

## **ТРИХВИЛЬОВА ДИФРАКЦІЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ В КОВЗАЮЧІЙ ГЕОМЕТРІЇ: ПРЯМЕ ВИЗНАЧЕННЯ ТРИПЛЕТНИХ ФАЗОВИХ ІНВАРІАНТІВ**

На основі динамічної теорії проведено чисельний розрахунок кутових та спектральних розподілів коефіцієнтів відбивання дзеркально дифрагованих хвиль у випадку трихвильової ковзаючої рентгенівської дифракції. Показано, що форма розподілів коефіцієнтів відбивання однозначно і неперервно залежить від значення триплетного фазового інваріанта. Розроблено теоретичні основи методу визначення величини триплетного фазового інваріанта для тонких приповерхневих шарів монокристалів.

Класичний рентгеноструктурний аналіз ґрунтується на інформації, яка одержується з двоххвильової дифракції. Втрата в цьому випадку фазової інформації призводить до виникнення фазової проблеми, що полягає у неможливості прямого визначення відносних фаз структурних амплітуд відбивань. На відміну від двоххвильової, багатохвильова дифракція чутлива до співвідношень між структурними амплітудами відбивань. В останній час з'явилася серія робіт (огляд представлено в [1]), присвячених як впливу фаз відбивань на характер явищ багатохвильової дифракції, так і розробці прямих методів експериментального визначення величини фазових інваріантів. Розглянуті роботи присвячено традиційним випадкам дифракції із традиційними глибинами  $t \sim 1-10$  мкм проникнення променів в кристал. Тому запропоновані в них методи визначення величини фазового інваріанта можна віднести до об'ємної частини монокристалів. Останнім часом підвищився інтерес до вирощування та вивчення кристалічних систем з неоднорідною по глибині структурою. Це вимагає розробки аналогічних методів для тонких приповерхневих шарів кристалів, в

яких виключається можливість накладення інформації, що надходить від більш глибоких шарів. Гранично мала глибина  $t \sim 10 \div 100$  нм проникнення випромінювання в кристал досягається в ковзаючій геометрії дифракції, коли площина, що відбиває перпендикулярна до поверхні кристалу, а кути входу променів в кристал і виходу з нього близькі до кута повного зовнішнього відбивання. В роботі [2] була вивчена фазова чутливість трихвильової ковзаючої дифракції і продемонстрована можливість визначення величини триплетного фазового інваріанта із кутових розподілів інтенсивності дзеркальних хвиль. Однак, відсутність якісних відмінностей для цих розподілів ускладнює розробку ефективних методів визначення фазових інваріантів.

В загальному випадку багатохвильової дифракції неможливо отримати аналітичне рішення задачі знаходження амплітуд дифрагованих хвиль. Тому представлені теоретичні дослідження трихвильової дифракції проведено за допомогою чисельних розрахунків за алгоритмом, запропонованим в [3]. Розгляд методики визначення триплетних фазових інваріантів для тонких приповерхневих шарів ми проведемо на прикладі трихвильової конфігурації Si (000, 440, 404) із використанням лінійного  $\pi$ -поляризованого випромінювання, коли електричний вектор лежить у площині відбивання (440). Як було відзначено в [3], особливістю багатохвильової взаємодії рентгенівських променів в ковзаючій геометрії є випадковий характер її реалізації. Тому в даній роботі розрахункові дослідження проведені для різних значень довжини хвилі падаючого випромінювання. В якості точної умови реалізації багатохвильової дифракції  $S=0$ , де  $S=(\lambda_M - \lambda)/\lambda_M$  - спектральний параметр, взято умову приналежності багатохвильової точки Лорентца до площини конфігурації. Довжина хвилі, що задовольняє цій умові  $\lambda_M = 0.16628$  нм. Представлення коефіцієнтів відбивання зв'язане з одним з можливих способів спектрального сканування багатохвильової області, який запропоновано в [3]. На кристал під деяким фіксованим кутом  $\phi_0$  в межах області повного зовнішнього відбивання падає пучок, що колімований по куту  $\phi_0$  і розбіжний по азимутальному куту  $\phi_0$ . Азимутальним кутом є кут обертання

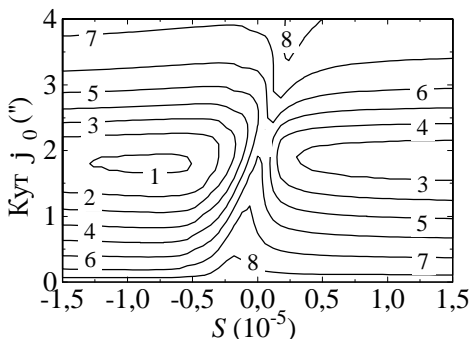


Рис.1 Коефіцієнт відбивання  $R_{440}(S, j_0)$ . Криві 1 – 8 відповідають  $R_{440} = 0.16, 0.14, 0.12, 0.1, 0.08, 0.06, 0.04, 0.02$ .

кристалу навколо нормалі до вхідної поверхні кристалу. В розрахунках  $\varphi_0 = |\chi_0|^{1/2}$ , де  $\chi_0$  – Фур'є-компонента поляризованості кристалу. На рис.1 представлено результати обчислень спектрально-кутового розподілу  $R_{440}(S, \varphi_0)$  для значень триплетного фазового інваріанта  $\Phi_3=0$ . Триплетний фазовий інваріант визначено як  $\Phi_3 = F_{\bar{4}40} + F_{404} + F_{0\bar{4}\bar{4}}$ , де останні є фазами структурних амплітуд відбивань, що входять до складу трихвильової конфігурації.

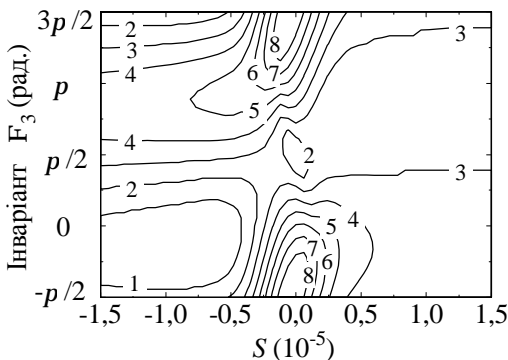


Рис.2 Коефіцієнт відбивання  $R_{440}(S, F_3)$ . Криві 1 – 8 відповідають  $R_{440} = 1.2, 1.1, 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5$ .

Початок координат  $\varphi_0 = 0$  відповідає випадку, коли кут виходу дзеркально дифрагованої хвилі дорівнює нулю. Як видно область

трихвильової взаємодії в даних координатах характеризується двома напрямками, один з яких паралельний до спектральної осі  $S$ , а другий нахилений до неї під деяким кутом, таким що  $\Delta\Phi_0 = \Delta S(\text{tg}_{440}\theta + \text{tg}_{404}\theta)$ , де  $\theta_{440}$  і  $\theta_{404}$  - кути дифракції. Відхід від положення  $S = 0$  відповідає переходу з трихвильової області до двохвильової. На рис.2 представлено напівінтегральні криві  $R_{440}(S, \Phi_3) = \int R_{440}(S, \Phi_3, \Phi_0) d\Phi_0$  при неперервній зміні значення триплетного фазового інваріанта. Значення  $R_{440}(S, \Phi_3)$  нормовано на відповідне значення для двохвильової дифракції. На рис.1 і 2 спостерігається повна аналогія фазової залежності профілів трихвильових піків, при спектральному скануванні дозволеної дзеркально дифрагованої хвилі з фазовою залежністю профілів трихвильових піків, що виникають при азимутальному скануванні дозволеного відбивання в схемі експерименту Реннінгера. Для значень  $\Phi_3=0$  та  $\Phi_3=\pi$  спостерігається зворотній порядок слідування локального мінімуму та максимуму, в той час як для  $\Phi_3=-\pi/2$  домінує ослаблення (Aufhellung), а для  $\Phi_3=\pi/2$  підсилення (Umweganregung) двохвильової інтенсивності. З рис.2 видно, що форма профілю піку дзеркально дифрагованої хвилі є однозначною та неперервною функцією значення фазового інваріанта.

З викладеного вище впливає суть методики визначення значення триплетного фазового інваріанта для тонких приповерхневих шарів монокристалів. Вона зводиться до експериментального виміру профілю піку  $I_e(S)$  і його порівняння із профілями  $I_p(S, \Phi_3)$ , обчисленими для різних значень триплетного фазового інваріанта. Критерієм правильності визначення значення триплетного фазового інваріанта може служити умова мінімізації параметру  $P(\Delta S, \Phi_3) = \int [I_e(S) - I_p(S + \Delta S, \Phi_3)]^2 dS$ . При розрахунках структурні амплітуди відбивань, що входять до складу трихвильової конфігурації вважаються відомими із інтенсивностей двохвильових відбивань. Профіль піку  $I_p(S, \Phi_3)$  обчислюється на основі  $R_H(S, \Phi_3)$  з урахуванням реальних спектральних та кутових характеристик пучка, що падає на кристал. Більш просто задача визначення величини триплетного фазового інваріанта вирішується у випадку

центросиметричної структури приповерхневого шару. В цьому випадку одне з двох можливих значень,  $\Phi_3 = 0$  або  $\pi$ , що може приймати інваріант, визначається з асиметрії трихвильового піку - за порядком слідування локального мінімуму та максимуму.

Таким чином, на основі чисельних розрахунків кутових та спектральних розподілів коефіцієнтів відбивання дзеркально дифрагованої хвилі у випадку трихвильової ковзаючої дифракції запропоновано метод визначення величини триплетного фазового інваріанта для тонких приповерхневих шарів монокристалів.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Weckert E., Hümmel K. Multiple-beam X-ray diffraction for physical determination of reflection phases and its applications // Acta Cryst.- 1997.- **A53**, Part 2.- P.108-143.
2. Tseng T.P., Chang S.-L. Phase effects in three-beam grazing-incidence X-ray diffraction // Acta Cryst.- 1990.- **A46**, Part 4.- P.567-576.
3. Stetsko Yu.P., Chang S.-L. An algorithm for solving multiple-wave dynamical X-ray diffraction equations // Acta Cryst.- 1997.- **A53**, Part 1.- P.28-34.

#### SUMMARY

**STETSKO Yu.P.**

#### **THREE-WAVE X-RAY DIFFRACTION IN GRAZING GEOMETRY: DIRECT DETERMINATION OF TRIPLET PHASE INVARIANTS**

Numerical calculation of angular and spectral reflection distributions of the specularly diffracted waves in the case of three-wave grazing-incidence X-ray diffraction is carried out using the dynamical theory. The shapes of reflection distributions are shown to be uniquely and continuously dependent upon the value of the triplet phase invariant. A method for calculating the value of the triplet phase invariant is developed for thin surface single crystal layers.