Письма в ЖЭТФ, том 55, вып.11, стр.618 - 620 10 июня 1992 г

О ВОЗМОЖНОСТИ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ С УЧЕТОМ ДИНАМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ

С.П.Дарбинян, П.В.Петрашень, Ф.Н.Чуховский

Институт кристаллографии РАН,

11733, Москва

Поступила в редакцию 20 декабря 1991 г.

Показана возможность восстановления комплексной отражательной способности кристалла по угловой зависимости кривой дифракционного отражения в условиях, когда существенны эффекты динамического рассеяния рентгеновских лучей в нарушенном кристаллическом слое.

Определение распределения по толщине z комплексной отражательной способности (КОС) кристалла (зависящей от величины структурного фактора $\sigma(z)$ и упругих смещений $\vec{u}(z)$ узлов кристаллической решетки) по угловой интенсивности брэгговского отражения рентгеновских лучей представляет собой одну из главных проблем теории обратных задач дифракции [1-5]. Проблема сводится к последовательному решению следующих двух задач:

1) восстановление фазы отраженной волны или амплитудного коэффициента отражения (АКО) по экспериментальным данным дифракционного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ);

2) вычисление КОС по угловой зависимости АКО.

В борновском приближении теории ДРРЛ решение первой задачи детально описано в [1,2], причем в [2] приведены примеры практического применения теории к тонким гетероэпитаксиальным структурам, когда толщина нарушенного кристаллического слоя $T \ll \Lambda_{экс}$, где $\Lambda_{экс}$ – длина экстинкции рентгеновских лучей. В случае когда $T \gtrsim \Lambda_{экс}$, становятся существенными динамические эффекты ДРРЛ, которые делают связь между КОС и АКО более сложной. Существенно, однако, что (см. [1]) решения первой задачи в борновском и динамическом случае ДРРЛ совпадают. Таким образом, для распространения существующей теории [1] на случай более толстых кристаллических структур, необходимо построить метод решения, выходящий за рамки борновского приближения теории ДРРЛ.

В основу такого метода удобно положить рекуррентные соотношения, связывающие между собой АКО $R(q, z_N)$ и $R(q, z_{N+1})$ на двух различных глубинах под поверхностью z_N и z_{N+1} (соответственно $z_{N+1} > z_N$)

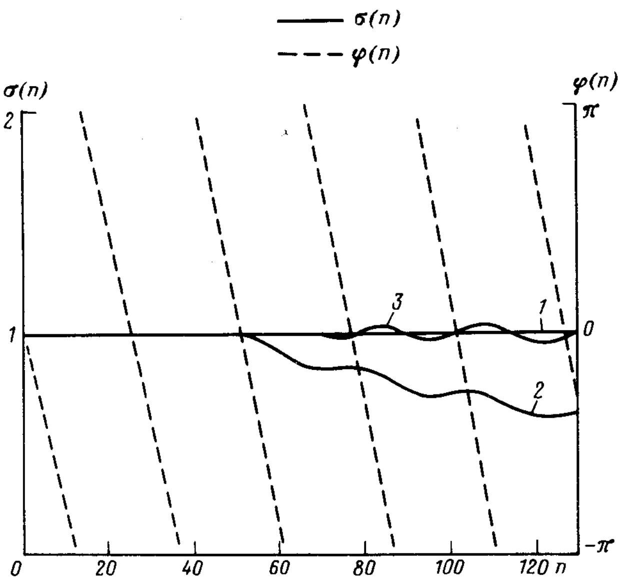
$$R(q, z_N) = r_N(q, z_N) + R(q, z_{N+1})/\beta_N(q, z_N), \tag{1}$$

где $q = q' + i\mu_0$, q' – нормированное отклонение от условия Брэгга для идеального кристалла, μ_0 – нормальный коэффициент поглощения, $r_N(q, z_N)$ – коэффициент отражения от тонкого изолированного кристаллического слоя $\Delta = z_{N+1} - z_N$. Из общей теории ДРРЛ следует, что $\beta_N(q, z)$ удовлетворяет уравнению

$$-i\frac{d\beta_N(q, z)}{dz} = (q - \alpha)\beta_N(q, z) + \sigma(z)[2r_N(q, z)\beta_N(q, z) + R(q, z_{N+1})], \tag{2}$$

с граничным условием $\beta_{N+1}(q, z_{N+1}) = 1$, $z_N \le z \le z_{N+1}$. Здесь $\alpha = d(\vec{h}\vec{u})/dz$, $\vec{h}$ – вектор дифракции, $\vec{u}(z)$ – смещение отражающей плоскости, $\sigma(z)$ – пропорционально модулю структурного фактора. Если $\Delta \ll \Lambda_{экс}$, то можно показать, что расчет $r_N(q, z_N)$ в борновском приближении теории ДРРЛ дает точность $\sim \Delta^3 \ll 1$, а пренебрежение первого слагаемого в квадратных скобках в уравнении (2) позволяет вычислить $\beta_N(q, z_N)$ с точностью $\sim \Delta^2 \ll 1$.

АКО $R(q, z_{N+1})$, рассматриваемые как функции в комплексной плоскости q, аналитичны в верхней полуплоскости, поэтому соответствующие им фурье-трансформанты отличны от нуля лишь в области $z > z_N$ [1]. Можно показать, что при делении $R(q, z_{N+1})$ на $\beta_N(q, z_N)$, это свойство сохраняется, поэтому фурье-преобразование второго слагаемого в (1) отлично от нуля при $z > z_{N+1}$, в то время как фурье-преобразование от $r_N(q, z_N)$ дает нам профиль КОС в диапазоне $z_N < z < z_{N+1}$. Отсюда следует важное утверждение, что фурье-трансформанты АКО в борновском и динамическом случае совпадают в достаточно близком к поверхности слое.



Профиль КОС кристалла с нарушенным слоем. $z_n = (T/128)n$, где $n = 0, 1, 2, \ldots, 128$. *1* – модельный профиль КОС; *2* – расчетный профиль КОС – борновское приближение; *3* – расчетный профиль КОС – динамический случай

Таким образом, приходим к следующему алгоритму решения второй задачи определения КОС по угловой зависимости АКО, а именно:

1) кристаллическая структура разбивается на подслои, толщины которых $\Delta \ll \Lambda_{\text{экс}}$;

2) вычисляется фурье-преобразование заданного АКО на поверхности структуры $R(q, 0)$, и тем самым определяется фрагмент профиля КОС в первом подслое;

3) по распределению КОС $\sigma(z)\exp[-i\varphi(z)]$, где $\varphi(z) = \vec{h}\vec{u}(z)$, в первом подслое вычисляются амплитуды $r_1(q, z_1)$, $\beta_1(q, z_1)$ в борновском приближении, а затем по формуле (1) АКО $R(q, z_1)$, то есть коэффициент отражения, соответствующий структуре с "удаленным" первым подслоем;

4) далее процесс повторяется начиная с п.2, до удаления всех подсло-

ев нарушенного слоя. Рассчитанные таким образом в отдельных подслоях фрагменты КОС "сшиваются" и дают полный профиль КОС по толщине нарушенного кристалла.

В качестве примера применения данного алгоритма было проведено ЭВМ – моделирование для случая профиля КОС типа "ступеньки", соответствующего структуре, состоящей из подложки и приповерхностного кристаллического слоя с измененным параметром решетки, толщина которого $T = 1,6\Lambda_{экс}$. Был проведен расчет прямой задачи динамического ДРРЛ, и рассчитана угловая зависимость АКО на поверхности кристалла $R(q, 0)$, после чего в соответствии с описанным выше алгоритмом производилось восстановление профиля КОС, который затем сравнивался с исходным заданным профилем, а также с профилем КОС, восстановленном в борновском приближении (см. рисунок). Видно, что решение обратной задачи ДРРЛ с учетом динамических эффектов дает лучшее приближение к истинному решению, чем борновское приближение. Отметим, что наблюдаемые на обоих восстановленных профилях КОС при достаточно больших толщинах $z > T/2$ паразитные биения, связаны, по-видимому, с накоплением ошибок округления при использовании дискретного преобразования Фурье, которые практически исчезают, если использовать известные методы стабилизации решения некорректных задач [6].

1. П.В.Петрашень, Ф.Н.Чуховский, ДАН СССР, **309**, 105 (1989).
2. P.V.Petrashen, and F.N.Chukhovskii, Collected Abstracts XII European Crystallographic Meeting. Moscow, USSR, **3**, 7 (1989)
3. A.M.Afanasev, S.S.Fanchenko, and A.V.Maslov, Phys. Stat. Sol (a) **117**, 341 (1990).
4. И.А.Вартаньянц, М.В.Ковальчук, В.Г.Кон и др., Письма в ЖЭТФ **49**, 630 (1989).
5. Yu.N.Belyaev, and A.V.Kolpakov , Phys. Stat. Sol. (a) **76**, 641 (1983).
6. А.Н.Тихонов, В.Я.Арсенин, Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.