

индекс 3624



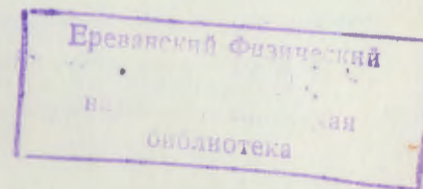
Препринт ЕФИ-1118(81)-88

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ  
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE

---

А.М.АФАНАСЬЕВ, А.В.ЕСАЯН

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ  
И СТРУКТУРА ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ В КРИСТАЛЛЕ  
НА ГРАНИЦЕ БРЭГГ-ЛАУЭ ГЕОМЕТРИИ



ЦНИИАтоминформ  
ЕРЕВАН—1988

Ա.Մ. ԱՓԱՆԱՍԵՎ, \* Ա.Վ. ԵՍԱԶՅԱՆ

ԲՐԵԳ-ԼԱՍԵ ԵՐԿՐԱԶԱՓՈՒԹՅԱՆ ՍԱՀՄԱՆՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ  
ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԳԻՓՐԱԿՑԻԱՆ ԵՎ ԱԼԻԲԱՑԻՆ ԴԱՇՏՆԵՐԻ  
ԿԱՌՈՒՑՎԱԾԸ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Տեսականորեն ուսումնասիրված են Բրեգ-Լասե սահուն երկրաչափու-  
թյան դեպքում դիֆրակցիոն անդրադարձման կորերի և երկրորդային մառ-  
զայթման ելքի առանձնահատկությունները. իդեալական բյուրեղներում  
ոննտգենյան մառազայթների անհամաչափ դիֆրակցիայի պայմաններում: ՌեՆտ-  
գենյան մառազայթների դիֆրակցիայի դինամիկական տեսության հիման վրա  
մանրամասն վերլուծված են Փոտոէլեկտրոնների ելքի ինտենսիվության  
անլույսային կախվածությունները, միաբյուրեղի մակերևույթից հայելա-  
յին անդրադարձման առկայության և բացակայության դեպքում: Գտնվել են  
վերլուծական արտահայտություններ դիֆրակցված ալիքի ինտենսիվության  
համար, բյուրեղում ալիքային դաշտերի բաղադրական հավասարումների ար-  
մատների, ինչպես նաև սարքեր խորություններից Փոտոէլեկտրոնների ել-  
քի ինտենսիվության համար: Կառուցված է մոդիֆիկացված դինամիկական  
տեսություն, որը հիմնվում է ոննտգենյան մառազայթների սովորական ա-  
լիքային դիֆրակցիայի տեսության գործակիցների վերանորմավորման վրա:  
Գտնված են ներքին անհամաչափության օպտիմալ գործակիցի հասնելու այն  
պայմանները, որոնց դեպքում Փոտոէլեկտրոնների ելքը առավելագույնն է:

Երևանի ֆիզիկայի ինստիտուտ  
Երևան 1988

\* Ատոմային էներգիայի ինստիտուտ

УДК 585.42:537.531

А. М. АФАНАСЬЕВ, А. В. ЕСЯН

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ И СТРУКТУРА ВОЛНОВЫХ  
ПОЛЕЙ В КРИСТАЛЛЕ НА ГРАНИЦЕ БРЭГГ-ЛАУЭ ГЕОМЕТРИИ

Теоретически исследованы особенности кривых дифракционного  
отражения и специфика выхода вторичных излучений при асимметрич-  
ной дифракции рентгеновских лучей в скользящей геометрии Брег-  
га-Лауэ в идеальных кристаллах. На основе динамической теории  
дифракции рентгеновских лучей детально проанализированы угловые  
зависимости интенсивности выхода фотоэлектронов как при наличии  
зеркального отражения от поверхности монокристалла, так и в его  
отсутствии. Найдены простые аналитические выражения для интен-  
сивности дифрагированной волны, корней дисперсионного уравнения  
волновых полей в кристалле, а также для интенсивностей выхода  
фотоэлектронов с различных глубин. Построена модифицированная  
динамическая теория, которая базируется на перенормировках  
коэффициентов обычной двухволновой теории дифракции рентге-  
новских лучей. Найдены условия достижения оптимального внутренне-  
го коэффициента асимметрии, при которой выход фотоэлектронов  
максимален.

Ереванский физический институт

Ереван 1988

\* Институт атомной энергии

A.M. AFANAS'EV\*, A.V. ESAYAN

X-RAY DIFFRACTION AND WAVE FIELD STRUCTURE  
AT A BOUNDARY OF BRAGG-LAUE GEOMETRY

Peculiarities of the diffractive reflection curves as well as a specificity of the secondary radiation yield for the X-ray asymmetric diffraction within the Bragg-Laue grazing geometry in the ideal crystals are theoretically studied. Using the dynamical theory of X-ray diffraction the angular dependences of photoelectron yield intensity are thoroughly analyzed both in the presence and absence of mirror reflection from the single crystal surface. Simple analytical expressions have been found for the diffracted wave intensity, for the dispersion equation roots of wave fields in the crystal as well as for the intensities of photoelectron yield from various depths. A modified dynamic theory is constructed, based on renormalizations of coefficients of the conventional two-wave theory for the X-ray diffraction. There are found conditions to achieve an optimal intrinsic coefficient of asymmetry for which the photoelectron yield is maximal.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1988

Atomic Energy Institute

I. Введение

При дифракции рентгеновских лучей в асимметричной схеме с параметром асимметрии  $|\beta| > 1$ , т.е. когда дифрагированная волна распространяется под малым углом к поверхности кристалла, осуществляется ряд интересных физических явлений. Происходит сужение угловой области дифракции и смещение положения пика, резко изменяется направление потока рентгеновских лучей, имеет место явление аномально глубокого проникновения рентгеновских лучей в кристалл (см. например [1-3]). Кроме того, на границе геометрии Брэгга-Лауэ при переходе из геометрии Брэгга в геометрию Лауэ за счет эффекта полного внешнего отражения сохраняется частично брэгговски отраженная волна [4,5].

Асимметричная геометрия дифракции легко реализуется в схеме скользящей геометрии Брэгга-Лауэ [6,7], так как простым изменением угла падения  $\phi_0$  (см. рис. I) можно менять в широких пределах параметр асимметрии и переходить из геометрии Брэгга в геометрию Лауэ. В этой дифракционной схеме наряду с обычным брэгговским отражением легко наблюдается дополнительный поверхностный брэгговский пик (ПБП), для которого угол выхода дифра-

гированной волны ( $\Phi_h$ ) близок к критическому углу зеркального отражения  $\Phi_c$  [8]. При переходе к геометрии Лауэ основной пик исчезает, а ПБП сохраняется [5,9].

Специфика дифракции в асимметричной геометрии находит свое прямое отражение при регистрации вторичных излучений, сопровождающих дифракционное рассеяние. При большом параметре асимметрии ( $|\beta| \gg 1$ ) дифракционная волна распространяется почти параллельно поверхности кристалла, что сильно увеличивает рождение фотоэлектронов вблизи поверхности, и на кривой выхода фотоэлектронов наблюдается резкий пик [10,11].

Аномальное глубокое проникновение дает дополнительный провал на кривых выхода флуоресцентного излучения [12], а кроме того, сильно увеличивает интенсивность комптоновски рассеянных квантов [13,14].

Совокупность явлений в асимметричной схеме дифракции далеко не исчерпывается перечисленными выше эффектами. Внутри кристалла формируются волновые поля сложной структуры, и используя вторичные излучения с различными глубинами выхода (например, фотоэлектроны различных энергетических групп) можно провести детальное исследование этих полей.

Одним из центральных вопросов в этом направлении является вопрос о максимально достижимой параллельности сформированного волнового поля в кристалле входной поверхности кристалла, или как мы будем в дальнейшем называть - проблема максимального внутреннего коэффициента асимметрии. С точки зрения обычного дифракционного рассеяния не имеют особого интереса схема дифракции с  $|\beta| > \left| \frac{\Phi_0}{\Phi_c} \right|$ , так и при углах выхода  $\Phi_h < \Phi_c$ , интенсивность дифракционной волны очень быстро спадает. Однако с

увеличением параметра асимметрии, хотя и дифракционное отражение уменьшается, на определенных глубинах внутри кристалла (как будет видно ниже) возникает поток почти параллельной поверхности кристалла, и это при определенном выборе энергии фотоэлектронов может привести к дополнительному увеличению пика на кривой выхода фотоэлектронов. Детальный анализ этого вопроса дается в разделах 3 и 4. В разделе 2 приведены основные закономерности дифракционного рассеяния и выхода вторичных излучений для случаев не очень больших параметров асимметрии, когда эффектами зеркального отражения можно пренебречь.

## 2. Двухволновая динамическая теория

Асимметричная дифракция с  $|\beta| > 1$  наиболее просто реализуется в схеме скользящей геометрии Брэгга-Лауэ (см.рис.1). Кристалл вырезается под небольшим углом скоса  $\Psi$ . Отражающие плоскости почти перпендикулярны поверхности кристалла, а падающие и отраженные рентгеновские лучи скользят под малыми углами ( $\Phi_0$  и  $\Phi_h$  соответственно) к поверхности. При этом для углов падения  $\Phi_0 < |\tilde{\Psi}| = 2|\Psi| \sin \theta_B \cdot \cos \varphi_{hkl}$  (где  $\theta_B$  - угол Брэгга, а  $\varphi_{hkl}$  - угол между направлением скоса и векторов обратной решетки отражающих плоскостей) реализуется случай дифракции в геометрии Брэгга, когда от кристалла отражается дифрагированная волна большой интенсивности. При больших углах  $\Phi_0 > |\tilde{\Psi}|$ , реализуется дифракция в геометрии Лауэ, когда дифрагированная волна распространяется внутрь кристалла. Небольшим изменением угла  $\Phi_0$  можно переходить из геометрии Брэгга в геометрию Лауэ и наоборот. Поэтому схема и получила название скользящей схемы Брэгг-Лауэ дифракции. Если углы  $\Phi_0$  и  $\Phi_h$  не слишком

тали,  $\Phi_0, \Phi_h > \Phi_c$ , то для вычисления интенсивности брэгговского отражения можно использовать обычные формулы динамической дифракции рентгеновских лучей [1,2]. Интенсивность отраженного пучка определяется как

$$R_R(\theta) = |R_h|^2 = \frac{1}{|\beta|^2} \cdot \left| \frac{E_h}{E_0} \right|^2. \quad (1)$$

Здесь  $E_0$  и  $E_h$  - амплитуды падающей и дифрагированной волн соответственно, а  $\beta$  - так называемый фактор асимметрии, который задается формулой

$$\beta = \frac{\Phi_0}{\Phi_0 - |\tilde{\Psi}|}. \quad (2)$$

Амплитуда рассеяния  $R_h$  согласно уравнениям динамической теории [1,2] выражается следующей формулой

$$R_h = \frac{\sqrt{|\beta|} c \chi_h}{2\varepsilon_0^{(3)} - \chi_0}. \quad (3)$$

Здесь  $\chi_h$  - фурье-компонента поляризуемости, соответствующая данному отражению,  $c$  - поляризационный фактор, а  $\varepsilon_0^{(3)}$  - корень дисперсионного уравнения

$$(2\varepsilon_0 - \chi_0)(2\varepsilon_0/\beta - \chi_0 + \alpha) - c^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0 \quad (4)$$

с отрицательной мнимой частью. Для сравнения этих формул с результатами анализа более сложного варианта дифракции на границе геометрии Брэгга-Лауэ удобно ввести нумерацию решения уравнения (4) индексом 1,3 (см. разд.3).

Параметр  $\alpha$  связан с отклонением от брэгговского угла соотношением

$$\alpha = -2 \sin 2\theta_B \cdot (\theta - \theta_B). \quad (5)$$

Корни дисперсионного уравнения легко находятся

$$2\varepsilon_0^{(1,3)} - \chi_0 = \frac{1}{2} \left\{ -\beta\alpha_1 \pm \sqrt{\beta^2\alpha_1^2 + 4\beta c^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}} \right\}, \quad (6)$$

где  $\alpha_1 = \alpha - \chi_0 \frac{\beta-1}{\beta}$ , а тем самым, согласно (1), (3) имеется простой способ расчета кривых отражений.

Параметр  $\alpha$  также выражается через углы  $\Phi_0$  и  $\Phi_h$

$$\alpha = (\Phi_0 - |\tilde{\Psi}|)^2 - \Phi_h^2, \quad (5')$$

и с изменением угла  $\theta$  меняется также угол выхода  $\Phi_h$ . Важно также, что масштаб изменения угла  $\Phi_h$  в пределах ширины кривой брэгговского отражения на порядок превосходит масштаб изменения угла  $\theta$ .

При подходе к границе геометрии Брэгга-Лауэ ( $\Phi_0 \approx |\tilde{\Psi}|$ ) параметр  $\beta$  растет по модулю, т.е. реализуется резкоасимметричный случай дифракции с  $|\beta| \gg 1$ .

Согласно формулам (1), (6) положение брэгговского пика соответствует

$$\alpha_B = \frac{\beta-1}{\beta} \operatorname{Re} \chi_0, \quad (7)$$

а его ширина

$$W = W_0 / \sqrt{|\beta|}, \quad (8)$$

где  $W_0 = 2c |\chi_h|$  - ширина пика в симметричном отражении ( $|\beta| = 1$ ). Положение пика стабилизируется к  $\alpha_B = \operatorname{Re} \chi_0$ , его

ширина уменьшается по мере роста  $|\beta|$ . Соответствующие дифракционные кривые приведены на рис.2.

Перейдем к рассмотрению выхода фотоэлектронов. В соответствии с общей теорией [15] для вторичных излучений, вероятность выхода которых из кристалла задается функцией  $P(z)$ , угловая зависимость регистрируемого детектором интенсивности вторичного излучения (нормированной на единицу при угле падения, далеких от области брэгговской дифракции) определяется формулой:

$$\alpha(\theta) = \{1 + |\beta| P_R + 2\sqrt{|\beta|} \operatorname{Re}(\epsilon_h R_h)\} \cdot \int_0^{\infty} dz P(z) e^{-\mu(\theta)z}. \quad (9)$$

Здесь  $\epsilon_h = \chi_{ih}/\chi_{io}$  - параметр, характеризующий распределение сечения поглощения по элементарной ячейке кристалла, а

$$\mu(\theta) = 2\kappa \operatorname{Im} \epsilon_o^{(1)} / \Phi_o \quad (10)$$

определяет глубину проникновения рентгеновских лучей в кристалл. При  $\alpha_1 = 0$  глубина проникновения минимальна и определяется экстинкционной длиной  $L_{ex}$ :

$$\mu(\alpha_1 = 0) = 2/L_{ex}, \quad L_{ex} = \frac{\lambda \sqrt{\Phi_o \Phi_h}}{\pi |\chi_h|}. \quad (11)$$

Здесь  $\kappa = 2\pi/\lambda$  - модуль волнового вектора падающей волны,  $\lambda$  - длина волн рентгеновского излучения.

Из формул (3), (6) видно, что в области сильного дифракционного отражения  $|E_h| \sim \sqrt{|\beta|} \cdot |E_o|$ , т.е. амплитуда поля дифрагированной волны с ростом фактора асимметрии увеличивается в  $\sqrt{|\beta|}$  раз по отношению к амплитуде падающей волны, что пря-

мо отражается на выходе фотоэлектронов. Такое увеличение интенсивности выхода фотоэлектронов при переходе к асимметричному случаю дифракции имеет простую физическую природу. При асимметричной дифракции происходит сильное изменение направления суммарного потока рентгеновских лучей в кристалле. Для фотоэлектронов характерна малая глубина выхода, и изменение направления потока вызывает увеличение числа вылетающих из кристалла фотоэлектронов. Максимум интенсивности фотоэлектронов происходит на максимум кривой отражения. Учет конечности глубины выхода приводит к резкому уменьшению максимума интенсивности (см. рис.3). Для иллюстрации здесь и далее будем использовать функцию вероятности выхода фотоэлектронов в экспоненциальной форме:  $P(z) = \exp(-z/L_e)$ .

При углах падения  $\Phi_o > |\tilde{\Psi}|$  осуществляется дифракция в геометрии Лауэ. В этой геометрии волновое поле в кристалле представляет собой когерентную суперпозицию двух полей:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \sum_{i=1,2} [\vec{D}_o^{(i)} + \vec{D}_h^{(i)} \exp(i\vec{K}_h \cdot \vec{r})] \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r} + i\epsilon_o^{(i)} \kappa z / \Phi_o), \quad (12)$$

где  $\vec{K}$  - волновой вектор падающей волны, а  $\vec{K}_h$  - вектор обратной решетки. Амплитуды  $D_o^{(i)}$  и  $D_h^{(i)}$  находятся из граничных условий [1,12]:

$$D_o^{(1)} = \frac{2\epsilon_o^{(2)} - \chi_o}{2\epsilon_o^{(2)} - 2\epsilon_o^{(1)}} E_o, \quad D_o^{(2)} = -\frac{2\epsilon_o^{(1)} - \chi_o}{2\epsilon_o^{(2)} - 2\epsilon_o^{(1)}} E_o, \quad (13)$$

$$D_h^{(1)} = -D_h^{(2)} = -\frac{c\beta\chi_h}{2\epsilon_o^{(2)} - 2\epsilon_o^{(1)}} E_o.$$

Угловая зависимость выхода фотоэлектронов задается формулой:

$$\alpha(\theta) = \int_0^{\infty} dz P(z) \{ |\vec{D}_0|^2 + |\vec{D}_h|^2 + 2\epsilon_h \operatorname{Re}(\vec{D}_0 \vec{D}_h^*) \}. \quad (14)$$

и приобретает качественно иной характер по сравнению с кривой рис.3. Так, при  $L_e \rightarrow 0$   $\alpha(\theta)$  превращается в прямую по той очевидной физической причине, что на малых  $Z$  дифрагированная волна еще не успевает сформироваться. По мере увеличения  $L_e$  начинает проявляться структура на кривых  $\alpha(\theta)$ .

В соответствии с формулами (13) и (14)  $\alpha(\theta)$  можно представить в виде трех членов:

$$\alpha(\theta) = \alpha^{(1)}(\theta) + \alpha^{(2)}(\theta) + \alpha^{\text{int}}(\theta), \quad (15)$$

где  $\alpha^{(1,2)}$  есть вклады от мод 1 и 2, а третий член описывает интерференцию между ними. Если  $L_e$  мало по сравнению с длинами поглощения как первой, так и второй моды, то для  $\alpha(\theta)$  получается следующее простое выражение:

$$\alpha(\theta, Z) = 1 + \left\{ \frac{2\beta(\beta-1)c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}}{\beta^2\alpha_i^2 + 4\beta c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}} + \frac{2\epsilon_h\beta^2\alpha_1 c\chi_h}{\beta^2\alpha_i^2 + 4\beta c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}} \right\} \times \quad (16)$$

$$\times \left( 1 - \langle \cos(\sqrt{\beta^2\alpha_i^2 + 4\beta c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}} \cdot \frac{kZ}{2\Phi_0}) \rangle \right),$$

где  $\langle \dots \rangle = \int P(z) \dots dz$  означает пространственное усреднение по функции вероятности выхода фотоэлектронов. Для случая  $\beta = 1$  формула (16) получена в работе [16].

Если глубины выхода фотоэлектронов  $L_e > L_p$ , где  $L_p$  длина, на которой происходят маятниковые колебания (Pendelösung

effect) [2], то интерференционным членом можно пренебречь (т.е. опустить в формуле (16) второй осциллирующий член в круглых скобках), и для широкой области изменения глубины выхода  $L_e$  кривые выхода фотоэлектронов не зависят от  $L_e$ . В этом, так называемом асимптотическом случае

$$\alpha(\theta) = 1 + \frac{2\beta(\beta-1)c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}}{\beta^2\alpha_i^2 + 4\beta c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}} + \frac{2\epsilon_h\beta^2\alpha_1 c\chi_h}{\beta^2\alpha_i^2 + 4\beta c^2\chi_h\chi_{\bar{h}}}, \quad (17)$$

и на кривых  $\alpha(\theta)$  также наблюдается сильный максимум в области дифракционного рассеяния, однако интенсивность пика приблизительно вдвое меньше, чем в случае дифракции в геометрии Брэгга для тех же самых значений  $|\beta|$  (см.рис.4).

Как нетрудно увидеть из формулы (16) параметр  $L_p$  определяется выражением:

$$L_p = \lambda \frac{\sqrt{\Phi_0 \Phi_h}}{|\chi_h|}. \quad (18)$$

С точностью до множителя  $1/\pi$   $L_p$  совпадает с введенной выше для случая дифракции в геометрии Брэгга длиной  $L_{ex}$  (II). Заметим, что несмотря на совпадение формул (II) и (16) параметры  $L_{ex}$  и  $L_p$  имеют разный физический смысл:  $L_{ex}$  определяет глубину проникновения волнового поля в кристалл, в то время как  $L_p$  определяет длину, на которой происходит перекачка интенсивностей из падающей волны в дифрагированную и обратно. При дифракции на границе геометрии Брэгга-Лауэ появляется уже несколько характерных длин, и следует различать экстинкционные длины  $L_{ex}$ , определяющие затухание волн, и интерференционные

-  $L_p$  определяющие процессы перераспределения интенсивностей между различными модами (см. следующий раздел).

При дальнейшем увеличении  $L_e$  пик уменьшается по величине, а в пределе  $L_e \rightarrow \infty$  кривых  $\alpha(\theta)$  снова вырождается в прямую. Большие глубины выхода характерны для флуоресцентного излучения, и эти случаи подробно проанализированы в работах [12].

### 3. Модифицированная динамическая теория дифракции рентгеновских лучей

По мере увеличения  $\Phi_0$  и уменьшения  $\Phi_h$  пользоваться формулами обычной динамической теории уже нельзя. При  $\Phi_h \sim \Phi_c = \sqrt{|\chi_0|}$  необходимо учитывать эффекты зеркального отражения. Когда угол падения  $\Phi_0 \gg \Phi_c$ , то можно пренебречь зеркальным отражением падающей волны, но необходимо учитывать эффекты зеркального отражения для дифрагированной волны. В этом случае необходимо использовать граничные условия не только для амплитуд дифрагированных волн, но и для их производных. При этом дисперсионное уравнение становится уже уравнением третьего порядка (см. напр. [9]):

$$y[(y + \tilde{\Phi}_0 - |\tilde{\Psi}|)^2 - \tilde{\Phi}_h^2] - \frac{c^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}{2 \tilde{\Phi}_0} = 0, \quad (19)$$

где

$$y = \frac{2E_0 - \chi_0}{2\tilde{\Phi}_0}, \quad \text{а} \quad \tilde{\Phi}_{0,h} = \sqrt{\Phi_{0,h}^2 + \chi_0}. \quad (20)$$

Дисперсионное уравнение (19) имеет три корня, из которых два  $y_1, y_2$  имеют положительную мнимую часть, а  $\text{Im } y_3 < 0$ .

Волновое поле внутри кристалла будет определяться формулой (12), как и в рассмотренном выше случае дифракции в геометрии Лауэ, но при этом имеет место и дифракционное отражение, характерное для дифракции в геометрии Брэгга. Для амплитуды поля отраженной волны  $E_h^s$  и амплитуд волновых полей внутри кристалла легко находим:

$$E_h^s = \frac{c \chi_h}{y_3 (\Phi_h - \delta - y_3)} E_0, \quad (21)$$

$$D_h^{(1)} = \frac{\Phi_h + \delta + y_2}{y_2 - y_1} E_h^s; \quad D_0^{(1)} = \frac{c \chi_{\bar{h}}}{2 \tilde{\Phi}_0 \cdot y_1} D_h^{(1)},$$

$$D_h^{(2)} = -\frac{\Phi_h + \delta + y_1}{y_2 - y_1} E_h^s; \quad D_0^{(2)} = \frac{c \chi_{\bar{h}}}{2 \tilde{\Phi}_0 \cdot y_2} D_h^{(2)}, \quad (22)$$

где  $\delta = \tilde{\Phi}_0 + \tilde{\Psi}$ .

Совокупность формул (21), (22), (12) описывает дифракционное рассеяние в обоих случаях геометрии Брэгга и геометрии Лауэ. Так, в случае геометрии Брэгга ( $\delta < 0$ ) и

$$|\delta| \gg \delta_0, \quad (23)$$

где

$$\delta_0 = \left| \frac{c^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}{2 \tilde{\Phi}_0} \right|^{1/3}, \quad (24)$$

один из корней с положительной мнимой частью, соответствующей затухающей вглубь кристалла моде

$$y_2 = -\delta + \tilde{\Phi}_h. \quad (25)$$

(Поправки  $\Delta y_2$  к  $y_2$  малы и отношение  $|\Delta y_2/y_2| < (\delta_0/\delta)^{1/2}$ )  
 Корни  $y_1$ ,  $y_3$  находятся из решения квадратного уравнения:

$$y(y + \delta + \tilde{\Phi}_h) + \frac{\delta_0^3}{\tilde{\Phi}_h - \delta} = 0. \quad (26)$$

При этом оказывается, что корень  $y_1$  с наименьшей мнимой частью удовлетворяет неравенству:

$$|y_1| \ll |y_2|. \quad (27)$$

Совокупность приближений, приводящих к уравнениям (26), (27) фактически соответствует модифицированной динамической теории предложений для данной схемы дифракции в работе [9], суть которой сводится к сведению конечных выражений для амплитуды и коэффициента отражения к формулам обычной динамической теории с перенормированными коэффициентами  $\beta$  и  $\alpha$  (см. (2) и (5)).

С учетом неравенства (23) можно в формуле (21) заменить  $\Phi_h - \delta - y_3$  на  $\Phi_h - \delta - y_3^0$ , где  $y_3^0 = -\delta - \tilde{\Phi}_h$  есть выражение для корня  $y_3$  вдали от брэгговской дифракции. В результате для амплитуды рассеяния  $R_h$  вместо формулы (3) имеем:

$$R_h = \frac{\sqrt{|\beta|} c \chi_h}{2 \epsilon_0^{(3)} - \chi_0} \cdot f(\Phi_h), \quad (28)$$

где

$$f(\Phi_h) = \frac{2\Phi_h}{\Phi_h + \tilde{\Phi}_h} \quad (29)$$

а корень  $\epsilon_0^{(3)}$  определяется из уравнения (6) с перенорми-

рованными параметрами  $\beta$  и  $\alpha$ , которые следует заменить на  $\tilde{\beta}$  и  $\tilde{\alpha}$ , где

$$\tilde{\beta} = \frac{2\tilde{\Phi}_0}{\delta - \tilde{\Phi}_h},$$

$$\tilde{\alpha} = \delta^2 - \tilde{\Phi}_h^2 + \chi_0 \frac{\tilde{\beta} - 1}{\tilde{\beta}}.$$

(30)

При  $\Phi_h \gg \Phi_c$  параметры  $\Phi_h$  и  $\tilde{\Phi}_h$  близки, и их различие можно пренебречь. Фактор  $f(\Phi_h)$  в данном случае становится равным единице, а параметры  $\tilde{\beta}$  и  $\tilde{\alpha}$  совпадают с параметрами  $\beta$  и  $\alpha$  соответственно. Это означает, что дифракционное рассеяние при  $|\delta| \gg \delta_0$  и  $\Phi_h \gg \Phi_c$  описывается обычными формулами динамической теории (см. раздел 2). Заметим, что при углах скоса  $|\tilde{\Psi}| \gg \Phi_c$  параметр  $\delta_0 = \Phi_c \left(\frac{\Phi_c}{2\tilde{\Phi}_h}\right)^{1/2} \left(\frac{c\chi_h}{\chi_0}\right)^{2/3}$  оказывается много меньше  $\Phi_c$ , и поэтому существует область по  $\delta$ , когда  $|\delta| \gg \delta_0$ , но в области сильного дифракционного рассеяния  $\Phi_h$  оказывается близким к  $\Phi_c$ , т.е. углы  $\Phi_h$  и  $\tilde{\Phi}_h$  сильно различаются. Но в этом случае имеется простое описание дифракционного рассеяния по формулам МДТ, и появляются свои специфические для этой области явления. Прежде всего наряду с обычным брэгговским пиком, который соответствует углам  $\Phi_h \approx |\delta|$ , появляется еще дополнительный поверхностный брэгговский пик (ПН) при углах  $\Phi_h \approx \Phi_c$  [9].

Появление этого пика отражается в формуле (28) наличием множителя  $f(\Phi_h)$ . Последний имеет простой физический смысл. Предположим, что на кристалл падает рентгеновское излучение под углом  $\Phi_h$  с амплитудой  $E_h$ . Тогда в кристалле (без учета

та дифракционного рассеяния) образуется волновое поле с амплитудой

$$D_h = f(\Phi_h) E_h, \quad (31)$$

т.е. поле волны в кристалле как по амплитуде, так и по фазе отличается от падающей волны (см. например [1]). Ясно, что дифракционный процесс (его амплитуда), будет пропорционален не  $E_h$ , а  $D_h$ , и именно в силу этого обстоятельства возникает множитель  $f(\Phi_h)$ .

Кроме того, значение максимума коэффициента отражения в брэгговском пике уже сильно отличается от значений, предсказываемых обычной динамической теорией. В формуле (28) это обстоятельство отражено тем фактом, что при вычислении  $\varepsilon_0^{(3)}$  необходимо использовать перенормированные значения параметров  $\beta$  и  $\alpha$ . Так, если для обычной динамической теории (при пренебрежении поглощением) максимум коэффициента отражения равен единице, то в модифицированной теории

$$P_R^{\max} \approx \left| \frac{4\Phi_h^\circ \tilde{\Phi}_h^\circ}{(\Phi_h^\circ + \tilde{\Phi}_h^\circ)^2} \right|, \quad (32)$$

где  $\tilde{\Phi}_h^\circ \approx -\delta$  есть угол выхода, соответствующий максимуму брэгговского пика.

Естественно, что можно ожидать новых качественных явлений и в процессе формирования вторичных излучений, сопровождающих дифракционное рассеяние. Рассмотрим вначале излучение с нулевой глубиной выхода. В этом случае для описания  $\varepsilon(\theta)$  можно использовать формулу (9), в которой следует интеграл заменить единицей, а  $R_h$  (и соответственно  $P_R$ ) представить по фор-

муле (28).

При больших  $|\beta|$  основным членом в (9) является член  $|\beta| P_R$ , и согласно обычной динамической теории, для которой реализуется коэффициент отражения, равный единице, по мере роста  $|\beta|$   $\varepsilon_0^{\max}$  растет пропорционально  $|\beta|$ . С другой стороны, согласно (32) учет зеркального отражения для дифрагированной волны снижает максимальное значение коэффициента отражения, и как следствие рост  $\varepsilon_0^{\max}$  будет уже задаваться иным законом:

$$\varepsilon_0^{\max} \approx \left| \frac{4\tilde{\Phi}_0 \tilde{\Phi}_h^\circ}{(\Phi_h^\circ + \tilde{\Phi}_h^\circ)^2} \right|. \quad (33)$$

Из формулы (33) видно, что для достижения максимального эффекта нельзя увеличивать  $|\beta| = \frac{\Phi_0}{\Phi_h}$  за счет уменьшения  $\Phi_h^\circ$ , т.к. при

$$\Phi_h^\circ = \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \Phi_c \quad (34)$$

$\varepsilon_0(\theta)$  достигает своего максимального значения (при фиксированном  $\Phi_0$ ):

$$\varepsilon_0^{\max} = \frac{\beta}{9} |\beta_c|, \quad \beta_c = \frac{\Phi_0}{\Phi_c}, \quad (35)$$

а по мере уменьшения  $\Phi_h^\circ$   $\varepsilon_0^{\max}$  начинает падать.

Заметим, что рассмотрение примера с  $L_c = 0$  не является абстрактным математическим примером. Исследование флуоресцентного излучения от монослоя чужеродных атомов, высаженных на поверхность кристалла, является той реальной ситуацией, для кото-

рой в полной мере справедливы полученные выше закономерности.

Перейдем к анализу специфики выхода вторичных излучений с глубиной выхода  $L_e \neq 0$ . В этом случае необходимо знать не только амплитуду поля дифрагированной волны на поверхности кристалла, но и волновые поля внутри кристалла.

Общие формулы (22) с учетом неравенства (23) и вытекающие из него формулы (25)–(27) можно упростить следующим образом:

$$D_h^{(1)} = \frac{\Phi_h + \tilde{\Phi}_h}{\tilde{\Phi}_h - \delta} E_h^s, \quad D_o^{(1)} = E_o, \quad (36)$$

$$D_h^{(2)} = -\frac{\Phi_h + \delta}{\tilde{\Phi}_h - \delta} E_h^s, \quad D_o^{(2)} \approx 0,$$

а

$$E_h^s = \frac{c \chi_h}{\gamma_3 (\Phi_h + \tilde{\Phi}_h)} E_o. \quad (37)$$

Отметим, что при  $\Phi_h$ , близких к  $\Phi_c$ , параметр  $|\tilde{\Phi}_h|$  становится уже много меньше  $\Phi_h$ . Если при этом  $|\delta| \ll \Phi_c$ , то как следует из (36), амплитуды  $D_h^{(1)}$  и  $D_h^{(2)}$  могут намного превосходить амплитуду дифрагированной волны на поверхности кристалла  $E_h^s$ . На рис.5 представлена зависимость квадрата амплитуды дифрагированной волны от глубины

$$|D_h(z)|^2 = |D_h^{(1)} e^{ik\varepsilon_o^{(1)}z/\Phi_o} + D_h^{(2)} e^{ik\varepsilon_o^{(2)}z/\Phi_o}|^2$$

для значения  $\delta \approx 5\delta_o$  и при  $\Phi_h = \sqrt{\Phi_c^2 + \delta^2}$ , соответствующим максимуму брэгговского отражения. Интенсивность дифрагированного поля на глубине, как видно из рис.5, может намного

превосходить интенсивность поля на поверхности, и следовательно, на кривых выхода вторичных излучений можно ожидать существенно больших по амплитуде пиков.

Рассмотрим вторичное излучение, глубина выхода которых

$$L_e \gg L_p = \frac{\lambda}{2\pi |Re(\gamma_2 - \gamma_1)|}. \quad (38)$$

Для описания угловой зависимости  $\alpha(\theta)$  мы можем использовать формулу (14), которая была получена для случая в дифракции в геометрии Лауэ. Условие (38) позволяет пренебречь  $\alpha^{int}$  (см. (15)). Если, кроме этого, предположить, что  $L_e \ll L_{ex}^{(1)}$  и  $L_{ex}^{(2)}$ , где

$$L_{ex}^{(1,2)} = \frac{\lambda}{2\pi \Im(\gamma_{1,2} + \kappa_o/2\tilde{\Phi}_o)} \quad (39)$$

длины затухания первой и второй мод соответственно, то для  $\alpha(\theta)$  имеем следующее выражение:

$$\alpha_1(\theta) = 1 + \left| \frac{2\Phi_h(\Phi_h + \delta + \tilde{\Phi}_h) + \delta^2 + \tilde{\Phi}_h^2}{(\tilde{\Phi}_h - \delta)^2} \right| \cdot |E_h^s|^2 + 2\epsilon_h Re \left( \frac{\Phi_h + \tilde{\Phi}_h}{\tilde{\Phi}_h - \delta} E_h^s \right). \quad (40)$$

В области дифракционного отражения

$$\alpha_1(\theta) = 1 + \left| \frac{\Phi_o^2 + 2\delta^2}{2\delta^2} \right| \cdot |E_h^s|^2 + 2\epsilon_h Re \left( \frac{\sqrt{\Phi_c^2 + \delta^2} - \delta}{-2\delta} E_h^s \right), \quad (41)$$

а для  $\alpha_1^{max}$  получим:

$$\alpha_1^{\max} \approx \frac{2\phi_0}{|\delta|} \cdot \frac{|\phi_0^2 + 2\delta^2|}{|\sqrt{\phi_0^2 + \delta^2} - \delta|^2} \quad (42)$$

На рис.6 представлены кривые зависимости максимальных значений  $\alpha_0^{\max} (L_e=0)$  и  $\alpha_1^{\max} (L_e \neq 0)$  от  $|\delta|$ . Как видно из рис.6, в МДТ при  $|\delta| \rightarrow 0$   $\alpha_1^{\max} \rightarrow \infty$ , т.е. выход фотоэлектронов с конечных не равных нулю глубин может достигнуть сколь угодно больших значений. Интересно, что этот результат остается и в точной теории, если пренебречь процессом поглощения. При этом однако резкое возрастание  $\alpha^{\max}$  приходится не на  $\delta = 0$ , а несколько смещено (см. раздел 4).

На рис.7 представлены кривые  $\alpha(\theta)$  для различных глубин выхода  $L_e$  при малых значениях параметра  $\delta$ , когда учет эффектов зеркального отражения для дифрагированной волны приводит уже к качественно новым явлениям. Если в обычной динамической теории по мере увеличения  $L_e$  пик  $\alpha(\theta)$  падает, то в МДТ пик кривой  $\alpha(\theta)$  растет и может в несколько раз превышать соответствующее значение при  $L_e = 0$ , и лишь затем при  $L_e \geq L_{ex}^{(1)}$  начинает падать.

При дальнейшем росте  $L_e$  на кривой  $\alpha(\theta)$  начинает проявляться экстинкционный провал, и кривая  $\alpha(\theta)$  приобретает двухгорбый вид.

Перейдем к рассмотрению случая выхода вторичного излучения в геометрии Лауэ ( $\delta > 0$ ). В этой геометрии с учетом неравенства (23) корень дисперсионного уравнения (19) с отрицательной мнимой частью легко находится:

$$y_3 = -\delta - \tilde{\phi}_h \quad (43)$$

При этом корни  $y_1, y_2$  находятся из квадратного уравнения

$$y(y + \delta - \tilde{\phi}_h) - \frac{\delta_0^3}{\delta + \tilde{\phi}_h} = 0 \quad (44)$$

Уравнение (44) есть не что иное, как обычное дисперсионное уравнение (4), но с перенормированными параметрами  $\tilde{\beta}$  и  $\tilde{\alpha}$  (см. формулы (30)).

С учетом формул (43) и (44) для амплитуды поля отраженной волны  $E_h^s$  имеем:

$$E_h^s = - \frac{c\chi_h}{(\delta + \tilde{\phi}_h)(\phi_h + \tilde{\phi}_h)} E_0 \quad (45)$$

Естественно, что при  $\delta \rightarrow \infty$  амплитуда  $E_h^s$  стремится к нулю, а параметры  $\tilde{\beta}$  и  $\tilde{\alpha}$  стремятся к своим исходным значениям  $\beta$  и  $\alpha$  (2), (5).

Интересное следствие формулы (45) состоит в том, что в случае дифракции в геометрии Лауэ учет зеркального отражения дифракционной волны дает отличную от прямой кривую выхода  $\alpha(\theta)$  даже для вторичных излучений с  $L_e = 0$  (см. рис.8).

С учетом формул (43)-(45) общие выражения для амплитуд волновых полей несколько упрощаются, и их можно с учетом (20) представить в следующем виде

$$D_h^{(1,2)} = \left( \frac{\phi_h + \delta}{\phi_h + \tilde{\phi}_h} \right) \tilde{D}_h^{(1,2)} + \tilde{D}_0^{(1,2)} (E_h^s/E_0), \quad (46)$$

$$D_0^{(1,2)} = \frac{c\chi_h}{2E_0^{(1,2)} - \chi_0} D_h^{(1,2)},$$

где  $\tilde{D}_{o,h}^{(1,2)}$  определяется по формуле (13), в которой корни  $2E_o^{(1,2)}$  вычисляются по формуле (6) с перенормированными параметрами  $\tilde{\alpha}$  в соответствии с формулой (30) и  $\beta$  заменяется на

$$\tilde{\beta} = \frac{2\tilde{\Phi}_o}{\tilde{\delta} + \tilde{\Phi}_h} \quad (47)$$

Формулы (46), (4), (30), (14) позволяют рассчитать выход вторичных излучений в геометрии Лауэ при  $\tilde{\delta} > \tilde{\delta}_o$  в рамках МДТ, не прибегая к решению дисперсионного уравнения 3-го порядка.

По мере роста  $L_e$  максимум на кривой  $\mathcal{X}(\theta)$  увеличивается (см. рис. 9) уже в полной аналогии с предсказаниями обычной динамической теории.

Если глубина выхода  $L_e > L_p$  (см. (38)), то кривая  $\mathcal{X}(\theta)$  выходит на некоторый асимптотический режим по аналогии с результатами обычной динамической теории (см. (17)).

#### 4. Волновые поля и выход фотоэлектронов на границе геометрии Брэгга-Лауэ

При  $\Phi_o$  близком к  $|\tilde{\Psi}|$ , когда параметр  $|\tilde{\delta}| \ll \tilde{\delta}_o$ , для анализа дифракционного процесса и специфики выхода вторичных излучений необходимо уже обращаться к общему дисперсионному уравнению (19) и формулам (21), (22).

Как будет видно ниже, сильное дифракционное рассеяние имеет место при углах  $\Delta\theta$ , когда угол выхода  $\Phi_h$  близок к  $\Phi_c$ . Последнее обстоятельство дает возможность несколько упростить формулы (21), (22). С учетом неравенств  $|y_i|, |\tilde{\delta}| \ll \Phi_c$  легко находим:

$$E_h^s \approx \frac{c\chi_h}{\Phi_c y_3} E_o \equiv s \frac{\Phi_c}{y_3} E_o \quad (48)$$

и

$$D_h^{(1)} = -D_h^{(2)} = s \frac{\Phi_c^2}{y_3(y_2 - y_1)} E_o \quad (49)$$

Здесь  $s = \frac{c\chi_h}{|\chi_o|}$ .

Поле падающей волны можно в данном случае пренебречь, а для выхода фотоэлектронов в области сильного дифракционного рассеяния использовать формулу

$$\mathcal{X}(\theta) \approx \int_0^\infty dz P(z) \cdot |D_h(z)|^2 \quad (50)$$

В первую очередь естественный интерес представляет случай дифракции непосредственно на границе Брэгг-Лауэ дифракции, когда параметр  $\tilde{\delta} = 0$ . Дисперсионное уравнение (19) удобно переписать в следующей форме:

$$y(y^2 - \Phi_h^2 + \Phi_c^2 - i\chi_{oi}) - \tilde{\delta}_o^3 = 0 \quad (51)$$

Рассмотрим случай слабопоглощающего кристалла, когда

$$\chi_{oi} \ll \tilde{\delta}_o^2, \quad (52)$$

и рассмотрим область углов по  $\Delta\theta$ , когда

$$|\Phi_c^2 - \Phi_h^2| \ll \tilde{\delta}_o^2 \quad (53)$$

В этой области нетрудно выписать приближенные выражения для корней дисперсионного уравнения (51):

$$y_1 = \delta_0 \left(1 + \frac{a}{3}\right)$$

$$y_2 = \delta_0 \left(\eta + \frac{a}{3} \eta^2\right) \quad (54)$$

$$y_3 = \delta_0 \left(\eta^2 + \frac{a}{3} \eta\right),$$

где

$$\alpha = \frac{\Phi_h^2 - \Phi_c^2 + i\chi_{oi}}{\delta_0^2} \quad (55)$$

$$\text{и } \eta = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right).$$

В формуле (54) отброшены поправки порядка  $\frac{1}{3} \left(\frac{a}{3}\right)^3$ , так что эта формула дает очень хорошее приближение для корней  $y_i$  даже в том случае, когда  $\chi_{oi} \approx \delta_0^2$  и  $|\Phi_h^2 - \Phi_c^2| \approx \delta_0$ .

С учетом (54) легко находим:

$$E_h^s = S \frac{\Phi_0}{\delta_0} - \frac{1}{\eta \left(\eta + \frac{a}{3}\right)} E_0 \quad (56)$$

и

$$D_h^{(1)} = -D_h^{(2)} = S \frac{\Phi_c^2}{\delta_0^2} \frac{E_0}{(\eta-1) \left(1 + \left(\frac{a}{3}\right)^2 (1 + \eta^2)\right)} \quad (57)$$

Таким образом квадрат амплитуды поля  $|D_h|^2$  на глубине кристалла сильно превосходит соответствующую величину на поверхности (см. рис. 10) и

$$|D_h(\bar{z})|_{\max}^2 \approx \frac{S^2}{3} \left(\frac{\Phi_c}{\delta_0}\right)^4 |E_0|^2 \quad (58)$$

При этом глубина, на которой реализуется максимальное

значение амплитуды поля дифрагированной волны

$$L_p \approx \frac{\lambda}{3\delta_0}, \quad (59)$$

т.е.  $L_p$  растет по мере уменьшения  $\delta_0$ .

Следует отметить, что параметр  $\delta_0$  не может быть выбран сколь угодно малым, так как углы скоса  $|\Psi| < \frac{\pi}{2}$ . Минимальное значение  $\delta_0$  определяется очевидной формулой:

$$\delta_0^{\min} = S^{2/3} \Phi_c \cdot \left(\frac{\Phi_c}{2}\right)^{1/3} \quad (60)$$

Вообще говоря дифракция на самой границе, т.е. при  $\delta = 0$ , может быть не оптимальной с точки зрения получения максимального отношения  $|D_h|^2 / |E_0|^2$ . Действительно, как видно из формулы (49), амплитуды  $D_h^{(1,2)}$  возрастают по мере сближения корней  $y_1$  и  $y_2$ . Поэтому возникает естественный вопрос о наличии вырожденных корней дисперсионного уравнения (19).

Предположим, что поглощение слабое и положим вначале мнимые части  $\chi_0$  и  $\chi_h$  равными нулю.

Нетрудно получить, что при

$$\delta = -3/2 \delta_0$$

и

$$\Phi_h^2 = \Phi_c^2 - 3/4 \delta_0^2 \quad (61)$$

все три корня уравнения (19)

$$y_{1,2,3} = \delta_0 \quad (62)$$

Так как имеется в кристалле всегда поглощение, то его учет снижает вырождение, и в предположении слабого поглощения (см. (52))

находим

$$\begin{aligned} y_1 &= \delta_0 - i\delta_0 \alpha (\eta - i\frac{\alpha}{3}\eta^2), \\ y_2 &= \delta_0 - i\delta_0 \alpha (\eta^2 - i\frac{\alpha}{3}\eta), \\ y_3 &= \delta_0 - i\delta_0 \alpha (1 - i\frac{\alpha}{3}), \end{aligned} \quad (63)$$

где

$$\alpha = \left( \frac{\chi_{ei}}{\delta_0^2} \right)^{1/3} \quad (64)$$

В результате для амплитуд полей дифрагированных волн имеем:

$$D_h^{(1)} = -D_h^{(2)} \approx \frac{iS}{\eta(\eta-1)} \cdot \frac{\Phi_c^2}{\delta_0^2} \cdot \frac{E_0}{\alpha}, \quad (65)$$

а для волнового поля в кристалле находим:

$$D_h(z) = \frac{2S}{\eta(1-\eta)} \cdot \frac{\Phi_c^2}{\delta_0^2} \cdot \frac{E_0}{\alpha} e^{-z/L_0} \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{3}z}{L_0}\right), \quad (66)$$

где

$$L_0 = \frac{\lambda}{\pi \delta_0 \alpha} \quad (67)$$

(для простоты мы опустили в формулах (65), (66) члены пропорциональные  $\alpha^2$  в выражениях для корней (63)).

Как видно из формул (65)-(67) по мере уменьшения поглощения (уменьшения параметра  $\chi_{ei}$ , а тем самым и параметра  $\alpha$ ) амплитуды полей возрастают, и в принципе могут достигать очень больших значений, однако при этом согласно (67) растет и глубина, на которой формируется максимум поля дифрагированной вол-

ны.

Таким образом, лишь наличие поглощения препятствует формированию в кристалле пучка с направлением потока энергии в точности параллельным поверхности. Так, на рис. II представлена зависимость поля  $|D_h(z)|^2$  для случая Mo K $\alpha_1$  излучения при дифракции на монокристалле кремния, (220) - отражения с  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ . Этот случай наиболее подходит для демонстрации полученных выше результатов. На глубине порядка 900 Å в 450 раз превосходит  $|E_0|^2$ .

Для Cu K $\alpha_1$  излучения, когда поглощение представлено более сильно, переход к вырожденной точке не дает преимущества по сравнению с дифракцией на границе (см. рис. IO).

На рис. I2 представлены зависимости  $\mathcal{E}(\theta)$  для различных глубин выхода фотоэлектронов на границе геометрии Брегга-Лауэ и при  $\delta = -3/2 \delta_0$ , т.е. в окрестности вырожденной точки. Этот рисунок демонстрирует ожидаемые эффекты для соответствующих экспериментов.

В заключение отметим, что выше анализ велся лишь для совершенных кристаллов. Естественно, возникает вопрос, насколько нарушения в приповерхностных слоях (наличие аморфных слоев, шероховатостей поверхности) искажают описанную выше картину. Эти вопросы будут рассмотрены в последующих работах.

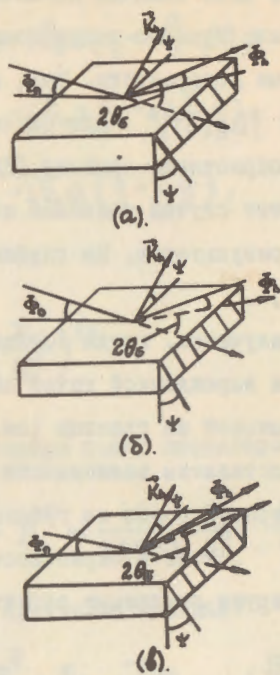


Рис. I

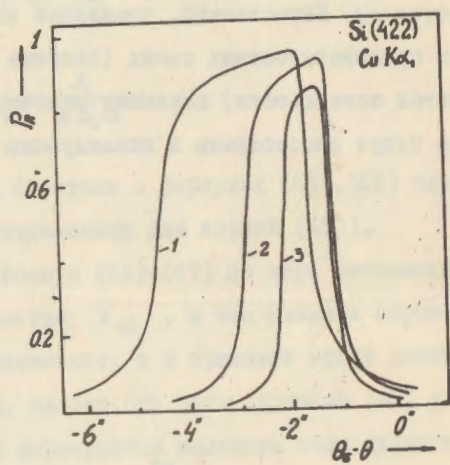


Рис. 2

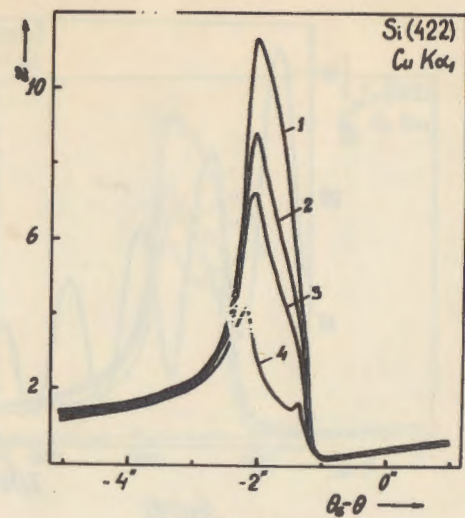


Рис. 3

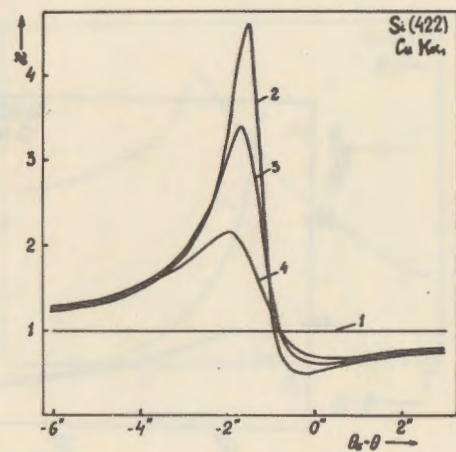


Рис. 4



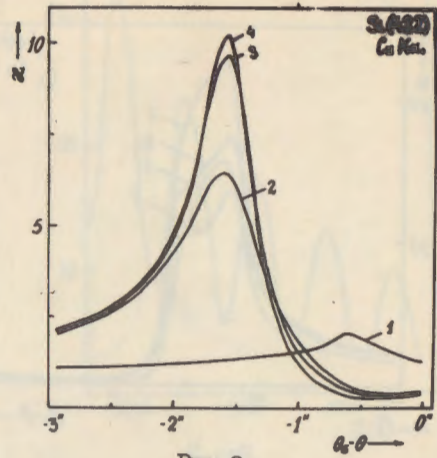


Рис. 9

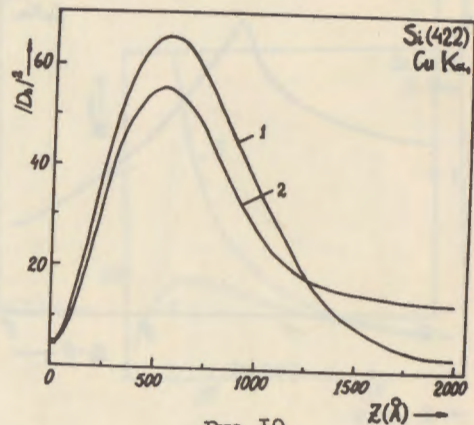


Рис. 10

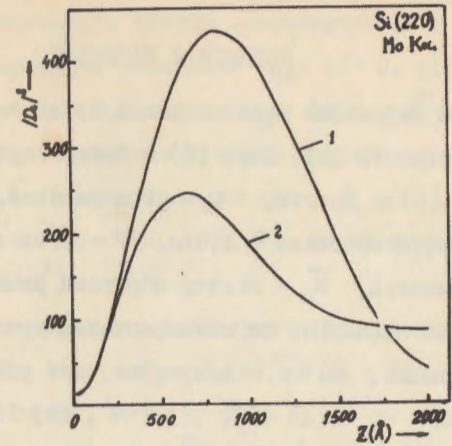


Рис. 11

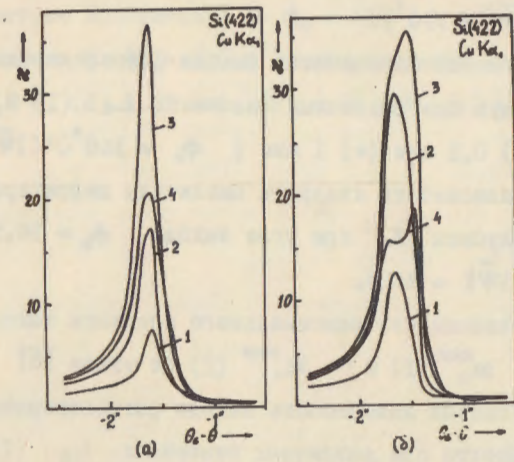


Рис. 12

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис.1 Схемы дифракции рентгеновских лучей в скользящих геометриях Брэгга (а), Лауэ (б) и Брегг-Лауэ (в).

$\theta_B$  - угол Брэгга,  $\varphi_0$  - угол падения,  $\phi_n$  - угол выхода дифрагированного пучка,  $\Psi$  - угол скоса отражающих плоскостей,  $\vec{K}_h$  - вектор обратной решетки.

Рис.2 Кривые отражения от монокристалла кремния Si ((422)-отражение,  $Cu K\alpha_1$ -излучение) для различных углов падения  $\phi_0 = (1) 165'$ , (2)  $250'$ , (3)  $300'$ ,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ .

Рис.3 Угловая зависимость выхода фотоэлектронов в геометрии Брэгга при различных значениях  $L_e: (1) 0$ , (2)  $0,1$  мкм, (3)  $0,2$  мкм, (4)  $1$  мкм ( $\phi_0 = 300'$ ,  $L_{ex} \approx 0,2$  мкм,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.4 Угловая зависимость выхода фотоэлектронов в геометрии Лауэ при различных значениях  $L_e: (1) 0$ , (2)  $0,1$  мкм, (3)  $0,2$  мкм (4)  $1$  мкм ( $\phi_0 = 360'$ ,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.5 Зависимость квадрата амплитуды дифрагированной волны от глубины  $Z$  при угле выхода  $\phi_n = 16,5'$  ( $\phi_0 = 320'$ ,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.6 Зависимость максимального значения выхода фотоэлектронов  $\alpha_0^{max} (1)$  и  $\alpha_0^{max} (2)$  от углов  $|\delta|$ .

Рис.7 Угловая зависимость выхода фотоэлектронов в геометрии Брэгга при различных значениях  $L_e: (1) 0$ , (2)  $0,01$  мкм, (3)  $0,05$  мкм, (4)  $0,1$  мкм ( $\phi_0 = 320'$ ,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.8 Угловая зависимость выхода фотоэлектронов в геометрии Лауэ при  $L_e = 0$  ( $\phi_0 = 340'$ ,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.9 Угловая зависимость выхода фотоэлектронов в геометрии Лауэ при различных значениях  $L_e: (1) 0$ , (2)  $0,05$  мкм, (3)  $0,1$  мкм, (4)  $0,2$  мкм ( $\phi_0 = 340'$ ,  $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.10 Зависимость квадрата амплитуды дифрагированной волны от глубины  $Z$  при углах выхода  $\phi_n = (1) 13,34'$ , (2)  $13,21'$  и  $\phi_0 = 330'$ ,  $326,9'$  соответственно ( $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

Рис.11 Зависимость квадрата амплитуды дифрагированной волны от глубины  $Z$  при  $\phi_n = 6,068'$ ,  $\phi_0 = 328,6'$  (1) (вырожденная точка) и  $\phi_n = \phi_c = 6,113'$ ,  $\phi_0 = |\tilde{\Psi}|$  (2) (граничная точка); ( $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ,  $Mo K\alpha_1$ -излучение, (220) - отражение).

Рис.12 Угловая зависимость выхода фотоэлектронов ( $\alpha$ ) на границе геометрии Брэгга-Лауэ ( $\phi_0 = 330'$ ) и (б) в вырожденной точке ( $\phi_0 = 326,9'$ ) при различных значениях  $L_e: (1) 0$ , (2)  $0,01$  мкм, (3)  $0,05$  мкм, (4)  $0,2$  мкм ( $|\tilde{\Psi}| = 330'$ ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. М.: Наука, 1986, с.92.
2. Пинскер Э.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982, с.390.
3. Kishino S. Anomalous Transmission in Bragg-Case Diffraction of X-Rays. J.Phys.Soc. Japan, 1971, vol.31, p.1168.  
Kishino S., Noda A., Kohra K. Anomalous Enhancement of Transmitted Intensity in Asymmetric Diffraction of X-Rays from a Single Crystal. J.Phys.Soc.Japan, 1972, vol.33, p.158.
4. Bedynska T. X-Ray Diffraction in the Range of Two Diffracted Beams for Extremely Asymmetric Case. Phys. Stat. Sol. (a), 1974, vol.25, p.405.
5. Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Мухамеджанов Э.Х., Ле Конг Куи. Переползание брэгговского пика на границе Брэгг-Лауэ-геометрии. ДАН СССР, 1987, т.295, № 4, с.839.
6. Afanas'ev A.M., Afanas'ev S.M., Aleksandrov P.A. et al. Grazing Bragg-Laue Diffraction for Studying the Crystal Structure of Thin Films. Phys.Stat. Sol. (a), 1984, vol.86, K1.

7. Афанасьев С.М. Анализ кристаллической структуры тонких пленок с помощью дифракции рентгеновских лучей в скользящей Брэгг-Лауэ геометрии. ФТТ, 1986, т.28, № 1, с.3.
8. Афанасьев А.М., Афанасьев С.М., Александров П.А. и др. Трехкристальная рентгеновская дифрактометрия в скользящей Брэгг-Лауэ геометрии с перпендикулярной разверткой. ФТТ, 1985, т.27, № 8, с.2274.
9. Афанасьев А.М., Афанасьев С.М., Есаян А.В., Хашимов Ф.Р. Поверхностный брэгговский пик при дифракции рентгеновских лучей в скользящей Брэгг-Лауэ геометрии. Поверхность, 1988, т.12
10. Takahashi T., Kikuta S. Variation of the Yield of Photoelectrons Emitted from a Silicon Single Crystal under the Asymmetric Diffraction Condition of X-Rays. J.Phys. Soc. Japan, 1979, vol.46, p.1608.
11. Круглов М.В., Созонтов Е.А., Соломин И.К. Фотоэмиссия в сильно асимметричном случае динамической дифракции рентгеновских лучей. ФТТ, 1985, т.27, в.9, с.2732.
12. Afanas'ev A.M., Imamov R.M., Mukhamedzhanov E.Kh., Peregudov V.N. Fluorescence Accompanying X-Ray Diffraction in the Grazing Incidence Bragg-Laue Geometry. Phys. Stat. Sol. (a), 1986, vol.98, p.367.

Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Мухамеджанов Э.Х. и др. Выход флуоресцентного излучения при асимметричной брэгговской дифракции рентгеновских лучей. ДАН СССР, 1986, т.289, № 2, с.341.

13. Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Мухамеджанов Э.Х., Ле Конг Куи.  
Неупругое рассеяние рентгеновских лучей при асимметричной  
брегговской дифракции. ДАН СССР, 1986, т.288, № 4, с.847.
14. Afanas'ev A.M., Imamov R.M., Mukhamedzhanov E.Kh., Naslu-  
khanyan A.A. Coherent Compton Effect in the Grazing  
Bragg-Laue Geometry. Phys.Stat. Sol.(a), 1987, vol.104,  
p.K73.
15. Афанасьев А.М., Кон В.Т. Внешний фотоэффект при дифракции  
рентгеновских лучей в кристаллах с нарушенным поверхностным  
слоем. ЖЭТФ, 1978, т.74, с.300.
16. Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Маслов А.В., Пашаев Э.М. Фото-  
эффект в условиях Лауэ-дифракции рентгеновских лучей.  
ДАН СССР, 1983, т.273, № 3, с.609.

Рукопись поступила 14 октября 1988 г.

А.М.АФАНАСЬЕВ, А.В.ЕСАЯН

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ И СТРУКТУРА ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ  
В КРИСТАЛЛЕ НА ГРАНИЦЕ БРЭГГ-ЛАУЭ ГЕОМЕТРИИ

Редактор Л.П.Мукаян  
Технический редактор А.С.Абрамян

---

Подписано в печать 29/ХП-88г. ВФ-03455 Формат 60x84/16  
Офсетная печать. Уч.изд.л. I,5 Тираж 299 экз. Ц.22к.  
Зак.тип.№ 669 Индекс 3624

---

Отпечатано в Ереванском физическом институте  
Ереван 36, ул.Братьев Алиханян, 2

the address for requests:  
Information Department  
Yerevan Physics Institute  
Markaryan St., 2  
Yerevan, 375036  
Armenia, USSR