

## ДИНАМИЧЕСКАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В СВЕРХРЕШЕТКАХ С РАЗЛИЧНЫМ ГРАДИЕНТОМ ДЕФОРМАЦИИ В ПЕРЕХОДНОЙ ОБЛАСТИ

© А.А. Дышеков, Ю.П. Хапачев, Д.А. Тарасов

Кабардино-Балкарский государственный университет,  
360004 Нальчик, Россия  
(Поступила в Редакцию 3 ноября 1995 г.)

Для анализа динамической дифракции в сверхрешетках с различным градиентом деформации в переходной области между слоями использовано обобщенное метода зонных диаграмм. Показано, что общие особенности когерентного рассеяния на сверхрешетках требуют введения нового физического параметра — «параметра когерентности» сверхрешетки. Принципиальное отличие результатов динамической теории дифракции от кинематической приводит к зависимости угловых ширин сателлитов от параметра когерентности, а также от градиента деформации в области между слоями сверхрешеток. Последнее обстоятельство дает возможность ввести новую характеристику — «степень динамичности» сверхрешетки. Эта характеристика позволяет оценить величину интерфейса между слоями.

Развитие дифракционной рентгеновской оптики одномерно модулированных периодических структур — сверхрешеток (СР) — стимулируется следующими обстоятельствами. С одной стороны, это фундаментальная проблема когерентного рассеяния волн рентгеновского диапазона частот на искусственной сверхструктуре (эпитаксиальной или акустической), период которой значительно превышает межатомное расстояние [1]. С другой стороны, эпитаксиальные полупроводниковые и металлические СР находят все большее применение в приборостроении (опто- и акустоэлектроника) [2].

Для анализа когерентного рентгеновского рассеяния в рамках динамической теории дифракции в СР развиты различные подходы, которые можно условно разделить на три основных направления.

Первое направление основано на качественном анализе решений системы уравнений Такаги с помощью зонных диаграмм [3,4]. Второе направление базируется на формализме Эвальда-Лауэ, в котором динамическая дифракция описывается с помощью дисперсионных поверхностей, построенных в обратном пространстве [5,6]. В третьем направлении используются рекуррентные соотношения между амплитудами дифрагированной и проходящей волн, что является по существу обобщением дарвиновского подхода в динамической теории дифракции для СР [7,8]. Кроме того, развиты методы приближенного решения системы Такаги для СР, в частности представление собственных решений

системы Такаги [9]. Упомянутые подходы и результаты, к которым они приводят, подробно изложены в обзорах [9,10].

Постановка и решение задач динамической дифракции в СР приводили к тому, что основные закономерности образования кривой дифракционного отражения (КДО) от СР (основной максимум и система сателлитов) определялись единственным параметром — величиной отношения периода СР к длине экстинкции ( $T/\Lambda_{\text{ext}}$ ).

Существующая ситуация, однако, меняется при постановке следующих вопросов.

1) При заданной величине  $\Lambda_{\text{ext}}$  все существенные особенности КДО от СР определяются периодическим полем деформации  $\varepsilon(z)$ . Характеристики этого поля можно разделить на «внешние» и «внутренние». К «внешним» относятся период СР  $T$  и амплитуда деформации  $\varepsilon_0$ . Одной из важных «внутренних» характеристик является градиент деформации в переходной области между слоями СР, определяющий толщину интерфейса. Смысл разделения параметров СР на «внешние» и «внутренние» состоит в следующем. Величины  $T$  и  $\varepsilon_0$  определяют общие особенности динамической дифракции на СР, вне зависимости от конкретной модели. Это означает, что при фиксированных  $T$  и  $\varepsilon_0$  различные функциональные зависимости поля деформации (различные модели СР) дают дифракционную картину, общий вид которой остается неизменным. Поэтому ясно, что должен существовать некоторый универсальный физический параметр, который и определяет качественные особенности формирования волнового поля СР как следствие когерентного взаимодействия преломленной и дифрагированной волн. Универсальность этого параметра означает, что он должен зависеть одновременно и от периода  $T$ , и от амплитуды деформации  $\varepsilon_0$ . Приведенное рассуждение подводит к необходимости определения этого универсального параметра — «параметра когерентности» СР.

2) «Внутренние» параметры отражают особенности модели и в отличие от «внешних» определяют конкретные количественные соотношения в КДО. При этом остается неясным, для какой из моделей СР динамические эффекты рассеяния проявляются в наибольшей степени. Постановка такого вопроса приводит к новому понятию, которое можно условно назвать «степенью динамичности» СР. Эта характеристика может зависеть от ряда «внутренних» параметров, однако в данной работе нас будет интересовать влияние только одного такого параметра — градиента деформации в интерфейсе.

Цель данной работы состоит в определении указанных характеристик, задающих наряду с  $T/\Lambda_{\text{ext}}$  состояние волнового поля в СР, и в выяснении их влияния на параметры КДО.

## 1. Параметр когерентности СР

Физический смысл параметра когерентности легче всего выяснить в простейшем случае симметричной дифракции по Брэггу от прямоугольной СР с одинаковыми толщинами слоев. Пусть на первом полупериоде СР межплоскостное расстояние  $d_1$ , а на втором —  $d_2$ . Применение теории упругонапряженного состояния многослойных эпитаксиальных структур к СР показывает, что в рентгенодифракционном эксперименте измеряется среднее значение деформации ( $\varepsilon$ ) по периоду

СР  $T$  [11]. Поэтому выберем начало отсчета деформации от среднего значения межплоскостного расстояния  $\langle d \rangle = (d_1 + d_2)/2$ . Тогда угловое положение основного максимума будет соответствовать нулю. Полное изменение межплоскостного расстояния на периоде СР, состоящем из  $N$  слоев, составляет  $N\Delta d$ , где  $\Delta d = d_1 - \langle d \rangle$ . Воспользуемся формализмом описания рентгеновской дифракции в СР, впервые предложенным в [12], когда период СР рассматривается как единая одномерная макроскопическая ячейка. Тогда по аналогии с задачей кинематической дифракции от кристалла с монотонно меняющимся межплоскостным расстоянием [13] ясно, что все слои на полупериоде СР рассеиваются синфазно при выполнении условия  $N|\Delta d| < \langle d \rangle$ .

Таким образом, величина

$$\xi = N\Delta d / \langle d \rangle \quad (1)$$

определяет синфазное когерентное рассеяние на периоде СР, если  $|\xi| < 1$ , и несинфазное рассеяние, если  $|\xi| > 1$ . Учитывая, что  $N = T/\langle d \rangle$ , а амплитуда изменения деформации  $\varepsilon_0$  при данном выборе начала отсчета представляет собой  $\Delta d/\langle d \rangle$ , преобразуем параметр  $\xi$  к следующему виду:

$$\xi = \frac{N\Delta d}{\langle d \rangle} = \frac{T\Delta d}{\langle d \rangle^2} = \frac{T\varepsilon_0}{\langle d \rangle}.$$

Заменяя в последнем выражении  $\langle d \rangle$  согласно условию Вульфа-Брэгга, получим следующий вид параметра когерентности СР:

$$\xi = \frac{2T\varepsilon_0 \sin \theta_B}{\lambda}, \quad (2)$$

где  $\theta_B$  — угол Брэгга, соответствующий среднему межплоскостному расстоянию  $\langle d \rangle$ ,  $\lambda$  — длина волны падающего излучения.

Наиболее просто увидеть влияние параметра когерентности СР при кинематической дифракции. Поскольку в этом случае при рассеянии волн амплитуды их от различных атомных плоскостей одни и те же, то КДО от СР представляет собой систему сателлитов одинаковой угловой ширины, определяемой полной толщиной СР. Ясно, что при этом параметр когерентности является единственной характеристикой, определяющей интенсивность основного максимума и сателлитов в точном брэгговском положении.

Этот факт непосредственно виден для гармонической модели СР, для которой амплитуда рассеяния дифракционной волны пропорциональна [3]

$$R \sim \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(\xi), \quad (3)$$

где  $J_m(\xi)$  — функции Бесселя первого рода, определяющие амплитуды основного максимума и сателлитов соответствующих порядков.

При строгом рассмотрении кинематического интеграла [14] параметр  $\xi$  в общем случае оказывается равным

$$\xi = \frac{2T\varepsilon_0}{\lambda \sin(\theta_B \pm \varphi)} \sin^2 \theta_B \left( \cos^2 \varphi \pm \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \theta_B \sin 2\varphi \right), \quad (4)$$

где  $\varphi$  — угол между рассеивающей плоскостью и поверхностью кристалла. Здесь и в дальнейшем в выражениях, содержащих знаки  $\pm$  и  $\mp$ , верхний знак соответствует случаю, когда рентгеновская волна падает под углом  $\theta_B - \varphi$ , нижний — под углом  $\theta_B + \varphi$  к поверхности кристалла. В случае симметричной дифракции по Брэггу ( $\varphi = 0$ ) формула (4) для  $\xi$  переходит в (2).

Лежащая в основе динамической теории дифракции концепция единого волнового поля не позволяет определить влияние параметра когерентности на форму КДО непосредственно из наглядных физических соображений. Поэтому необходимо рассмотреть динамическое рассеяние на конкретных моделях СР.

Если ограничиться при решении задачи динамической дифракции на СР определением ширин и угловых положений сателлитов, то оказывается, что это возможно в рамках формализма зонных диаграмм. Следовательно, для выяснения роли параметра когерентности использование этого подхода представляется наиболее естественным.

Отметим, что указанное ограничение оправдано следующими обстоятельствами. Во-первых, упомянутые характеристики связаны по существу с относительным измерением угловых расстояний, производимым прецизионно. Во-вторых, их оказывается вполне достаточно для определения структурных параметров СР [10].

## 2. Метод зонных диаграмм в динамической теории дифракции в СР

Динамическая дифракция для кристалла с модуляцией межплоскостного расстояния описывается системой уравнений Такаги [15]

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i2f\chi_H\eta\gamma_H/\gamma_0 \\ i2f\chi_H\eta & -i2(\kappa + \xi X(\tau)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где

$$\tau = \pi z/T, \quad \kappa = f\beta_H = -f\left(2\Delta\theta \sin 2\theta_B + \chi_0(1 - \gamma_H/\gamma_0)\right),$$

$$f = -\frac{T}{2\lambda \sin(\theta_B \pm \varphi)}.$$

Здесь  $z$  — координата по нормали в глубь кристалла,  $\eta$  — фактор поляризации,  $\chi_0$ ,  $\chi_H$  и  $\chi_{\bar{H}}$  — фурье-компоненты поляризуемости кристалла,  $\gamma_0 = \sin(\theta_B \mp \varphi)$  и  $\gamma_H = -\sin(\theta_B \pm \varphi)$  — направляющие косинусы преломленной и дифрагированной волн соответственно,  $X(\tau) = X(\tau + \pi)$  — периодическая функция, задающая модель СР.

Математическая структура решений уравнений с периодическими коэффициентами (таких как (5)) такова, что пространство параметров системы состоит из зон устойчивых и неустойчивых решений, разделенных переходными областями.

Каждая из зон характеризуется определенными соотношениями между параметрами системы. Физическая интерпретация неустойчивых решений в случае дифракции по Брэггу в полубесконечном кристалле

стоит в том, что дифрагированная волна в пределах данной области затухает по глубине кристалла, т.е. волна «выталкивается» из кристалла, формируя дифракционный максимум. Зоне устойчивых решений соответствует свободное распространение дифрагированной волны в глубь кристалла без образования дифракционного максимума. Подобная интерпретация требует сопоставления конкретной зоны с определенным угловым интервалом на КДО, для чего необходимо установить функциональную зависимость угловой переменной  $\beta_H$  (или  $\kappa$ ) от остальных параметров системы.

С помощью подстановки

$$\begin{pmatrix} E_0 \\ E_H \end{pmatrix} = e^{-i\kappa\tau} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{2f\chi_H\eta}{\kappa+\kappa_0} & \frac{2f\chi_H\eta}{\kappa-\kappa_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_H \end{pmatrix}$$

система Такаги (5) приводится к виду

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\kappa_0 & 0 \\ 0 & -i\kappa_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_H \end{pmatrix} + \frac{i\xi X(\tau)}{\kappa_0} \begin{pmatrix} \kappa - \kappa_0 & \kappa + \kappa_0 \\ -(\kappa - \kappa_0) & -(\kappa + \kappa_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_H \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где в случае дифракции по Брэггу ( $\gamma_H < 0$ )

$$\kappa_0^2 = \kappa^2 - \delta, \quad (7)$$

$$\delta = 4f^2\eta^2\chi_H\chi_H|\gamma_H|/\gamma_0. \quad (8)$$

Из (6) видно, что характер решения определяется соотношениями между тремя параметрами  $\kappa$ ,  $\kappa_0$ ,  $\xi$  и переходные области представляют собой поверхности. Однако выяснения структуры зон устойчивых и неустойчивых решений в пространстве параметров, т.е. определения переходных поверхностей, еще не достаточно для установления указанной функциональной связи.

Поясним сказанное. При проведении конкретного рентгенодифракционного эксперимента изменяется угловая переменная  $\kappa$ , а величины амплитуды деформации и периода СР (а значит,  $\xi$ ) остаются постоянными. Тем самым в пространстве параметров задается плоскость, параллельная координатной плоскости  $(\kappa_0, \kappa)$ . Для того чтобы определить тип решения при текущем  $\kappa$ , необходимо локализовать некоторое значение  $\kappa_0$  на прямой  $\kappa = \text{const}$ , лежащей в указанной плоскости. Локализация осуществляется заданием еще одного независимого соотношения  $\kappa_0 = \kappa_0(\kappa)$ , определяющего в плоскости  $\xi = \text{const}$  некоторую кривую. Пересечение этой кривой с прямой  $\kappa = \text{const}$  и дает необходимое значение  $\kappa_0$ .

Требуемое соотношение  $\kappa_0(\kappa)$  задается формулой (7). В работах [3,10] система (5) путем определенных приближений была сведена к уравнению Матье. В этом случае параметры уравнения Матье  $S$  и  $q$ , определяющие характер решения, выражаются через  $\kappa$ ,  $\kappa_0$ ,  $\xi$  следующим образом:

$$S = \kappa_0^2 + \xi^2/2, \quad q = 2\kappa\xi.$$

Соотношение  $S(q)$ , аналогичное  $\kappa_0(\kappa)$ , было введено в [3] и названо «геодезической линией». В общем же случае поверхность, задаваемую уравнением (7) в пространстве  $(\kappa_0^2, \kappa, \xi)$  параметров системы (5),

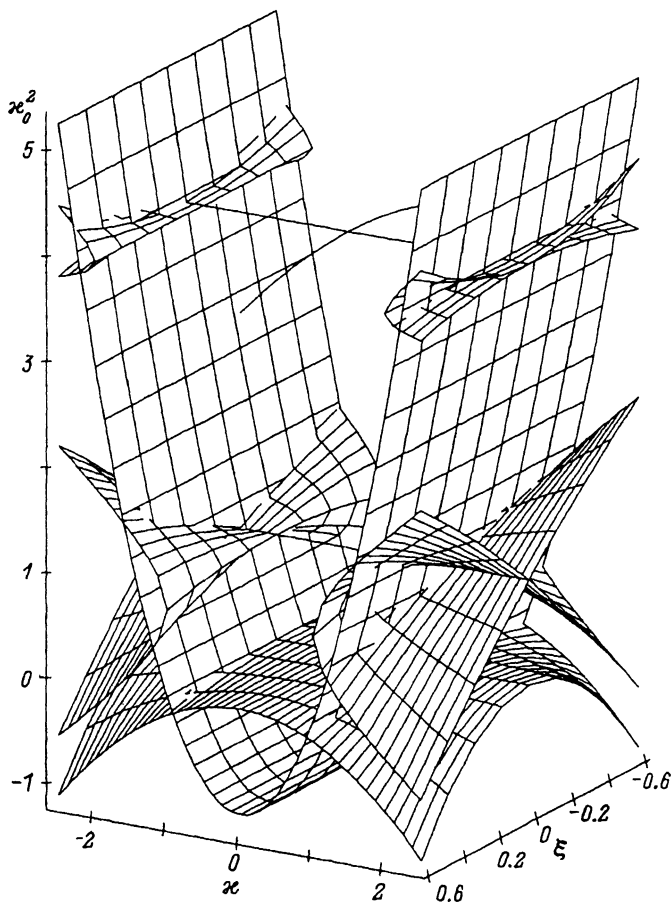


Рис. 1. Пересечение нулевой, первой и второй переходных поверхностей с «геодезической» (7) в пространстве параметров  $(x_0^2, x, \xi)$ .

можно по аналогии с [3] назвать «геодезической поверхностью». Она представляет собой параболический цилиндр (рис. 1).

Изложенный выше подход в рамках формализма зонных диаграмм позволяет рассматривать динамическую дифракцию в СР в общем виде и не использовать упрощения [3], приводящего задачу к уравнению Матье.

Существенно отметить, что приведенное рассуждение носит общий характер и не связано ни с выбором конкретной модели СР, ни с методом построения зонной диаграммы.

### 3. Применение метода зонных диаграмм для различных моделей СР

Для решения поставленной задачи естественно выделить предельный случай: прямоугольная СР с нулевой шириной переходной области (интерфейса) между слоями. С другой стороны, из класса СР с размытым интерфейсом (плавное изменение градиента деформации ме-

жду слоями) удобно выбрать гармоническую модель СР. При сохранении существа вопроса расчет для такой модели наименее громоздкий.

Гармоническая модель имеет вид

$$X(\tau) = \cos 2\tau. \quad (9)$$

Для модели (9) система Такаги (5) стандартными преобразованиями сводится к уравнению Хилла

$$\frac{d^2 u}{d\tau^2} + \left( S + 2\kappa\xi \cos 2\tau + \frac{\xi^2}{2} \cos 4\tau - i2\xi \sin 2\tau \right) u = 0. \quad (10)$$

Функция  $u(\tau)$  с точностью до фазового множителя, несущественного для последующего анализа, совпадает с амплитудой дифрагированной волны  $E_H$ .

Зонную диаграмму этого уравнения построим с помощью метода растянутых параметров [16]. В этом методе в ряд по степеням  $\xi$  разлагаются как решение  $u(\xi, \tau)$ , так и параметр  $S$ . Разложение  $S$  проводится в окрестностях точек  $n^2 = 0, 1, 4, 9, \dots$ , где происходит переход от одного типа решения к другому (от устойчивого к неустойчивому или наоборот). Таким образом, будем искать так называемое равномерно пригодное разложение вида

$$u(\xi, \tau) = u_0(\tau) + \xi u_1(\tau) + \xi^2 u_2(\tau) + \dots,$$

$$S(\pm n) = n^2 + \xi s_1 + \xi^2 s_2 + \dots,$$

в котором коэффициенты  $s_i$  находятся из требования периодичности решения. Найденные выражения для нулевой, первой и второй переходных поверхностей уравнения (10) в координатах  $(\kappa_0^2, \kappa, \xi)$  приведены в таблице; верхний либо нижний знак в выражениях задает лист переходной поверхности. На рис. 1 показано пересечение переходных поверхностей с «геодезической».

Будем рассматривать образование отражений в интересующей нас плоскости  $\xi = \text{const}$ . Парно решая относительно угловой переменной  $\kappa$  полученные выражения с уравнением (7), найдем координаты точек пересечения переходных кривых и «геодезической линии». Эти точки определяют угловые интервалы формирования основного рентгенодифракционного максимума и сателлитов от СР. Полученные соотношения дают связь между структурными параметрами СР, условиями эксперимента и видом КДО (положениями и ширинами основного

Формулы переходных поверхностей для гармонической и прямоугольной моделей СР

Гармоническая модель	Прямоугольная модель
$\kappa_0^2(0) = -\frac{1}{2}\kappa^2\xi^2 + \dots$	$\kappa_0^2(0) = -\frac{\pi^2}{12}\kappa^2\xi^2 + \dots$
$\kappa_0^2(\pm 1) = 1 - \frac{1}{2}\xi^2 \pm \xi\sqrt{\kappa^2 - 1} + \dots$	$\kappa_0^2(\pm n) = n^2 - \xi^2 \pm \frac{4}{\pi n}\xi\sqrt{\kappa^2 - n^2} + \dots,$ $n = 1, 3, 5, \dots$
$\kappa_0^2(\pm 2) = 4 - \frac{2}{3}\xi^2 + \frac{1}{6}\kappa^2\xi^2 \pm$ $\pm \frac{1}{4}\kappa\xi^2\sqrt{\kappa^2 - 4} + \dots$	$\kappa_0^2(\pm n) = n^2 - \xi^2 + \frac{1}{n^2}\kappa\xi^2 \left( \kappa \pm 2\sqrt{\kappa^2 - n^2} \right) + \dots,$ $n = 2, 4, 6, \dots$

рентгенодифракционного максимума и сателлитов). Не приводя самих этих выражений, отметим, что при выполнении условия

$$\varepsilon_0 < |\chi_H| \quad (11)$$

они приобретают особенно простой вид. Отметим, что условие (11), в частности, отвечает дифракции на ультразвуковой СР [1,5,6]. В результате для угловых ширин сателлитов первого и второго порядков имеем следующее компактное выражение:

$$\Delta\theta(m) = \begin{cases} \frac{1}{2}\Delta\theta(0)\xi Q(m), & m = \pm 1, \\ \frac{1}{8}\Delta\theta(0)\xi^2 Q(m), & m = \pm 2. \end{cases} \quad (12)$$

В (12) введены следующие обозначения:

$$Q(m) = \left( 1 + \left( \frac{T}{\pi m \Lambda_{\text{ext}}} \right)^2 \right)^{-1/2}, \quad (13)$$

а ширина основного рентгенодифракционного максимума идеального кристалла

$$\Delta\theta(0) = \frac{2\lambda}{\pi \Lambda_{\text{ext}}} \quad (14)$$

выражена через длину экстинкции  $\Lambda_{\text{ext}} = \frac{\lambda}{\pi\eta} \sqrt{\frac{\gamma_0 |\gamma_H|}{|\chi_H \chi_H|}}$ .

Формула (12) совпадает с приведенными в [8,9] выражениями для сателлитов первого порядка. Корректное выражение для ширин сателлитов второго порядка (12) получено впервые.

Из общих формул для ширин сателлитов следует, что при определенных соотношениях между  $\varepsilon_0$  и  $\chi_H$  «геодезическая кривая» не пересекает некоторые области неустойчивого решения. В рамках рассматриваемого здесь формализма это означает возможность исчезновения соответствующих сателлитов. Так, например, угловая ширина сателлитов первого порядка для гармонической СР становится равной нулю при выполнении неравенства  $4\delta \leq \xi^2$  или, что то же самое, согласно (4), (8),  $\lambda |\gamma_H| / \Lambda_{\text{ext}} \leq \pi \varepsilon_0 |h| / 4$ .

Зонная диаграмма уравнения (10) приведена на рис. 2 сплошной линией. Показано образование основного рентгенодифракционного максимума и сателлитов первого и второго порядков для дифракции по Брэггу в симметричной геометрии.

Выясним теперь особенности КДО для прямоугольной модели

$$\chi(\tau) = \begin{cases} 1, & 0 \leq \tau < \pi/2, \\ -1, & \pi/2 \leq \tau < \pi, \end{cases} \quad X(\tau) = X(\tau + \pi). \quad (15)$$

Для этого проще всего использовать следующий подход. Построим матрицу монодромии  $A$  (матрицу отображения за период) системы (5) [17,18]. Известно, что граница устойчивости задается условием [19]

$$|Tr A| = 2,$$



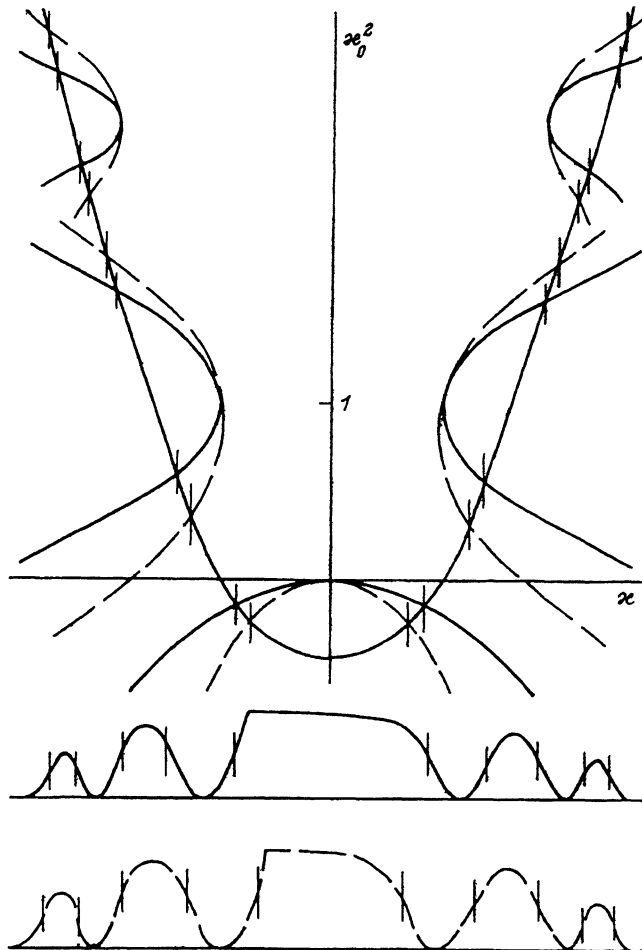


Рис. 2. Зонные диаграммы для гармонической (сплошная линия) и прямоугольной (штриховая линия) моделей СР. Показано образование основного рентгенодифракционного максимума и спутников в случае симметричной дифракции по Бреггу.

которое для нашей задачи имеет вид

$$\left| 2 \cos \frac{\pi \omega_1}{2} \cos \frac{\pi \omega_2}{2} - 2 \frac{\kappa_0^2 - \xi^2}{\sqrt{(\kappa_0^2 + \xi^2)^2 - 4\kappa^2 \xi^2}} \sin \frac{\pi \omega_1}{2} \sin \frac{\pi \omega_2}{2} \right| = 2, \quad (16)$$

где

$$\omega_1 = \sqrt{\kappa_0^2 + \xi^2 + 2\kappa\xi}, \quad \omega_2 = \sqrt{\kappa_0^2 + \xi^2 - 2\kappa\xi}.$$

Уравнение (16) в неявном виде задает переходные поверхности для прямоугольной СР. Явный вид переходных поверхностей, полученных из (16) разложением  $\kappa_0^2$  в ряд по малому параметру  $\xi$ , приведен в таблице.

В отличие от гармонической СР формулы прямоугольной модели задают уравнения переходных поверхностей любого порядка. Поэтому, используя приближение (11), можно записать выражения для угловых ширин всех спутников

$$\Delta\theta(m) = \begin{cases} \frac{2}{\pi m^2} \Delta\theta(0) \xi Q(m), & m = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots, \\ \frac{1}{m^2} \Delta\theta(0) \xi^2 Q(m), & m = \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots \end{cases} \quad (17)$$

Отметим, что величина  $Q(m)$ , которая входит как в (11), так и в (17), является следствием динамического характера рассеяния в СР, поскольку в ней содержится фактор  $T/\Lambda_{\text{ext}}$ . Аналогичные формулы работы [8] не содержат  $Q(m)$  и, таким образом, принципиально отличаясь от (17), не учитывают эффектов динамического рассеяния.

Переходные кривые для прямоугольной СР показаны на рис. 2 штриховыми линиями.

Расстояние между основным рентгенодифракционным максимумом и спутником  $m$ -го порядка при выполнении условия (11) для обеих моделей СР выражается формулой (см., например, [9,10])

$$\Delta\theta(0, m) = \frac{m\lambda|\gamma_H|}{TQ(m)\sin 2\theta_B}.$$

Обратимся теперь к анализу выражений (12), (17), полученных для ширин спутников разных моделей. Эти формулы принципиально отличаются от результатов кинематической теории, где, как известно, основной рентгенодифракционный максимум и спутники имеют одинаковую ширину для любой модели СР [10].

Выражения (12), (17) показывают, что при динамической дифракции на СР спутники разных порядков имеют разную ширину, вне зависимости от модели. Причиной этого является зависимость ширин спутников от параметра когерентности  $\xi$ . В этом проявляется, как указывалось выше, универсальность параметра  $\xi$ . Поскольку в нашем случае формулы (12), (17) получены при условии  $|\xi| < 1$ , то ясно, что ширины спутников меньше ширины основного максимума, что и наблюдалось экспериментально от ряда полупроводниковых СР (см., например, [19]). С увеличением  $|\xi|$  начинает проявляться кинематический характер рассеяния (например, увеличение  $\epsilon_0$  при постоянном  $T$  [6]).

Вместе с тем абсолютное значение ширин спутников  $\Delta\theta(m)$  для каждой из моделей определяется соответствующим числовым множителем — «амплитудой». Это означает, что ширины спутников зависят не только от  $\xi$  и условий дифракции, но и от характера изменения деформации на периоде СР, т.е. модели СР.

Таким образом, в динамической теории дифракции на СР следует ввести новую характеристику — «степень динамичности» СР. В качестве такой характеристики можно взять величину отклонения от единицы отношений ширин спутников различных порядков [20]

$$\sigma(m/n) = \frac{\Delta\theta(m)}{\Delta\theta(n)}, \quad m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (18)$$

Кинематической теории соответствует  $\sigma = 1$ . Ясно, что чем больше отличие величины  $\sigma(m/n)$  от единицы, тем в большей степени проявляются динамические эффекты при формировании единого волнового поля в СР.

Вычисленные для обеих моделей значения  $\sigma(0/\pm 1)$ ,  $\sigma(0/\pm 2)$ ,  $\sigma(\pm 1/\pm 2)$  приведены в [20], где показано, что для гармонической модели динамические эффекты изменения ширины основного рентгенодифракционного максимума и сателлитов оказываются более резко выражены, чем для прямоугольной СР. В этом смысле гармоническая СР оказывается более «динамической», чем прямоугольная.

Следовательно, по «степени динамичности» можно судить о величине градиента деформации в переходной области реальной СР, а значит, и о величине размытости интерфейса, которую невозможно измерить прямыми рентгенодифракционными методами.

Таким образом, для адекватного описания процесса динамической дифракции помимо известной величины  $T/\Lambda_{\text{ext}}$  необходимо ввести в рассмотрение новый универсальный параметр — параметр когерентности  $\xi$ . Этот параметр управляет общим характером взаимодействия дифракционных полей внутри кристалла, от него одинаковым образом зависят ширины сателлитов любых моделей СР.

Рассмотрение моделей СР с различным характером изменения деформации показывает, что целесообразно ввести новую характеристику — «степень динамичности»  $\sigma$ , в которой заложена информация о размытости интерфейса между слоями СР.

Динамический характер рассеяния приводит к тому, что расстояния между основным максимумом и сателлитами пропорциональны величине  $1/Q(m)$ , зависящей от  $T/\Lambda_{\text{ext}}$ , а угловые ширины сателлитов определяются независимым влиянием трех основных факторов. Первый фактор —  $Q(m)$  — связан с общими особенностями динамического рассеяния на кристалле как целом. Второй — вне зависимости от модели СР ширины сателлитов нечетного порядка пропорциональны параметру когерентности  $\xi$ , а ширины четных порядков — величине  $\xi^2$ . Третьим, числовым сомножителем, определяющим ширины сателлитов и «степень динамичности» СР, является величина, зависящая от «внутренних» параметров СР (в данном случае от градиента деформации в интерфейсе).

### Список литературы

- [1] Энтин И.Р. Письма в ЖЭТФ **26**, 392 (1977).
- [2] Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки. М. (1989). 216 с.
- [3] Халачев Ю.П., Колпаков А.В., Кузнецов Г.Ф., Кузьмин Р.Н. Кристаллография **24**, 3, 430 (1979).
- [4] Kharachev Yu.P. Phys. Stat. Sol. (b) **120**, 1, 155 (1983).
- [5] Энтин И.Р. ЖЭТФ **77**, 1, 214 (1979).
- [6] Ассур К.П., Энтин И.Р. ФТТ **24**, 7, 2122 (1982).
- [7] Belyaev Yu.N., Kolpakov A.V. Phys. Stat. Sol. (a) **76**, 2, 641 (1983).
- [8] Vardanyan D.M., Maloukyan H.M., Petrosyan H.M. Acta Cryst. **A41**, 218 (1985).
- [9] Колпаков А.В., Прудников И.Р. Вестник МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия **32**, 4, 3 (1991).
- [10] Халачев Ю.П., Чуховский Ф.Н. Металлофизика **13**, 7, 65 (1991).
- [11] Chukhovskii F.N., Kharachev Yu.P. Cryst. Rev. **3**, 3, 257 (1993).

- [12] Kervarec J., Baudet M., Caulet J., Auvray P., Emery J.Y., Regreny A. *J. Appl. Cryst.* **17**, 2, 196 (1984).
- [13] Колпаков А.В., Хапачев Ю.П., Кузнецов Г.Ф., Кузьмин Р.Н. *Кристаллография* **22**, 3, 473 (1977).
- [14] Kyutt R.N., Petrashen P.V., Sorokin L.M. *Phys. Stat. Sol. (a)* **60**, 2, 381 (1980).
- [15] Takagi S. *Acta Cryst.* **15**, 1131 (1962).
- [16] Найфэ А. *Методы возмущений* М. (1976). 456 с.
- [17] Якубович В.А., Старжинский В.М. *Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами*. М. (1972). 720 с.
- [18] Арнольд В.И. *Обыкновенные дифференциальные уравнения*. М. (1971). 240 с.
- [19] Конников С.Г., Коваленко О.В., Погребницкий К.Ю. *ФТП* **21**, 10, 1745 (1987).
- [20] Дышеков А.А., Тарасов Д.А., Хапачев Ю.П. *Письма в ЖТФ* **21**, 13, 6 (1995).