

Шероховатость интерфейсов многослойных систем в спектрах рассеянного рентгеновского излучения

© В.П. Романов*, В.М. Уздин*, С.В. Ульянов*,**

* Санкт-Петербургский государственный университет,
198904 Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

** Санкт-Петербургский торгово-экономический институт,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: v.romanov@pobox.spbu.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 21 июня 2007 г.)

Развит теоретический подход для описания рассеяния рентгеновского излучения на слоистой структуре с неидеальными интерфейсами. Проведен анализ зеркального и диффузного рассеяния с учетом продольных и поперечных пространственных корреляций шероховатостей интерфейсов и конечного значения угловой апертуры. Показано, что в рамках рассмотренного подхода удается объяснить наблюдаемое экспериментально уширение брэгговских пиков высоких порядков и замедление спада интенсивности зеркального рассеяния на больших углах.

Работа поддержана грантами РФФИ № 06-08-01201; 06-02-16722 и РФФИ–ННИО 06-02-04005.

PACS: 73.21.Ac, 78.70.Ck

1. Введение

Стандартным методом исследования и контроля пространственной структуры наносистем, в том числе многослойных, является рентгеновская спектроскопия. В последнее время этот метод получил особенно широкое распространение в связи с использованием синхротрона в качестве источника рентгеновского излучения [1–3]. Появилась возможность изучать на масштабах порядка межатомных не только статические, но и динамические свойства наноразмерных структур путем измерения временных корреляционных функций интенсивности рентгеновского излучения [2,4]. Использование поляризованного рентгеновского излучения позволило исследовать магнитные свойства [5,6].

Теория рассеяния рентгеновских лучей к настоящему времени хорошо разработана [1,3,7–13]. Создан целый ряд стандартных программ, позволяющих моделировать спектры рассеяния рентгеновского излучения в самых разнообразных слоистых системах. Однако в ряде случаев достигнуть хорошего согласия теории с экспериментом не удается, поскольку на форму спектров влияют структурные дефекты, не учитываемые в стандартном подходе. Например, это касается уширения брэгговских пиков высоких порядков, которое наблюдалось для целого ряда слоистых систем [14–19]. Поэтому важно понимать, как структурные дефекты, прежде всего шероховатости интерфейсов, и их пространственные корреляции проявляются в спектрах рентгеновского рассеяния.

Обычно рассеяние рентгеновского излучения исследуется в двух типах экспериментов — в зеркальном и диффузном рассеянии. В первом типе экспериментов изучается угловая зависимость интенсивности зеркального отраженного излучения. По данным измерений получают информацию о числе слоев пленки, их толщинах, а также о среднеквадратичной шероховатости интерфейсов.

В экспериментах по диффузному рассеянию исследуется распределение интенсивности вблизи углов зеркального отражения, обычно в окрестности одного из брэгговских пиков. По данным диффузного рассеяния судят о длине пространственной корреляции шероховатостей в плоскости слоев. Наиболее сложно определяемым параметром является корреляционная длина в направлении, перпендикулярном слоям, которая не влияет на наклон кривых угловых зависимостей интенсивности диффузно рассеянного рентгеновского излучения.

В работе [20] было исследовано влияние некоторых особенностей структуры интерфейсов на угловую зависимость интенсивности зеркального рассеяния. В частности, был проанализирован эффект перемешивания атомов разных металлов в процессе эпитаксиального роста многослойных пленок. Было показано, что он приводит к понижению высоты брэгговских пиков, не меняя их ширину. В настоящей работе задача рассеяния рентгеновского излучения на многослойной структуре с неидеальными интерфейсами решена с учетом пространственной корреляции шероховатостей интерфейсов и конечной угловой апертуры установки. Предложено объяснение экспериментально наблюдаемому уширению брэгговских пиков высоких порядков и замедлению скорости спада их высоты. Проанализирована зависимость спектров зеркального и диффузного рассеяния от шероховатостей интерфейсов, в частности исследовано влияние продольных и поперечных корреляционных длин шероховатостей.

Работа построена следующим образом. Во втором разделе получены общие соотношения, описывающие спектры диффузного и зеркального рассеяния многослойной системой. Третий раздел посвящен анализу полученных результатов и обсуждению возможных подходов к использованию экспериментальных данных для получения информации о структуре и корреляционных свойствах интерфейсов многослойных систем.

2. Рассеяния рентгеновского излучения многослойными системами

Нас будет интересовать упругое рассеяние рентгеновского излучения на слоистой системе. Для рентгеновского излучения диэлектрическая проницаемость металла ϵ меньше единицы. Пренебрегая ее мнимой частью, можно записать

$$\epsilon(\mathbf{r}) = 1 - \Delta(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где величина $\Delta(\mathbf{r})$ определяется плотностью рассеивающих электронов и для каждого вещества существенно зависит от длины волны падающего излучения. Дифференциальное сечение рассеяния рентгеновского излучения в рассматриваемой системе определяется выражением [3]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_0^4}{(4\pi)^2} \left\langle \int_V \int_V d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Delta(\mathbf{r}_1) \Delta(\mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \right\rangle, \quad (2)$$

где $k_0 = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны падающего излучения, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_r - \mathbf{k}_0$ — вектор рассеяния, \mathbf{k}_r и \mathbf{k}_0 — волновые векторы рассеянной и падающей волн, угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают статистическое усреднение, интегрирование ведется по рассеивающему объему. Величину $\Delta(\mathbf{r})$ в многослойной пленке, содержащей N бислоев, удобно представить в виде

$$\Delta(r) = \int dz' \sum_{l=1}^N \Delta_l(z', \mathbf{r}_\perp) \times \delta \left(z' - z + \sum_{p=0}^{l-1} d^{(p)}(\mathbf{r}_\perp) + h(\mathbf{r}_\perp) \right), \quad (3)$$

где $\delta(z)$ — δ -функция, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_\perp, z)$, $d^{(l)}(\mathbf{r}_\perp) = d_a^{(l)}(\mathbf{r}_\perp) + d_b^{(l)}(\mathbf{r}_\perp)$ — толщина l -го бислоя, составленного из слоев металлов A и B , имеющих толщины $d_a^{(l)}(\mathbf{r}_\perp)$ и $d_b^{(l)}(\mathbf{r}_\perp)$ соответственно, $h(\mathbf{r}_\perp)$ — высота шероховатой поверхности подложки над плоскостью $z = 0$, причем $\int_S h(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}_\perp = 0$. Здесь формально положено $d^{(0)}(\mathbf{r}_\perp) = d^{(-1)}(\mathbf{r}_\perp) = 0$. Функция Δ_l отлична от нуля только в пределах l -го бислоя и равна нулю за его пределами, Δ_0 относится к подложке.

Подставляя выражение (3) в формулу (2) и выполняя интегрирование по переменным z_1 и z_2 , получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_0^4}{(4\pi)^2} \left\langle \int_S \int_S d\mathbf{r}_{\perp 1} d\mathbf{r}_{\perp 2} \sum_{l,j=1}^N \Delta_{l,q_z}(\mathbf{r}_{\perp 1}) \Delta_{j,-q_z}(\mathbf{r}_{\perp 2}) \times \exp[-iq_z(L_B^{(l-1)}(\mathbf{r}_{\perp 1}) - L_B^{(j-1)}(\mathbf{r}_{\perp 2}))] \times \exp[-i\mathbf{q}_\perp(\mathbf{r}_{\perp 1} - \mathbf{r}_{\perp 2})] \right\rangle. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_\perp, q_z)$,

$$L_B^{(k)}(\mathbf{r}_\perp) = \sum_{p=0}^k d^{(p)}(\mathbf{r}_\perp) + h(\mathbf{r}_\perp),$$

$$L_B^{(0)}(\mathbf{r}_\perp) + L_B^{(-1)}(\mathbf{r}_\perp) = h(\mathbf{r}_\perp).$$

Величины

$$\Delta_{k,q_z}(\mathbf{r}_\perp) = \int dz \Delta_k(z, \mathbf{r}_\perp) e^{-iq_z z} \quad (5)$$

дают форм-фактор k -го бислоя при $k \geq 1$, а при $k = 0$ — форм-фактор подложки. В зависимости от строения пленки для форм-фактора бислоя можно использовать различные модели. Если на интерфейсах не происходит перемешивания атомов, то величину Δ_k для бислоя можно описать ступенчатой моделью

$$\Delta_k(z, \mathbf{r}_\perp) = \theta(z) \theta(d^{(k)}(\mathbf{r}_\perp) - z) \times [C_b + (C_a - C_b) \theta(d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp) - z)], \quad (6)$$

где $\theta(z)$ — θ -функция Хэвисайда, C_a и C_b — постоянные. В рамках этой модели диэлектрические проницаемости в пределах каждого металлического слоя постоянны и меняются скачком при переходе к металлу другого сорта. В подложке диэлектрическая проницаемость считается постоянной:

$$\Delta_0(z) = C_{\text{sub}} \theta(-z).$$

Выполняя интегрирование в формуле (5), для форм-факторов бислоя и подложки получаем

$$\Delta_{k,q_z}(\mathbf{r}_\perp) = \frac{i}{q_z} \left[C_b e^{-iq_z d^{(k)}(\mathbf{r}_\perp)} + (C_a - C_b) e^{-iq_z d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp)} - C_a \right], \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (7)$$

$$\Delta_{0,q_z} = \frac{iC_{\text{sub}}}{q_z}.$$

Для дальнейших вычислений перейдем от суммирования по бислоям к суммированию по каждому слою. Для этого удобно сделать замены

$$L^{(2k)}(\mathbf{r}_\perp) = L_B^{(k)}(\mathbf{r}_\perp),$$

$$L^{(2k-1)}(\mathbf{r}_\perp) = L_B^{(k-1)}(\mathbf{r}_\perp) + d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp).$$

В этом случае выражение (4) принимает вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_0^4}{(4\pi)^2 q_z^2} \int_S \int_S d\mathbf{r}_{\perp 1} d\mathbf{r}_{\perp 2} e^{-i\mathbf{q}_\perp(\mathbf{r}_{\perp 1} - \mathbf{r}_{\perp 2})} \times \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta \epsilon_n \Delta \epsilon_m \langle e^{-iq_z(L^{(n)}(\mathbf{r}_{\perp 1}) - L^{(m)}(\mathbf{r}_{\perp 2}))} \rangle, \quad (8)$$

где величины

$$\begin{aligned}\Delta\varepsilon_0 &= C_{\text{sub}} - C_a, \\ \Delta\varepsilon_{2k-1} &= C_a - C_b, \quad k = 1, 2, \dots, N, \\ \Delta\varepsilon_{2k} &= C_b - C_a, \quad k = 1, 2, \dots, N-1, \\ \Delta\varepsilon_{2N} &= C_b\end{aligned}\quad (9)$$

равны скачкам диэлектрической проницаемости при переходе через границу раздела металлов.

Представим толщины слоев в виде

$$L^{(2k)}(\mathbf{r}_\perp) = kd + \delta L^{(2k)}(\mathbf{r}_\perp) = kd + \sum_{l=1}^k \delta d^{(l)}(\mathbf{r}_\perp) + h(\mathbf{r}_\perp),$$

$$\begin{aligned}L^{(2k-1)}(\mathbf{r}_\perp) &= (k-1)d + d_a + \delta L^{(2k-1)}(\mathbf{r}_\perp) \\ &= (k-1)d + d_a + \sum_{l=1}^{k-1} \delta d^{(l)}(\mathbf{r}_\perp) + \delta d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp) + h(\mathbf{r}_\perp), \\ d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp) &= d_a + \delta d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp),\end{aligned}\quad (10)$$

где $\delta d^{(k)}(\mathbf{r}_\perp)$ — отклонение толщины k -го бислоя от среднего значения, $\delta d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp)$ — отклонение толщины слоя металла A в k -м бислое.

Проведем усреднение, считая, что величины $\delta d_a^{(k)}(\mathbf{r}_\perp)$, $\delta d^{(k)}(\mathbf{r}_\perp)$ и $h(\mathbf{r}_\perp)$ распределены нормально с нулевыми средними. В этом случае имеем

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{k_0^4}{(4\pi)^2 q_z^2} \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m e^{(-iq_z D_{n,m})} e^{-\frac{q_z^2}{2} (\langle (\delta L^{(n)})^2 \rangle + \langle (\delta L^{(m)})^2 \rangle)} \\ &\times \left\{ S(2\pi)^2 \delta(q_x) \delta(q_y) + \iint_S d\mathbf{r}_{\perp 1} d\mathbf{r}_{\perp 2} e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot (\mathbf{r}_{\perp 1} - \mathbf{r}_{\perp 2})} \right. \\ &\times \left. \left(e^{[q_z^2 \langle \delta L^{(n)}(\mathbf{r}_{\perp 1}) \delta L^{(m)}(\mathbf{r}_{\perp 2}) \rangle]} - 1 \right) \right\},\end{aligned}\quad (11)$$

где S — освещенная площадь и использованы обозначения

$$\begin{aligned}D_{2k,2p} &= D_{2k-1,2p-1} = d(k-p), \\ D_{2k-1,2p} &= d(k-p-1) + d_a,\end{aligned}$$

$$D_{2k,2p-1} = d(k-p+1) - d_a; \quad k, p = 1, 2, \dots, N. \quad (12)$$

Величины $\delta L^{(n)}(\mathbf{r}_\perp)$, $n = 0, 1, 2, \dots, 2N$ представляют собой шероховатости межслоевых поверхностей, т.е. смещения этих поверхностей от их среднего положения.

В выражении (11) выделена зеркально рассеянная компонента с $\mathbf{q}_\perp = 0$. Отметим, что в том случае, когда шероховатости интерфейсов в разных точках в плоскости (x, y) некоррелированы

$$\langle \delta L^{(n)}(\mathbf{r}_{\perp 1}) \delta L^{(m)}(\mathbf{r}_{\perp 2}) \rangle = 0, \quad |\mathbf{r}_{\perp 1} - \mathbf{r}_{\perp 2}| \neq 0,$$

интегральное слагаемое в формуле (11) не вносит вклад в рассеяние. По этой причине дифференциальное сечение рассеяния удобно разбить на два слагаемых, одно из

которых связано с некоррелированными шероховатостями, а другое учитывает корреляции:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_1 + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_2.$$

Сечение рассеяния найдем интегрированием $d\sigma/d\Omega$ по телесному углу $\Delta\Omega$, под которым из каждой точки рассеивающей системы видно приемное устройство

$$\Delta\sigma = \int_{\Delta\Omega} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega.$$

Учитывая выражение для дифференциала телесного угла через дифференциалы компонент вектора рассеяния [3]

$$d\Omega = \frac{dq_x dq_y}{k_0^2 \sin^2 \theta},$$

где θ — угол скольжения для рассеянного луча, который приближенно можно считать равным углу скольжения для падающего луча, получаем

$$\Delta\sigma = (\Delta\sigma)_1 + (\Delta\sigma)_2. \quad (13)$$

При зеркальном рассеянии имеем

$$\begin{aligned}(\Delta\sigma)_1 &= \frac{S k_0^3}{2 q_z^3} \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m e^{(-iq_z D_{n,m})} \\ &\times e^{-\frac{q_z^2}{2} (\langle (\delta L^{(n)})^2 \rangle + \langle (\delta L^{(m)})^2 \rangle)},\end{aligned}\quad (14)$$

$$\begin{aligned}(\Delta\sigma)_2 &= \frac{S k_0^4}{8\pi q_z^2} \int_{\Delta\Omega} d\Omega \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m e^{(-iq_z D_{n,m})} \\ &\times e^{-\frac{q_z^2}{2} (\langle (\delta L^{(n)})^2 \rangle + \langle (\delta L^{(m)})^2 \rangle)} \\ &\times \int_0^\infty r_\perp dr_\perp J_0(q_\perp r_\perp) \left(e^{[q_z^2 \langle \delta L^{(n)}(\mathbf{r}_\perp) \delta L^{(m)}(0) \rangle]} - 1 \right).\end{aligned}\quad (15)$$

В выражении (15) было использовано предположение об однородности и изотропности корреляционной функции шероховатостей интерфейсов в плоскостях слоев и использовано обозначение $J_0(x)$ для функции Бесселя нулевого порядка. Если телесный угол $\Delta\Omega$ достаточно мал, а корреляционная функция шероховатостей быстро убывает, то при излучении зеркального рассеяния можно считать $q_\perp r_\perp \ll 1$ и полагать $J_0(q_\perp r_\perp) = 1$.

При рассмотрении диффузного рассеяния будем считать, что детектор расположен так, что зеркально отраженный луч не попадает в приемное устройство. В этом случае в правой части выражения (13) остается лишь

второе слагаемое, которое может быть записано в виде

$$(\Delta\sigma)_2 = \frac{\Delta\Omega S k_0^4}{8\pi q_z^2} \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m e^{-iq_z D_{n,m}} \times e^{-\frac{q_z^2}{2}(\langle(\delta L^{(n)})^2\rangle + \langle(\delta L^{(m)})^2\rangle)} \times \int_0^\infty r_\perp dr_\perp J_0(q_\perp r_\perp) \left(e^{[q_z^2 \langle\delta L^{(n)}(\mathbf{r}_\perp)\delta L^{(m)}(0)\rangle]} - 1 \right). \quad (16)$$

Для корреляционной функции шероховатостей в [11] было предложено выражение

$$\langle\delta L^{(n)}(\mathbf{r}_{\perp 1})\delta L^{(m)}(\mathbf{r}_{\perp 2})\rangle = \sigma_n \sigma_m \exp\left[-\left(\frac{|D_{n,m}|}{l_{z,n,m}}\right)^s\right] \times \exp\left[-\left(\frac{|r_{\perp 1} - r_{\perp 2}|}{l_{\perp,n,m}}\right)^{2h_{n,m}}\right], \quad (17)$$

где обычно $s = 1$ или 2 , $h_{n,m} \in [0, 1]$, величины $l_{\perp,n,m}$ и $l_{z,n,m}$ являются корреляционными длинами шероховатостей интерфейсов в направлениях вдоль и поперек слоев пленки, σ_n — среднеквадратичная шероховатость границы раздела слоев с номерами n и $n + 1$. В формуле (17) учитывается, что корреляционные свойства сверхрешетки могут зависеть от номеров слоев. В частности, они могут быть существенно разными для подложки ($n = 0$ или $m = 0$) и для слоев пленки ($n, m \geq 1$).

3. Обсуждение результатов

Проанализируем, как проявляются корреляции шероховатостей интерфейсов многослойных систем l_\perp и l_z в спектрах зеркального и диффузного рассеяния рентгеновского излучения. При изучении зеркального рассеяния измеряется коэффициент отражения R , который определяется как отношение интенсивности рассеяния в телесный угол $\Delta\Omega$ к интенсивности излучения, падающего на рассеивающую многослойную систему [3]

$$R = \frac{1}{S \sin \theta} \int_{\Delta\Omega} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega = \frac{2k_0}{S q_z} \Delta\sigma. \quad (18)$$

В отраженной интенсивности удобно выделить когерентный вклад R_1 , не связанный с корреляциями шероховатостей

$$R = R_1 + R_2. \quad (19)$$

Когерентный вклад является главным, по крайней мере в области малых q_z . Влияние шероховатостей в нем учитывается через фактор Дебая–Валлера [21]

$$R_1 = \frac{k_0^4}{q_z^4} \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m e^{-iq_z D_{n,m}} e^{-\frac{q_z^2}{2}(\langle(\delta L^{(n)})^2\rangle + \langle(\delta L^{(m)})^2\rangle)}. \quad (20)$$

Второй вклад связан с пространственными корреляциями шероховатости и имеет вид

$$R_2 = \frac{k_0^5}{4\pi q_z^3} \sum_{n,m=0}^{2N} \Delta\varepsilon_n \Delta\varepsilon_m e^{-iq_z D_{n,m}} \times e^{-\frac{q_z^2}{2}(\langle(\delta L^{(n)})^2\rangle + \langle(\delta L^{(m)})^2\rangle)} \times \int_{\Delta\Omega} \int_0^\infty r_\perp dr_\perp J_0(q_\perp r_\perp) \left(e^{[q_z^2 \langle\delta L^{(n)}(\mathbf{r}_\perp)\delta L^{(m)}(0)\rangle]} - 1 \right). \quad (21)$$

Обратим внимание на то, что когерентный вклад с ростом q_z спадает значительно быстрее, чем корреляционный. Это связано с тем, что помимо фактора Дебая–Валлера корреляционный вклад R_2 содержит экспоненциально растущий множитель $(e^{[q_z^2 \langle\delta L^{(n)}(\mathbf{r}_\perp)\delta L^{(m)}(0)\rangle]} - 1)$. Кроме того, предэкспоненциальный множитель в корреляционном вкладе пропорционален $1/q_z^3$, а в когерентном — $1/q_z^4$.

Обычно считается, что в зеркальном рассеянии проявляется лишь когерентный вклад. Строго говоря, это справедливо лишь при бесконечно малой апертуре $\Delta\Omega$, когда корреляционный вклад очень мал. При конечных апертурах наблюдения интенсивность зеркального рассеяния может зависеть от корреляционных свойств шероховатостей.

В расчетах в качестве модельных систем использовались экспериментально изучавшаяся в работе [14] десятислойная пленка $[\text{Fe}(28 \text{ \AA})/\text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{10}$, в которой рассеивалось рентгеновское излучение с длиной волны $\lambda = 0.20753 \text{ nm}$, и исследовавшаяся в [19] пленка, составленная из 30 бислоев, содержащих 2 монослоя (ML) железа и 16 монослоев ванадия, $[\text{Fe}(2 \text{ ML})/\text{V}(16 \text{ ML})]_{30}$, в которой рассеивалось рентгеновское излучение с длиной волны $\lambda = 0.154 \text{ nm}$. В обоих случаях в качестве подложки использовался MgO.

На рис. 1 показана зависимость от q_z коэффициента отражения R , а также отдельно когерентного R_1 и корреляционного R_2 вкладов. Расчеты проводились для пленки $[\text{Fe}(28 \text{ \AA})/\text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{10}$ со следующими значениями параметров: $\sigma_n = 0.47 \text{ nm}$, $l_\perp = 10 \text{ nm}$, $l_z = 20 \text{ nm}$, $\Delta\Omega = 10^{-5} \text{ sr}$. Видно, что в области малых q_z главным является когерентный вклад, а в области больших q_z — корреляционный, поэтому с увеличением q_z замедляется скорость спада коэффициента отражения и брэгговские пики заметно уширяются. Промежуточные осцилляции при данных значениях параметров шероховатостей в области больших q_z исчезают.

На рис. 2 и 3 приведены экспериментальные данные по рассеянию рентгеновского излучения, взятые из работ [14,19]. Как видно из этих рисунков, брэгговские пики высоких порядков уширяются, а скорость убывания интенсивности рассеяния замедляется. Здесь же приведены результаты расчетов, выполненных по формулам (17), (19)–(21), в которых среднеквадратичные шероховатости слоев и корреляционные длины использовались

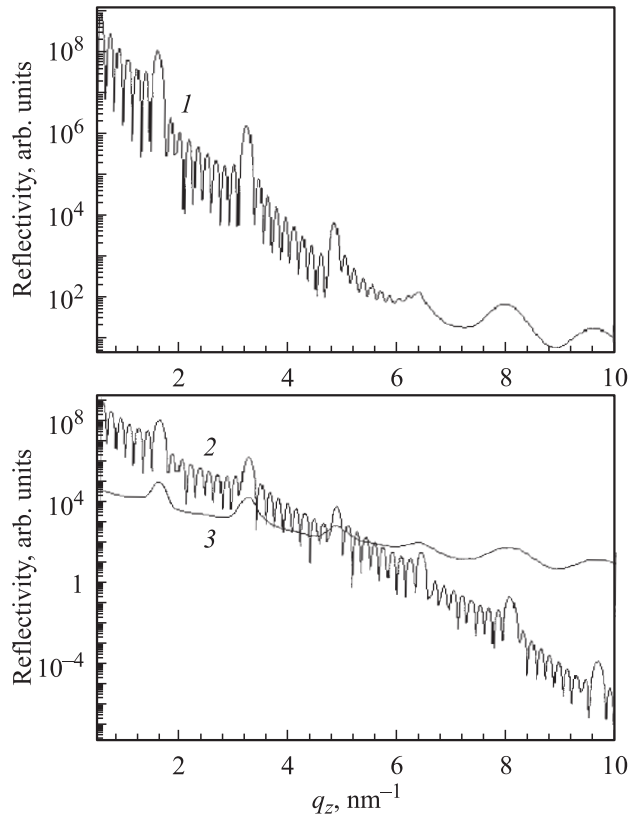


Рис. 1. Зависимость коэффициента зеркального отражения от q_z (кривая 1), представленная как сумма когерентного (2) и корреляционного (3) вкладов, для многослойной пленки $[\text{Fe}(28 \text{ \AA})/\text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{10}$ с параметрами, указанными в тексте.

в качестве подгоночных параметров. Сравнивая теоретические и экспериментальные кривые, можно заключить, что качественно они достаточно хорошо согласуются. Особенно хорошее согласие наблюдается с приведенными на рис. 3 данными работы [19], в которой отчетливо наблюдались брэгговские пики вплоть до пиков пятого порядка.

Для выяснения возможности определения характеристик интерфейсов многослойных пленок по данным рассеяния рентгеновского излучения были проведены расчеты коэффициента отражения при различных значениях параметров рассеивающих систем и разных угловых апертурах. Расчеты показали, что по мере увеличения угловой апертуры $\Delta\Omega$ уширение брэгговских пиков за счет пространственных корреляций начинается с пиков меньшего порядка. Как правило, в экспериментальных установках расстояние от рассеивающего объекта до детектора находится в пределах 0.3–1 м. Если приемное отверстие детектора имеет форму щели, то ее ширина составляет примерно 0.1–0.5 мм при длине порядка 1 см. При этих значениях параметров установки для телесного угла $\Delta\Omega$, под которым видна щель из любой точки рассеивающего объекта, получаем оценку: $\Delta\Omega \sim 10^{-6} - 10^{-5}$ sr.

Расчеты, проведенные в предположении независимости параметров шероховатости интерфейса от номера

слоя, показали, что в области малых q_z зависимость от амплитуды шероховатостей проявляется главным образом в законе убывания коэффициента отражения из-за фактора Дебая–Валлера. В области больших q_z , начиная с третьего брэгговского пика, где становится существенным корреляционный вклад, появляется зависимость от обеих корреляционных длин l_{\perp} и l_z .

При больших значениях l_z независимо от величины l_{\perp} в картине зеркального рассеяния остаются промежуточные осцилляции даже между брэгговскими максимумами высоких порядков. Влияние корреляционной длины l_{\perp} при больших значениях l_z сводится к тому, что с

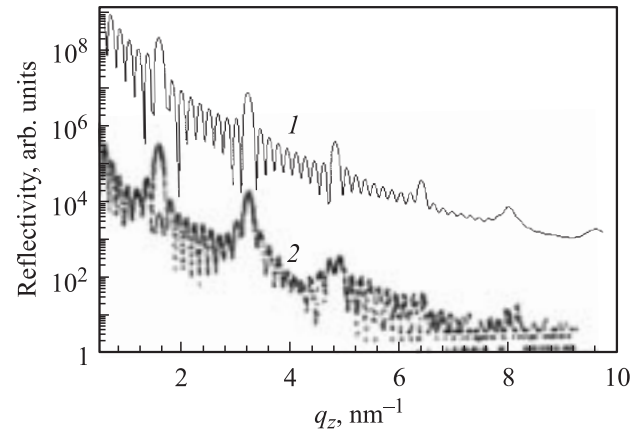


Рис. 2. Зависимость рассчитанного и измеренного коэффициентов зеркального отражения от q_z для пленки $[\text{Fe}(28 \text{ \AA})/\text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{10}$. 1 — результаты расчетов, 2 — экспериментальные данные работы [14]. При расчетах использовались следующие значения параметров: $\sigma_n = 0.3$ nm, $l_{\perp} = 10$ nm, $l_z = 20$ nm, $\Delta\Omega = 10^{-4}$ sr, $\lambda = 0.20753$ nm. Для наглядности кривые сдвинуты по вертикали.

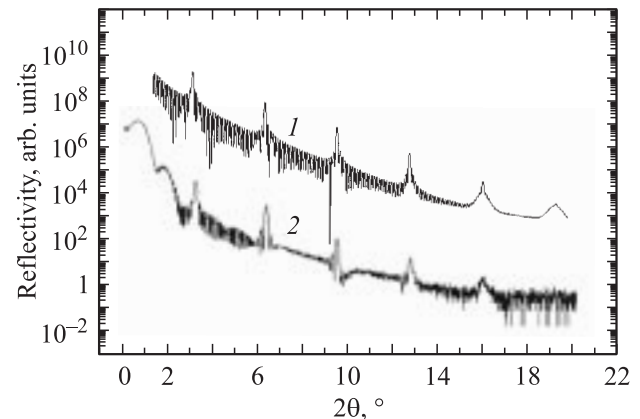


Рис. 3. Угловая зависимость рассчитанного и измеренного коэффициентов зеркального отражения для 30-слойной пленки $[\text{Fe}(2 \text{ ML})/\text{V}(16 \text{ ML})]_{30}$, в которой рассеивалось рентгеновское излучение с длиной волны $\lambda = 0.154$ nm. 1 — результаты расчетов, 2 — экспериментальные данные работы [19]. При расчетах использовались следующие значения параметров: $\sigma_n = 0.22$ nm, $l_{\perp} = 10$ nm, $l_z = 20$ nm, $\Delta\Omega = 10^{-5}$ sr. Для наглядности кривые сдвинуты по вертикали, $q_z = 2k_0 \sin \theta$.

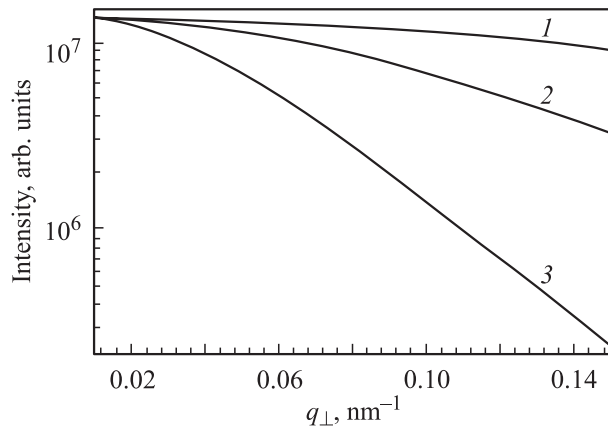


Рис. 4. Зависимость интенсивности диффузного рассеяния от q_{\perp} для 10-слойной пленки $[\text{Fe}(28 \text{ \AA})/\text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{10}$ в окрестности второго брэгговского пика ($q_z = 3.22 \text{ nm}^{-1}$). Корреляционная длина в плоскостях слоев принималась равной $l_{\perp} = 10$ (1), 20 (2) и 40 nm (3). Для остальных параметров брались следующие значения: $l_{\parallel} = 20 \text{ nm}$, $\sigma_n = 0.47 \text{ nm}$, $\lambda = 0.20753 \text{ nm}$. Кривые приведены к общему началу.

уменьшением l_{\perp} увеличивается скорость спадания как брэгговских пиков, так и промежуточных максимумов с ростом q_z . По мере уменьшения l_z между брэгговскими пиками высоких порядков исчезают промежуточные максимумы, а сами брэгговские пики уширяются.

Интенсивность зеркального рассеяния, рассчитанная в предположении нарастания среднеквадратичных шероховатостей слоев пропорционально \sqrt{n} , где n — номер бислоя, оказывается практически не зависящей от l_z . Что касается зависимости зеркального рассеяния от l_{\perp} , то она существует, но заметно проявляется только при больших корреляционных длинах. Основное влияние на форму кривых зеркального рассеяния оказывает величина среднеквадратичной шероховатости.

При исследовании диффузного рассеяния фактически изучается величина R_2 как функция q_{\perp} при фиксированном q_z . Это рассеяние целиком обусловлено корреляциями шероховатостей [7–11,13,15–17]. Расчеты интенсивности диффузного рассеяния показали, что амплитуда шероховатости σ_n и корреляционная длина l_z не влияют на наклон кривых интенсивности как функции q_{\perp} . Абсолютная величина диффузного рассеяния существенно зависит как от дисперсии шероховатости, так и от корреляционных длин l_{\perp} и l_z . Единственным параметром, от которого существенно зависит наклон кривой интенсивности, является значение l_{\perp} . Результаты расчетов приведены на рис. 4. Кривые зависимости интенсивности рассеяния от q_{\perp} приведены к общему началу. Как видно из рисунка, наклон кривых увеличивается с ростом корреляционной длины l_{\perp} . Отметим, что расчеты как с не зависящей от номера слоя среднеквадратичной шероховатостью интерфейса, так и с корневым нарастанием шероховатости с ростом номера бислоя приводят к практически одинаковым результатам, если

в среднем по слоям среднеквадратичные шероховатости в обеих моделях совпадают.

Таким образом, корреляционные эффекты в спектрах зеркального рассеяния рентгеновского излучения многослойными системами проявляются только за счет конечной апертуры установки. Информация, получаемая из экспериментов по зеркальному и диффузному рассеянию, является взаимно дополнительной. По наклону кривых угловых зависимостей диффузно рассеянного излучения можно оценить корреляционную длину l_{\perp} . Из данных по зеркальному рассеянию можно получить информацию о корреляционных свойствах в направлении, перпендикулярном интерфейсам, и о среднеквадратичных шероховатостях. Наличие спектров рассеяния рентгеновского излучения разных длин волн на одной и той же многослойной системе позволяет уточнить значения параметров, характеризующих шероховатости интерфейсов.

Список литературы

- [1] U. Pietsch, V. Holy, T. Baumbach. High-resolution X-ray scattering. Shpringer-Verlag (2004). 409 p.
- [2] W.H. de Jeu, B.I. Ostrovskii, A.N. Shalaginov. Rev. Mod. Phys. **75**, 181 (2003).
- [3] S.K. Sinha, E.B. Sirota, S. Garoff, H.B. Stanley. Phys. Rev. B **38**, 2297 (1988).
- [4] В.П. Романов, С.В. Ульянов. УФН **173**, 941 (2003).
- [5] F. Radu, A. Nefedov, J. Grabis, G. Nowak, A. Bergmann, H. Zabel. J. Magn. Mater. **300**, 206 (2006).
- [6] A. Bergmann, J. Grabis, A. Nefedov, K. Westerholt, H. Zabel. J. Phys. D: Appl. Phys. **39**, 842 (2006).
- [7] S.K. Sinha. J. Phys. III France **4**, 1543 (1994).
- [8] V. Holy, T. Baumbach. Phys. Rev. B **49**, 10 668 (1994).
- [9] D.K.G. de Boer. Phys. Rev. B **53**, 6048 (1996).
- [10] T. Salditt, T.H. Metzger, Ch. Brandt, U. Klemradt, G. Peisl. Phys. Rev. B **51**, 5617 (1995).
- [11] J.P. Schlomka, M. Tolan, L. Schwalowsky, O.H. Seeck, J. Stettner, W. Press. Phys. Rev. B **51**, 2311 (1995).
- [12] D.R. Lee, S.K. Sinha, D. Haskell, Y. Choi, J.C. Lang, S.A. Stepanov, G. Srajer. Phys. Rev. B **68**, 224 409 (2003).
- [13] D.R. Lee, S.K. Sinha, C.S. Nelson, J.C. Lang, C.T. Venkataraman, G. Srajer, R.M. Osgood. Phys. Rev. B **68**, 224 410 (2003).
- [14] R. Schad, P. Belien, G. Verbanck, V.V. Moshalkov, Y. Bruynseraede, H.E. Fischer, S. Lefebvre, M. Bessiere. Phys. Rev. B **59**, 1242 (1999).
- [15] A. Gupta, A. Paul, S. Mikhopadhyay, K. Mibu. J. Appl. Phys. **90**, 1237 (2001).
- [16] A. Paul, A. Gupta. J. Alloys Comp. **326**, 246 (2001).
- [17] A. Paul. J. Magn. Mater. **240**, 497 (2002).
- [18] A. Gupta, A. Paul, M. Gupta, C. Meneghini, U. Pietsch, K. Mibu, A. Maddalena, C.D. Toe, G. Principy. J. Magn. Mater. **272–276**, 1219 (2004).
- [19] A. Remhof, G. Nowak, A. Liebig, H. Zabel, B. Hjovarrsson. J. Phys.: Cond. Matter. **18**, L 441 (2006).
- [20] В.П. Романов, С.В. Уздин, В.М. Уздин, С.В. Ульянов. ФТТ **48**, 144 (2006).
- [21] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1992). 664 с.