

УДК 535.34

РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА СЛОИСТЫХ НАНОСИСТЕМАХ С ШЕРОХОВАТЫМИ ИНТЕРФЕЙСАМИ

С. В. Ульянов^{1,2}, В. П. Романов¹, В. М. Уздин^{1,3}

¹Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет,
Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский торгово-экономический институт, Санкт-Петербург, Россия

³Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных
технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

ulyanov_sv@mail.ru, vpromanov@mail.ru, v_uzdin@mail.ru

PACS 61.05.cf, 61.05.cm, 73.21.Ac, 78.70.Ck

Развита теория рассеяния рентгеновского излучения на слоистых структурах с шероховатыми интерфейсами. Рассмотрено как кинематическое (борновское), так и динамическое приближения (борновское с искаженными волнами). Выполнены расчеты рентгеновских спектров зеркального рассеяния для сверхрешеток с разными периодами, амплитудами и корреляционными длинами шероховатостей интерфейсов. Результаты расчетов в разных приближениях сравниваются с экспериментом.

Ключевые слова: слоистые наноструктуры, сверхрешетки, шероховатость интерфейсов, рассеяние синхротронного и рентгеновского излучения.

1. Введение

При практическом использовании наносистем важной задачей является неразрушающий контроль качества их внутренней структуры. Среди систем, имеющих многочисленные приложения в спинтронике, особое значение имеют слоистые структуры, в которых были открыты гигантское магнитосопротивление, туннельное магнитосопротивление, осциллирующее межслойное обменное взаимодействие и целый ряд других новых эффектов [1]. Важно отметить, что в этих системах электронные и магнитные свойства в значительной степени определяются микроскопической структурой интерфейса на различных пространственных масштабах. Рассеяние рентгеновского излучения под малыми углами является традиционным методом изучения интерфейсов многослойных наноструктур, позволяющим определять как геометрические параметры системы, так и статистические характеристики шероховатости интерфейсов.

Диэлектрическая проницаемость ε и показатель преломления n на частотах, соответствующих рентгеновскому излучению, очень мало отличаются от единицы, причем их вещественные части меньше единицы:

$$\varepsilon \approx 1 - 2\delta + 2i\beta, \quad n = 1 - \delta + i\beta. \quad (1.1)$$

где величины δ и β порядка $10^{-6} - 10^{-5}$. На плоской границе вакуум-среда для луча, прошедшего в среду, нормальная компонента волнового вектора имеет вид

$$k_z = -k_0 \sqrt{\varepsilon - \cos^2 \theta_0} = -k_0 \sqrt{\sin^2 \theta_0 - 2\delta + 2i\beta}. \quad (1.2)$$

Здесь ось z направлена в вакуум перпендикулярно границе, зависимость поля от времени предполагается гармонической $\exp(-i\omega t)$. Через k_0 обозначено волновое число падающей волны в вакууме $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$, где λ - длина волны падающего излучения; θ_0 - угол скольжения падающего луча. При углах скольжения, меньших критического значения θ_c , которое определяется соотношением

$$\sin \theta_c = \sqrt{2\delta}, \quad (1.3)$$

происходит полное внешнее отражение. При углах значительно превышающих критическое значение θ_c , луч проходит в среду практически не преломляясь и сохраняя интенсивность из-за очень малых значений δ и β . При углах скольжения, близких к θ_c , луч, прошедший в среду существенно отличается от падающего луча как по интенсивности, так и по характеру распространения.

При описании рассеяния рентгеновского излучения многослойными структурами с неидеальными интерфейсами традиционно применяют два основных подхода. В первом подходе, «кинематическом» используется борновское приближение, в рамках которого падающее поле во всех точках рассматривается как вакуумное, а вся многослойная пленка вместе с подложкой - как источник рассеяния. Во втором, «динамическом» подходе, используется борновское приближение с искаженными волнами. При этом падающее поле находится как точное решение задачи распространения волны в многослойной пленке с идеальными интерфейсами. Отклонения интерфейсов от идеальных рассматриваются как возмущения, на которых рассеивается падающее поле, а рассеянное поле ищется в борновском приближении.

В спектрах зеркального рассеяния периодических многослойных систем наблюдаются брэгговские пики. Положение этих пиков приближенно может быть получено из уравнения

$$q_z = \sqrt{q_c^2 + \left(\frac{2\pi l}{d}\right)^2}, \quad l = 1, 2, \dots \quad (1.4)$$

Здесь q_z - перпендикулярная к плоским слоям составляющая вектора рассеяния, q_c - критическое значение вектора рассеяния, $q_c = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta_c$, d - пространственный период слоистой структуры. В кинематическом приближении положение брэгговских пиков определяется формулой (1.4) при $q_c = 0$. Это приводит к тому, что в этом приближении брэгговские пики оказываются смещенными в сторону меньших q_z , то есть меньших углов скольжения по сравнению с их истинным положением.

Настоящая работа посвящена исследованию зеркального рассеяния рентгеновского излучения многослойными пленками с учетом диффузного вклада, вносимого шероховатостями интерфейсов. Особое внимание уделяется сопоставлению результатов расчетов, выполненных в рамках борновского приближения и борновского приближения с искаженными волнами.

2. Основные уравнения

Рассмотрим рассеяние волны, падающей из вакуума на многослойную пленку. В декартовой системе координат с осью z , направленной в вакуум по нормали к средним положениям слоев, будем считать, что пленка на подложке расположена в области $z \leq 0$. Уравнения $z = z_n$, $n = 1, 2, \dots, N + 1$ описывают средние положения интерфейсов в пленке, содержащей N слоев на подложке. Из-за наличия шероховатостей истинные положения интерфейсов отклоняются от средних, и могут быть описаны уравнением

$$z = z_n + h_n(\rho), \quad (2.1)$$

где $\rho = (x, y)$, $\langle h_n \rangle = 0$. Усреднение проводится по поверхности интерфейса.

Для монохроматической волны, в которой зависимость поля от времени определяется множителем $e^{-i\omega t}$, имеем

$$(\Delta + k^2 \varepsilon(\mathbf{r}))\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla((\nabla \ln \varepsilon(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})), \quad (2.2)$$

где Δ - оператор Лапласа. Рассмотрим рассеяние волны, поляризованной перпендикулярно плоскости рассеяния. В этом случае, учитывая, что $\ln \varepsilon(\mathbf{r}) \approx -2\delta + 2i\beta$ очень мало, а характерное расстояние, на котором в плоскостях интерфейсов меняется $\varepsilon(\mathbf{r})$, много больше длины волны рентгеновского излучения, можно пренебречь правой частью уравнения (2.2). Само уравнение (2.2) становится скалярным

$$(\Delta + k^2 \varepsilon(\mathbf{r}))E(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.3)$$

Диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$ в многослойных системах удобно разбить на два слагаемых

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \delta\varepsilon(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

где $\bar{\varepsilon}(\mathbf{r})$ - диэлектрическая проницаемость в идеальной слоистой структуре с плоскими интерфейсами

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \theta(z) + \sum_{n=1}^N \varepsilon_n [\theta(z - z_{n+1}) - \theta(z - z_n)] + \varepsilon_{N+1} \theta(z_{N+1} - z), \quad (2.5)$$

В этом выражении ε_n , $n = 1, 2, \dots, N+1$ - диэлектрические проницаемости N слоев и подложки. Отклонение $\varepsilon(\mathbf{r})$ от $\bar{\varepsilon}(\mathbf{r})$, возникающее из-за шероховатостей интерфейсов, дается выражением

$$\delta\varepsilon(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N+1} \Delta\varepsilon_n [\theta(z - z_n) - \theta(z - z_n - h_n(\rho))], \quad (2.6)$$

где $\Delta\varepsilon_n = \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}$, $\theta(z)$ - функция Хевисайда.

Уравнение (2.3) перепишем в виде

$$[\Delta + k^2 \bar{\varepsilon}(\mathbf{r})]E(\mathbf{r}) = -k^2 \delta\varepsilon(\mathbf{r})E(\mathbf{r}), \quad (2.7)$$

или в интегральной форме

$$E(\mathbf{r}) = E_{Fr}(\mathbf{r}) - k^2 \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta\varepsilon(\mathbf{r}') E(\mathbf{r}'), \quad (2.8)$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ - функция Грина, удовлетворяющая уравнению

$$[\Delta + k^2 \bar{\varepsilon}(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.9)$$

и условию излучения. Здесь $\delta(\mathbf{r})$ - δ -функция, $E_{Fr}(\mathbf{r})$ - решение однородного уравнения

$$[\Delta + \bar{\varepsilon}(\mathbf{r})k^2]E_{Fr}(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.10)$$

По смыслу $E_{Fr}(\mathbf{r})$ - решение задачи Френеля о нахождении поля в каждой точке пространства в случае многослойной пленки с плоскими интерфейсами.

При описании рассеяния рентгеновского излучения в борновском приближении с искаженными волнами для поля $E_{Fr}(\mathbf{r})$ также удобно написать интегральное уравнение

$$E_{Fr}(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) + k^2 \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [1 - \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}')] E_{Fr}(\mathbf{r}'), \quad (2.11)$$

где $E_0(\mathbf{r})$ - поле, а $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ - функция Грина в вакууме

$$[\Delta + k^2]G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.12)$$

Интегральный член уравнения (2.11) может быть переписан с использованием функции Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ из уравнения (2.8). Действительно, уравнение распространения волны в вакууме

$$[\Delta + k^2]E_0(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.13)$$

формально может быть переписано в виде

$$[\Delta + k^2\bar{\varepsilon}(\mathbf{r})]E_0(\mathbf{r}) = k^2[\bar{\varepsilon}(\mathbf{r}) - 1]E_0(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

В интегральной форме уравнение (2.14) примет вид

$$E_0(\mathbf{r}) = E_{Fr}(\mathbf{r}) + k^2 \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\bar{\varepsilon}(\mathbf{r}') - 1] E_0(\mathbf{r}'). \quad (2.15)$$

Подставляя $E_0(\mathbf{r})$ из (2.15) в (2.11), получаем [2]

$$\int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [1 - \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}')] E_{Fr}(\mathbf{r}') = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [1 - \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}')] E_0(\mathbf{r}'). \quad (2.16)$$

Подставляя (2.16) в (2.11) и в (2.8), имеем

$$E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) + k^2 \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [1 - \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}')] E_0(\mathbf{r}') - k^2 \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta\varepsilon(\mathbf{r}') E(\mathbf{r}'). \quad (2.17)$$

Интегральное уравнение (2.17) является точным. В борновском приближении с искаженными волнами в последнем слагаемом правой части уравнения (2.17) поле $E(\mathbf{r})$ заменяется на $E_{Fr}(\mathbf{r})$. Таким образом, рассеянное поле $E_{sc}(\mathbf{r})$ в этом приближении складывается из регулярного поля

$$E_{reg}(\mathbf{r}) = k^2 \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [1 - \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}')] E_0(\mathbf{r}') \quad (2.18)$$

и стохастического, зависящего от шероховатостей интерфейсов

$$E_{fl}(\mathbf{r}) = -k^2 \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta\varepsilon(\mathbf{r}') E_{Fr}(\mathbf{r}'). \quad (2.19)$$

Дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\langle |E_{reg} + E_{fl}|^2 \rangle}{E_0^2} r^2 \quad (2.20)$$

где E_0 амплитуда падающего поля, r - расстояние до точки наблюдения. Выделяя в (2.20) чисто зеркальный и диффузный вклады в рассеяние, имеем [3]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|E_{reg} + \langle E_{fl} \rangle|^2}{E_0^2} r^2 + \frac{\langle |E_{fl}|^2 \rangle - |\langle E_{fl} \rangle|^2}{E_0^2} r^2. \quad (2.21)$$

В задачах рассеяния при $r \gg D$, где D - характерный размер пленки, для функции Грина можно использовать приближение дальней зоны, и она может быть записана в виде [4]

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} \mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_s), \quad (2.22)$$

где $\mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_s)$ - решение задачи Френеля для плоской волны единичной амплитуды вида $e^{-i\omega t - i\mathbf{k}_s \mathbf{r}'}$, где $\mathbf{k}_s = k_0 \frac{\mathbf{r}}{r}$ - волновой вектор рассеянной волны.

В экспериментах по рассеянию рентгеновского излучения измеряется интенсивность излучения, прошедшая через приемное отверстие детектора. которое в силу конечности

размеров приемной щели детектора регистрирует как чисто зеркальное, так и диффузное рассеяние. Для коэффициента отражения R имеем

$$R = \frac{1}{S \sin \theta_0} \int_{\Delta\Omega} d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right). \quad (2.23)$$

Здесь S - освещенная площадь пленки, $\Delta\Omega$ - телесный угол, под которым видна щель детектора из точки на поверхности пленки. Дифференциал $d\Omega$ может быть представлен в виде [3]

$$d\Omega = \frac{dq_x dq_y}{k_0^2 \sin \theta_{sc}}. \quad (2.24)$$

Здесь θ_{sc} угол скольжения рассеянного луча, \mathbf{q} - вектор рассеяния, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$, где \mathbf{k}_i - волновой вектор падающей плоской волны в вакууме.

В приближении дальней зоны для регулярной и стохастической частей рассеянного поля из формул (2.18), (2.19), (2.22) имеем

$$E_{reg}(\mathbf{r}) = -k^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r} E_0 \int d\mathbf{r}' \mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_s) [1 - \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}')] e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}'} \quad (2.25)$$

$$E_{fl}(\mathbf{r}) = k^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int d\mathbf{r}' \mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_s) \delta\varepsilon(\mathbf{r}') E_{Fr}(\mathbf{r}'). \quad (2.26)$$

Для выполнения интегрирования в формулах (2.25), (2.26) необходимо знать поле $E_{Fr}(\mathbf{r})$ и $\mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}', -\mathbf{k}_s)$ во всех точках пленки на подложке. Поле $E_{Fr}(\mathbf{r})$ в случае падения на многослойную пленку плоской монохроматической волны с амплитудой E_0 , может быть представлено в виде

$$E_{Fr}(\boldsymbol{\rho}, z) = \sum_{n=1}^N E_n(\boldsymbol{\rho}, z, \mathbf{k}_i) [\theta(z - z_{n+1}) - \theta(z - z_n)] + E_{N+1}(\boldsymbol{\rho}, z, \mathbf{k}_i) \theta(z_{N+1} - z), \quad (2.27)$$

где

$$E_n(\boldsymbol{\rho}, z, \mathbf{k}_i) = e^{i\mathbf{k}_\perp \boldsymbol{\rho}} [T_n e^{-ik_{n,z}(z-z_n)} + R_n e^{ik_{n,z}(z-z_n)}] E_0 \quad (2.28)$$

Формула (2.28) представляет поле в каждом слое в виде суперпозиции двух волн с волновыми векторами $(\mathbf{k}_\perp, \mp k_{n,z})$, где $k_{n,z} = k\sqrt{\varepsilon_n - \cos^2 \theta_0}$. В формуле (2.28) $T_n E_0$ и $R_n E_0$ - комплексные амплитуды поля на нижней стороне n -го интерфейса для волн, распространяющихся в направлении подложки и вакуума соответственно. Эти амплитуды могут быть найдены матричным методом [4, 5]. Поле $\mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}, -\mathbf{k}_s)$ дается выражением

$$\mathcal{E}_{Fr}(\mathbf{r}, -\mathbf{k}_s) = \sum_{n=1}^N \mathcal{E}_n(\boldsymbol{\rho}, z, -\mathbf{k}_s) [\theta(z - z_{n+1}) - \theta(z - z_n)] + \mathcal{E}_{N+1}(\boldsymbol{\rho}, z, -\mathbf{k}_s) \theta(z_{N+1} - z), \quad (2.29)$$

где

$$\mathcal{E}_n(\boldsymbol{\rho}, z, -\mathbf{k}_s) = e^{-i\mathbf{k}_\perp \boldsymbol{\rho}} [\tilde{T}_n e^{-ik'_{n,z}(z-z_n)} + \tilde{R}_n e^{ik'_{n,z}(z-z_n)}] \quad (2.30)$$

Здесь $k'_{n,z} = k\sqrt{\varepsilon_n - \cos^2 \theta_{sc}}$, \tilde{T}_n и \tilde{R}_n - комплексные амплитуды полей под n -ым интерфейсом при единичной амплитуде поля с волновым вектором $-\mathbf{k}_{sc}$, падающего из вакуума на пленку.

Как регулярное, так и стохастические рассеянные поля могут быть представлены в виде суммы по интерфейсам [6, 7]

$$E_{reg}(\mathbf{r}) = k^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r} E_0 \sum_{n=1}^{N+1} \int d\boldsymbol{\rho}' e^{-i\mathbf{q}_\perp \boldsymbol{\rho}'} \alpha_n, \quad (2.31)$$

где

$$\alpha_n = (\varepsilon_n - 1) \left[\frac{i}{q_{n,z}^+} \tilde{T}_n e^{ik_{n,z} z_n} (e^{-iq_{n,z}^+ z_n} - e^{-iq_{n,z}^+ z_{n+1}}) - \frac{i}{q_{n,z}^-} \tilde{R}_n e^{-ik_{n,z} z_n} (e^{-iq_{n,z}^- z_n} - e^{-iq_{n,z}^- z_{n+1}}) \right], \quad (2.32)$$

$$q_{n,z}^\pm = k_{n,z} \pm k \sin \theta_0,$$

В формуле (2.32) в амплитудах \tilde{T}_n и \tilde{R}_n угол $\theta_{sc} = \theta_0$.

Для стохастической части рассеянного поля

$$E_{Fl}(\mathbf{r}) = k^2 \frac{e^{ikr}}{4\pi r} E_0 \sum_{n=1}^{N+1} \int d\rho' e^{-i\mathbf{q}_\perp \rho'} \Delta \varepsilon_n \tilde{n} \hat{F}_n(\rho') \quad n, \quad (2.33)$$

где

$$n = \begin{pmatrix} T_n \\ R_n \end{pmatrix}; \quad \tilde{n} = (\tilde{T}_n, \tilde{R}_n) \quad (2.34)$$

$$\hat{F}_n(\rho) = i \begin{pmatrix} \frac{1}{q_{n,z}^{(1)}} \left(e^{-iq_{n,z}^{(1)} h_n(\rho)} - 1 \right); & \frac{1}{q_{n,z}^{(2)}} \left(e^{-iq_{n,z}^{(2)} h_n(\rho)} - 1 \right) \\ -\frac{1}{q_{n,z}^{(2)}} \left(e^{iq_{n,z}^{(2)} h_n(\rho)} - 1 \right); & -\frac{1}{q_{n,z}^{(1)}} \left(e^{iq_{n,z}^{(1)} h_n(\rho)} - 1 \right) \end{pmatrix}$$

Здесь

$$q_{n,z}^{(1)} = k'_{n,z} + k_{n,z}, \quad q_{n,z}^{(2)} = k'_{n,z} - k_{n,z}. \quad (2.35)$$

При получении формулы (2.33) для поля в окрестности каждого интерфейса использовалось аналитическое выражение для поля E_{Fr} под интерфейсом.

В коэффициенте отражения (2.23) выделим чисто зеркальный и диффузный вклады

$$R = R_1 + R_2, \quad (2.36)$$

$$R_1 = \frac{k^4}{q_z^2} \left| \sum_{n=1}^{N+1} (\alpha_n + \langle A_n \rangle) \right|^2, \quad (2.37)$$

$$R_2 = \frac{k^4}{16\pi^2 \sin^2 \theta_0} \int_{\Delta\Omega} d\Omega \int d\rho e^{-i\mathbf{q}_\perp \rho} \sum_{n,m=1}^{N+1} (\langle A_n(\rho) A_m^*(0) \rangle - \langle A_n \rangle \langle A_m^* \rangle), \quad (2.38)$$

где

$$A_n(\rho) = \Delta \varepsilon_n \tilde{n} \hat{F}_n(\rho) \quad n, \quad (2.39)$$

а верхний индекс «*» означает комплексное сопряжение. В формулах (2.37) и (2.38) использовалось предположение о пространственной однородности шероховатостей пленки, и поэтому

$$A_n(\rho) = \langle A_n \rangle. \quad (2.40)$$

В диффузной части коэффициента отражения R_2 при выполнении статистического усреднения будем предполагать, что шероховатости интерфейсов $h_n(\rho)$ имеют гауссово распределение и поэтому статистическое усреднение переносится в показатель экспоненты. В результате получаем

$$R_2 = \frac{k^4}{16\pi^2 \sin^2 \theta_0} \int_{\Delta\Omega} d\Omega \sum_{n,m=1}^{N+1} \Delta \varepsilon_n \Delta \varepsilon_m^* \sum_{j,l=1}^4 H_n^{(j)} H_m^{(l)*} e^{-\frac{1}{2} [(q_{n,z}^{(j)})^2 \sigma_n^2 + (q_{m,z}^{(l)*})^2 \sigma_m^2]} \times \int d\rho e^{-i\mathbf{q}_\perp \rho} \left(e^{q_{n,z}^{(j)} q_{m,z}^{(l)*} \langle h_n(\rho) h_m(0) \rangle} - 1 \right) \quad (2.41)$$

Здесь σ_n - среднеквадратичная шероховатость n -го интерфейса, $q_{n,z}^{(3)} = -q_{n,z}^{(2)}$, $q_{n,z}^{(4)} = -q_{n,z}^{(1)}$,

$$H_n^{(1)} = \frac{\tilde{T}_n T_n}{q_{n,z}^{(1)}}, \quad H_n^{(2)} = \frac{\tilde{T}_n R_n}{q_{n,z}^{(2)}}, \quad (2.42)$$

$$H_n^{(3)} = \frac{\tilde{R}_n T_n}{q_{n,z}^{(3)}}, \quad H_n^{(4)} = \frac{\tilde{R}_n R_n}{q_{n,z}^{(4)}}.$$

Если предположить, что шероховатости изотропны в плоскостях интерфейсов, то интегрирование по угловой переменной в $\int d\rho$ может быть выполнено, что формально приведет в формуле (2.41) к замене

$$\int d\rho e^{-i\mathbf{q}_\perp \rho} \rightarrow 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho J_0(q_\perp \rho), \quad (2.43)$$

где $J_0(x)$ - функция Бесселя нулевого порядка.

Выражение (2.41) описывает диффузное рассеяние в борновском приближении с искаженными волнами. Если в формуле (2.41) положить $T_n = \tilde{T}_n = 1$, $R_n = \tilde{R}_n = 0$, $q_{n,z} = q_z$, то получим диффузный вклад в рассеяние в борновском приближении.

3. Анализ спектров зеркального рассеяния

В работах [8, 9] был предложен метод выделения в спектрах зеркального рассеяния чисто зеркального R_1 и диффузного вклада R_2 , обусловленного конечностью ширины щели детектора. Оба вклада анализировались в рамках первого борновского приближения. Было показано, что при малых углах рассеяния вклад диффузного рассеяния пренебрежимо мал, в то время как с ростом угла рассеяния его вклад возрастает, а в области брэгговских пиков высоких порядков становится определяющим. Для пленок с большими толщинами слоев определение параметров шероховатостей с использованием первого борновского приближения может приводить к большим погрешностям из-за того, что в этом приближении положение брэгговских пиков, как следует из формулы (1.4) искажено. В частности, при описании спектров зеркального рассеяния в таких пленках в кинематическом приближении получаются заниженные толщины слоев. Использование этих значений приводит к неверным значениям таких параметров шероховатостей как среднеквадратичная амплитуда и корреляционные длины. Использование борновского приближения с искаженными волнами позволяет применять способ анализа спектров зеркального рассеяния, предложенный в [8, 9] не только для тонких пленок с тонкими слоями, но и для пленок произвольной толщины.

Остановимся подробнее на диффузном вкладе. Из-за конечности ширины щели детектора рассеянное излучение собирается из телесного угла $\Delta\Omega$, величина которого определяется геометрией щели. В частности, для прямоугольной щели шириной a и длиной b

$$\Delta\Omega = \frac{ab}{r^2}, \quad (3.1)$$

где r — расстояние от рассеивающей пленки до детектора. Это приводит к тому, что в детектор попадают лучи, рассеянные с волновыми векторами $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$, где

$$q_{0x} - \Delta q_x \leq q_x \leq q_{0x} + \Delta q_x, \quad -\Delta q_y \leq q_y \leq \Delta q_y. \quad (3.2)$$

Для зеркального рассеяния $q_{0x} = 0$. При углах рассеяния, при которых становится заметным диффузный вклад, изменением q_z из-за конечности размеров щели детектора можно

пренебречь. Телесный угол $\Delta\Omega$ связан с Δq_x и Δq_y соотношением

$$\Delta\Omega = \frac{4\Delta q_x \Delta q_y}{k^2 \sin \theta_{sc}}, \quad (3.3)$$

Характерный интервал изменения q_\perp можно оценить как

$$\Delta q_\perp \approx \frac{k}{2} \sqrt{\Delta\Omega \sin \theta_{sc}} \quad (3.4)$$

В экспериментах по рассеянию рентгеновского излучения типичными являются следующие параметры: $\Delta\Omega \sim 10^{-6}$ стерад, $\lambda \sim 0.15$ нм, $\theta_{sc} \sim 3^\circ$. В этом случае

$$\Delta q_\perp \sim 0.5 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^{-1}, \quad (3.5)$$

В диффузном вкладе в рассеяние, даваемом выражением (2.41), область интегрирования по переменной ρ фактически ограничена радиусом корреляции шероховатостей в плоскости интерфейсов l_{xy} . Для не слишком больших корреляционных длин, удовлетворяющих условию

$$\Delta q_\perp l_{xy} \ll 1, \quad (3.6)$$

выражение (2.41), (2.43) может быть существенно упрощено, т.к. при этом можно положить

$$J_0(q_\perp \rho) \approx J_0(0) = 1. \quad (3.7)$$

Как следует из оценок (3.5), (3.6), это справедливо для корреляционных длин l_{xy} , удовлетворяющих условию $l_{xy} \ll 200$ нм.

Интегрирование по $\Delta\Omega$ в формулах (2.41), (2.43) при этом может быть заменено на умножение на величину телесного угла $\Delta\Omega$. Корреляционную функцию шероховатостей будем учитывать в виде

$$\langle h_n(\rho) h_m(0) \rangle = \sigma_n \sigma_m e^{-\frac{(z_n - z_m)^2}{l_z^2}} e^{-\frac{\rho^2}{l_{xy}^2}} \quad (3.8)$$

В этом случае

$$R_2 = \frac{k^4 l_{xy}^2 \Delta\Omega}{16\pi \sin \theta_0} \sum_{n,m=1}^{N+1} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m^* \sum_{j,l=1}^4 H_n^{(j)} H_m^{(l)*} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [(q_{n,z}^{(j)})^2 \sigma_n^2 + (q_{m,z}^{(l)*})^2 \sigma_m^2] \right\} \times \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(B_{n,m,j,l})^p}{pp!}, \quad (3.9)$$

где

$$B_{n,m,j,l} = q_{n,z}^{(j)} q_{m,z}^{(l)*} \sigma_n \sigma_m e^{-\frac{(z_n - z_m)^2}{l_z^2}} \quad (3.10)$$

Если условие (3.6) не выполнено, то в формуле (2.41) необходимо выполнить интегрирование по телесному углу $\Delta\Omega$.

Мы провели сравнительный анализ рассчитанных спектров зеркального рассеяния рентгеновского излучения многослойными пленками. Расчеты были выполнены для трех типов сверхрешеток: для сверхрешеток с тонкими слоями и относительно гладкими интерфейсами, для сверхрешеток с тонкими слоями и шероховатыми интерфейсами и сверхрешеток с толстыми слоями. Для каждого типа структур расчеты проводились как в борновском приближении, так и в борновском приближении с искаженными волнами. Слои можно считать тонкими, если в подкоренном выражении в формуле (1.4) можно пренебречь первым

слагаемым при определении положения любого брэгговского пика. При этом пространственный период многослойной пленки d должен удовлетворять условию

$$d \ll \frac{\lambda}{2 \sin \theta_c} = \frac{\lambda}{2\sqrt{2\delta}}. \quad (3.11)$$

Взяв типичные значения параметров системы в экспериментах по рассеянию рентгеновского излучения: $\lambda = 0.15 \text{ nm}$, $\delta = 10^{-5}$, получим условие $d \ll 17 \text{ nm}$.

Для сверхрешеток с тонкими слоями и малыми шероховатостями спектры зеркального рассеяния, рассчитанные в кинематическом и динамическом приближениях дают при углах больше угла полного внешнего отражения практически совпадающие результаты. Это показано на рисунке 1, где для системы $[Fe(2ML)/V(16ML)]_{30}$ приведены результаты эксперимента (зеленая кривая, 1), расчет в борновском приближении (красная кривая, 3) и в борновском приближении с искаженными волнами (синяя кривая, 2). Для наглядности кривые сдвинуты друг относительно друга по оси ординат. Нетрудно видеть, что для данного типа наноструктур результаты, полученные в двух использованных приближениях, практически идентичны.

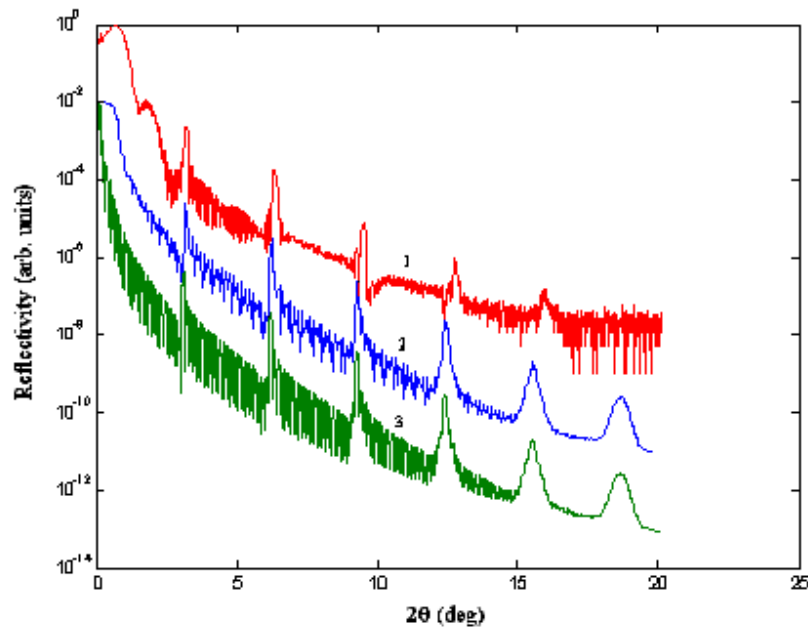


РИС. 1. Спектры зеркального рассеяния рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.154 \text{ nm}$ на сверхрешетке $[Fe(2ML)/V(16ML)]_{30}$, нанесенной на подложку $MgO(0,0,1)$. 1, красная кривая - экспериментальные данные [8]; 2, синяя кривая - результаты расчетов в борновском приближении с искаженными волнами; 3, зеленая кривая - результаты расчетов в борновском приближении. При расчетах использовались следующие значения параметров: среднеквадратичная шероховатость $\sigma = 0.23 \text{ nm}$, корреляционные длины $l_z = l_{xy} = 25 \text{ nm}$. Кривые сдвинуты по вертикали для наглядности

На рисунке 2 приведены экспериментальные данные и результаты расчетов в обоих приближениях для многослойных пленок с тонкими слоями с периодом $d = 4.35 \text{ nm}$ и существенными шероховатостями интерфейсов. Прежде всего, видно, что результаты этих подходов различаются при малых углах, близких к углу полного внешнего отражения. Это

связано с тем, что пространственный период в данной многослойной системе в два раза больше, чем у рассмотренной выше. Если расчет в динамическом приближении практически описывает положение брегговских пиков в эксперименте, то в кинематическом приближении есть заметные отличия. В частности, положение первого брегговского пика в борновском приближении несколько сдвинуто в область меньших углов. В области больших углов результаты обоих расчетов практически совпадают. Отметим, что на экспериментальном спектре отсутствуют промежуточные осцилляции после первого брегговского пика, а сами брегговские пики постепенно расширяются при увеличении угла скольжения. Этот эффект можно объяснить, если допустить, что толщины отдельных слоев многослойной пленки имеют некоторый разброс.

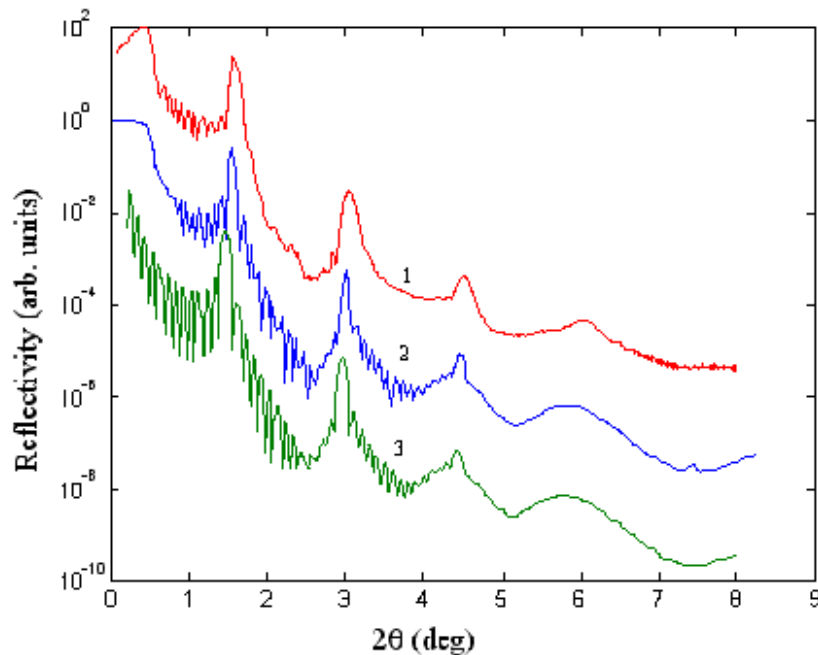


Рис. 2. Спектры зеркального рассеяния рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.1127 \text{ nm}$ на сверхрешетке $[CoFeB(2.55 \text{ nm})/MgO(1.8 \text{ nm})]_{15}$, нанесенной на подложку Si/SiO_2 . 1, красная кривая - экспериментальные данные [9]; 2, синяя кривая - результаты расчетов в борновском приближении с искаженными волнами; 3, зеленая кривая - результаты расчетов в борновском приближении. При расчетах использовались следующие значения параметров: среднеквадратичная шероховатость интерфейсов $\sigma = 0.62 \text{ nm}$, подложки $\sigma_s = 0.5 \text{ nm}$ корреляционные длины $l_z = 12 \text{ nm}$, $l_{xy} = 25 \text{ nm}$. Кривые сдвинуты по вертикали для наглядности

Особенно заметно расхождение результатов расчетов в кинематическом и динамическом приближениях в случае толстых многослойных пленок. Это проиллюстрировано на рисунках 3 и 4, где приведены результаты расчетов для двух модельных систем с сильно различающимися значениями корреляционных длин шероховатостей интерфейсов. Видно, что спектры зеркального рассеяния, рассчитанные в борновском приближении, имеют равноотстоящие брегговские пики, тогда, как в приближении искаженных волн расстояние между пиками, в согласии с формулой, (1.4) меняется. Кроме того само положение брегговских пиков в борновском приближении особенно для пиков с малыми номерами сильно

сдвинуто в область малых углов относительно пиков, рассчитанных в приближении искаженных волн.

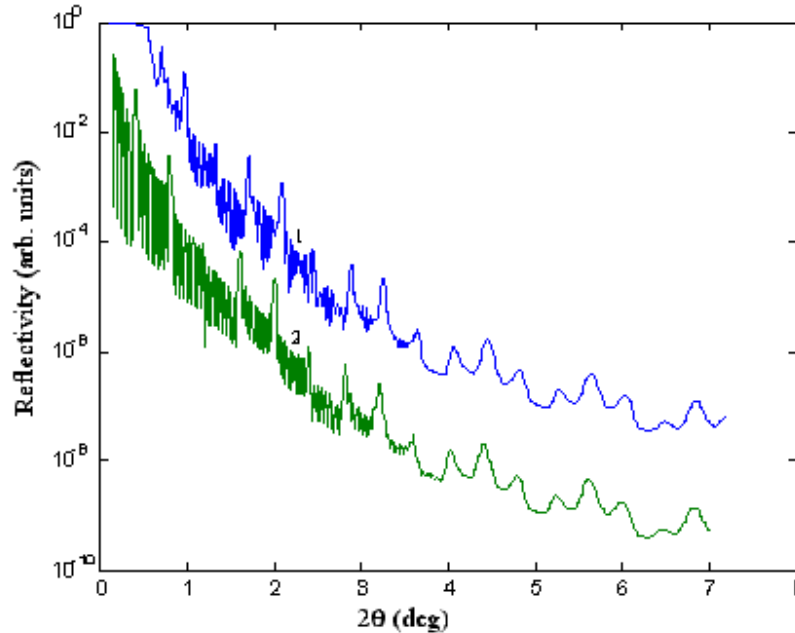


Рис. 3. Спектры зеркального рассеяния рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.154 \text{ nm}$ на сверхрешетке $[GaAs(7\text{nm})/AlAs(15\text{nm})]_{10}$. 1, синяя кривая - результаты расчетов в борновском приближении с искаженными волнами; 2, зеленая кривая - результаты расчетов в борновском приближении. При расчетах использовались следующие значения параметров: среднеквадратичная шероховатость интерфейсов $\sigma = 1 \text{ nm}$, корреляционные длины $l_z = l_{xy} = 30 \text{ nm}$. Кривые сдвинуты по вертикали для наглядности

Что касается диффузного вклада в зеркальное рассеяние, то они в обоих подходах очень близки. Однако определение корреляционных длин шероховатости по ближней части спектра, где подавляющий вклад вносит чисто зеркальное рассеяние, не представляется возможным. Тем не менее именно по этой части спектра зеркального рассеяния в динамическом приближении можно определить межслоевое расстояние и амплитуду шероховатостей интерфейсов, необходимые для моделирования брэгговских пиков высокого порядка. Кинематическое приближение при малых углах скольжения приводит к заметным ошибкам в определении параметров.

4. Заключение

В настоящей работе выполнены расчеты спектров зеркального рассеяния рентгеновского излучения на слоистых наносистемах в кинематическом и динамическом приближениях. Установлены условия, при которых оба приближения дают практически совпадающие результаты. Для толстых пленок, для систем с большими корреляционными длинами и амплитудами шероховатостей интерфейсов и для малых углов скольжения, близких к углу полного внешнего отражения, кинематического подхода недостаточно для адекватного описания эксперимента. Конечная ширина щели детектора приводит к тому, что спектры зеркального рассеяния от систем с шероховатыми интерфейсами содержит диффузные вклады.

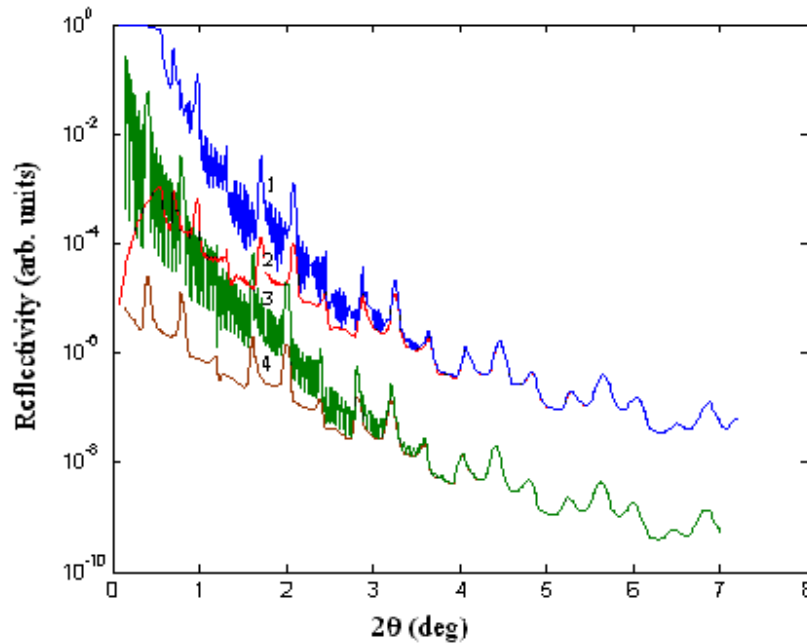


Рис. 4. Спектры зеркального рассеяния рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.154 \text{ nm}$ на сверхрешетке $[GaAs(7\text{nm})/AlAs(15\text{nm})]_{10}$. 1, синяя кривая - результаты расчетов в борновском приближении с искаженными волнами; 2, красная кривая - диффузный вклад, вычисленный в борновском приближении с искаженными волнами; 3, зеленая кривая - результаты расчетов в борновском приближении; 4, коричневая кривая - диффузный вклад, вычисленный в борновском приближении. При расчетах использовались следующие значения параметров: среднеквадратичная шероховатость интерфейсов $\sigma = 1 \text{ nm}$, корреляционные длины $l_z = l_{xy} = 120 \text{ nm}$. Кривые сдвинуты по вертикали для наглядности

Это проявляется в уширении брэгговских пиков высоких порядков и в замедлении спада интенсивности с ростом угла рассеяния. В экспериментах с варьируемой шириной щели это позволяет получить информацию о корреляционных длинах шероховатостей интерфейсов непосредственно из спектров зеркального рассеяния [8, 9]. При этом обработку спектров можно проводить как в кинематическом, так и в динамическом приближениях. При малых углах рассеяния, когда спектры, рассчитанные в кинематическом и динамическом подходах заметно различаются, относительный вклад диффузного рассеяния в зеркальные спектры мал. Здесь преимущество динамического подхода проявляется в более точном определении параметров сверхрешетки при обработке экспериментальных спектров.

Работа выполнена при поддержке грантами СПбГУ № 11.38.45.2011, РФФИ № 12-02-01016-а и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» (контракты Р 689, НК-526Р, 14.740.11.0879, 16.740.11.0030).

Литература

- [1] Грюнберг П.А. // УФН. — 2008. — V. 178. — P. 1349.
- [2] Rodberg L.S., Thaler R.M. Introduction to the quantum theory of scattering, 2nd ed.— New-York and London: Academic Press, 1967.— 400 p.
- [3] Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff S., Stanley H.B. // Phys. Rev. B. — 1988. — V.38. — P.2297.

- [4] Renaud G., Lazzari R., Leroy F. // *Serf. Sci. Rep. B.* — 2009. — V.64. — P.255.
- [5] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. — 2-е изд., М.: Наука, 1973. — 720 с.
- [6] Holy V., Baumbach T. // *Rev. B.* — 1994. — V. 49. — 10668.
- [7] Pietsch U., Holy V., Baumbach T. *High-resolution X-ray scattering: From thin films to lateral nanostructures*, 2nd ed. — New-York: Springer-Verlag, 2004. — 409 p.
- [8] Romanov V. P., Ulyanov S. V., Uzdin V. M., Nowak G., Vadala M., Zabel H. // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 2008. — V.41. — P. 115401.
- [9] Romanov V. P., Ulyanov S. V., Uzdin V. M., Nowak G., Shokuie K., Zabel H. // *Phys. Rev. B.* — 2010. — V.82. — P. 165416.