[6] *Гафийчук В. В., Кияк С. Г., Савицкий Г. В., Пляцко Г. В.* // Тез. докл. VI Всесоюз. конф. по нерезонансному взаимодействию оптического излучения с веществом. Вильнюс, 1984. С. 71.
[7] *Ахманов С. А., Емельянов В. И., Коротеев Н. И., Семиногов В. Н.* // УФН. 1985. Т. 147. № 4. С. 675—745.
[8] *Yaws C. L., Lutwack P., Dickens L. L., Hsu G.* // Sol. St. Technol. 1981. Vol. 24. N 1. P. 87—92.

Минский
радиотехнический институт

Поступило в Редакцию
26 апреля 1988 г.
В окончательной редакции
19 декабря 1988 г.

01; 05, 07 *Журнал технической физики, т. 59, в. 9, 1989*

ТЕОРИЯ СКОЛЬЗЯЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ В КИНЕМАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

И. А. Шипов, М. А. Андреева

Рентгеновская дифракция на кристаллических плоскостях, почти перпендикулярных поверхности в условиях полного внешнего отражения (ПВО), начиная с пионерской работы [1], эффективно используется для исследования кристаллической структуры ультратонких пленок и поверхностей [2]. Особенностью скользящей геометрии эксперимента является структурная информативность зависимостей интенсивности дифрагированной волны I_h не только от угла отклонения от угла Брэгга $\Delta\vartheta$, но и от углов скольжения падающего на поверхность излучения φ_0 и выхода (зеркальной) дифрагированной волны φ_h. Выяснилось, что интерпретация кривых $I_h(\varphi_h)$ различается в случаях дифракции на совершенных и мозаичных кристаллах [3]. В первом случае $\Delta\vartheta$ и φ_h жестко связаны между собой (при фиксированном φ_0) [4], в кинематическом случае $I_h(\varphi_h)$ и $I_h(\Delta\vartheta)$ независимы: положение и форма $I_h(\Delta\vartheta)$ определяет период решетки и размеры когерентно рассеивающих областей вдоль поверхности, а форма $I_h(\varphi_h)$ связана с толщиной или глубиной залегания участвующего в дифракции (для выделяемого $\Delta\vartheta$) слоя.

Кинематическая теория скользящей дифракции для случая полубесконечного однородного кристалла развита в [5, 6]. В настоящей работе получены аналитические формулы, описывающие $I_h(\varphi_h)$ для случая кристаллической пленки в рамках кинематического приближения с учетом различия электронных плотностей пленки и подложки. В отличие от [5, 6] в настоящей работе учитывается, что поле в кристалле в условиях ПВО в общем случае представляет собой не просто френелевскую затухающую волну, а систему стоячих волн.

Для решения задачи используем матричное уравнение для тангенциальных (индекс t) компонент электрического и магнитного полей излучения проходящей и дифрагированной (индексы 1 и 2 соответственно) волн, полученное в [7] (ограничимся рассмотрением σ — поляризации дифракционной задачи, когда $H_{it}=H_i$, $i=1, 2$)

$$\frac{d}{dz}\begin{pmatrix} H_1(z) \\ E_{1t}(z) \\ H_2(z) \\ E_{2t}(z) \end{pmatrix} = ikM(z)\begin{pmatrix} H_1(z) \\ E_{1t}(z) \\ H_2(z) \\ E_{2t}(z) \end{pmatrix}; \quad M=-\Phi_0 E+\begin{pmatrix} \hat{\alpha} & \hat{\beta} \\ \hat{\gamma} & \hat{\delta} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где E — единичная матрица 4×4, а

$$\hat{\alpha}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \Phi_0^2+\chi_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta}=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \chi_{\bar{h}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \chi_h & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\delta}=\begin{pmatrix} -\psi & 1 \\ \Phi_h^2+\chi_0 & -\psi \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Здесь $\chi_{0,h}$, $\bar{h}$, (z) — фурье-компоненты поляризуемости среды, $\psi(z)=(\tau\mathbf{q})$ — эффективный угол разориентации отражающих плоскостей, $\mathbf{q}$ — единичный вектор нормали к поверхности, τ — вектор обратной решетки в единицах ω/c, $\Phi_{0,h}=\sin\varphi_{0,h}$.

В кинематическом случае, когда размеры когерентно рассеивающих областей на поверхности меньше длины экстинкции, в (1) можно пренебречь обратным влиянием дифрагированной волны на проходящую, т. е. положить $\chi_{\bar{h}}=0$. Тогда возможно при $\chi_{0,\,h}(z)$, $\psi\,(z)=\text{const}$ получить аналитическое решение (1), раскладывая матричный экспоненциал в ряд и проводя с учетом $\hat{\beta}=0$ и $\hat{\alpha}^2=(\Phi_0^2+\chi_0)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$, суммирование,

$$\begin{pmatrix} H_1(d)\\ E_{1t}(d)\\ H_2(d)\\ E_{2t}(d)\end{pmatrix}=L\,(d)\begin{pmatrix} H_1(0)\\ E_{1t}(0)\\ H_2(0)\\ E_{2t}(0)\end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$L\,(d)=e^{ikMd}=e^{-ikd\Phi_0}\begin{pmatrix}\hat{X} & 0\\ \hat{W} & \hat{Y}\end{pmatrix}, \tag{4}$$

где $L\,(d)$ — толщина кристаллической пленки,

$$\hat{X}=\begin{pmatrix}\cos Q_0 & \dfrac{i}{\eta_0}\sin Q_0\\ i\eta_0\sin Q_0 & \cos Q_0\end{pmatrix},\qquad \hat{Y}=e^{-ikd\psi}\begin{pmatrix}\cos Q_h & \dfrac{i}{\eta_h}\sin Q_h\\ i\eta_h\sin Q_h & \cos Q_h\end{pmatrix},$$

$$\hat{W}=(\eta_0^2-\hat{\delta}^2)^{-1}\{(\cos Q_0-\cos(kd\hat{\delta}))(\hat{\gamma}\hat{\alpha}+\hat{\delta}\hat{\gamma})+i\,(\eta_0\sin Q_0-\hat{\delta}\sin(kd\hat{\delta}))\hat{\gamma}+$$

$$+i\,(\eta_0^{-1}\sin Q_0-\hat{\delta}^{-1}\sin(kd\hat{\delta}))\,\hat{\delta}\hat{\gamma}\hat{\alpha}\}=$$

$$=\chi_h\begin{pmatrix} A+B+C\left(1+\dfrac{\psi}{\eta_h}\right)+D\left(1-\dfrac{\psi}{\eta_h}\right) & \dfrac{B-A}{\eta_0}+\dfrac{D-C}{\eta_h}\\ A\,(\psi-\eta_0)+B\,(\psi+\eta_0)-C\,(\psi+\eta_h)-D\,(\psi-\eta_h) & A\left(1-\dfrac{\psi}{\eta_0}\right)+B\left(1+\dfrac{\psi}{\eta_0}\right)+C+D\end{pmatrix},$$

$$A=\frac{e^{-ikd\eta_0}}{2\,((\psi-\eta_0)^2-\eta_h^2)},\qquad B=\frac{e^{ikd\eta_0}}{2\,((\psi+\eta_0)^2-\eta_h^2)},$$

$$C=\frac{e^{-ikd(\eta_h+\psi)}}{2\,((\psi+\eta_h)^2-\eta_0^2)},\qquad D=\frac{e^{ikd(\eta_h-\psi)}}{2\,((\psi-\eta_h)^2-\eta_0^2)}, \tag{5}$$

а $\eta_{0,\,h}=\sqrt{\Phi_{0,\,h}^2+\chi_0}$, $Q_{0,\,h}=kd\eta_{0,\,h}$.

При $\varphi_0=\varphi_h$ и $\psi=0$, раскрывая неопределенность для $\hat{W}$, получаем выражение

$$\hat{W}=-\frac{\chi_h}{2\eta_0^2}\begin{pmatrix} Q_0\sin Q_0 & -\dfrac{i}{\eta_0}(Q_0\cos Q_0-\sin Q_0)\\ -i\eta_0\,(Q_0\cos Q_0+\sin Q_0) & Q_0\sin Q_0\end{pmatrix}. \tag{6}$$

Для решения граничной задачи в (2) следует ввести связь между E_{it} и H_i ($i=1,\ 2$) на верхней и нижней поверхностях пленки

$$E_{1t}(0)=E_0+E_R=\Phi_0\,(H_0-H_R),\qquad E_{2t}(0)=E_h=-\Phi_hH_h,$$

$$E_{1t}(d)=u_0H_1(d),\qquad E_{2t}(d)=u_hH_2(d). \tag{7}$$

Соотношения (7) записаны в предположении, что подложка не дает дифракционное рассеяние в области дифракционного максимума пленки; $u_{0,\,h}=\sqrt{\Phi_0^2+\chi_0^{\text{ам}}}$, $\chi_0^{\text{ам}}$— восприимчивость подложки; $E_0\,(H_0)$, $E_R\,(H_R)$ и $E_h\,(H_h)$ обозначают амплитуды падающей, зеркально отраженной и (зеркальной) дифрагированной волн соответственно. Решение системы (2) с учетом (7) дает общее выражение для E_h для случая кристаллической пленки на аморфной подложке

$$E_h=-2\Phi_0\frac{(l_{21}-u_0l_{11})\,(l_{42}-u_hl_{32})-(l_{22}-u_0l_{12})\,(l_{41}-u_hl_{31})}{[(l_{21}-u_0l_{11})-\Phi_0\,(l_{22}-u_0l_{12})]\,[(l_{43}-u_hl_{33})-\Phi_h\,(l_{44}-u_hl_{34})]}E_0, \tag{8}$$

где l_{ij} ($i,\ j=1,\ 4$) — компоненты матрицы $L\,(d)$.

Интенсивность дифрагированной волны равна $I_h=|E_h/E_0|^2\,\Phi_h/\Phi_0$. В общем случае вычисление $L\,(d)$ можно провести, разбив пленку на достаточно тонкие слои, в которых $\chi_{0,h}\,(z)$, $\psi\,(z)=\text{const}$ и перемножив матричные экспоненциалы вида (5), соответствующие отдельным слоям. Для однородной кинематической пленки, учитывая явный вид $L\,(d)$ (5), можно привести общее решение (8) к виду

$$E_h = -\frac{\chi_h t_{01}^0 t_{01}^h e^{ikd(\psi+\eta_0+\eta_h)}}{2\Phi_h\left(1+r_{01}^0 r_{12}^0 e^{2ikd\eta_0}\right)\left(1+r_{01}^h r_{12}^h e^{2ikd\eta_h}\right)}\left\{\frac{1-e^{-ikd(\psi+\eta_0+\eta_h)}}{\psi+\eta_0+\eta_h} + \frac{1-e^{-ikd(\psi-\eta_0+\eta_h)}}{\psi-\eta_0+\eta_h} r_{12}^0 + \frac{1-e^{-ikd(\psi+\eta_0-\eta_h)}}{\psi+\eta_0-\eta_h} r_{12}^h + \frac{1-e^{-ikd(\psi-\eta_0-\eta_h)}}{\psi-\eta_0-\eta_h} r_{12}^0 r_{12}^h\right\}, \qquad (9)$$

где $r_{01}^{0,\,h}$, $r_{12}^{0,\,h}$, $t_{01}^{0,\,h}$ — френелевские коэффициенты отражения и пропускания на границе внешняя среда—пленка и пленка—подложка для проходящей и дифрагированной волн соответственно

$$r_{01}^{0,\,h} = \frac{\Phi_{0,\,h}-\eta_{0,\,h}}{\Phi_{0,\,h}+\eta_{0,\,h}}, \quad r_{12}^{0,\,h} = \frac{\eta_{0,\,h}-u_{0,\,h}}{\eta_{0,\,h}+u_{0,\,h}}, \quad t_{01}^{0,\,h} = \frac{2\Phi_{0,\,h}}{\Phi_{0,\,h}+\Phi_{0,\,h}}. \qquad (10)$$

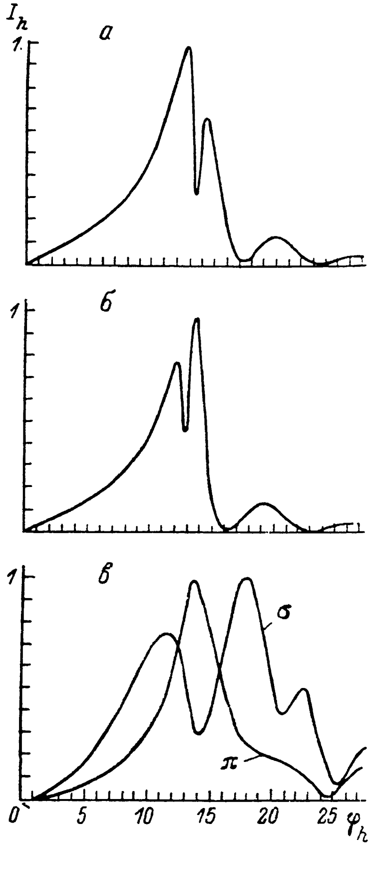
Это выражение имеет очевидный смысл, если учесть, что проходящую и дифрагированную волны в пленке можно представить в условиях ПВО в виде

$$E_{1,\,2}(z) = \frac{t_{01}^{0,\,h} E_{0,\,h}}{1+r_{01}^{0,\,h} r_{12}^{0,\,h} e^{2ikd\eta_{0,\,h}}}\left\{e^{ikz\eta_{0,\,h}} + r_{12}^{0,\,h} e^{ik(2d-z)\eta_{0,\,h}}\right\}, \qquad (11)$$

а ψ возникает в (9) при наличии периодичности χ_L по z.

Конкретные расчеты показывают (см. рисунок, *а*, *б*), что даже при незначительных различиях электронных плотностей пленки и подложки ($\sim$5 %) невозможно ограничиться представлением преломленной волны в виде затухающей френелевской волны; искажение структуры поля в пленке в этом случае вызывает отчетливое изменение формы $I_h(\varphi_h)$ соотношения между интенсивностями сателлитов и их положением.

Существенное различие характера взаимодействия в динамическом и кинематическом случаях дифракции обнаруживается сравнением рисунков *а* и *в*.[1] Кинематическая теория скользящей дифракции, применимая к мозаичным поверхностям, несколько проще динамической (ее дисперсионное уравнение не 4-й степени, а 2-й). Это упрощение относится не только к математической стороне вопроса, заключающейся в возможности всегда получить аналитическое решение, как в данной работе. Предположение о независимости структуры поля проходящей и дифрагированных волн позволяет решать задачу с учетом послойного изменения не только электронной плотности или степени аморфизации, но и тангенциальной составляющей параметра решетки, что представляет значительный практический интерес.



Нормированные кривые по углу выхода $I_h(\varphi_h)$, рассчитанные для кристаллической пленки толщиной 600 Å по кинематической (*а*, *б*) и динамической (*в*) теориям.

а, *в* — $\chi_0 = \chi_0^f$; *б* — $\chi_0 = 0.95\ \chi_0^f$. Расчет для (220), отражения CuK_α, излучения от монокристалла кремния, $\varphi_h = 15$. *в* — динамические кривые для поляризаций падающего излучения σ и π (кинематические кривые не зависят от поляризации).

Список литературы

[1] *Marra W. C., Eisenberger P., Cho A. J.* // J. Appl. Phys. 1979. Vol. 50. N 11. P. 6927—6933.

[2] *Андреева М. А., Борисова С. Ф., Степанов С. А.* // Поверхность. 1985. № 4. С. 5—26.

[1] Кинематический предел динамической теории в этой геометрии [8] имеет место для очень тонких пленок $d \leqslant 50$ Å.

[3] *Щеглов М. П., Андреева М. А., Кютт Р. Н.* // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 9.
[4] *Afanas'ev A. M., Melkonyan M. K.* // Acta Cryst. 1983. Vol. A39. N 2. P. 207—210.
[5] *Vineyard G. H.* // Phys. Rev. 1982. Vol. B26. P. 4146—4159.
[6] *Dietrich S., Wagner H.* // Z. Phys. 1987. Vol. B56. P. 207—215.
[7] *Андреева М. А., Борисова С. Ф., Хапачев Ю. П.* // Металлофизика. 1986. Т. 8. Вып. 5. С. 44—49.
[8] *Александров П. А., Афанасьев А. М., Степанов С. А.* // Поверхность. 1984. № 8. С. 9—18.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Физический факультет

Поступило в Редакцию
26 апреля 1988 г.

01; 09 *Журнал технической физики, т. 59, в. 9, 1989*

ВОЛНЫ ПОЛЯРИЗАЦИИ В НЕЛИНЕЙНОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

Ю. Н. Зайко

Уравнения Максвелла для электрического E и магнитного полей совместно с уравнением для поляризации P в нелинейном диэлектрике можно привести к виду [1, 2]

$$c^2E_{zz} = E_{tt} + 4\pi P_{tt},$$
$$P_{tt} + \sigma P_t + \omega_0^2 P + \alpha P^3 = \frac{\omega_p^2}{4\pi} E. \qquad (1)$$

Волна распространяется вдоль направления z; ω_0, m — частота малых колебаний и эффективная масса связанных осцилляторов (модель диэлектрической среды); $\omega_p{}^2 = 4\pi Ne^2/m$, N — число осцилляторов в единице объема; σ — затухание.

В (1) предполагается, что кристалл обладает центром симметрии, в противном случае ангармонизм описывается слагаемым αP^2 во втором уравнении. Для первого случая система (1) использовалась в [1] для исследования задачи о модуляционной неустойчивости монохроматической волны.

Применим для исследования (1) метод многомасштабных разложений [3]. Введем новые переменные $\xi = \varepsilon^\gamma (z - ut)$, $\tau = \varepsilon^\beta t$, ε — малый параметр. Представим поля в виде разложений

$$E = E_0 + \varepsilon E^{(1)} + \varepsilon^2 E^{(2)} + \ldots,$$
$$P = P_0 + \varepsilon P^{(1)} + \varepsilon^2 P^{(2)} + \ldots\ . \qquad (2)$$

Подставляя (2) в (1) (предварительно второе уравнение в (1) надо продифференцировать по t), имеем в нулевом порядке по ε: $\omega_0^2 P_0 + \alpha P_0^3 = (\omega_p^2/4\pi) E_0$. Чтобы разложение по целым степеням ε имело место, необходимо потребовать $\beta = \gamma + 1$. В первом порядке по ε получаем уравнение, определяющее скорость длинноволновых возмущений u: $\omega_0^2 + 3\alpha P_0^2 = \omega_p^2 u^2/(c^2 - u^2)$. Пользуясь этим уравнением и выражая $E^{(1)}$ с помощью уравнений первого порядка через $P^{(1)}$, из уравнений второго порядка по ε исключим величины $E^{(2)}$, $P^{(2)}$ и получим уравнение для $P^{(1)}$ ($\gamma = 1/2$)

$$P_\tau^{(1)} + \frac{3\alpha u P_0}{\omega_p^2}\left(\frac{c}{u} - \frac{u}{c}\right)^2 P^{(1)} P_\xi^{(1)} + \frac{1}{2\omega_p^2}\left(\frac{c}{u} - \frac{u}{c}\right)^2 \left[\frac{\sigma}{\varepsilon^{1/2}} u^2 P_{\xi\xi}^{(1)} - u^3 P_{\xi\xi\xi}^{(1)}\right] = 0. \qquad (3)$$

Из (3) видно, что без учета затухания ($\sigma = 0$) формальный параметр ε не входит в уравнение и его роль в разложении (2) играет фактический параметр малости — отношение переменной составляющей поляризации к P_0; если же $\sigma \neq 0$, то разложение (2) следует вести по σ^2.

Уравнение (3) является известным уравнением Кортевега де Вриза—Бюргерса (КдВБ). Его решением является ударная волна, структуру которой можно определить из асимптотики стационарного решения с малой амплитудой $\sim e^{k\xi}$. Для k получаем выражение $k_{1,2} = 1/2u \times [\sigma \pm \sqrt{\sigma^2 - (8\omega_p^2/(c/u - u/c)^2})]$. При $\sigma > (2\sqrt{2}\omega_p)/|c/u - u/c|$ возможны решения (3) в виде доменных стенок двух типов, при $\sigma < (2\sqrt{2}\omega_p)/|c/u - u/c|$ — в виде последовательности доменов, убывающих по амплитуде. Об экспериментальном наблюдении таких структур сообщалось в работе [4].