

PACS numbers: 03.50.De, 41.20.Jb, 61.10.Dp, 68.49.Uv, 68.65.Ac, 68.65.Hb, 81.70.Eh

Решение дисперсионного уравнения в явном виде для случая двух сильных волн

А. Н. Ефанов, В. П. Кладько

*Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарёва НАН Украины,
просп. Науки, 41,
03028 Киев-28, Украина*

Численно решено уравнение дисперсионной поверхности (уравнение четвертой степени) в двухволновом случае для геометрий Брэгга и Лауэ и построено сечение дисперсионной поверхности плоскостью дифракции. Кроме того, аналитически решено дисперсионное уравнение вблизи точки Лорентца (уравнение второй степени). Проведено сравнение этих методов с общепринятым, в котором волновые векторы выражаются через параметр $\Delta\theta$. Проанализирован также вид дисперсионных кривых в некоторых экзотических частных случаях для геометрий, как Брэгга, так и Лауэ. Преимущества численного нахождения волновых векторов особо четко проявляются при анализе наноразмерных элементов вдали от угла Вульфа–Брэгга, а также при анализе структур, состоящих из материалов с сильно отличающимися эффективными параметрами решеток.

Чисельно розв'язано рівняння дисперсійної поверхні (рівняння четвертого ступеня) в двохвильовому випадку для геометрій Брегга і Лауе та побудовано перерізи дисперсійної поверхні площиною дифракції. Крім того, аналітично розв'язано дисперсійне рівняння поблизу точки Лорентца (рівняння другого ступеня). Виконано порівняння цих метод із загальноприйнятою, в якій хвильові вектори виражаються через параметр $\Delta\theta$. Проаналізовано також вигляд дисперсійних кривих в деяких екзотичних поодиноких випадках для геометрій як Брегга, так і Лауе. Переваги чисельного визначення хвильових векторів особливо чітко виявляються у аналізі нанорозмірних елементів далеко від кута Вульфа–Брегга, а також у аналізі структур, які складаються з матеріалів з дуже різними ефективними параметрами ґратниць.

The equation of dispersion surface (i.e. forth-order equation) in two-beam case is numerically solved for both Laue and Bragg geometries. The section of dispersion surface by diffraction plane is drawn. Besides, second-order dispersion equation is analytically solved near the Lorentz point.

This method is compared with standard method, which describes wave vectors by means of $\Delta\theta$ parameter. The appearance of dispersion curve for some particular cases is analyzed for Laue and Bragg geometries. Advantages of numerical determination of wave vectors are evident while analyzing nanostructures far from exact Bragg angle and while diagnosing materials with high lattice mismatch.

Ключевые слова: дисперсионное уравнение, дисперсионная поверхность, дифракция рентгеновских лучей, геометрия Брэгга и Лауэ.

(Получено 19 ноября 2004 г.)

ВВЕДЕНИЕ

Дисперсионная поверхность является одним из наиболее удобных и наглядных инструментов для изучения дифракции рентгеновских лучей. Для успешного моделирования дифракционных процессов нужно знать волновые векторы всех имеющихся в системе волн, для чего необходимо как можно точнее решить дисперсионное уравнение (1).

Ранее этой проблемой занимались многие авторы [1–4], однако в большинстве работ это либо приблизительные геометрические модели, либо численные модели частных случаев. Очень часто представления о дисперсионной поверхности для геометрии Лауэ переносились на геометрию Брэгга (картинку просто поворачивали на 90°). Наиболее полный анализ дисперсионного уравнения для случая Брэгга дан в работах Т. Fukamachi [5, 6], однако расчеты приведены только для случая симметричной дифракции с упрощениями и с анализом некоторых условных, не имеющих физического смысла параметров.

Поэтому нами проведено численное решение дисперсионного уравнения для двухволнового случая в геометриях как Брэгга, так и Лауэ несколькими различными методами, а также аналитическое решение приближенного уравнения вблизи угла Вульфа–Брэгга (для двух корней). Кроме того, проанализирован приблизительный подход для поиска волновых векторов, применяющийся в большинстве программ для расчета кривых качания, а также проведено сравнение данного подхода с численным решением.

Ценность предложенного точного решения дисперсионного уравнения проявляется наиболее четко при анализе экспериментальных кривых качания вдали от точного брэгговского положения. Данная задача становится все более актуальной в связи с уменьшением характерных размеров исследуемых объектов, таких, как квантовые точки и квантовые провода, сверхтонкие слои (толщиной в несколько постоянных решетки) и т. п. Еще

один плюс численного решения — более точный анализ структур, состоящих из материалов со значительно отличающимися параметрами решетки. Кроме того, данный подход должен значительно увеличить точность анализа экспериментальных кривых, полученных в сильно асимметричной геометрии, в частности, при скользящей дифракции (GID).

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДИСПЕРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ 4-Й СТЕПЕНИ (ГЕОМЕТРИЯ БРЭГГА)

Из уравнений Максвелла для случая нулевого локального заряда и отсутствия токов проводимости, что практически всегда справедливо для рентгеновских волн [2], можно получить уравнения распространения E -компонент электромагнитных волн [3, 4]:

$$(\Delta + k^2(r))\vec{E}(r) = \text{grad div } \vec{E}(r),$$

где k — длина волнового вектора в среде.

Считая поляризуемость кристалла периодической функцией координат (с периодом решетки) $\chi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} \chi_{\vec{g}} \exp(i\vec{g}\vec{r})$, подставим в качестве решения плоскую волну в двухлучевом приближении

$$E(r) = E_0 \exp(i\vec{k}_0\vec{r}) + E_h \exp(i\vec{k}_h\vec{r})$$

и, разложив волну на две с разными поляризациями (для σ -поляризации $C = 1$ и для π -поляризации $C = \cos(2\theta_B)$, где θ_B — угол Вульфа–Брэгга), после преобразований получаем

$$\begin{aligned} \frac{k_0^2 - K^2}{K^2} E_0 &= \chi_0 E_0 + C\chi_{\vec{h}} E_h, \\ \frac{k_h^2 - K^2}{K^2} E_h &= C\chi_{\vec{h}} E_0 + \chi_0 E_h, \end{aligned} \quad (1)$$

где $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ — длина волнового вектора в вакууме.

Дисперсионное уравнение получается из условия равенства нулю детерминанта этой системы и, после преобразования к безразмерным волновым векторам (тут и далее $k_0 \equiv \frac{k_0}{K}$, $k_h \equiv \frac{k_h}{K}$), принимает вид

$$(k_0^2 - n^2)(k_h^2 - n^2) = C^2 \chi_h \chi_{\vec{h}}, \quad (2)$$

где $n \approx \sqrt{1 + \chi_0}$ — показатель преломления данной среды.

Заметим, что в кристалле правильнее было бы оперировать векторами индукции электрического поля, для которых дисперсионное уравнение для приведенных волновых векторов будет иметь вид [3]:

$$\left(\frac{k_0^2 - 1}{k_0^2} - \chi_0 \right) \left(\frac{k_h^2 - 1}{k_h^2} - \chi_0 \right) = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (3)$$

Однако можно показать, что эта формула сводится к (1) при замене

$$n \rightarrow \sqrt{\frac{1 - \chi_0}{(1 - \chi_0)^2 - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}} \approx \sqrt{1 + \chi_0}, \quad (4)$$

что говорит о том, что оба эти подхода практически эквивалентны (данный факт подтвержден моделированием).

Перейдем к декартовым координатам, для чего введем следующие величины (рис. 1):

$$z = h \cos(\varphi), \quad x = -\cos(\alpha), \quad d = -x + h \sin(\varphi),$$

где α — угол между падающим из вакуума на поверхность лучом K_0 и поверхностью, φ — угол между нормалью и вектором \vec{h} , \vec{h} — вектор обратной решетки (тут и далее $h \equiv \frac{2\pi h}{K}$).

Тогда квадраты модулей волновых векторов могут быть выражены следующим образом:

$$k_0^2 = x^2 + y^2, \\ k_h^2 = (z - y)^2 + d^2 = y^2 - 2zy + z^2 + d^2. \quad (5)$$

Подставив данные выражения в дисперсионное уравнение, получим

$$(y^2 + (x^2 - n^2))(y^2 - 2zy + (z^2 + d^2 - n^2)) = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}$$

или после преобразования

$$y^4 - 2zy^3 + (z^2 + d^2 + x^2 - 2n^2)y^2 - 2z(x^2 - n^2)y + \\ + (x^2 - n^2)(z^2 + d^2 - n^2) - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0. \quad (6)$$

Данное уравнение четвертой степени легко решается при помощи метода Лагера [7], поскольку данный метод позволяет найти комплексные корни. Однако необходимо учитывать, что после

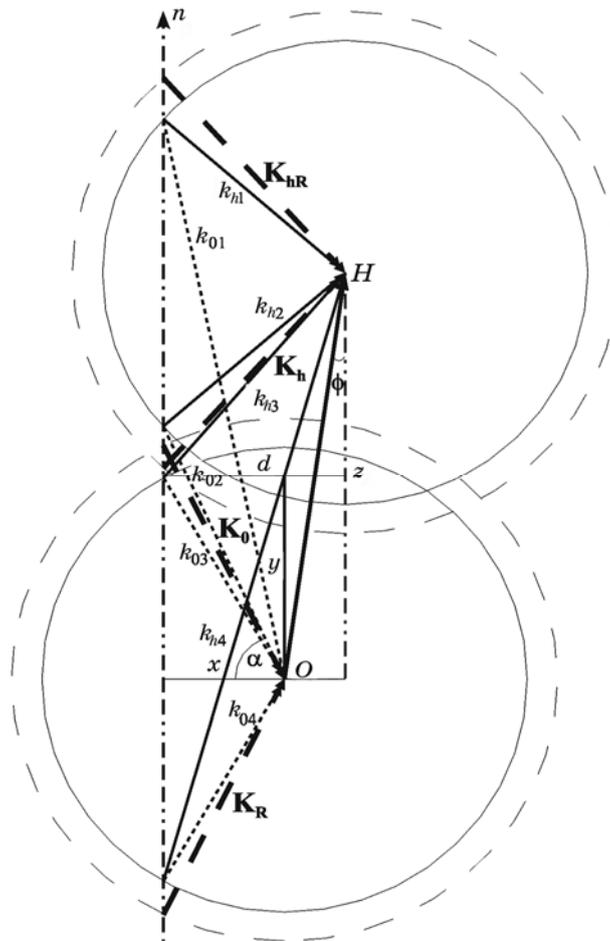


Рис. 1. Проекция дисперсионной поверхности на плоскость дифракции в обратном пространстве (геометрия Брэгга).

применения численного метода решения корни необходимо отсортировать в соответствии с их физическим смыслом (в данном случае — по величине действительной и мнимой частей).

Решив уравнение (6) и подставив результаты в (5), мы найдем k_0^i и k_h^i , где $i = 1, \dots, 4$. Подставив найденные величины волновых векторов в (1), мы получим отношения амплитуд дифрагированной и падающей волн:

$$c_i = \frac{E_h^i}{E_0^i} = \frac{k_0^2 - (1 + \chi_0)K^2}{CK^2\chi_{\bar{h}}} = \frac{CK^2\chi_h}{k_h^2 - (1 + \chi_0)K^2}. \quad (7)$$

Для полубесконечного кристалла один из этих коэффициентов

и будет представлять дифракционную способность кристалла, равную (в случае Брэгга)

$$R = \frac{\sqrt{1-d^2}}{\sqrt{1-x^2}} c_i^2. \quad (8)$$

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДИСПЕРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ 4-Й СТЕПЕНИ В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ

В геометрии на прохождение дисперсионная поверхность представлена на рис. 2.

В данной геометрии представленные на рис. 2 величины равны

$$z = h \cos(\varphi), \quad x = \cos(\alpha), \quad d = h \sin(\varphi).$$

Тогда квадраты модулей волновых векторов могут быть выражены следующим образом:

$$k_0^2 = x^2 + y^2, \quad k_h^2 = (z-x)^2 + (y+d)^2 = y^2 + 2dy + (x^2 - 2zx + z^2 + d^2).$$

Подставив данные выражения в дисперсионное уравнение (2), после преобразования получим

$$y^4 - 2dy^3 + (z^2 + d^2 + 2x^2 - 2n^2 - 2zx)y^2 - 2d(x^2 - n^2)y + (x^2 - n^2)(z^2 + d^2 + x^2 - n^2 - 2zx) - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0.$$

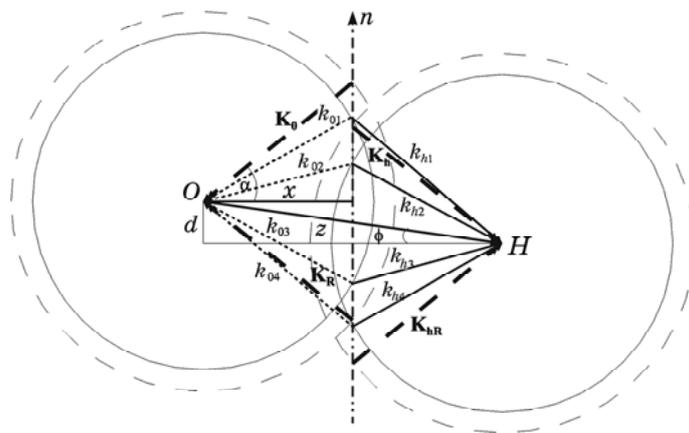


Рис. 2. Проекция дисперсионной поверхности на плоскость дифракции в обратном пространстве (геометрия Лауэ).

**АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УПРОЩЕННОГО
ДИСПЕРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ 2-Й СТЕПЕНИ
ВБЛИЗИ УГЛА ВУЛЬФА–БРЭГГА В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА**

Если в дисперсионном уравнении (2) принять, что $k_0 \approx k_h \approx n$, получим упрощенное дисперсионное уравнение второй степени

$$\xi_0 \xi_h = \frac{1}{4} C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}, \quad (9)$$

где $\xi_0 = k_0 - n$ и $\xi_h = k_h - n$.

В декартовых координатах ξ_0 и ξ_h можно выразить следующим образом (рис. 3):

$$\xi_0 = x \sin \theta_2 \pm y \cos \theta_2, \quad \xi_h = x \sin \theta_1 \pm y \cos \theta_1, \quad (10)$$

где углы θ_1 и θ_2 определены следующим образом [5]:

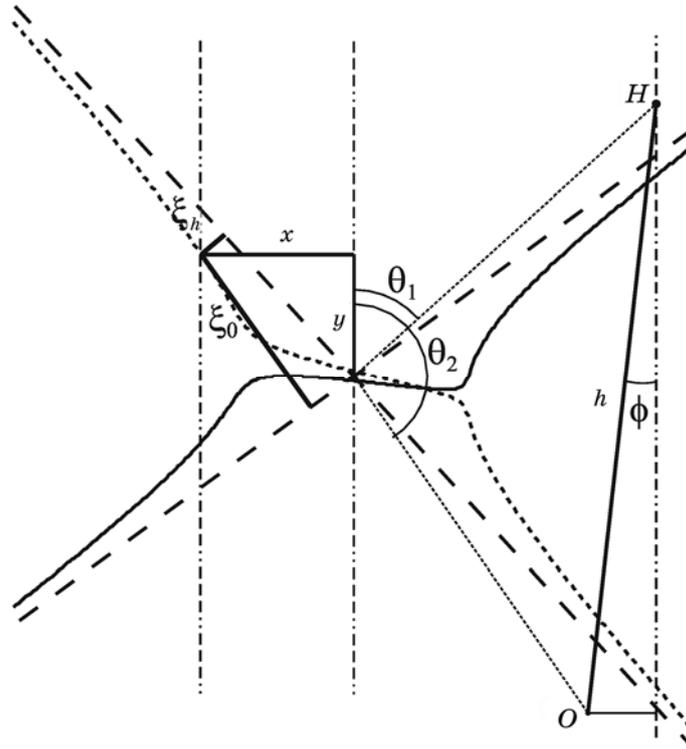


Рис. 3. Проекция дисперсионной поверхности вблизи точного брэгговского положения в геометрии Брэгга ($\Delta\alpha = 5''$).

$$\theta_1 = \arctan \left| \frac{X_0 - h \sin \varphi}{z - Y_0} \right|, \quad \theta_2 = \pi - \arctan \left| \frac{X_0}{Y_0} \right|,$$

а координаты X_0 и Y_0 являются координатами относительно точки O точного брэгговского положения, т. е. точки пересечения двух окружностей радиусами n с центрами в точках O и H (точки Лорентца):

$$X_0 = -\sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cos \varphi + \frac{h \sin \varphi}{2}, \quad Y_0 = \sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \sin \varphi + \frac{z}{2}.$$

Подставив (10) в (9), получим

$$\cos \theta_1 \cos \theta_2 y^2 \pm x \sin(\theta_1 + \theta_2) y + x^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 - \frac{1}{4} C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0,$$

откуда найдем координату y :

$$y = \frac{\pm x \sin(\theta_1 + \theta_2)}{2 \cos \theta_1 \cos \theta_2} \times \left(\mp \sqrt{x^2 \sin^2(\theta_1 + \theta_2) - \cos \theta_1 \cos \theta_2 (4x^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}})} \right). \quad (11)$$

Необходимо также учитывать сортировку корней по величине мнимой части.

Данный подход позволяет достаточно точно решить дисперсионное уравнение вблизи точного положения Брэгга, однако вдали от точки Лорентца он неприменим (поскольку тут окружности аппроксимируются прямыми линиями). Выигрыш в скорости расчета получается в 6–10 раз по сравнению с численным решением формулы (7), что весьма неплохо.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УПРОЩЕННОГО ДИСПЕРСИОННОГО УРАВНЕНИЯ 2-Й СТЕПЕНИ ВБЛИЗИ УГЛА ВУЛЬФА–БРЭГГА В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ

В геометрии Лауэ координаты ξ_0 и ξ_h будут выражаться через декартовы координаты следующим образом:

$$\xi_0 = y \sin \theta_2 \pm x \cos \theta_2, \quad \xi_h = y \sin \theta_1 \pm x \cos \theta_1, \quad (12)$$

но и сами координаты x и y будут иметь несколько иное значение (рис. 4)

Углы θ_1 и θ_2 будут переопределены через X_0 и Y_0 следующим образом:

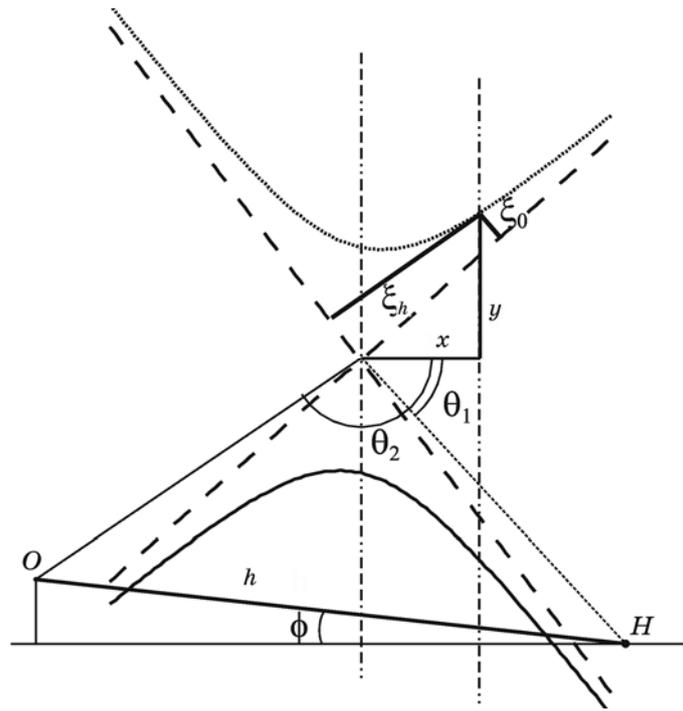


Рис. 4. Проекция дисперсионной поверхности вблизи точного брэгговского положения в геометрии Лауэ ($\Delta\alpha = 5''$).

$$\theta_1 = \arctan \left| \frac{Y_0 + h \sin \varphi}{z - X_0} \right|, \quad \theta_2 = \pi - \arctan \left| \frac{Y_0}{X_0} \right|,$$

а координаты X_0 и Y_0 :

$$X_0 = \sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \sin \varphi + \frac{z}{2}, \quad Y_0 = -\sqrt{n^2 - \left(\frac{h}{2}\right)^2} \cos \varphi - \frac{h \sin \varphi}{2}.$$

Подставив (12) в (9), получим:

$$\sin \theta_1 \sin \theta_2 y^2 \pm x \sin(\theta_1 + \theta_2) y + x^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \frac{1}{4} C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0.$$

Откуда найдем координату y :

$$y = \frac{\pm x \sin(\theta_1 + \theta_2)}{2 \sin \theta_1 \sin \theta_2} \times \\ \times \left(\mp \sqrt{x^2 \sin^2(\theta_1 + \theta_2) - \sin \theta_1 \sin \theta_2 (4x^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 - C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}})} \right).$$

СРАВНЕНИЕ «ТОЧНОЙ» ДИСПЕРСИОННОЙ КРИВОЙ С «ПРИБЛИЗИТЕЛЬНОЙ»

В литературе (например, [4]) имеется часто используемая приближительная формула для y , которая в симметричном случае (при $\varphi = 0$ на рис. 1) принимает вид

$$y = \pm \sqrt{\beta^2 - 4C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}, \quad (13)$$

где $\beta = 2(\alpha - \theta_B) \sin 2\theta_B$.

Как видно из приведенных графиков (рис. 5), приближительное решение весьма неплохо отражает поведение дисперсионной поверхности вблизи угла Вульфа-Брэгга. Однако, как видно из рисунка, для действительных частей волновых векторов направление вектора Пойнтинга при прохождении через точное брэгговское положение очень сильно изменяется, что не соответствует действительности. Кроме того, из дисперсионной кривой для мнимой части волновых векторов видно, что вдали от точного брэгговского положения в приближительном методе поглощение стремится к нулю, а значит, возникает необходимость вносить дополнительно поглощение при расчете кривых качания. Еще один недостаток упрощенного подхода — его неприменимость вдали от брэгговского положения, поскольку тут окружности дисперсионной кривой аппроксимируются прямыми (асимптоты на графике для действительной части волновых векторов).

В геометрии Лауэ совпадение численного и приближительного аналитического методов значительно лучше (с точностью до тол-

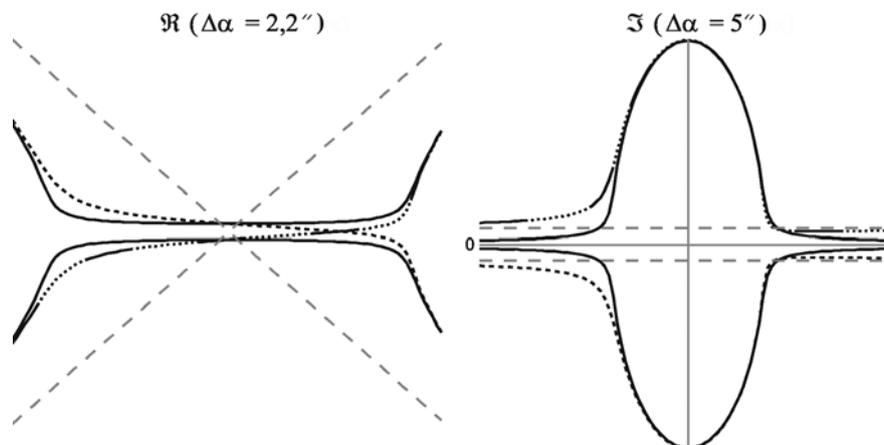


Рис. 5. Пунктирные кривые — «точное» решение дисперсионного уравнения по формуле (6); сплошные — «приближительное» по формуле (13).

щины линии дисперсионной кривой на графике), а значит, применение этого подхода вблизи угла Вульфа–Брэгга более оправдано.

Тут и далее \Re обозначает действительную часть, а \Im — мнимую. Все рисунки проекции дисперсионной поверхности вблизи точки Лорентца приведены для диапазона углов падающей волны $\Delta\alpha = 5''$ (по $2,5''$ слева и справа от точного угла Вульфа–Брэгга), если не указано иное.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ФИЗИЧЕСКИ ВАЖНЫХ ЧАСТНЫХ СЛУЧАЕВ ОПИСАННЫМИ ВЫШЕ ПОДХОДАМИ

Кроме описанных выше методов решения дисперсионных уравнений были также реализованы следующие:

- 1) предложенный в [8] метод, где введено обозначение $K\delta\vec{n} = \vec{k}_0 - \vec{K}_0$ и полученное уравнение 4-й степени решается численно;
- 2) численное решение уравнения для D (формула (3));
- 3) аналитические приближительные формулы Fukamachi [6].

Однако результаты применения первого метода полностью совпадали с решением формулы (6), разница только в геометрической интерпретации (уравнение четвертой степени необходимо решать относительно неизвестной δ , а не y). Вторым методом с точностью до оговоренной выше (см. (4)) замены также сводится к решению уравнения (6). Что касается третьего метода, то результат Fukamachi лишь немного отличался от решения формулы (11), поскольку при выводе этого метода были отброшены квадраты мнимой части волновых векторов для того, чтобы решить задачу перехода от векторных уравнений к скалярным алгебраически, в отличие от описанного в данной статье геометрического подхода.

Сравнение численного решения (6) и аналитического (11) показывает, что вблизи точки Лорентца графики совпадают с точностью до толщины линии (в диапазоне углов падения в пределах одного градуса), однако на расстоянии нескольких градусов от угла Вульфа–Брэгга приближенный аналитический подход (11) становится слабо применим.

Приведенные в табл. 1 и 2 графики рассчитывались для кристалла Si с ориентацией плоскостей (333) для π -поляризации Си K_α -излучения в симметричной геометрии Брэгга. Корни уравнений сортировались с учетом требования непрерывности дисперсионных кривых, что в случае Брэгга приводило к физической целесообразности формулы (8) для отражения от полубесконечного кристалла. В строках таблицы представлены сверху вниз: действительная и мнимая части волновых векторов вблизи точки Лорентца и коэффициент отражения от полубесконечного кристалла (см. (8)).

Как и следовало ожидать, вдали от точного положения Брэгга как мнимая, так и действительная части волновых векторов стре-

мятся к их значению в кристалле n (пунктирные прямые на графиках), как в случае одной сильной волны.

В первом столбце табл. 1 представлена проекция дисперсионной поверхности на плоскость дифракции при описанных выше параметрах.

При равенстве нулю мнимой части χ_h (второй столбец табл. 1) все графики становятся строго симметричными, что говорит о том, что асимметрию вносит именно мнимая часть χ_h .

Если же равна нулю действительная часть χ_h (первый столбец табл. 2), тогда, как и следовало ожидать, дифракция на кристалле очень ослабевает и пик отражения становится очень узким (послед-

ТАБЛИЦА 1.

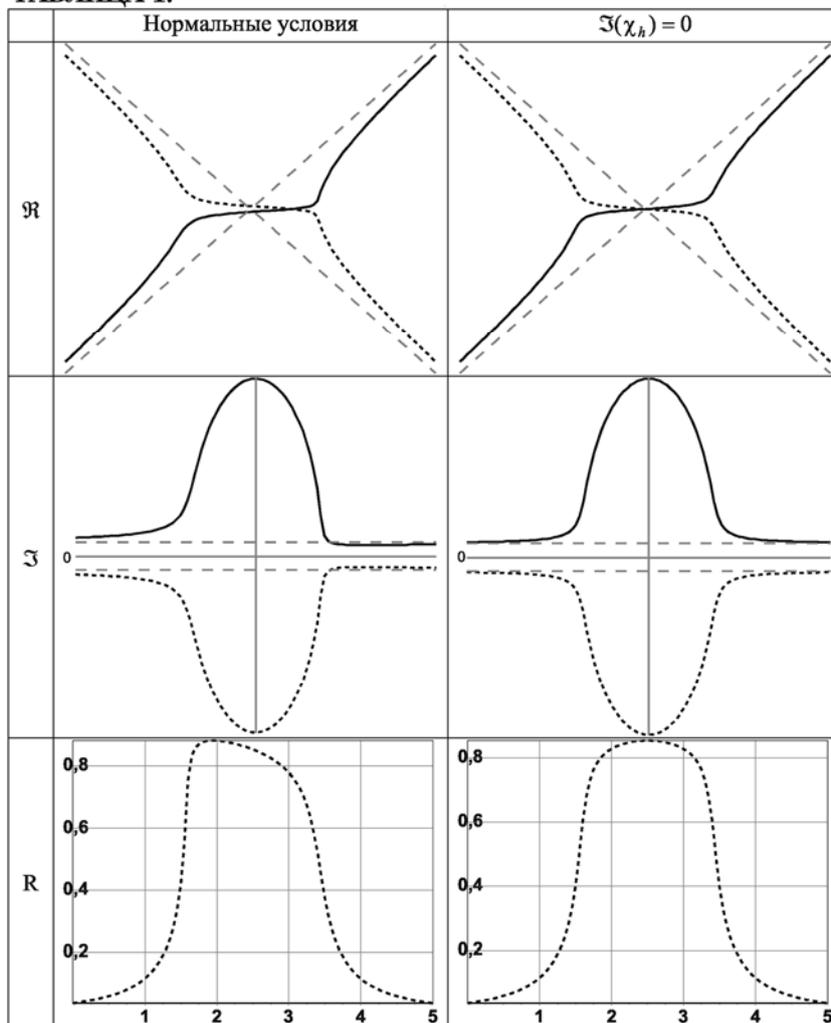
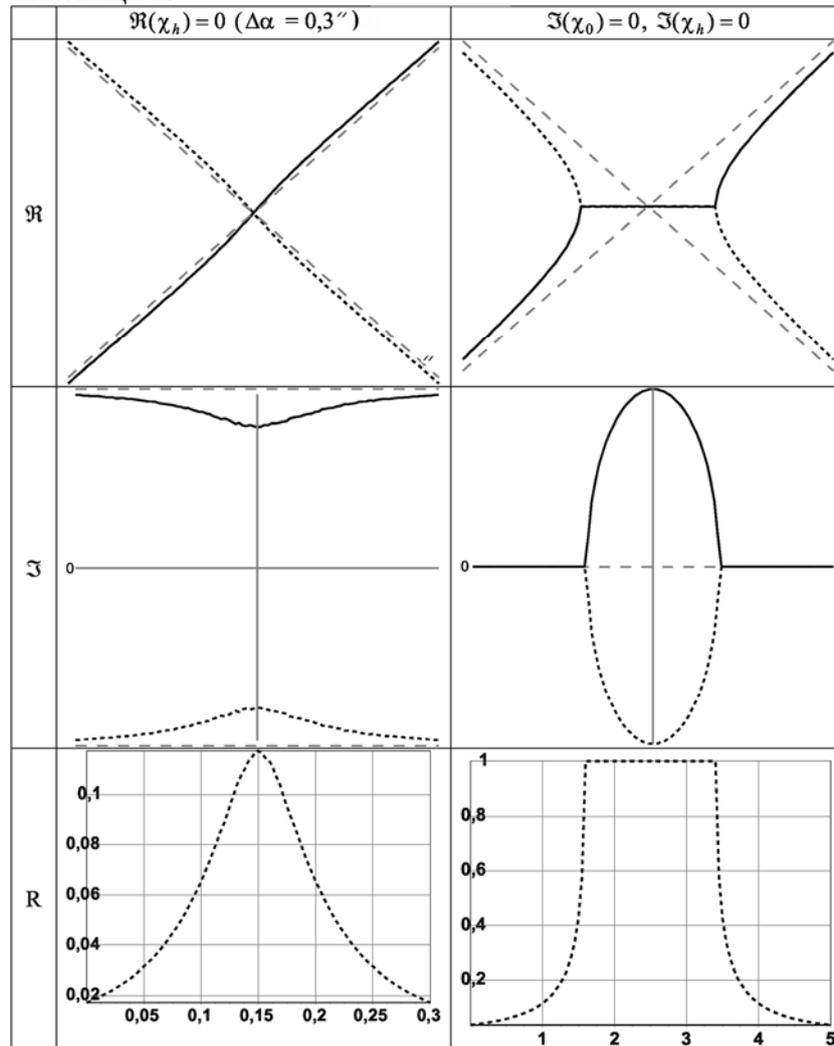


ТАБЛИЦА 2.



ний график в первом столбце). Кроме того, ход действительной части дисперсионных кривых в этом случае напоминает случай Лауэ (рис. 4).

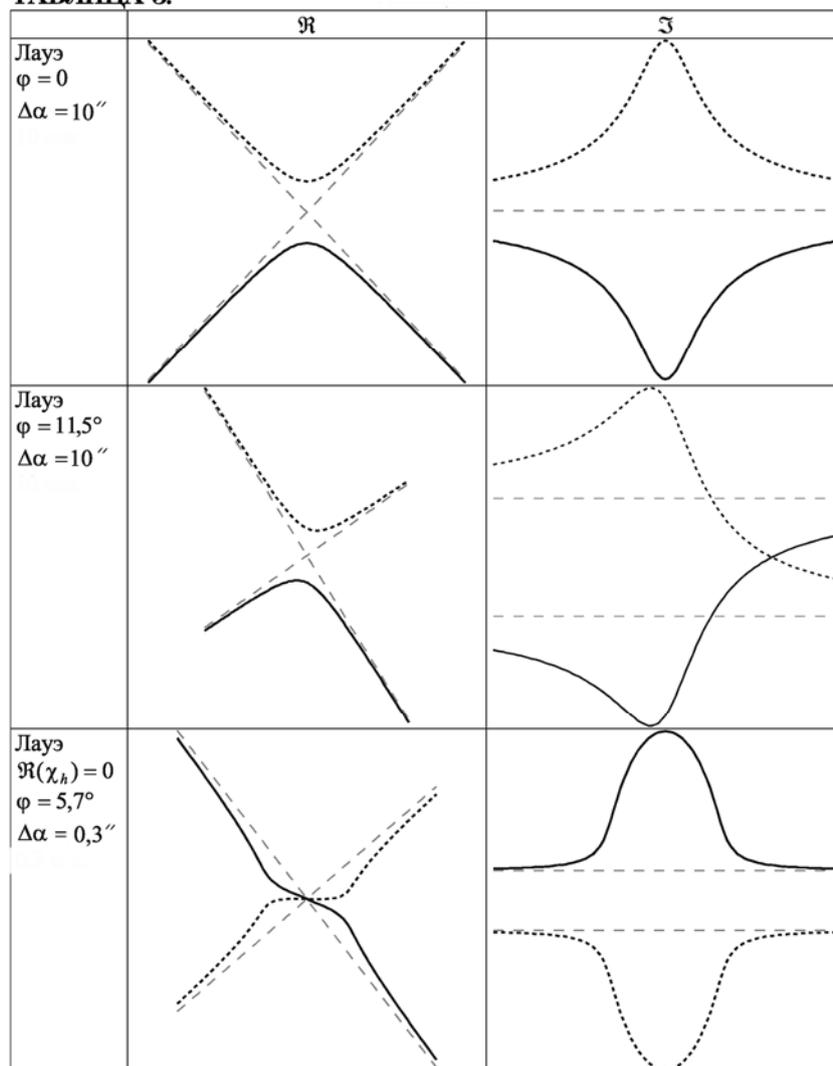
Самый интересный крайний случай — равенство нулю мнимых частей как χ_0 , так и χ_h (второй столбец табл. 2). Именно эту картинку для мнимой и действительной частей волновых векторов в кристалле чаще всего выдают за дисперсионную кривую. В этих условиях исчезают как поглощение, так и асимметрия и появляется область полного отражения. Кроме того, только в этом случае можно говорить о дисперсионной кривой в случае Брэгга как о двух гипер-

болах (и то только в случае неправильной сортировки корней!). Также из этих графиков видно, что только в случае чисто действительного дисперсионного уравнения можно говорить о «диаметре» дисперсионной поверхности в геометрии Брэгга.

СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИИ В ГЕОМЕТРИЯХ БРЭГГА И ЛАУЭ

При тех же условиях, что и для геометрии Брэгга, построены дис-

ТАБЛИЦА 3.



персионные кривые в геометрии Лауэ. В этом случае для сортировки корней можно воспользоваться вполне физическим требованием отсутствия скачка на графике мнимой части волновых векторов. Тогда получаются графики, приведенные в табл. 3.

В первой строке таблицы изображен ход действительной и мнимой частей волнового вектора в симметричной геометрии Лауэ. Как и следовало ожидать, проекция действительной части на плоскость дифракции представляет собой две гиперболы, асимптотичные к действительной части показателя преломления n . Мнимые части обоих волновых векторов положительны. Это говорит о том, что поглощение положительно для обоих сильных волновых полей, возникающих в кристалле, правда, для одного волнового поля оно больше, а для другого меньше, как и было описано в литературе [1].

В случае асимметричной геометрии Лауэ (вторая строка табл. 2) ситуация сильно меняется: поглощение на одной ветви при некотором значении угла падения становится больше поглощения на второй ветви. Это достаточно интересный результат, недостаточно описанный в литературе (справедливости ради надо отметить, что подобный график для мнимой части волнового вектора в этом случае приведен в [3]).

В случае, когда действительная часть χ_h обращается в ноль, вид дисперсионной кривой (третья строка табл. 2) становится практически идентичным ее виду в геометрии Брэгга (табл. 1), однако и в этом случае поглощение для обеих ветвей остается положительным.

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ НАХОЖДЕНИЯ ВОЛНОВОГО ВЕКТОРА НА ВИД КРИВОЙ КАЧАНИЯ

На рис. 6 и 7 приведены кривые качания от сверхрешеток, смоделированные рекурсивным методом Бартелза и др. [9] для идеальных недеформированных слоев. Данный метод достаточно точен для так называемой «стандартной дифракции» плоской волны на кристалле. При выводе данного метода не предполагается близость к точному положению Брэгга [4], а только условие слабости еще двух волновых полей, существующих в кристалле (это несправедливо только в некоторых экзотических случаях, например, в скользящей геометрии). Конечно, как раз в этих «экзотических случаях» превосходство численного метода нахождения волновых векторов должно проявиться особо явно, однако этот момент будет рассмотрен в следующих работах.

В приведенных на рисунках кривых качания (отражение (400)) сплошная кривая соответствует численно найденным волновым векторам, а пунктирная — найденным по приближительной аналитической формуле (13).

Для сверхрешеток, состоящих из материалов с близкими пара-

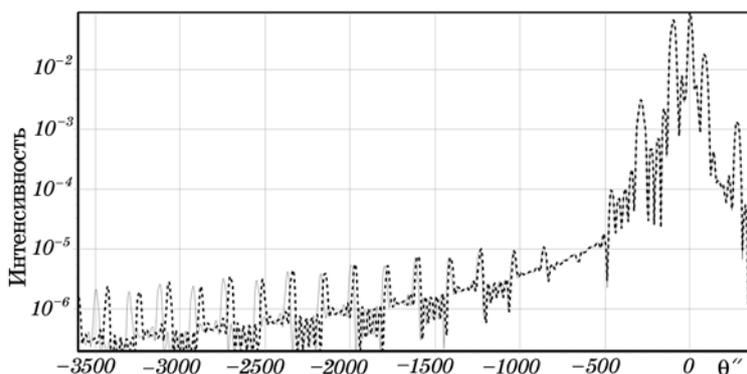


Рис. 6. Сверхрешетка AlAs/GaAs на GaAs (5 пар слоев по $5 \cdot 10^{-8}$ м каждый).

метрами, оба рассматриваемых метода дают достаточно похожие кривые качания вблизи угла Вульфа–Брэгга, однако, как и следовало ожидать, на отстройках по углу более градуса от подложки начинаются заметные расхождения (рис. 6).

Совсем иначе обстоит дело для сверхрешеток с сильно отличающимися постоянными решетки. Тут кривые качания отличаются очень сильно даже вблизи пика подложки. Данный факт объясняется тем, что рентгеновские лучи, падающие на кристалл под углами, близкими к брэгговским для подложки, могут быть весьма далеки от угла Вульфа–Брэгга для конкретных слоев. Это значит, что для слоев с параметром решетки, сильно отличным от, например, подложки, формула (13) и построенный на ней приблизительный подход неприменимы. На рис. 7 представлена кривая качания для сверхрешетки GaAs/InAs. Угол Вульфа–Брэгга для InAs равен $30,57^\circ$, а для GaAs — $33,03^\circ$, т. е. отличаются на $2,5^\circ$. Кроме того, если слои InAs тонкие, то необходимо учесть, что их постоянная решетки в латеральном на-

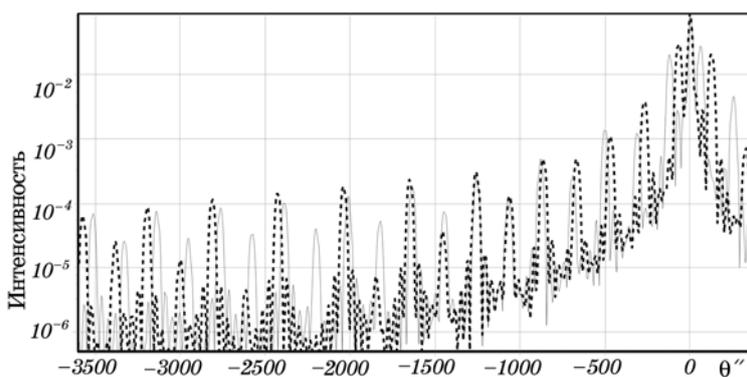


Рис. 7. Сверхрешетка InAs/GaAs на GaAs (5 пар слоев по $5 \cdot 10^{-8}$ м каждый).

правлении практически равна этому параметру подложки из GaAs и соответственно межплоскостное расстояние в направлении нормали к поверхности увеличивается, а значит, разность углов Вульфа–Брэгга в разных слоях может достичь 5° . Очевидно, что для таких отстроек от точки Лорентца допущенные при выводе формулы (13) аппроксимации неприменимы и этот метод не работает. Попытка ввести поправку на рассогласование постоянной решетки [4] практически не улучшает ситуацию.

ВЫВОДЫ

Как и следовало ожидать в случае Брэгга, сечение дисперсионной поверхности плоскостью дифракции не является просто повернутыми на 90° двумя гиперболами, которые представляют собой дисперсионную кривую в случае Лауэ. Это следовало хотя бы из того, что вектор Пойнтинга для дифрагированной волны должен в целом сохранять свое направление при переходе угла падения через угол Вульфа–Брэгга, а для двух гипербол это возможно только при наличии скачка с одной на другую, чего в реальности не наблюдается.

Как видно из графиков в случае Брэгга, поглощение (мнимая часть волнового вектора) для одной из ветвей положительно (затухание), а для другой — отрицательно (усиление). Соответственно, для полубесконечного кристалла физически целесообразна только первая ветвь. В случае Лауэ при симметричной геометрии для одной из ветвей поглощение больше, для другой меньше, но для обеих ветвей идет затухание. Однако в случае несимметричной геометрии ситуация меняется: при некоторых углах падения луча на кристалл сильно поглощающая и слабо поглощающая ветви меняются местами, т. е. в толстых кристаллах в зависимости от угла падения на выходе будет доминировать либо одно, либо другое волновое поле.

Влияние более точного численного метода нахождения волновых векторов на вид кривой качания становится весьма заметным вдали от точного положения Брэгга, именно там, где проявляются наиболее интересные эффекты, связанные с квантовыми точками и другими квантово-размерными элементами. Кроме того, численное нахождение волновых векторов значительно улучшает анализ структур, состоящих из материалов с сильно отличающимися параметрами решетки.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. B. Batterman and H. Cole, *Dynamical Diffraction of X-Rays by Perfect Crystals. Reviews of Modern Physics* (1964).
2. A. Authier, *Ewald Waves in Theory and Experiment (Dynamical Theory of X-Ray Diffraction)* (ASRDF: 1970).

3. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford: 2001).
4. V. Holý, U. Pietch, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Springer: 1999).
5. T. Fukamachi, R. Negishi, and T. Kawamura, *Acta Crystallogr. A*, **41**: 253 (1995).
6. T. Fukamachi, R. Negishi, S. Zhou et al., *Acta Crystallogr. A*, **58**: 552 (2002).
7. *Numerical Recipes in C* <http://www.nr.com/>.
8. X. Huang and M. Dudley, *Acta Crystallogr. A*, **59**: 163 (2003).
9. W. J. Bartels, J. Hornsrta, and D. J. W. Lobeek, *Acta Crystallogr. A*, **42**: 539 (1986).