$

полностью определяется рассеивающими свойствами кристалла, размерами дефектов, их концентрацией (стафактором E) и толщиной пленки l . Для $\eta=0$ реальная часть корреляционной длины принимает максимальное значение, равное τ . При этом же условии из (13) следует максимальное значение интенсивности диффузного фона

$$I_{g \max}^d = \tau |\sigma_g|^2 (1 - E^2) l. \quad (14)$$

Характер поведения корреляционной длины в кристалле с ЛИПР как функции угловой отстройки $\Delta\theta$ и координаты z проанализирован в [12]. Кратко остановимся на основных моментах этого анализа. В градиентной пленке, согласно (11), y может принимать нулевые значения для определенных η и соответствующих z : $\eta = -2\pi z/l_1^2$. Эти значения $z = z_B = -l_1^2 \eta / (2\pi)$ отвечают глубине, на которой выполняется точное условие Брэгга (в кристалле с ЛИПР период решетки изменяется по толщине, следовательно, однозначно определяет брэгговское условие в любой точке внутри кристалла). Совершенно очевидно, что реальная часть корреляционной длины имеет максимальное значение не во всем кристалле, как это было в случае отсутствия деформации решетки, а только на глубине z_B . С удалением от z_B корреляционная длина уменьшается по закону $\tau(z_B, z) \sim \tau \exp\{-4\pi\tau^2(z_B - z)^2/l_1^4\}$.

В работе [3] детально исследован процесс формирования осцилляционной структуры КДО. В некотором смысле механизм выхода диффузных квантов из градиентной пленки аналогичен этому процессу: большому градиенту деформации решетки соответствует более протяженный по углам диффузный фон.

Предположим, что точное брэгговское условие выполняется для межплоскостного расстояния в середине пленки, тогда $y_1 = \sqrt{\pi} \tau l / l_1^2$, $y_0 = -y_1$. Согласно свойству интегралов вероятности [22] $\text{erf}(y) = -\text{erf}(-y)$, из (12) получаем максимальное значение интенсивности диффузного рассеяния градиентной пленки

$$I_g^d \text{max} = |\sigma_g|^2 (1 - E^2) (l_1^2/2) \text{erf}(\sqrt{\pi} \tau l / l_1^2). \quad (15)$$

Для малых значений y интеграл вероятности $\text{erf}(y) \approx 2y/\sqrt{\pi}$. Поэтому при $l_1 \rightarrow \infty$ ($\langle \Delta a \rangle \rightarrow 0$) решение (15) непосредственно переходит в (14). Далее, используя известное асимптотическое представление [22].

$$\text{erf}(y) = 1 - \exp(-y^2) (\sqrt{\pi} y)^{-1} [1 + O(y^{-1})],$$

исследуем поведение углового распределения интенсивности диффузно рассеянных волн при больших значениях угловой отстройки $|\eta| \gg 2\pi l / l_1^2$; $|y_{1,0}| \gg 1$. В результате для I_g^d получаем

$$I_g^d(\Delta\theta) \approx |\sigma_g|^2 (l_1^2 / (4\tau\eta)) (1 - E^2) \exp[-(\tau\eta)^2 / \pi] \times \\ \times \{1 - \exp[-4(\tau/l_1)^2 (\eta l + \pi l^2 / l_1^2)]\}. \quad (16)$$

Данное решение также допускает переход к кристаллу с неизменным параметром решетки. Действительно, для $l_1 \gg l$, разложив экспоненту в фигурных скобках в ряд и ограничившись двумя первыми членами разложения, непосредственно приходим к соотношению (13).

Неоднородное распределение дефектов

В ряде случаев дефекты имеют пространственно неоднородное распределение (например, ионно-имплантированные слои). При этом по глубине может изменяться как концентрация (статфактор $E = E(z)$), так и размеры дефектов (в данном случае корреляционная длина Като $\tau = \tau(z)$).

Теоретическое исследование этой проблемы представляет отдельную задачу. В данной работе мы лишь численно проанализируем решение для когерентной и диффузной составляющих в рамках наиболее простых зависимостей для E и τ

$$E(z) = E(1 + \alpha z), \quad \tau(z) = \tau(1 + \beta z),$$

где $\alpha = \Delta E / (El)$; $\beta = \Delta \tau / (\tau l)$; ΔE , $\Delta \tau$ — полное изменение статфактора и корреляционной длины Като по толщине пленки.

Результаты численных расчетов

Расчеты КДО от градиентной пленки проводились на основе модели кристалла, профиль деформации решетки которого показан на рис. 1, а (штриховая линия — среднестатистический профиль деформации). Все вычисления выполнены для пленки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с использованием полученных соотношений применительно к симметричной брэгговской дифракции σ -поляризованного $\text{Cu K}\alpha_1$ -излучения (отражение 004).

Сравнительно малая толщина пленки, достаточно большой градиент деформации решетки и наличие дефектов обеспечивали кинематический характер дифракционного рассеяния. Расчеты выполнены для моделей эпитаксиальных пленок без и при наличии подложки. Для лучшего разрешения структуры

КДО в области малых интенсивностей на рисунках приведены соответствующие кривые в логарифмическом масштабе.

Влияние подложки на формирование осцилляционной структуры КДО показано на рис. 1, б. В отсутствие подложки форма КДО обусловлена движением фазовых слоев по толщине пленки и выходом последних через нижнюю поверхность пленки [3]. При этом по аналогии с дифракцией света на щели максимум интенсивности обеспечивается преобладающим числом синфазно рассеивающих слоев. При наличии подложки фазовые слои не выходят из пленки, а про-

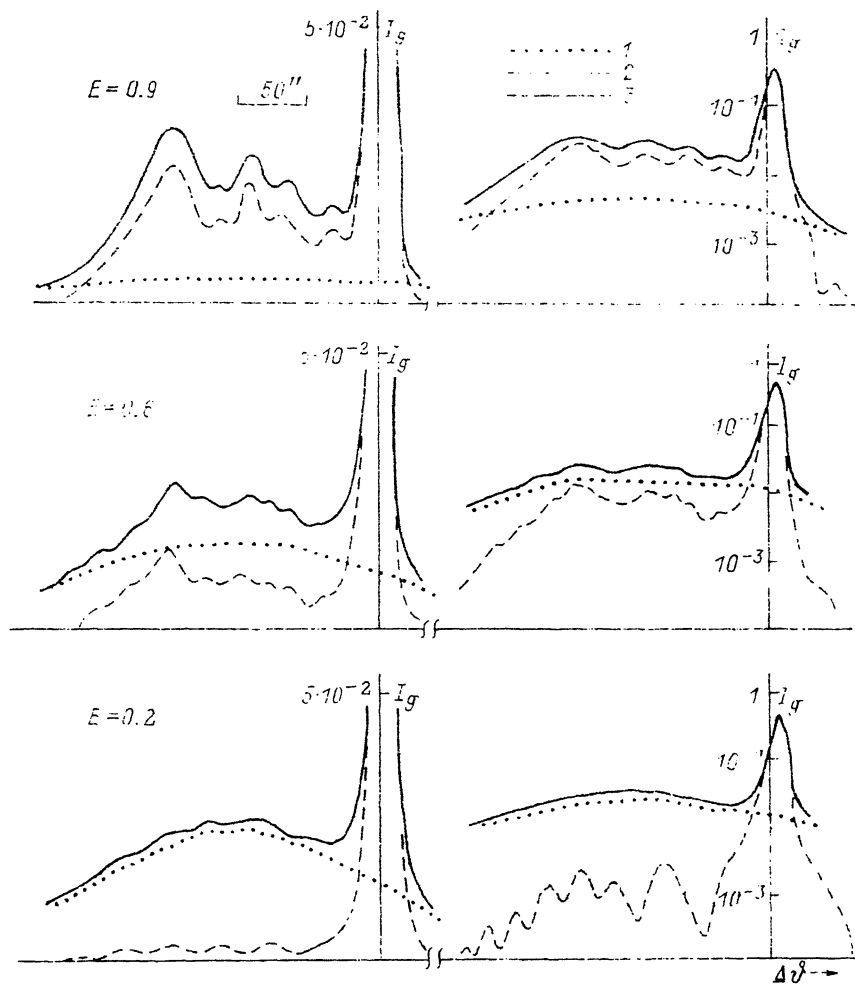


Рис. 2. Расчетные КДО (справа в логарифмическом масштабе) для различных значений E градиентной пленки.

1 — диффузная, 2 — когерентная, 3 — полная интенсивность. $l=1$ мкм, $l_1=0.30$ мкм, $\tau=0.05$ мкм.

должают перемещаться по подложке. В результате влияние нижних фазовых слоев несущественно и вид КДО пленки напоминает профиль углового распределения дифрагированной на крае полуплоскости световой волны [4, 5].

Поскольку формирование диффузного фона зависит от степени аморфизации, размеров дефектов, градиента деформации решетки и толщины пленки (см. (12)), то результаты численных расчетов анализируются в зависимости от величин этих параметров.

Согласно рис. 2, уменьшение статфактора приводит к подавлению когерентной и росту диффузной интенсивностей. При этом наблюдается сглаживание осцилляций полной КДО. Для сильно аморфизованной пленки ($E=0.2$) профиль КДО определяет диффузное рассеяние.

В конкретной угловой области для количественной характеристики дифракционного спектра аналогично оптике видимого диапазона частот можно ввести функцию видимости [23] $V = (I_{\max} - I_{\min}) / (I_{\max} + I_{\min})$, где I_{\max} и I_{\min} — максимальное и минимальное значения рассеянной интенсивности в выделенной угловой области КДО (например, участок спектра, охватывающий дальние относительно подложки максимум и минимум). Удобно ввести нормировку, полагая $I_{\min} = 0$ при дифракции на бездефектной пленке. В результате функция видимости для

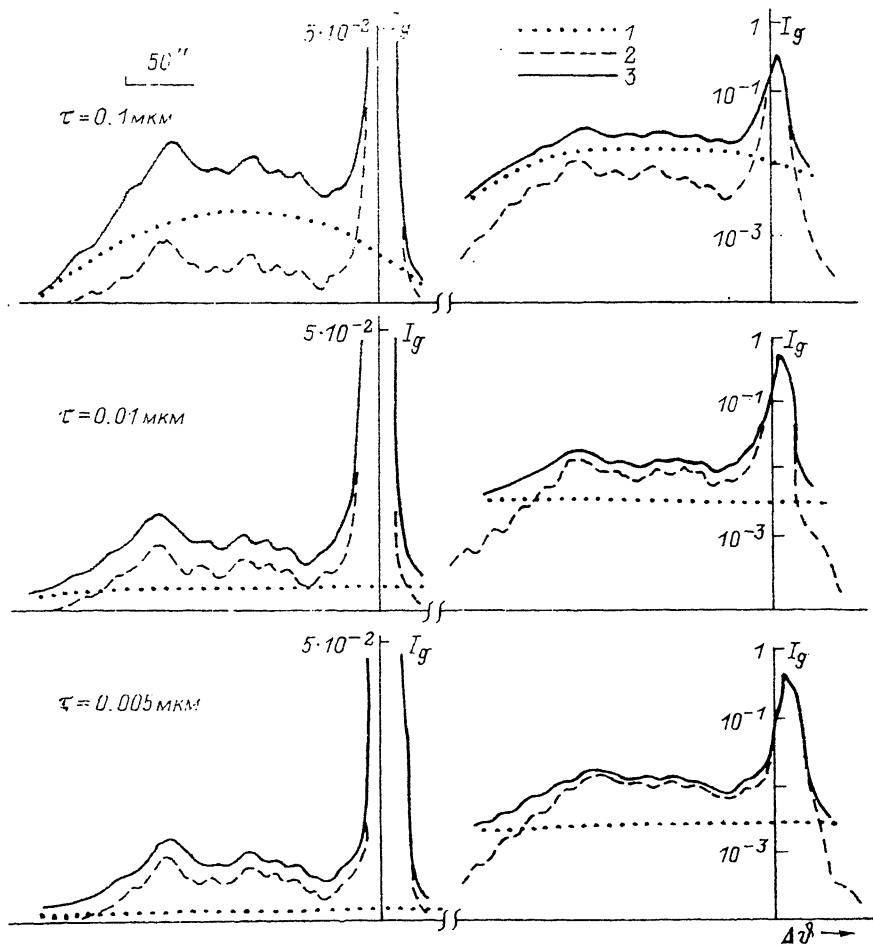


Рис. 3. Расчетные КДО (справа в логарифмическом масштабе) для различных значений τ . 1—3 — то же, что и на рис. 2, $l_1 = 0.30$ мкм, $l = 1$ мкм, $E = 0.6$.

такой пленки будет равна единице. В случае большой степени аморфизации $V \rightarrow 0$.

Угловая область, охватываемая диффузным фоном, наряду с величиной градиента деформации решетки определяется размерами дефектов. Как и при динамической дифракции [12], интенсивность диффузного фона спадает с уменьшением размеров дефектов, а сам фон становится более протяженным по углам (рис. 3).

На рис. 4 показаны КДО в зависимости от толщины и градиента деформации пленки. Известно, что увеличение толщины пленки без изменения максимальной деформации решетки практически не меняет угловой интервал осцилляционной структуры когерентной КДО [3], хотя, как это видно из рис. 4, наблюдается рост числа осцилляционных максимумов из-за увеличения числа фазовых слоев по толщине пленки. Кроме этого, увеличивается интенсивность диффузного фона за счет распределенных по толщине добавочных источников некогерентного рассеяния.

Увеличение толщины пленки без изменения градиента деформации (рис. 4, $l=2$ мкм, $l_1=0.30$ мкм) также влечет изменение углового распределения когерентной и диффузной интенсивности. При заданном градиенте деформации увеличение толщины пленки является причиной расширения угловой области дифракционного спектра.

Проведенный численный анализ КДО показывает также существенное влияние на формирование последней неоднородного по глубине распределения дефектов (рис. 5). Такая слоистая неоднородность может быть обусловлена гра-

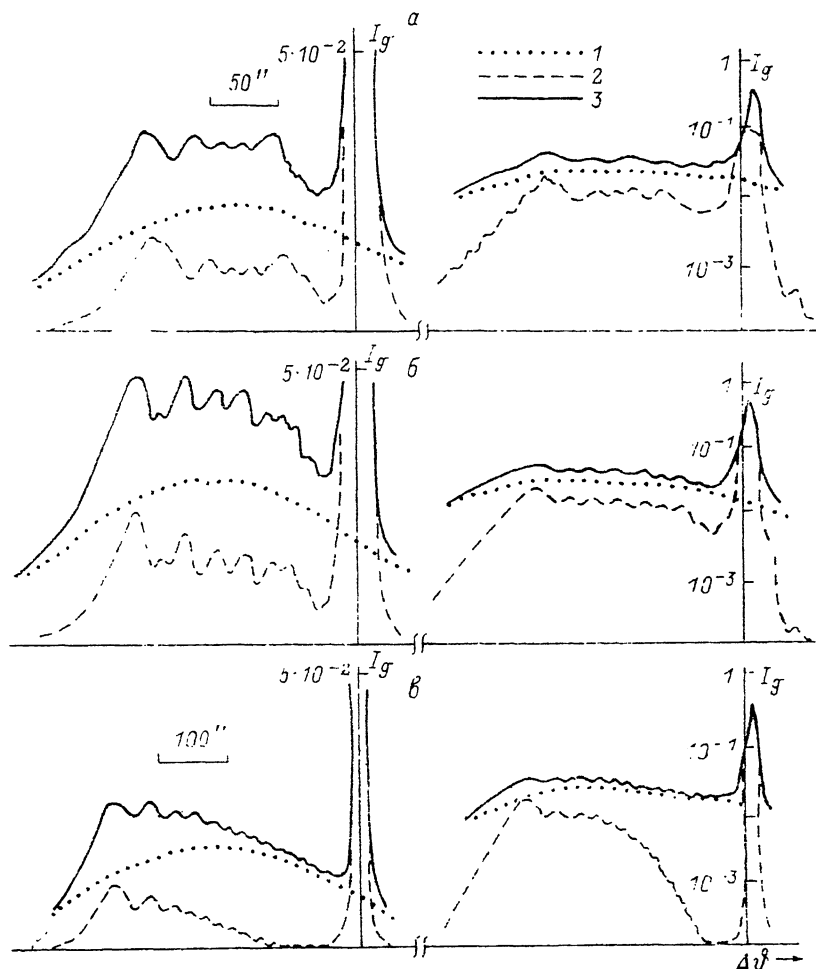


Рис. 4. Расчетные КДО (справа в логарифмическом масштабе) для различных значений градиента деформации и толщины пленки.

1—3 — то же, что и на рис. 2. $\tau=0.05$ мкм, $E=0.6$; l , мкм: а — 1.5; б, в — 2.0; l_1 , мкм: а — 0.38, б — 0.43, в — 0.30.

диентным изменением концентрации и размеров дефектов. Если степень аморфизации пленки растет в глубь кристалла ($\Delta E = -0.7$), то верхний, менее дефектный слой пленки имеет большую отражательную способность и, следовательно, дифрагированная на пленке когерентная интенсивность преимущественно сосредоточена слева, вдали от подложки. В то же время диффузный фон смещен в противоположную сторону — к пику подложки.

Совершенно иная картина наблюдается при замене знака градиента статфактора, так как в этом случае плотность источников некогерентного рассеяния больше в приповерхностной области пленки, т. е. в области большей деформации решетки относительно подложки.

Асимметрия диффузного фона проявляется при заметном градиенте изменения размеров дефектов. Известно, что для больших дефектов интенсивность

диффузного фона имеет более резкий спад с изменением угловой отстройки [12]. В данном случае (рис. 5) дефекты меньших размеров сосредоточены в нижней части пленки, поэтому в угловой области подложки более слабый спад диффузного фона, чем вдали от нее.

Таким образом, в зависимости от характера статистического распределения дефектов в пленке формируется диффузный фон определенной конфигурации. Профиль полной КДО зависит от следующих характеристик среды: степени

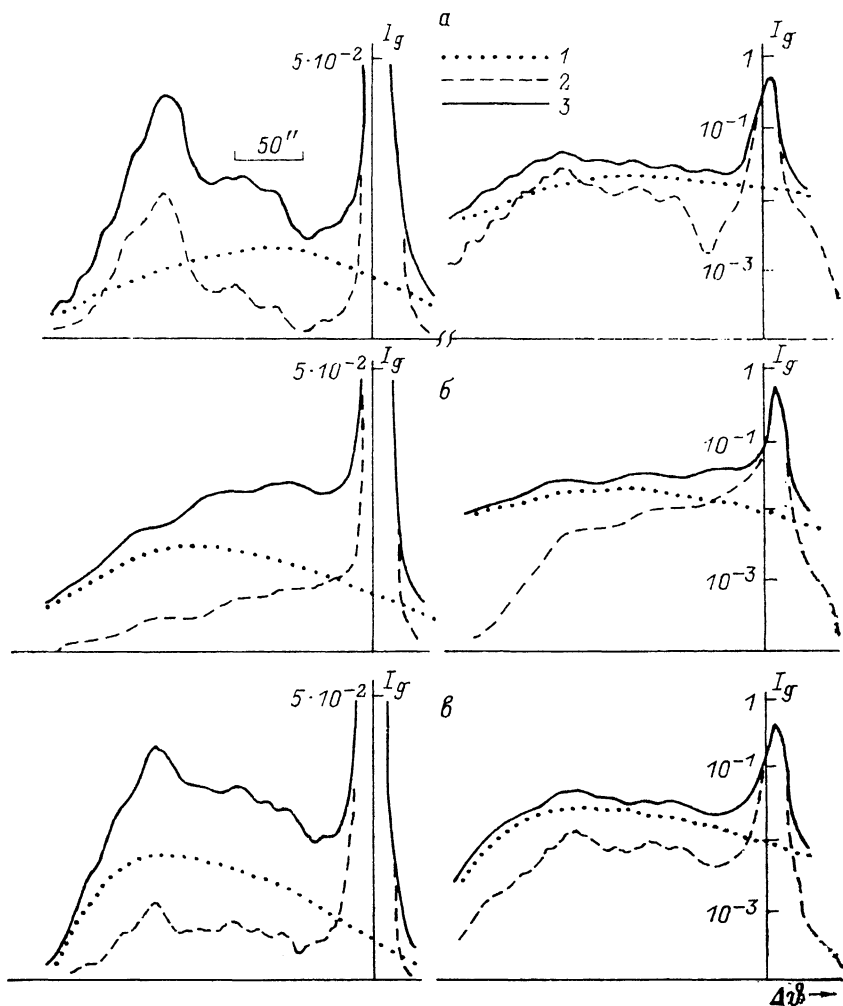


Рис. 5. Влияние неоднородного распределения концентрации дефектов и изменения их размеров по глубине пленки на профиль КДО (справа в логарифмическом масштабе).

1—3 — то же, что и на рис. 2. $l=1$ мкм, $l_1=0.30$ мкм; τ , мкм: а, б — 0.05; в — 0.15; Е: а — 0.9, б — 0.2, в — 0.6; $\Delta E=-0.7$ (а), 0.7 (б); $\Delta \tau=-0.10$ мкм (в).

аморфизации пленки, размеров дефектов, градиента деформации решетки и толщины пленки. Установлено, что не менее важным фактором, влияющим на вид полной двухкристалльной КДО является слоистая неоднородность распределенных по пленке дефектов [10].

Важнейшей проблемой в настоящее время остается решение обратных задач восстановления строения неоднородных слоев и пленок по данным рентгеновской дифрактометрии. Уже на этапе кинематической дифракции в когерентном приближении встречаются определенные трудности [24]. Учет диффузного рассеяния ставит на этом пути дополнительные преграды, преодоление которых связано с однозначной идентификацией когерентной и некогерентной компонент [25] с помощью, например, трехкристалльной дифрактометрии [26].

Список литературы

- [1] *Halliwel M. A. G., Lyons M. H., Hill M. J.* // *J. Cryst. Growth*. 1984. Vol. 68. N 2. P. 523—531.
- [2] *Kolrakov A. V., Pungev V. I.* // *Sol. St. Commun*. 1985. Vol. 54. N 7. P. 573—578.
- [3] *Коллаков А. В., Пунегов В. И.* // *Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, Астрон.* 1986. Т. 27. № 5. С. 85—87.
- [4] *Шустер А.* Введение в теоретическую оптику. Л.; М.: ОНТИ, 1935. 376 с.
- [5] *Пунегов В. И.* Об аналогии дифракции рентгеновских лучей в кристаллах и света на щели. Сыктывкар, 1987. 29 с. Деп. в ВИНТИ. № 8903-В87. М., 1987.
- [6] *Коллаков А. В., Пунегов В. И.* // *Поверхность*. 1988. № 3. С. 82—84.
- [7] *Лидер В. В., Чуховский Ф. Н., Хапачев Ю. П., Барашев М. И.* // *ФТТ*. 1989. Т. 31. Вып. 4. С. 74—81.
- [8] *Коллаков А. В., Хапачев Ю. П., Кузнецов Г. Ф., Кузьмин Р. Н.* // *Кристаллография*. 1977. Т. 22. № 3. С. 473—480.
- [9] *Kato N.* // *Acta Cryst. A*. 1980. Vol. 36. N 5. P. 763—769, 770—778.
- [10] *Петрашень П. В.* // *Металлофизика*. 1986. Т. 8. № 1. С. 35—43.
- [11] *Бушнев В. А.* // *ФТТ*. 1989. Т. 31. Вып. 11. С. 70—78.
- [12] *Пунегов В. И.* // *Кристаллография*. 1990. Т. 35. № 3. С. 576—583.
- [13] *Пунегов В. И.* // *ФТТ*. 1990. Т. 32. Вып. 8. С. 2476—2479.
- [14] *Пунегов В. И.* // *ЖТФ*. 1990. Т. 60. Вып. 10. С. 82—87.
- [15] *Пунегов В. И.* // *ФТТ*. 1991. Т. 33. Вып. 1. С. 234—242.
- [16] *Pungev V. I., Petrakov A. P., Tikhonov N. A.* // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1990. Vol. 122. N 2. P. 447—456.
- [17] *Пинскер Э. Г.* Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982. 391 с.
- [18] *Пунегов В. И., Ладанов А. В.* // *Поверхность*. 1990. № 4. С. 45—50.
- [19] *Кривоглаз М. А.* Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1983. 408 с.
- [20] *Воронков С. Н., Чуховский Ф. Н.* // *Металлофизика*. 1989. Т. 11. № 6. С. 52—56.
- [21] *Пунегов В. И., Павлов К. М.* // *Тез. докл. V Всесоюз. совещания по когерентному взаимодействию излучения с веществом*. М., 1990. С. 35.
- [22] *Никифоров А. Ф., Уваров В. Б.* Основы теории специальных функций. М.: Наука, 1974. 304 с.
- [23] *Калитевский Н. И.* Волновая оптика. М.: Высшая школа, 1978. 384 с.
- [24] *Афанасьев А. М., Фанченко С. С.* // *ДАН СССР*. 1986. Т. 287. № 6. С. 1395—1399.
- [25] *Пунегов В. И.* // *Поверхность*. 1991. № 3. С. 45—49.
- [26] *Афанасьев А. М., Александров П. А., Ижамов Р. М.* Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М.: Наука, 1989. 152 с.

Сыктывкарский университет

Поступило в Редакцию
11 февраля 1991 г.