

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ

PACS numbers: 61.05.cc, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.J-, 68.49.Uv

Динамическая теория скользящего диффузного рассеяния рентгеновских лучей в кристалле с приповерхностными дефектами

А. Ю. Гаевский, И. Э. Голентус, В. Б. Молодкин

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

Скользящая дифракция (grazing incidence diffraction—GID) рентгеновских лучей, падающих под малыми углами (сравнимых с углом полного внешнего отражения), является мощным инструментом диагностики дефектов в приповерхностных слоях и в тонких плёнках. В данной статье разработана динамическая модель диффузного рассеяния рентгеновского излучения в кристалле с приповерхностными дефектами типа центров дилатации. Основная информация об искажениях кристаллической решётки вблизи поверхности заключена в диффузных компонентах рассеяния, сосредоточенных в окрестности когерентных пиков зеркально отражённой и зеркально дифрагированной волн. Для вычисления амплитуд диффузного рассеяния предложен новый подход, связанный с приближением искажённой волны (distorted wave Born approximation—DWBA). Фурье-компоненты атомных смещений выражены с помощью точных формул континуального приближения, которые получены с учётом сил изображения, обусловленных влиянием границы раздела. Рассчитаны карты интенсивности скользящего диффузного рассеяния на приповерхностных дефектах, хаотически расположенных в плоском слое. Для разных схем сканирования определены условия регистрации преимущественно диффузной составляющей в скользящей дифракции.

Ковзна дифракція (grazing incidence diffraction—GID) Рентгенових променів, що падають під малими кутами (порівняними з кутом повного зовнішнього відбивання), є потужним інструментом діагностики дефектів у приповерхневих шарах і в тонких плівках. У даній статті розроблено динамічну модель дифузного розсіяння Рентгенового випромінювання у кристалі з приповерхневими дефектами типу центрів дилатації. Основна інформація про викривлення кристалічної ґратниці поблизу поверхні міститься в дифузних компонентах розсіяння, зосереджених навколо коге-

рентних піків дзеркально відбитої і дзеркально дифрагованої хвиль. Для обчислення амплітуд дифузного розсіяння запропоновано новий підхід, пов'язаний з наближенням спотвореної хвилі (distorted wave Born approximation—DWBA). Фур'є-компоненти атомних зміщень виражено за допомогою точних формул континуального наближення, яких одержано з урахуванням сил зображення, обумовлених межею поділу. Розраховано карти розподілу інтенсивності ковзного дифузного розсіяння на приповерхневих дефектах, хаотично розташованих у пласкому шарі. Для різних схем сканування визначено умови реєстрації переважно дифузної складової в ковзній дифракції.

Diffraction of X-rays in conditions of total external reflection (grazing-incidence diffraction—GID) is a powerful method for defects' diagnostics in subsurface layers and thin films. In a given paper, the dynamical model of diffuse X-ray scattering in crystals, which contain subsurface dilatation-centre-type defects, is developed. Diffuse scattering near the specular reflected and specular diffracted coherent peaks provides the main information about subsurface lattice distortions. New approach developed for calculation of the diffuse scattering amplitude is based on the distorted wave Born approximation (DWBA). Fourier components of lattice distortions are expressed by exact formulas within the scope of the continuous approximation, which takes into account the image forces caused by surface boundary. The intensity maps calculated for diffuse grazing waves scattered by subsurface defects randomly distributed in a flat layer are presented. For different scanning schemes, the conditions of predominantly diffuse component registration in grazing diffraction are defined.

Ключевые слова: рентгеновские лучи, скользкая дифракция, динамическая теория, когерентное и диффузное рассеяние, приближение искажённой волны, центры дилатации, силы изображения.

(Получено 16 мая 2013 г.; окончат. вариант — 24 марта 2014 г.)

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Точечные дефекты, в роли которых выступают атомы замещения или внедрения, создают в кристалле поля статических смещений, которые невелики относительно постоянной решетки. Они могут быть описаны в приближении флуктуационных волн концентрации, применяемом в кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей в неидеальных твердых растворах [1]. Поля смещений в кинематическом приближении приводят к двум основным эффектам: диффузному рассеянию, сосредоточенному вблизи брэгговских пиков; к ослаблению интенсивности когерентного рассеяния, выражаемому статическим фактором Дебая–Валлера [1, 2]. С увеличением концентрации либо мощности дефектов этот фактор растет. Причем при кластеризации точечных дефектов он увеличивается в несколько раз [4] по сравнению со случаем однородного распределе-

ния дефектов той же концентрации, для которого справедливы общепринятые оценки фактора Дебая–Валлера [1, 3]. Возрастание фактора Дебая–Валлера приводит к эффективному уменьшению интенсивности брэгговского рассеяния и увеличению относительного вклада диффузной составляющей.

Приближение флуктуационных волн, справедливое при незначительных отклонениях концентрации компонентов твердого раствора от средних значений, не вполне применимо для протяженных дефектов, например включений новой фазы, когерентно связанной с матрицей, квантовых точек и т.д. Для таких дефектов поля атомных смещений, приводящие к диффузному рассеянию, определяются обычно с помощью различных моделей, базирующихся на уравнениях упругого равновесия. Действительно, для протяженных когерентных дефектов в хорошем приближении можно считать, что размеры областей смещений значительно превышают постоянную решетки. Смещения атомов из их положений в идеальной решетке очень медленно меняются от атома к атому. И при вычислении полей смещений можно пользоваться континуальной теорией. Наибольший вклад в диффузное рассеяние дают искаженные области, захватывающие значительные объемы кристалла, т.е. удаленные от центров дефектов. Поэтому важен выбор модельных полей смещений с правильной асимптотикой. Обычным в теориях диффузного рассеяния (как кинематической, так и динамической) является использование полей смещения, меняющихся на больших расстояниях как $\sim r^{-2}$ [1, 5]. Это отвечает дефектам кулоновского типа, например, центрам дилатации. Это выражение для смещений, которое справедливо для изотропных дефектов, расположенных в глубине кристалла, в случае приповерхностных дефектов необходимо дополнять слагаемыми, которые связаны с так называемыми силами изображения. Эти слагаемые сложным образом зависят от расстояний точки наблюдения до дефекта r и до поверхности z . Если рассматривать дифракцию излучения в объеме кристалла, вкладом сил изображения можно пренебречь, как и делается в традиционной теории [1–3]. Однако этот вклад необходимо последовательно учитывать, если речь идет об исследовании дифракционными методами приповерхностных слоев кристалла.

В данной работе анализируется диффузное рассеяние рентгеновских лучей, направленных под малыми углами к поверхности кристалла — меньшими угла полного внешнего отражения (ПВО). При таких углах скольжения (порядка нескольких десятков угловых минут) имеет место зеркальное отражение с коэффициентом отражения близким к единице. А при определенной ориентации волнового вектора в плоскости поверхности кристалла возникает дифракционное рассеяние от атомных плоскостей, перпендикулярных поверхности кристалла, которое приводит к появлению над

поверхностью зеркально дифрагированной волны (ЗДВ) [6, 7]. Такой тип дифракции получил название скользящей рентгеновской дифракции (grazing incidence diffraction—GID) [8]. При наличии искажений кристаллической структуры в области ЗДВ появляются диффузно дифрагировавшие волны (ДДВ). Последние содержат прямую информацию о кристаллической структуре искаженных приповерхностных слоев толщиной от десятка до сотен нанометров. Если скользящая брэгговская дифракция, при которой измеряется интенсивность ЗДВ, позволяет оценивать усредненные параметры (изменение постоянной решетки по глубине кристалла, толщину пленок на поверхности и др. [7–9]). То исследование диффузной скользящей дифракции, т.е. измерение ДДВ, может дать более детальную информацию о приповерхностных дефектах и вызываемых ими неоднородных деформациях кристаллической решетки, об искажениях интерфейсов в многослойных структурах и проч.

Следует отметить, что попытки построения теоретических моделей скользящей дифракции в дефектных кристаллах предпринимались ранее (например, [9–11]), однако последовательная динамическая теория пока отсутствует. В данной работе разработан метод расчета диффузного рассеяния при скользящей рентгеновской дифракции в кристалле с дефектами типа центров дилатации. Для оценки искажений решетки использованы аналитические выражения для полей смещений с учетом влияния поверхности, которые получены в точно решаемой модели изотропных дефектов в полуограниченном пространстве [12, 13].

2. ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ СКОЛЬЗЯЩЕГО ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ

Рассмотрим брэгговскую дифракцию на кристаллической структуре вещества, рассматривая, так называемую, некомпланарную схему дифракции, в которой вектор дифракции \mathbf{H} параллелен поверхности кристалла (рис. 1) [6, 7]. Оси прямоугольной системы координат выберем так, чтобы ось Oz была перпендикулярна поверхности кристалла и направлена наружу, а ось Oy совпадала с направлением вектора дифракции \mathbf{H} .

Диффузное рассеяние возникает за счет отклонения $\delta\chi(\mathbf{r})$ восприимчивости кристалла с дефектами от восприимчивости усредненной решетки $\langle\chi(\mathbf{r})\rangle$, которая в нашем случае есть не что иное, как восприимчивость $\chi_0(\mathbf{r})$ кристалла без дефектов, ограниченного плоской поверхностью $z = 0$. Амплитуду диффузного рассеяния можно вычислить, воспользовавшись теоремой обратимости [14, 15]

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}} = (K^2/4\pi) \int d\mathbf{r} E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \delta\chi(\mathbf{r}) E_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

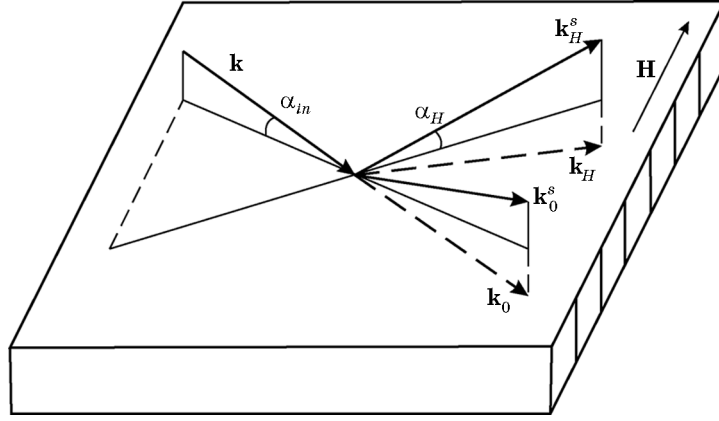


Рис. 1. Падающая волна с в.в. \mathbf{k} порождает прошедшую (\mathbf{k}_0), зеркально отраженную (\mathbf{k}_0^s), дифрагированную (\mathbf{k}_H) и зеркально дифрагированную (\mathbf{k}_H^s) волны. При точном брэгговском отражении угол скольжения для зеркально дифрагированной волны $\alpha_H = \alpha_{in}$.

Здесь \mathbf{k} , \mathbf{p} — волновые вектора (в.в.), отвечающие направлению изначально падающей на кристалл плоской волны и плоской волны единичной амплитуды, падающей на кристалл из той точки, в которой снимается диффузное рассеяние, соответственно. $E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $E_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ — поля, которые возникают в пространстве в результате падения на бездефектный кристалл соответствующих плоских волн. Выражения для этих полей даются стандартной динамической теорией скользющего рассеяния на идеальном кристалле [6, 7]:

$$E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{p}} \begin{cases} e^{-ik_z z} + r_0(\mathbf{k})e^{ik_z z}, & z > 0 \\ t_{01}(\mathbf{k})e^{-iv_k^{(1)}z} + t_{02}(\mathbf{k})e^{-iv_k^{(2)}z}, & z < 0 \end{cases} + E e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{H})\mathbf{p}} \begin{cases} r_H(\mathbf{k})e^{ik_z^H z}, & z > 0 \\ t_{H1}(\mathbf{k})e^{-iv_k^{(1)}z} + t_{H2}(\mathbf{k})e^{-iv_k^{(2)}z}, & z < 0, \end{cases} \quad (2)$$

$$E_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}_{\parallel}\mathbf{p}} \begin{cases} e^{-ip_z z} + r_0(\mathbf{p})e^{ip_z z}, & z > 0 \\ t_{01}(\mathbf{p})e^{-iv_p^{(1)}z} + t_{02}(\mathbf{p})e^{-iv_p^{(2)}z}, & z < 0 \end{cases} + e^{i(\mathbf{p}_{\parallel} - \eta_0 \mathbf{H})\mathbf{p}} \begin{cases} r_H(\mathbf{p})e^{ip_z^H z}, & z > 0 \\ t_{H1}(\mathbf{p})e^{-iv_p^{(1)}z} + t_{H2}(\mathbf{p})e^{-iv_p^{(2)}z}, & z < 0, \end{cases} \quad (3)$$

где проекции волновых векторов принимают значения

$$k_z \approx k\alpha_{in}, \quad k_z^H = k\sqrt{\alpha_{in}^2 - \varphi_{in}}, \quad \mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k} + k_z \mathbf{n},$$

$$\begin{aligned}
v_{\mathbf{k}}^{(1,2)} &= k\sqrt{\alpha_{in}^2 + \chi_0 + w_{\mathbf{k}}^{(1,2)}}, & w_{\mathbf{k}}^{(1,2)} &= \frac{\varphi_{in}}{2} \pm \sqrt{\frac{\varphi_{in}^2}{4} + \chi_H \chi_{\bar{H}}}, \\
p_z &\approx k\alpha_{ex}, & p_z^H &= k\sqrt{\alpha_{ex}^2 - \varphi_{ex}}, & \mathbf{p}_{\parallel} &= \mathbf{p} + p_z \mathbf{n}, \\
v_{\mathbf{p}}^{(1,2)} &= k\sqrt{\alpha_{ex}^2 + \chi_0 + w_{\mathbf{p}}^{(1,2)}}, & w_{\mathbf{p}}^{(1,2)} &= \frac{\varphi_{ex}}{2} \pm \sqrt{\frac{\varphi_{ex}^2}{4} + \chi_H \chi_{\bar{H}}},
\end{aligned}$$

где введены параметры отклонения от точного брэгговского условия для волн \mathbf{k} и \mathbf{p} : $\varphi_{in} = -2\Delta\theta_{in} \sin 2\theta_B$, $\varphi_{ex} = -2\Delta\theta_{ex} \sin 2\theta_B$ соответственно; \mathbf{n} — вектор внешней нормали к поверхности кристалла. Коэффициент η_G в экспоненте $e^{i(\mathbf{p}_{\parallel} - \eta_G \mathbf{H})\rho}$ (3) равен 1 при сканировании в окрестности стержня $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ и равен -1 при сканировании в окрестности $\mathbf{G} = \mathbf{H}$.

Коэффициенты прохождения и отражения в (2), (3) имеют вид

$$\begin{aligned}
t_{01,02}(\mathbf{g}) &= \frac{\pm 2g_z (v_{\mathbf{g}}^{(2,1)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(2,1)}}{(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(2)} - (v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(1)}}, & (4) \\
t_{H1,H2}(\mathbf{g}) &= t_{01,02}(\mathbf{g}) w_{\mathbf{g}}^{(1,2)} / \chi_{-H}, \\
r_0(\mathbf{g}) &= -\frac{(v_{\mathbf{g}}^{(1)} - g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(2)} - (v_{\mathbf{g}}^{(2)} - g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(1)}}{(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(2)} - (v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(1)}}, \\
r_H(\mathbf{p}) &= \frac{2\chi_H g_z (v_{\mathbf{g}}^{(1)} - v_{\mathbf{g}}^{(2)})}{(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(2)} - (v_{\mathbf{g}}^{(2)} + g_z)(v_{\mathbf{g}}^{(1)} + g_z^H) w_{\mathbf{g}}^{(1)}}, \\
\mathbf{g} &= \mathbf{k}, \mathbf{p}.
\end{aligned}$$

Как будет видно далее, выражения для коэффициентов отражения в данном рассмотрении нам не пригодятся. Формулы (2), (3) составляют основу борновского приближения искаженной волны (DWBA—distorted wave Born approximation) [8, 16].

Заметим, что в случае дефектов с положительной дилатацией, на поверхности кристалла будут образовываться горбики, а в случае отрицательной дилатации — впадины. Объем каждой такой неровности сравним с объемом самого дефекта (см. формулу (20)), интегралом по которому можно пренебречь по сравнению с вкладом в интеграл дальних полей смещений в кристалле, вызванных наличием дефекта. Поэтому интеграл в (1) можно рассматривать как интеграл только по полупространству $z < 0$.

Если подставить выражения (2) и (3) в (1), получим формулы для амплитуд диффузного рассеяния:

в окрестности зеркального пика

$$\begin{aligned}
 f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}}(\mathbf{0}) = & (k^2 E/4\pi) \int_{-\infty}^0 dz \delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}^0 + \mathbf{H}, z) \left[t_{01}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p})e^{iq_{11}z} + t_{01}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p})e^{iq_{21}z} + \right. \\
 & + t_{02}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p})e^{iq_{12}z} + t_{02}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p})e^{iq_{22}z} \left. \right] + \delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}^0 - \mathbf{H}, z) \left[t_{H1}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p})e^{iq_{11}z} + \right. \\
 & + t_{H1}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p})e^{iq_{21}z} + t_{H2}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p})e^{iq_{12}z} + t_{H2}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p})e^{iq_{22}z} \left. \right]; \quad (5)
 \end{aligned}$$

в окрестности пика, отвечающего зеркально дифрагированной волне,

$$\begin{aligned}
 f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}}(\mathbf{H}) = & (k^2 E/4\pi) \int_{-\infty}^0 dz \delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}^H + \mathbf{H}, z) \left[t_{01}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p})e^{iq_{11}z} + t_{01}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p})e^{iq_{21}z} + \right. \\
 & + t_{02}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p})e^{iq_{12}z} + t_{02}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p})e^{iq_{22}z} \left. \right] + \delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}^H - \mathbf{H}, z) \left[t_{H1}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p})e^{iq_{11}z} + \right. \\
 & + t_{H1}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p})e^{iq_{21}z} + t_{H2}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p})e^{iq_{12}z} + t_{H2}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p})e^{iq_{22}z} \left. \right]. \quad (6)
 \end{aligned}$$

В (5), (6) введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 q_{ij} = & -v_{\mathbf{p}}^{(i)} - v_{\mathbf{k}}^{(j)}, \quad (i, j = 1, 2), \\
 \delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = & \int \delta\chi(\rho, z) e^{-iq_{\parallel}\rho} d\rho,
 \end{aligned}$$

а также выделены малые векторы, лежащие вблизи узла обратной решетки $\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}$

$$\mathbf{q}_{\parallel}^G = -\mathbf{p}_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{G}. \quad (7)$$

В выражениях (5), (6) мы пренебрегли слагаемыми, содержащими $\delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}^G, z)$, поскольку, как мы увидим далее, эти слагаемые пропорциональны \mathbf{q}_{\parallel}^G (см. (21)), в то время как другие члены пропорциональны значительно большим векторам $\sim H$.

Займемся вычислением векторов (7). При выполнении точного брэгговского условия для волны с в.в. \mathbf{g} , падающей на поверхность кристалла под скользющим углом α , половина угла между векторами \mathbf{g}_{\parallel} и $\mathbf{g}_{\parallel} + \mathbf{H}$ равна

$$\theta_B(\alpha) = \theta_B + (1/2)\alpha^2 \operatorname{tg} \theta_B, \quad (8)$$

где $\theta_B = \theta_B(\mathbf{0})$ — половина угла между теми же векторами в условиях точного отражения, но при нулевом угле падения (рис. 2). Выражение (8) легко следует из условий

$$2g_{\parallel} \sin \theta_B(\alpha) = 2K \sin \theta_B = H, \quad g_{\parallel} = K \cos \alpha.$$

Таким образом, мы видим, что при увеличении угла падения для

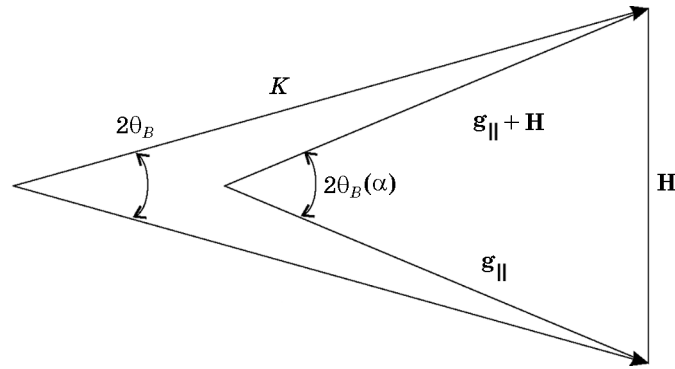


Рис. 2. Геометрия расположения векторов, удовлетворяющих точному брэгговскому условию при углах скольжения, равных 0 и α .

удовлетворения точному брэгговскому условию необходимо дополнительное вращение луча в плоскости xy , которым нельзя пренебрегать. Поскольку иначе уже при углах падения, сравнимых с критическим, происходит отстройка от точного брэгговского условия на величину порядка χ_0 . Угол отстройки $\Delta\theta$ будет нами отсчитываться именно от приведенного выше значения $\theta_B(\alpha)$.

При фиксированном угле падения α_{in} и отстройке $\Delta\theta_{in}$ положение в.в. ЗДВ также фиксировано. Интенсивность диффузного рассеяния мы будем определять в координатах $(\Delta\theta', \alpha_{ex})$, где $\Delta\theta'$ — угол расхождения в горизонтальной плоскости между направлением наблюдения и направлением распространения ЗДВ (т.е. угол между векторами $-\mathbf{p}_{||}$ и $\mathbf{k}_{||} + \mathbf{H}$).

Пусть падающий пучок попадает в точное брэгговское положение. При повороте в.в. этого пучка на угол $\Delta\theta_{in}$ в горизонтальной плоскости (рис. 3, слева), в.в. ЗДВ поворачивается на угол, равный

$$\Delta\theta_H = -\Delta\theta_{in} \cos 2\theta_B, \quad (9)$$

при этом длина проекции этого в.в. также претерпевает некоторое изменение, т.е. ЗДВ при заданных α_{in} , $\Delta\theta_{in}$ в проекции на плоскость xy будет распространяться под углом $\theta_B(\alpha_{in}) - \Delta\theta_{in} \cos 2\theta_B$ к оси Ox . Угол между вектором $-\mathbf{p}_{||}$ и осью Ox составляет $\theta_B(\alpha_{ex}) + \Delta\theta_{ex}$. Отсюда мы можем найти связь между отстройкой $\Delta\theta_{ex}$ и угловым расхождением $\Delta\theta'$ (рис. 3, справа):

$$\theta_B(\alpha_{in}) - \Delta\theta_{in} \cos 2\theta_B + \Delta\theta' = \theta_B(\alpha_{ex}) + \Delta\theta_{ex}$$

или

$$\Delta\theta_{ex} = \Delta\theta' + (1/2)(\alpha_{in}^2 - \alpha_{ex}^2) \operatorname{tg} \theta_B - \Delta\theta_{in} \cos 2\theta_B. \quad (10)$$

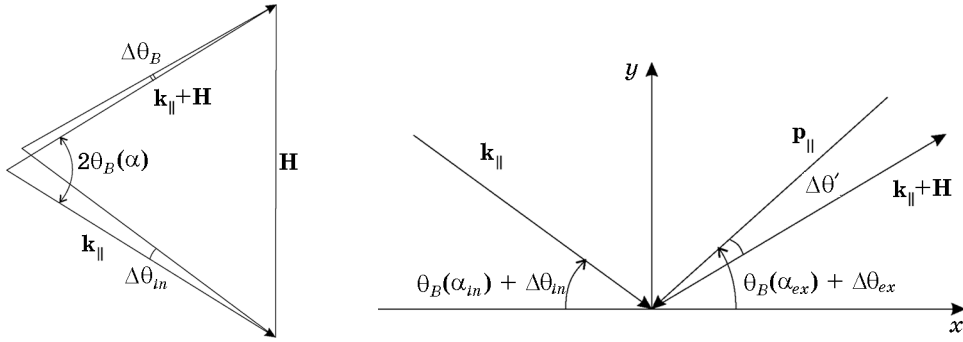


Рис. 3. Слева — изображение угла отстройки $\Delta\theta_{in}$ падающей волны и связанного с ней отклонения направления распространения ЗДВ $\Delta\theta_H$. Справа — изображение относительного расположения векторов падающей волны, ЗДВ и направления наблюдения.

Используя приведенный рисунок, получаем

$$\begin{aligned} -p_x - k_x &= K \cos \alpha_{ex} \cos(\theta_B(\alpha_{ex}) + \Delta\theta_{ex}) - K \cos \alpha_{in} \cos(\theta_B(\alpha_{in}) + \Delta\theta_{in}) \approx \\ &\approx K(\alpha_{in}^2 - \alpha_{ex}^2)/(2 \cos \theta_B) + K \sin \theta_B (\Delta\theta_{in} - \Delta\theta_{ex}). \end{aligned}$$

Аналогично для y -компоненты

$$\begin{aligned} -p_y - k_y - H &= K \cos \alpha_{ex} \sin(\theta_B(\alpha_{ex}) + \Delta\theta_{ex}) + \\ &+ K \cos \alpha_{in} \sin(\theta_B(\alpha_{in}) + \Delta\theta_{in}) - 2K \sin \theta_B \approx K \cos \theta_B (\Delta\theta_{in} + \Delta\theta_{ex}). \end{aligned}$$

Выполняя такие же вычисления для малых векторов $\mathbf{q}_{||}^0$ в окрестности нулевого узла, запишем конечный результат

$$\mathbf{q}_{||}^G = \frac{1}{2} K \left(\frac{\alpha_{in}^2 - \alpha_{ex}^2}{\cos \theta_B} + \frac{\varphi_{ex} - \varphi_{in}}{2 \cos \theta_B}, \frac{\eta_G \varphi_{ex} - \varphi_{in}}{2 \sin \theta_B} \right), \quad \mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}, \quad (11)$$

где параметр отклонения φ_{ex} является функцией $(\Delta\theta', \alpha_{ex})$ согласно (10).

3. ФЛУКТУАЦИИ ВОСПРИИМЧИВОСТИ ДЛЯ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ДЕФЕКТОВ

Обратимся к выводу формул для фурье-компонент флуктуаций восприимчивости $\delta\chi(\mathbf{q}_{||}, z)$. Пусть микродефект создает в кристалле векторное поле смещений $\mathbf{u}(\rho, z)$. Будем считать, что при введении в кристалл дефекта изменения восприимчивости связаны лишь с этими смещениями $\mathbf{u}(\rho, z)$. Тогда результирующую восприимчивость

$$\chi(\rho, z) = \chi_0(\rho, z) + \delta\chi(\rho, z)$$

можно выразить через восприимчивость кристалла без дефекта $\chi_0(\rho, z)$, если выполнить замену координат материальных точек [17]:

$$\chi(\rho, z) = \chi_0(\rho - \mathbf{u}_{\parallel}(\rho, z), z - u_z(\rho, z)). \quad (12)$$

Выполним фурье-преобразование функции (12) по координатам в горизонтальной плоскости:

$$\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \int \chi_0(\rho - \mathbf{u}_{\parallel}(\rho, z), z - u_z(\rho, z)) e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}\rho} d\rho. \quad (13)$$

После замены переменной $\rho - \mathbf{u}_{\parallel}(\rho, z) = \rho'$ и разложения экспоненты в ряд получим

$$\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \int (1 - \nabla_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel})(1 - \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel}) \chi_0(\rho', z - u_z) e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}\rho'} d\rho'. \quad (14)$$

В это подынтегральное выражение входят малые члены:

$$\nabla_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel} = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \cong \frac{u}{l}, \quad |\mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel}| \cong \frac{u}{a},$$

где l — размер области искажений, вызванных дефектом, a — период кристаллической решетки. Будем считать, что искажения плавные, и область искажений много больше кристаллической ячейки $l \gg a$. Тогда производными от смещений в (14) можно пренебречь, а также можно считать, что $\mathbf{u}(\rho', z) = \mathbf{u}(\rho, z)$. Перейдем в (14) к фурье-компонентам $\chi_0(\mathbf{q}_{\parallel}, z)$

$$\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \int (1 - \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel}) \sum_{\mathbf{h}_{\parallel}} \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z - u_z(\rho', z)) e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}\rho' + i\mathbf{h}_{\parallel}\rho'} d\rho' \quad (15)$$

и представим восприимчивость под знаком интеграла в виде:

$$\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z - u_z(\rho', z)) \approx \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) - \frac{\partial \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z)}{\partial z} u_z(\rho', z),$$

В результате получим

$$\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) - \sum_{\mathbf{h}_{\parallel}} \left[i\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{h}_{\parallel}, z) + \frac{\partial \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z)}{\partial z} u_z(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{h}_{\parallel}, z) \right]. \quad (16)$$

Формула (16) допускает обобщение на случай множества дефектов в предположении линейной суперпозиции смещений, вызванных каждым дефектом. Допустим, что дефекты могут располагаться в

узлах некоторой сетки, и числа заполнения этих узлов дефектами обозначим как c_s (c_s принимает значения либо 0, либо 1). Тогда суммарное поле смещений равно

$$\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}, z) = \sum_s c_s \left(\mathbf{u}_{\parallel}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s, z - z_s) + \mathbf{e}_z u_z(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s, z - z_s) \right),$$

где $\boldsymbol{\rho}_s, z_s$ — координаты узла. Для флуктуации восприимчивости получим

$$\begin{aligned} \delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = & -\sum_s c_s \sum_{\mathbf{h}_{\parallel}} e^{i(\mathbf{h}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel})\boldsymbol{\rho}_s} \left[i\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{h}_{\parallel}, z - z_s) + \right. \\ & \left. + \frac{\partial\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z)}{\partial z} u_z(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{h}_{\parallel}, z - z_s) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Таким образом, получено выражение для фурье-компонент флуктуаций восприимчивости через восприимчивость идеального кристалла и фурье-компоненты поля смещений \mathbf{u}_{\parallel} и u_z . Поскольку все дефекты лежат на одной глубине, далее для краткости будем обозначать $u(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s, z - z_s)$ как $u(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s, z)$.

4. ПОЛЯ УПРУГИХ СМЕЩЕНИЙ С УЧЕТОМ СИЛ ЗЕРКАЛЬНОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ

Зададимся конкретным типом дефектов, а именно, дефектами в виде центров дилатации. Расчет в континуальном приближении дает следующие выражения для полей смещений [12, 13]

$$\frac{4\pi}{V_0} \mathbf{u}_{\parallel}(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{\boldsymbol{\rho}}{R^3} + \frac{\boldsymbol{\rho}}{\varepsilon \bar{R}^3} - \frac{6\rho z(z + z_s)}{\bar{R}^5}, \quad (18)$$

$$\frac{4\pi}{V_0} u_z(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{z - z_s}{R^3} + \frac{2z}{\bar{R}^3} - \frac{z + z_s}{\varepsilon \bar{R}^3} - \frac{6z(z + z_s)^2}{\bar{R}^5}, \quad (19)$$

где V_0 — изменение объема, связанное с дефектом, $R = \sqrt{\rho^2 + (z - z_s)^2}$, $\bar{R} = \sqrt{\rho^2 + (z + z_s)^2}$, $\varepsilon = 1/(3 - 4\nu)$ (ν — коэффициент Пуассона).

Из (18) для смещений точек поверхности $z = 0$ следует выражение

$$u_z(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{V_0(1 - \nu)z_s}{\pi(\rho^2 + z_s^2)^{3/2}}.$$

Нетрудно вычислить, что объем горбика или впадины (в зависимости от знака V_0) на поверхности равен

$$\Delta V = \int_0^{+\infty} u_z(\rho) 2\pi\rho d\rho = 2(1-\nu)V_0. \quad (20)$$

В приложении А показано, что для дефектов данного типа в выражении (17) зависимостью восприимчивости $\chi_0(\mathbf{h}_\parallel, z)$ от z можно пренебречь, что позволяет записать эту формулу в более простом виде

$$\delta\chi(\mathbf{q}_\parallel, z) = -i\mathbf{q}_\parallel \sum_s c_s \sum_{\mathbf{h}_\parallel} e^{i(\mathbf{h}_\parallel - \mathbf{q}_\parallel)\rho_s} \chi_{\mathbf{h}_\parallel} \mathbf{u}_\parallel(\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{h}_\parallel, z). \quad (21)$$

Поскольку $\delta\chi(\mathbf{q}_\parallel, z) \propto \mathbf{q}_\parallel$, основной вклад в диффузное рассеяние вносят члены с $|\mathbf{q}_\parallel| \cong H$. В сумме по \mathbf{h}_\parallel оставляем только слагаемые, для которых $|\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{h}_\parallel| \ll H$, поскольку учитываем дальние поля искажений (малые $|\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{h}_\parallel|$), которые вносят основной вклад в диффузное рассеяние [1]. Соответственно пренебрежение слагаемым, пропорциональным $\delta\chi(\mathbf{q}_\parallel, z)$ при $\mathbf{q}_\parallel = \mathbf{q}_\parallel^0, \mathbf{q}_\parallel^H$, в (5), (6) можно считать оправданным. Окончательно (21) принимает вид

$$\delta\chi(\mathbf{q}_\parallel \pm \mathbf{H}, z) = -i\chi_{\pm H}(\mathbf{q}_\parallel \pm \mathbf{H}) \mathbf{u}_\parallel(\mathbf{q}_\parallel, z) \sum_s c_s e^{-i\mathbf{q}_\parallel \rho_s}. \quad (22)$$

5. ИНТЕНСИВНОСТЬ СКОЛЬЗЯЩЕГО ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ В ДЕФЕКТНОМ КРИСТАЛЛЕ

Используя (22) и преобразуя исходные выражения (5), (6), получим

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}}(\mathbf{0}) = & (-ik^2 EH\chi_H/4\pi) \left[u_y(\mathbf{q}_\parallel^0, -q_{11}) \{t_{01}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p}) - t_{H1}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p})\} + \right. \\ & + u_y(\mathbf{q}_\parallel^0, -q_{21}) \{t_{01}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p}) - t_{H1}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p})\} + \\ & \left. + u_y(\mathbf{q}_\parallel^0, -q_{22}) \{t_{02}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p}) - t_{H2}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p})\} + \right. \end{aligned} \quad (23)$$

$$\left. + u_y(\mathbf{q}_\parallel^0, -q_{22}) \{t_{02}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p}) - t_{H2}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p})\} \right] \sum_s c_s e^{-i\mathbf{q}_\parallel^0 \rho_s} \equiv A_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \sum_s c_s e^{-i\mathbf{q}_\parallel^0 \rho_s},$$

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}}(\mathbf{H}) = & (-ik^2 EH\chi_H/4\pi) \left[u_y(\mathbf{q}_\parallel^H, -q_{11}) \{t_{01}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p}) - t_{H1}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p})\} + \right. \\ & + u_y(\mathbf{q}_\parallel^H, -q_{21}) \{t_{01}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p}) - t_{H1}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p})\} + \\ & + u_y(\mathbf{q}_\parallel^H, -q_{21}) \{t_{02}(\mathbf{k})t_{01}(\mathbf{p}) - t_{H2}(\mathbf{k})t_{H1}(\mathbf{p})\} + \\ & \left. + u_y(\mathbf{q}_\parallel^H, -q_{22}) \{t_{02}(\mathbf{k})t_{02}(\mathbf{p}) - t_{H2}(\mathbf{k})t_{H2}(\mathbf{p})\} \right] \times \\ & \times \sum_s c_s e^{-i\mathbf{q}_\parallel^H \rho_s} \equiv A_H(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \sum_s c_s e^{-i\mathbf{q}_\parallel^H \rho_s}. \end{aligned} \quad (24)$$

Дифференциальное сечение диффузного рассеяния выражается через средние по всевозможным положениям дефектов:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{p}, \mathbf{G}) = A_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \left\langle \sum_{s,s'} c_s c_{s'} e^{-i q_{\parallel}^G (\rho_s - \rho_{s'})} \right\rangle, \quad \mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}. \quad (25)$$

Таким образом, для нахождения интенсивности диффузного рассеяния нам необходимо определить фурье-компоненты смещений (см. Приложение Б) и вычислить средние значения для сумм.

Если дефекты распределены хаотически, средние значения сумм в (25) равны просто числу дефектов внутри кристалла N (при рассмотрении диффузного рассеяния нас будут интересовать только ненулевые значения для q_{\parallel}). В этом случае сечения рассеяния, приведенные к единице поверхности, даются формулой

$$\frac{d\sigma}{S d\Omega}(\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{p}, \mathbf{G}) = n A_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}, \mathbf{p}), \quad (26)$$

где $n = N/S$ — концентрация дефектов.

Далее в расчетах рассматривается (220)-отражение излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$ в кристалле кремния, содержащего дефекты на глубине 50 Å.

На рисунке 4 приведены карты распределения интенсивности в координатах $(\Delta\theta', \alpha_{ex})$ при зафиксированном образце и источнике излучения.

На рисунке 5 построены вертикальные срезы соответствующих карт. Дифференциальное сечение рассчитано в единицах $C_0 = n \times (EV_0/4\pi)^2$. Для удобства на левом рисунке указаны расположения критических углов $\alpha_{c1,c2} = |\chi_0 \mp \chi_H|^{1/2}$, которые, как известно [18], отвечают условию касания нормали, проведенной через начало вектора \mathbf{p} , различных ветвей дисперсионной поверхности. Максимумы на кривой слева слегка смещены относительно критических значений $\alpha_{c1,c2}$ за счет того, что при вертикальном сканировании точное брэгговское условие не выполняется для всех векторов \mathbf{p}_{\parallel} . Но, как видно, максимумы на кривой справа тоже расположены вблизи критических углов. Это подчеркивает существенно динамический характер диффузного рассеяния в этой области, несмотря на то, что отстройка падающего пучка от условий точного отражения велика: $\varphi_{in} \gg |\chi_H|$. Кроме того, при рассматриваемой отстройке угол скольжения ЗДВ $\alpha_H = (\alpha_{in}^2 - \varphi_{in})^{1/2} = (|\chi_0| + 2\Delta\theta_{in} \sin 2\theta_B)^{1/2}$ является чисто мнимой величиной, т.е. интенсивность ЗДВ экспоненциально затухает при удалении от поверхности кристалла, и детектор будет регистрировать только диффузную компоненту рассеяния.

При ω -сканировании источник с детектором остаются зафиксированными, и поворачивается только образец вокруг нормали \mathbf{n} . Если в начальном положении ($\omega = 0$) падающий пучок удовлетворял точному брэгговскому условию, а детектор находился в позиции

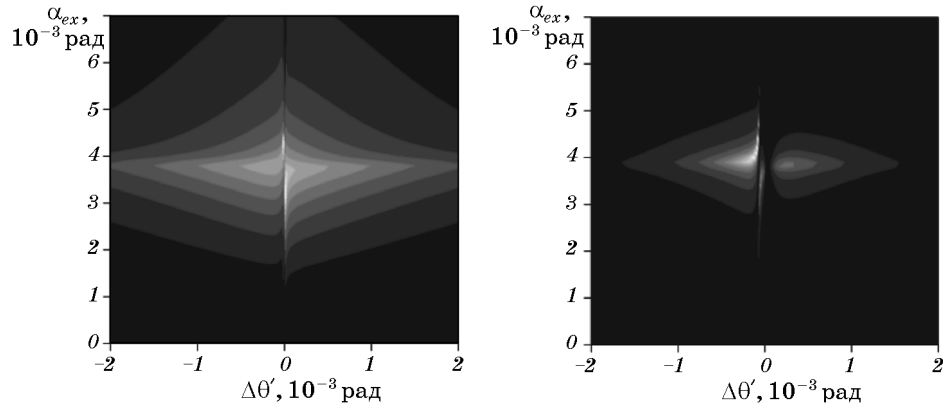


Рис. 4. Распределение интенсивности рассеяния (26) в окрестности $\mathbf{G} = \mathbf{H}$ в координатах $(\Delta\theta', \alpha_{ex})$ при фиксированных $\alpha_{in} = \theta_c = |\chi_0|^{1/2}$, $\Delta\theta_{in} = 0$ (слева) и $\Delta\theta_{in} = -10^{-4}$ (справа).

$\Delta\theta'_0$, то при повороте образца на угол ω против часовой стрелки (если смотреть сверху), отстройка падающего пучка составит $\Delta\theta_{in} = \omega$, а новое положение ЗДВ по отношению к детектору согласно (9) составит

$$\Delta\theta' = \Delta\theta'_0 + \omega \cos 2\theta_B - \omega = \Delta\theta'_0 - 2\omega \sin^2 \theta_B.$$

Если при этом детектор получает степень свободы в вертикальном направлении (сканирование по α_{ex}), получим еще один возможный тип карт распределения (рис. 6). При $\Delta\theta'_0 = 0$ наблюдается очень узкая по углу поворота ω картина шириной порядка $0,5 \cdot 10^{-5}$ (рис. 6, а).

При увеличении начального отклонения $\Delta\theta'_0$ эта ширина также увеличивается, и при $\Delta\theta'_0 = -10^{-4}$ составляет порядка $3 \cdot 10^{-4}$ (рис.

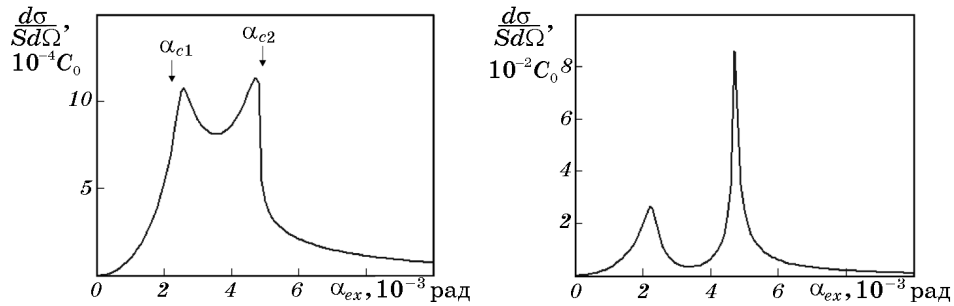


Рис. 5. Распределение интенсивности по углу выхода при $\alpha_{in} = \alpha_c = |\chi_0|^{1/2}$, $\Delta\theta_{in} = \Delta\theta' = 0$ (слева), $\Delta\theta_{in} = -10^{-4}$, $\Delta\theta' = -0,7 \cdot 10^{-4}$ (справа).

б, б), а при $\Delta\theta'_0 = -10^{-3}$ — порядка $3 \cdot 10^{-3}$ (рис. 6, в). При дальнейшем увеличении $\Delta\theta'_0$ ширина картины продолжает увеличиваться, но при этом сама интенсивность падает.

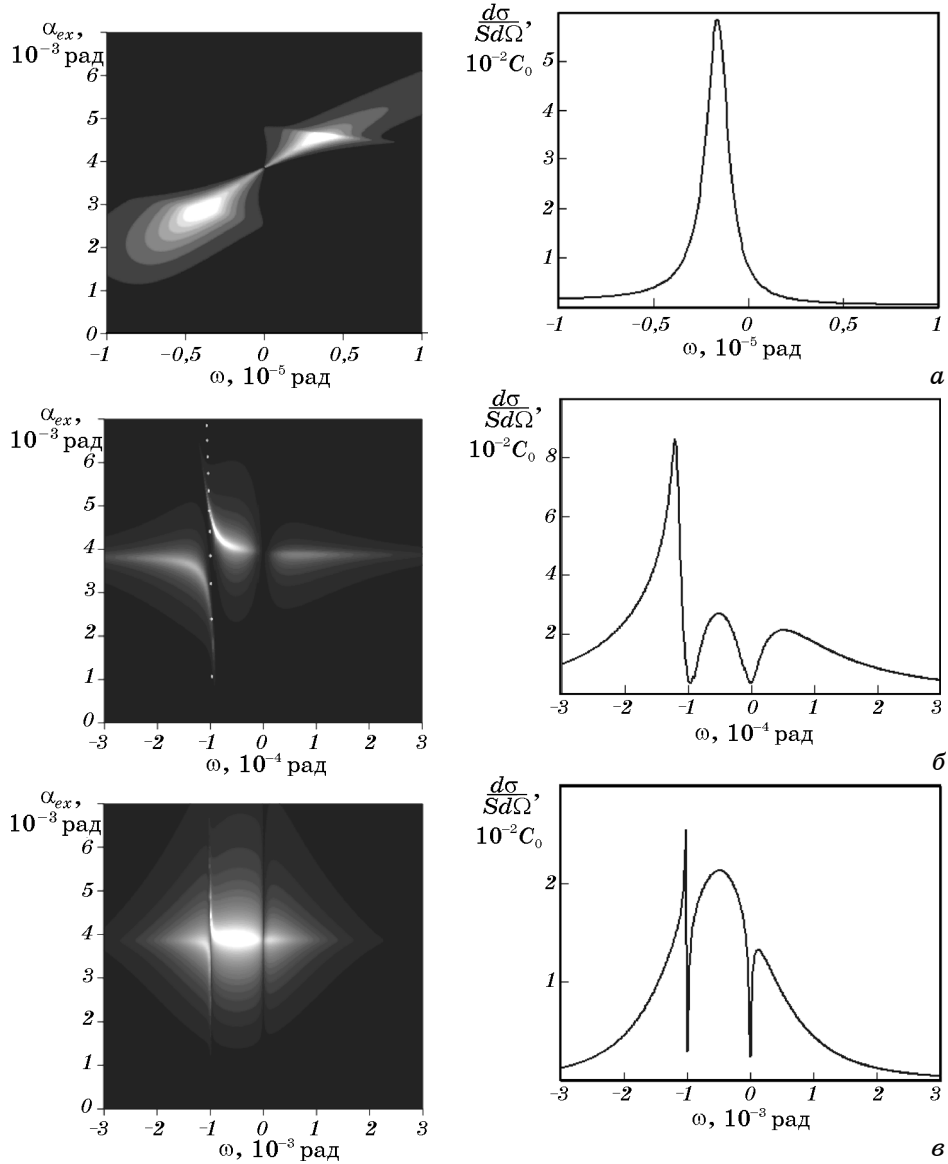


Рис. 6. Слева — распределение интенсивности в окрестности $\mathbf{G} = \mathbf{H}$ в координатах (ω, α_{ex}) при $\alpha_{in} = \alpha_c$ для различных начальных позиций ($\omega = 0$) детектора: $\Delta\theta'_0 = 0$ (а), $\Delta\theta'_0 = -10^{-4}$ (б), $\Delta\theta'_0 = -10^{-3}$ (в). Справа — горизонтальный срез соответствующих карт на уровне $\alpha_{ex} = 0,9\alpha_c$.

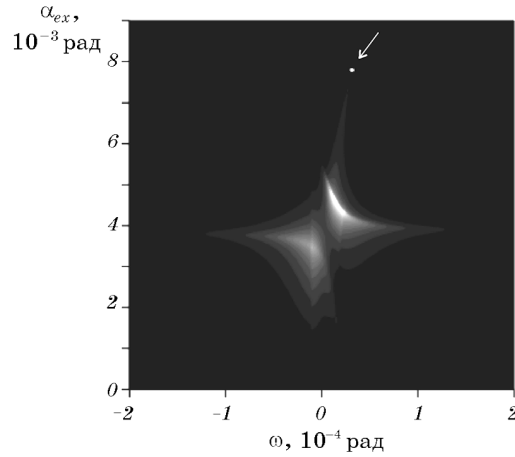


Рис. 7. Распределение интенсивности в окрестности $\mathbf{G} = \mathbf{H}$ в координатах (ω, α_{ex}) при $\alpha_{in} = \alpha_c$, $\Delta\theta'_0 = 10^{-5}$. Стрелочкой показано расположение когерентного пика, отвечающего ЗДВ.

На рисунке 6, б наиболее отчетливо видна особенность в диффузном рассеянии (на рис. 6, в эта особенность имеет существенно сжатый вид), сосредоточенная около линии отвечающей условию $\Delta\theta_{ex} = 0$, т.е. когда волна, падающая из точки наблюдения, удовлетворяет точному брэгговскому условию. На рисунке 6, б слева соответствующая линия показана точками. Снова обратим внимание на то, что указанная особенность соответствует значительным отстройкам падающего пучка $\Delta\theta_{in} = \omega \approx -10^{-4}$ от условий точного отражения, т.е. отвечает кинематическому рассеянию; но наблюдаемый эффект носит существенно динамический характер.

Чтобы определить положения когерентного пика на приведенных картах, мы должны записать условия совпадения направления наблюдения с направлением распространения ЗДВ. Эти условия выглядят следующим образом: $\Delta\theta' = 0$, $\alpha_{ex} = \alpha_H$. Первое условие выполняется, когда $\omega = \Delta\theta'_0 / (2 \sin^2 \theta_B)$. При таком ω угол скольжения ЗДВ составляет $\alpha_H = (\alpha_{in}^2 + 2\Delta\theta'_0 \operatorname{ctg} \theta_B)^{1/2}$. Это означает, что при

$$\Delta\theta'_0 < -(1/2) \alpha_{in}^2 \operatorname{tg} \theta_B. \quad (27)$$

ЗДВ будет являться поверхностной волной, и детектор будет регистрировать только диффузную компоненту, что отвечает случаям б, в на рис. 6. В случае а на рис. 6 координаты когерентного пика равны $\omega = 0$, $\alpha_{ex} = \alpha_c \approx 3,86 \cdot 10^{-3}$.

Если же условие (27) нарушается и, скажем, $\Delta\theta'_0$ является положительной величиной, тогда на карте можно наблюдать и когерентный пик (рис. 7).

6. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В данной работе теоретически исследовано динамическое рассеяние рентгеновских лучей падающих под скользящими углами на поверхность кристалла. Показано, каким образом диффузная компонента интенсивности рассеяния зависит от поля упругих смещений, создаваемого дефектами, находящимися вблизи поверхности. Для атомных смещений использованы точные аналитические выражения, полученные в континуальной теории для дефектов типа центров дилатации с учетом сил зеркального изображения.

Скользящее рассеяние рентгеновских лучей от поверхности дефектного кристалла, при котором помимо зеркальной и зеркально дифрагировавшей волн, образуются зеркальные диффузно дифрагировавшие волны, исследовано в борновском приближении искаженной волны DWBA. Именно это приближение позволяет корректно описывать скользящее рассеяние на поверхности неидеального кристалла, при котором компоненты векторов рассеяния, нормальные к поверхности, очень малы. Кроме того, при расчетах в рамках DWBA не возникает проблем с расходимостями, характерными для динамической теории диффузного рассеяния, основанной на обычной теории возмущений.

Рассчитаны профили и карты распределения интенсивности диффузного рассеяния для различных схем GID-сканирования с использованием точных формул для фурье-компонент атомных смещений.

Развитый в настоящей работе метод расчета диффузного скользящего рассеяния, учитывающий динамическую природу данного процесса, может быть использован для диагностики приповерхностных слоев кристаллов, тонких пленок, многослойных структур с квантовыми точками.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА (REFERENCES)

1. M. A. Krivoglaz, *Difraktsiya Rentgenovskikh Luchey i Neytronov v Neideal'nykh Kristallakh (X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals)* (Kiev: Naukova Dumka: 1983) (in Russian).
2. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **4**: 1041 (1971).
3. M. F. Thorpe, I. S. Chung, and Y. Cai, *Phys. Rev. B*, **43**: 8282 (1991).
4. A. Yu. Gaevskiy, M. A. Ivanov, and V. B. Molodkin, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **31**, No. 5: 633 (2009) (in Russian).
5. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskiy, and M. E. Osinovskiy, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **5**, No. 5: 3 (1983) (in Russian).
6. A. M. Afanas'ev and M. K. Melkonyan, *Acta Crystallogr. A*, **39**: 207 (1983).
7. A. M. Afanas'ev, P. A. Alexandrov, and R. M. Imamov, *Rentgenodifraktsionnaya Diagnostika Submikronnykh Sloev (X-Ray Diffraction Diagnostics of Submicron Layers)* (Moscow: Nauka: 1989) (in Russian).

8. U. Pietsch, V. Holy, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (New York: Springer-Verlag: 2004).
9. U. Pietsch, *Current Sci.*, **78**: 25 (2000).
10. E. A. Kondrashkina, S. A. Stepanov, M. Schmidbauer, R. Opitz, and R. Koehler, *J. Appl. Phys.*, **81**: 175 (1997).
11. A. P. Ulyanekov, S. A. Stepanov, U. Pietsch, and R. Kohler, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **28**: 2522 (1995).
12. A. Yu. Gaevskiy, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **31**, No. 10: 1317 (2009) (in Russian).
13. R. D. Mindlin, *Physics*, **7**: 195 (1936).
14. J. Daillant, S. Mora, and A. Sentenacm, *Diffuse Scattering Lect. Notes Phys.*, **770**: 133 (2009).
15. J. Daillant and O. Belorgey, *J. Chem. Phys.*, **97**: 5824 (1992).
16. S. K. Sinha, E. B. Sirota, S. Garoff, and H. B. Stanley, *Phys. Rev. B*, **38**: 2297 (1988).
17. S. Takagi, *J. Phys. Soc. Jap.*, **13**, No. 2: 278 (1958).
18. S. M. Durbin and T. Gog, *Acta Cryst. A*, **45**: 132 (1989).
19. F. Oberhettinger, *Tables of Bessel Transforms* (New York: Springer-Verlag: 1972).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В данном приложении проанализированы и вычислены интегралы следующего вида:

$$I_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{h}_{\parallel}, q) = \int_{-\infty}^0 \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) u_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) e^{iqz} dz, \quad (1A)$$

$$I_z(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{h}_{\parallel}, q) = \int_{-\infty}^0 (\partial \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) / \partial z) u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) e^{iqz} dz. \quad (2A)$$

Для задач настоящей статьи актуальны значения \mathbf{q}_{\parallel} , которые лежат в очень малых окрестностях брэгговских узлов и отстоят от них на величины порядка $K\theta_c$. Фурье-компоненты $u_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, z)$ и $u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z)$, для которых \mathbf{q}_{\parallel} близки к ненулевым узлам, очень малы, и мы будем учитывать лишь близкие к нулевому узлу значения \mathbf{q}_{\parallel} . В таком случае $u_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, z)$, $u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z)$ будут плавными в атомных масштабах функциями z (см. Приложение Б). Поскольку значения q по порядку величины не превышают $K\theta_c$, функция e^{iqz} также будет достаточно медленно меняться в атомных масштабах.

Зафиксируем значения \mathbf{q}_{\parallel} , q и введем обозначение $U(z) = u_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) \times e^{iqz}$. Согласно вышесказанному $U(z)$ слабо изменяется в пределах элементарной ячейки, и можно ограничиться ее разложением в ряд до линейного члена. Воспользовавшись периодичностью восприимчивости по z (с периодом элементарной ячейки a), получим

$$\int_{-\infty}^0 \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) U(z) dz =$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n=-\infty}^0 \int_{(n-1)a}^{na} \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) U(z) dz = \sum_{n=-\infty}^0 \int_0^a \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) U((n-1)a + z) dz \approx \\
 &\approx \sum_{n=-\infty}^0 \int_0^a \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) \left[U((n-1)a + z) + z \frac{\partial}{\partial z} U(z) \Big|_{z=(n-1)a} \right] dz = \\
 &= a \chi_{h_{\parallel}} \sum_{n=-\infty}^0 U((n-1)a) + \int_0^a z \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) dz \sum_{n=-\infty}^0 \frac{\partial}{\partial z} U(z) \Big|_{z=(n-1)a}. \tag{3A}
 \end{aligned}$$

Здесь $\chi_{h_{\parallel}} = \frac{1}{a} \int_0^a \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) dz$ — фурье-компонента, определяемая по табличным данным. Расчет в приближении, когда функция $\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z)$ аппроксимируется постоянной, показывает, что пренебречь последним в (3A) членом, вообще говоря, нельзя (вклад $\sim 10\%$). Однако, оказывается, что если кристалл обладает центральной симметрией, то интеграл $\int_0^a z \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) dz$ попросту равен $\frac{a^2}{2} \chi_{h_{\parallel}}$. Это значение получается, если учесть следующие равенства:

$$\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) = \chi_{h_{\parallel}} + 2 \sum_{m \neq 0} \chi_{h_{\parallel}, m} \cos\left(\frac{2\pi m z}{a}\right), \quad \int_0^a z \cos\left(\frac{2\pi m z}{a}\right) dz = 0.$$

Это означает, что с хорошей точностью формулу (1A) можно записать в виде

$$I_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{h}_{\parallel}, q) = \chi_{h_{\parallel}} \int_{-\infty}^0 u_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, z) e^{iqz} dz = \chi_{h_{\parallel}} u_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel}, -q). \tag{4A}$$

Для вычисления другого интеграла, (2A), перейдем к интегрированию по частям:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^0 \frac{\partial \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z)}{\partial z} u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) e^{iqz} dz &= \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) \Big|_{z=0} - \\
 &- \int_{-\infty}^0 \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) \frac{\partial}{\partial z} [u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) e^{iqz}] dz.
 \end{aligned}$$

Здесь функция $\frac{\partial}{\partial z} [u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) e^{iqz}]$ также является очень плавной в атомных масштабах и, аналогично интегралу (1A), мы получим

$$I_z(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{h}_{\parallel}, q) = \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) \Big|_{z=0} - \chi_{h_{\parallel}} u_z(\mathbf{q}_{\parallel}, z) \Big|_{z=0}. \tag{5A}$$

Оба слагаемых в (5А) имеют порядок $\chi_0 V_0$, что сравнимо с вкладом объема самого дефекта в диффузное рассеяние, поэтому интегралом (2А) можно пренебречь.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

В данном приложении приведено вычисление y -составляющей Фурье-компоненты параллельных смещений (18). Используя табличное преобразование Ханкеля для функции $(r^2 + \beta^2)^{-3/2}$ [19], получим

$$\int_{\mathbf{R}^2} \frac{e^{-iq_{\parallel}\rho}}{(x^2 + y^2 + \beta^2)^{3/2}} d\rho = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{r e^{-iq_{\parallel}r \sin\theta}}{(r^2 + \beta^2)^{3/2}} dr d\theta = 2\pi \int_0^{\infty} \frac{r J_0(q_{\parallel}r)}{(r^2 + \beta^2)^{3/2}} dr = \frac{2\pi}{|\beta|} e^{-q_{\parallel}|\beta|},$$

откуда для объемного слагаемого смещений (18)

$$\frac{4\pi}{V_0} u_y^V(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \int_{\mathbf{R}^2} \frac{y}{R^3} e^{-iq_{\parallel}\rho} d\rho = i \frac{\partial}{\partial q_y} \frac{2\pi}{|z - z_s|} e^{-q_{\parallel}|z - z_s|} = -2\pi i \frac{q_y}{q_{\parallel}} e^{-q_{\parallel}|z - z_s|}. \quad (\text{Б1})$$

Используя этот результат, для зеркального слагаемого в (18) можно легко получить

$$\frac{4\pi}{V_0} u_y^S(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = \int_{\mathbf{R}^2} \left(\frac{y}{\varepsilon \bar{R}^3} - \frac{6yz(z + z_s)}{\bar{R}^5} \right) e^{-iq_{\parallel}\rho} d\rho = -2\pi i \frac{q_y}{q_{\parallel}} e^{-q_{\parallel}|z + z_s|} \left(\frac{1}{\varepsilon} + 2q_{\parallel}z \right). \quad (\text{Б2})$$

Фурье-преобразование по z приводит к следующему

$$\begin{aligned} \frac{4\pi}{V_0} u_y^V(\mathbf{q}_{\parallel}, -q) &= \int_{-\infty}^0 \int_{\mathbf{R}^2} \frac{y}{R^3} e^{-iq_{\parallel}\rho} e^{iqz} d\rho dz = \\ &= -2\pi i \frac{q_y}{q_{\parallel}} e^{iqz_s} \left(\frac{1}{q_{\parallel} + iq} - \frac{e^{(q_{\parallel} - iq)z_s} - 1}{q_{\parallel} - iq} \right), \end{aligned} \quad (\text{Б3})$$

$$\begin{aligned} \frac{4\pi}{V_0} u_y^S(\mathbf{q}_{\parallel}, -q) &= \int_{-\infty}^0 \int_{\mathbf{R}^2} \left(\frac{y}{\varepsilon \bar{R}^3} - \frac{6yz(z + z_s)}{\bar{R}^5} \right) e^{-iq_{\parallel}\rho} e^{iqz} d\rho dz = \\ &= -2\pi i \frac{q_y}{q_{\parallel}} \frac{e^{-q_{\parallel}z_s}}{q_{\parallel} + iq} \left(\frac{1}{\varepsilon} - \frac{2q_{\parallel}}{q_{\parallel} + iq} \right). \end{aligned} \quad (\text{Б4})$$

Для получения полной фурье-компоненты смещений нужно сложить выражения (Б3), (Б4):

$$u_y(\mathbf{q}_{\parallel}, -q) = u_y^V(\mathbf{q}_{\parallel}, -q) + u_y^S(\mathbf{q}_{\parallel}, -q). \quad (\text{Б5})$$