

А.А. Дышеков
Ю.П. Хапачев

**НОВЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ
К ЗАДАЧАМ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЙ
КРИСТАЛЛООПТИКИ**

НАЛЬЧИК
2010

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Х.М. БЕРБЕКОВА»

А.А. Дышеков, Ю.П. Хапачев

**НОВЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ЗАДАЧАМ
РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЙ КРИСТАЛЛООПТИКИ**

НАЛЬЧИК 2010

УДК 53(01);539.26:539.3:548.7
ББК 22.37:22.346
Д 91

Рецензенты:

доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Физико-технического института
Российской академии наук им. акад. А.Ф. Иоффе
Р.Н. Кютт

доктор физико-математических наук,
доцент КФТТ физического факультета МГУ
Е.Н. Овчинникова

Д91 Дышеков, А. А. Новые аналитические подходы к задачам рентгенодифракционной кристаллооптики [Текст] : монография / А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев / Под ред. В. А. Елюхина и Б. С. Карамурзова. – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2010. – 75 с. – 100 экз.

Рассмотрены аналитические решения задач динамической теории дифракции рентгеновских лучей для модельных сложноподобных гетероструктур. Эти решения могут быть использованы для высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

Представлен новый, нестандартный вариант динамической теории дифракции рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. Теория основывается на прямом анализе уравнений Максвелла с учетом модельных представлений о характере взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллом, соответствующих теории Эвальда – Лауэ. В качестве математического метода нахождения приближенного решения дифракционного уравнения используется модификация метода многих масштабов. Полученные результаты соответствуют известным выводам динамической теории дифракции за пределами области полного внешнего отражения. Получены выражения для амплитудных коэффициентов отражения дифрагированной и зеркальной волны для произвольных углов, включая область полного внешнего отражения.

Книга предназначена для студентов, аспирантов и научных сотрудников, специализирующихся в области физики твердого тела.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект № 10-02-00023а.

УДК 53(01);539.26:539.3:548.7
ББК 22.37:22.346

ISBN 978-5-7558-0464-6

© Кабардино-Балкарский
государственный университет, 2010

ПРЕДИСЛОВИЕ НАУЧНЫХ РЕДАКТОРОВ

Современное развитие твердотельной электроники обусловлено вовлечением в нее тройных и четверных изопериодических твердых растворов на основе групп $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$. Естественно, эти материалы технологически несравненно более сложны, чем «материал номер один» – кремний, однако и к их качеству предъявляются достаточно жесткие традиционные требования: необходимы бездислокационные монокристаллы больших размеров с равномерным распределением легирующих примесей и собственных точечных дефектов. К эпитаксиальным пленкам этих материалов предъявляются еще и свои специфические требования.

Контроль качества таких структур с заданными физическими свойствами осуществляется различными способами, однако рентгеновская дифрактометрия является пока одним из наиболее эффективных неразрушающих методов определения параметров реальной структуры указанных объектов. Создание уникальных высокоразрешающих рентгенодифракционных методов происходит в последние годы настолько быстро, что изложение этих вопросов полностью отсутствует не только в учебной литературе, но даже в специальных научных монографиях.

Данная монография, по мнению авторов, должна частично восполнить этот пробел. В основу содержания книги положены теоретические результаты, отраженные авторами в серии оригинальных, а также и обзорных статей в отечественных и зарубежных изданиях. Отдельные разделы читались авторами в соответствующих спецкурсах Кабардино-Балкарского госуниверситета.

В первой главе приведены точные аналитические решения для модельных задач динамической теории дифракции для структур, профиль деформации которых задается некоторой известной функцией. Используется классический формализм теории динамической дифракции Такаги – Топена. Авторы выделяют немногочисленный класс задач, имеющих точное аналитическое решение. Значимость точно решаемых моделей состоит в том, что они в некотором смысле характерны и для реальных структур, таких как: идеальный кристалл, кристалл с постоянным градиентом деформации (например, изогнутый кристалл или эпитаксиальная пленка твердого раствора с линейным изменением концентрации – варизонная структура), система пленка-подложка с переходным слоем на границе раздела, некоторые модели сверхрешеток (СР). Под характерностью здесь подразумевается то, что ряд реальных кристаллических структур с той или иной степенью точности описывается указанными моделями.

Точные решения позволяют анализировать общие закономерности процессов когерентного рассеяния рентгеновских волн в модулированных кристаллических решетках для определенных частных случаев, представляющих интерес. Существенно, что в ряде случаев для пленок с монотонным изменением деформации приближение постоянного градиента оказывается недоста-

точным и возникает необходимость дальнейшего обобщения – рассмотрения профилей деформации с переменным градиентом.

Принципиальным моментом изложения результатов является использование авторами качественных методов исследования решений дифференциальных уравнений с позиций математической теории устойчивости.

Качественные аналитические методы при исследовании задач динамической дифракции актуальны по целому ряду причин. В первую очередь, это связано с тем, что они могут быть применены в совершенно различных областях науки. Так, например, распространение волн различной природы в периодических средах относится к сфере физики твердого тела, а различные волновые процессы в средах с распределенной обратной связью рассматриваются в радиотехнике и электронике. Применимость качественного подхода обусловлена общим свойством различных физических систем и процессов, а именно, – наличием параметрического влияния характеристик среды на формирование волнового поля.

Во второй главе монографии представлен разработанный А.А. Дышековым в ряде оригинальных работ принципиально новый, нестандартный вариант динамической теории дифракции рентгеновских лучей, который применен для идеального кристалла. Нестандартная теория рассеяния основана на прямом анализе уравнений Максвелла (или волнового уравнения) с учетом модельных представлений о характере взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллом, соответствующих теории Эвальда – Лауэ. В качестве математического метода нахождения приближенного решения дифракционного уравнения используется модификация метода многих масштабов. Результаты новой теории рассеяния соответствуют известным выводам классической динамической теории дифракции за пределами области полного внешнего отражения. Еще одним, принципиально новым моментом является то, что в рамках единого подхода получены выражения для амплитудных коэффициентов отражения дифрагированной и зеркальной волны для произвольных углов, включая область полного внешнего отражения.

Книга может быть полезна для студентов, аспирантов и научных сотрудников младшего научного возраста, специализирующихся в области физики твердого тела, полупроводникового материаловедения и рентгеновской диагностики кристаллов и тонких пленок.

Научные редакторы –
доктор физико-математических наук,
профессор **В.А. Елюхин**
Научный центр Мехико

доктор технических наук,
профессор **Б.С. Карамурзов**
Кабардино-Балкарский госуниверситет

Литература

1. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей / Р. Джеймс / Под ред. В.И. Ивероновой. – М. : ИЛ, 1950. – 572 с.
2. Иверонова В.И. Теория рассеяния рентгеновских лучей / В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич. – М. : МГУ, 1978. – 278 с.
3. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика / З.Г. Пинскер. – М. : Наука. – 392 с.
4. Энтин И.Р. О динамической дифракции рентгеновских лучей на кристалле с периодическим полем смещений / И.Р. Энтин // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77. – Вып. 1(7). – С. 214–222.
5. Andreeva M.A. Matrix Analog of the Takagi Equations for Grazing-Incidence Diffraction / M.A. Andreeva, K. Rocette, Yu.P. Khapachev. // Phys. stat. sol.(a). – 1985. – V. 88. – № 2. – P. 455–462.
6. Андреева М.А. Матричный аналог уравнений Такаги для скользящих углов падения / М.А. Андреева, С.Ф. Борисова, Ю.П. Хапачев // Металлофизика. – 1986. – Т. 8. – № 5. – С. 44–49.
7. Андреева М.А. Полукинематическая теория резкоасимметричной дифракции на бикристалле / М.А. Андреева, А.А. Дышеков, Ю.П. Хапачев. // Металлофизика и новейшие технологии. – 1994. – Т. 16. – № 4. – С. 22–26.
8. Андреева М.А.. Мессбауэровская и рентгеновская оптика поверхности / М.А. Андреева, Р.Н. Кузьмин. – М. : Общественная академия знаний, 1996. – 128 с.
9. Дышеков А.А. Нестандартная теория рассеяния рентгеновских лучей / А.А. Дышеков // Актуальные вопросы современного естествознания. – 2009. – Вып. 7. – С. 3–20.
10. Дышеков А.А. Пространственное масштабирование в теории рассеяния рентгеновских лучей. Нестандартная динамическая теория / А.А. Дышеков // Металлофизика и новейшие технологии. – 2010. – Т. 32. – № 1. – С. 13–21.
11. Дышеков А.А. Нестандартная динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах / А.А. Дышеков // РСНЭ-НБИК. – 2009. – С. 442. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010. – № 10.
12. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости / Б.П. Демидович. – М. : Наука, 1967. – 472 с.
13. Ландау Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. – М. : Наука, 1962 – 664 с.

14. Найфэ А. Введение в методы возмущений / А. Найфэ. – М. : Мир, 1984. – 536 с.
15. Khapachev Yu.P. The theory of dynamical X-ray diffraction on a superlattice / Yu.P. Khapachev // Phys. stat. sol.(b). – 1983. – V. 120. – № 1. – P. 155–163.
16. Хапачев Ю.П. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в кристаллических сверхрешетках (обзор) / Ю.П. Хапачев, Ф.Н. Чуховский // Металлофизика и новейшие технологии. – 1991. – Т. 13. – № 7. – С. 65-85.
17. Дышеков А.А. Динамическая дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках (Обзор) / А.А. Дышеков, Ю.П. Хапачев // Успехи физики металлов. – 2001. – Т. 2. – № 4. – С. 281–351.
18. Хапачев Ю.П. Теория динамической рентгеновской дифракции в сверхрешетках : учебн. пособие / Ю.П. Хапачев, А.А. Дышеков. – Нальчик : Каб.-Балк. ун-т, 2002. – 96 с.
19. Молодкин В.Б. Динамическое рассеяние рентгеновского и синхротронного излучения в сверхрешетках. Рентгенодифракционная кристаллооптика сверхрешеток / В.Б. Молодкин, А.П. Шпак, А.А. Дышеков, Ю.П. Хапачев. – Киев : Академперіодика, 2004. – 120 с.
20. Бушуев В.А. Зеркальное отражение рентгеновских лучей в условиях резко асимметричной некомпланарной дифракции в кристалле с аморфной пленкой / В.А. Бушуев, А.П. Орешко // ФТТ. – 2001. – Т. 43. – С. 906–912.

Содержание

Предисловие научных редакторов	3
Глава 1. АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ ДЛЯ МОДЕЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР	5
§ 1. Интерпретация решений уравнений Такаги согласно теории устойчивости	7
§ 2. Структура с переменным профилем деформации	9
§ 3. Динамическая рентгеновская дифракция в кристалле с экспоненциальным профилем деформации. Аналитическое решение и структура волнового поля	14
§ 4. Приближение резкого градиента деформации	19
§ 5. Равномерно пригодные разложения для вырожденных гипергеометрических функций	26
§ 6. Аналитические решения для неэкспоненциальных профилей деформации	31
§ 7. Обобщение задачи дифракции в переходном слое с учетом изменения электронной плотности	37
Литература	44
Глава 2. КОВАРИАНТНАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ	49
§ 1. Физическая модель взаимодействия кристалла с излучением	51
§ 2. Прямое разложение решения и геометрические условия дифракции	55
§ 3. Метод многих масштабов – метод разложения производной	58
§ 4. Граничные условия и амплитудный коэффициент отражения	67
Литература	71

НАУЧНОЕ ИЗДАНИЕ

Дышеков Артур Альбекович
Хапачев Юрий Пшиканович

**НОВЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ЗАДАЧАМ
РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОЙ КРИСТАЛЛООПТИКИ**

Под редакцией В.А. Елюхина и Б.С. Карамурзова

Редактор *Л.П. Кербиева*
Компьютерная верстка *В.Н. Мидовой*
Корректор *Л.П. Кербиева*

В печать 18.03.2010. Формат 60х84 $\frac{1}{16}$.
Печать трафаретная. Бумага офсетная. 4.42 усл.п.л. 4.0 уч.-изд.л.

Тираж 500 экз. Заказ № 6007.
Кабардино-Балкарский государственный университет.
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Полиграфический участок ИПЦ КБГУ
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.