

Структура интерфейсов многослойных систем в спектрах зеркального рассеяния рентгеновского излучения

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

* Научно-исследовательский институт им. В.А. Фока, Санкт-Петербургского государственного университета, 198904 Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

** Санкт-Петербургский государственный университет, 199178 Санкт-Петербург, Россия

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

E-mail: v.romanov@pobox.spbu.ru,
serge@vu1864.spb.edu,
uzdin@icape.nw.ru,
ulyanov@infos.ru

(Поступила в Редакцию 9 марта 2005 г.)

Исследовано влияние пространственной структуры интерфейса в многослойных металлических пленках на форму спектра зеркального рассеяния рентгеновского излучения. Рассмотрено два типа структурных дефектов на интерфейсе — ступеньки, приводящие к переменной толщине слоев, и перемешивание атомов разных металлов в процессе эпитаксиального роста. Показано, что эти механизмы по-разному проявляются в спектрах зеркального рассеяния. Вследствие перемешивания заметно снижаются высоты брэгговских пиков, особенно высоких порядков. Шероховатости интерфейса приводят к уширению брэгговских пиков и исчезновению промежуточных пиков между ними.

Работа частично поддержана грантами ИНТАС 01-0386, 03-51-4778 и Российского фонда фундаментальных исследований 04-02-16024.

PACS: 73.21.Ac, 78.70.Ck

1. Введение

Исследование искусственных слоистых наноструктур, состоящих из различных химических элементов, открыло область физики, объединяющую фундаментальную науку с новейшими технологиями и промышленными приложениями. Так, обнаружение антиферромагнитной обменной связи и гигантского магнетосопротивления в металлических магнитных сверхрешетках не только способствовало развитию представлений о низкоразмерном магнетизме, но и привело к созданию нового поколения запоминающих и считывающих устройств в современных компьютерах [1]. При создании приборов и устройств на основе многослойных систем особую роль приобретает контроль качества интерфейсов, поскольку он в значительной степени определяет их магнитные и транспортные свойства. Перемешивание атомов, ступеньки и островки на интерфейсах невозможно исключить в процессе эпитаксиального роста. В то же время такие дефекты могут привести и к улучшению используемых характеристик наноструктур или формированию новых свойств, полезных для практических приложений. Определение шероховатости интерфейсов на атомном масштабе по данным различных экспериментальных методик представляет собой важную задачу, которая пока не находит однозначного решения.

Одним из стандартных методов, применяемых для контроля многослойных металлических систем, является

рентгеновская спектроскопия. Рентгеновские спектры, измеренные при скользящих углах падения, используются для определения геометрических параметров многослойных систем; по ним судят и о гладкости границ раздела [2–5]. Однако однозначное восстановление атомной структуры интерфейса по данным рентгеновской спектроскопии оказывается невыполнимой задачей и требует модельных представлений о шероховатости реального интерфейса. Поэтому представляет интерес исследование вопроса о том, как проявляются различные типы дефектов на интерфейсах в искажениях формы линий зеркального рассеяния рентгеновского излучения. Исследованию этого вопроса посвящена настоящая работа. В разделе 2 рассмотрены типичные особенности неидеальных интерфейсов — ступеньки на границе, приводящие к переменной толщине слоев, и перемешивание атомов в процессе роста образца, которое ведет к образованию сплава и размыванию интерфейса. Для перемешивания предложена модель, предполагающая „всплывание“ атомов в процессе эпитаксиального роста и формирование асимметричного профиля концентрации компонент с обеих сторон от интерфейса. В разделах 3, 4 выводятся формулы, описывающие спектры зеркального отражения рентгеновского излучения в идеальной структуре и для каждого типа „неидеального“ интерфейса. Результаты численных расчетов при различных параметрах, характеризующих шероховатость интерфейсов, и их обсуждение приведены в разделах 5, 6.

2. Пространственная структура неидеального интерфейса

Эпитаксиальный рост многослойной системы представляет собой сложный процесс, зависящий от множества факторов — типа химических элементов, температуры и гладкости подложки, скорости депозиции, геометрии установки и др. Тем не менее можно выделить несколько характерных типов дефектов, которые обычно имеют в виду, когда говорят о шероховатых интерфейсах металлических сверхрешеток.

Первый тип дефектов — это ступеньки высотой в несколько атомов на границе раздела слоев. Степень заполнения очередного слоя в металлических сверхрешетках обычно контролируется посредством измерения осциллирующей коэффициента отражения быстрых электронов в процессе эпитаксиального роста. Однако даже если такие осцилляции хорошо наблюдаемы и слои очередного химического элемента начинают выращивать, когда предыдущий слой максимально заполнен, ступеньки на границе раздела все равно остаются. Будем считать, что характерные размеры ступенек в плоскости сверхрешетки значительно превосходят их высоту. В этом случае можно считать, что рентгеновское излучение отражается на плоской границе, но толщины слоев в многослойной системе различны и флуктуируют в зависимости от координаты в плоскости сверхрешетки. Если размер пятна рентгеновского излучения, падающего на образец, много больше размера ступенек, то падающее излучение будет „чувствовать“ некоторое распределение слоев по толщине.

Другим типом дефектов является перемешивание атомов на интерфейсе, приводящее к образованию сплава на границе раздела. Обычно такие дефекты характеризуют толщиной переходной области. Однако последние исследования [6–8] показали, что в большинстве металлических сверхрешеток эта область неоднородна по концентрации, а профиль концентрации компонент сплава несимметричен относительно номинального интерфейса. Остановимся на этом вопросе более подробно, поскольку игнорирование асимметрии интерфейса может привести к ошибочной интерпретации экспериментальных данных.

Одним из основных факторов, определяющих перемешивание на интерфейсе, является обмен адсорбированных атомов с атомами подложки. Исследования методом туннельной спектроскопии [9] показали, что в начальной стадии напыления атомов Cr на гладкую поверхность железа лишь один из четырех атомов остается на поверхности, в то время как остальные три внедряются в поверхностный слой железа. При напылении очередного слоя часть атомов подложки „всплывает“ на поверхность посредством такого обмена. При дальнейшем росте образца атомы могут подниматься на несколько слоев вверх, но не могут опуститься глубоко вниз, поскольку там все места заняты. В результате образуется асимметричный интерфейс. Выведем профиль концентрации компонент в сверхрешетке A/B

при таком сценарии перемешивания. Обозначим через ξ долю атомов в слое, которые обмениваются с атомами подложки за время напыления этого слоя. Параметр ξ может быть различным при нанесении атомов A на подложку B и атомов B на подложку A , но далее мы будем пренебрегать этим различием. Пусть очередной период сверхрешетки, состоящий из n слоев элемента A и m элемента B , наносится на слой, в котором концентрации атомов A и B составляют $x_A^*(0)$ и $x_B^*(0) = 1 - x_A^*(0)$ соответственно. До тех пор пока наносятся слои элемента A , на поверхности могут оказаться только атомы сорта B , поднявшиеся в результате обмена с вновь поступившими атомами A . Их концентрация $x_B^*(k)$ к началу заполнения $k + 1$ -го слоя ($1 \leq k \leq n$) дается формулой

$$x_B^*(k) = \xi^k x_B^*(0) = \xi^k (1 - x_A^*(0)).$$

После нанесения n слоев элемента A начинается напыление элемента B . Теперь для концентрации атомов A на поверхности заполненного k -слоя ($n + 1 \leq k \leq n + m$) имеем

$$x_A^*(k) = \xi^{k-n} x_A^*(n) = \xi^{k-n} (1 - \xi^n (1 - x_A^*(0))).$$

Потребовав выполнения условия $x_A^*(n + m) = x_A^*(0)$, получаем уравнение для определения концентрации $x_A^*(0)$. Учитывая, что в процессе эпитаксиального роста обмен атомов k -слоя происходит и когда этот слой наносится на подложку, и когда он служит подложкой при напылении $k + 1$ слоя, получаем следующие выражения для послылойной концентрации элемента A в сверхрешетке:

$$x_A(k) = 1 - \xi^k (1 - \xi) \frac{1 - \xi^m}{1 - \xi^{n+m}} - \xi \delta_{k,n}, \quad 1 \leq k \leq n,$$

$$x_A(k) = \xi^{k-n} (1 - \xi) \frac{1 - \xi^n}{1 - \xi^{n+m}} + \xi \delta_{k,n+m}, \quad n \leq k \leq n + m, \quad (1)$$

где $\delta_{k,n}$ — символ Кронекера.

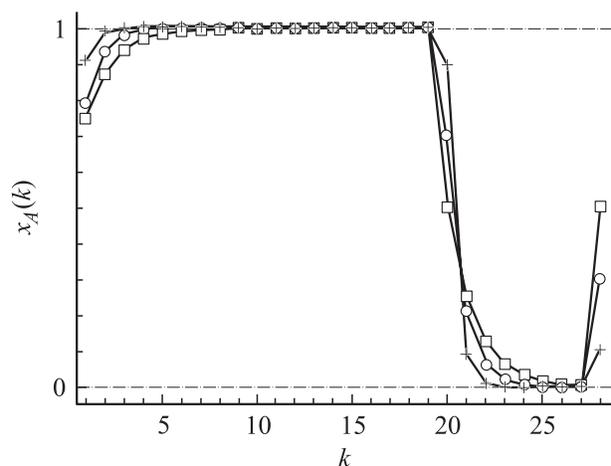


Рис. 1. Зависимость доли атомов A в монослое от номера монослоя при различных перемешиваниях ξ . Бислой содержит 20 монослоев атомов A и 8 монослоев атомов B . Кружки, кресты и прямоугольники соответствуют значениям $\xi = 0.1, 0.3$ и 0.5 .

Послойная концентрация элемента A при разных значениях параметра ξ представлена на рис. 1. Характерной особенностью этого распределения является асимметрия интерфейса, которая особенно сильно проявляется при промежуточных значениях $\xi \sim 0.5$. Причиной асимметрии является существование выделенного направления — направления эпитаксиального роста. В случае когда такое направление отсутствует, например когда перемешивание стимулировано отжигом образца, интерфейс будет симметричен.

Предложенная модель позволяет дать естественное объяснение ряду экспериментов, в которых для исследования интерфейсов использовались мессбауэровская спектроскопия с пробными слоями ^{57}Fe и ^{119}Sn [10]. Приведем несколько примеров.

В работе [11] для исследования магнитной структуры интерфейса в сверхрешетках Cr/V тонкие слои ^{119}Sn были помещены на разных расстояниях от интерфейса. Сверхтонкие поля на атомах ^{119}Sn вблизи интерфейса V/Cr и Cr/V оказались существенно различны. Если пробный слой вводился близко к границе слоя Cr и на нем выращивался слой V, то в спектре преобладали атомы ^{119}Sn с нулевым сверхтонким полем. Если на слой V наносился тонкий слой Cr, затем слой ^{119}Sn , а потом продолжалось напыление хрома, на ядрах ^{119}Sn наблюдалось значительное сверхтонкое расщепление. Это интерпретировалось как доказательство различной шероховатости интерфейсов V/Cr и Cr/V. Однако, если предположить, что часть атомов ^{119}Sn „всплывает“ в первом случае в немагнитном V, а во втором — в магнитном Cr, такое поведение сверхтонких полей вполне естественно и говорит, скорее, об асимметрии каждого интерфейса. Аналогичные выводы можно сделать при анализе мессбауэровских спектров сверхрешеток Fe/Cr. В экспериментах [6] пробные слои ^{57}Fe наносились для одних образцов только на интерфейс Fe/Cr (Fe на Cr), а для других — на интерфейс Cr/Fe (Cr на Fe). В основном использовалось природное железо, содержащее всего 2% мессбауэровского изотопа ^{57}Fe . Спектральный вклад линии $33T$, отвечающий атомам ^{57}Fe в массивном железе, оказался примерно в полтора раза больше для образцов с пробным слоем на интерфейсе Fe/Cr. В образцах с пробными слоями на интерфейсе Cr/Fe был больше вклад линии $20T$, соответствующий атомам ^{57}Fe , окруженным вблизи интерфейса атомами Cr [3]. Очевидно, что такое распределение сверхтонких полей находится в согласии со сценарием всплывания атомов на поверхность при эпитаксиальном росте. Наконец, тот же механизм объясняет различие параметров сверхтонких взаимодействий для атомов на интерфейсах Fe/Ag и Ag/Fe [12]. Таким образом, можно утверждать, что процесс всплывания атомов и формирования при этом асимметричного интерфейса носит общий характер при эпитаксиальном росте металлических многослойных систем. Поэтому проявление этой асимметрии в спектрах зеркального отражения рентгеновского излучения представляет большой интерес для контроля качества интерфейса и адекватной интерпретации данных дополнительных экспериментальных методик.

3. Рассеяние рентгеновского излучения на идеальных интерфейсах

Рассмотрим слоистую структуру, состоящую из N металлических бислоев на подложке. Каждый бислой толщиной $d = d_a + d_b$ состоит из слоя металла A толщиной d_a и слоя металла B толщиной d_b . В идеализированной структуре будем считать подложку и границы между металлами идеально плоскими и структуры всех бислоев одинаковыми.

Нас будет интересовать упругое рассеяние мягкого рентгеновского излучения на такой структуре. Для рентгеновского излучения диэлектрическая проницаемость среды ε меньше единицы. Пренебрегая ее мнимой частью, можно записать

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 - \Delta(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Величина $\Delta(\mathbf{r})$ определяется плотностью рассеивающих электронов $\rho(\mathbf{r})$. Для однокомпонентной плазмы [13]

$$\Delta(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \rho(\mathbf{r}),$$

где e и m — заряд и масса электрона, ω — частота падающего излучения. На границе вакуум—среда при углах падения $\alpha \ll \alpha_c = \sqrt{\Delta}$ наблюдается полное внешнее отражение. В окрестности угла α_c амплитуды отраженной и преломленной волн являются величинами одного порядка и сильно зависят от разности $\alpha - \alpha_c$. Для рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ отклонение диэлектрической проницаемости от единицы очень мало: $\Delta \sim 10^{-5} - 10^{-6}$, и угол полного внешнего отражения, отсчитываемый от поверхности раздела сред, составляет несколько mrad.

В области малых углов, т.е. при $\alpha \ll 1$, из формул Френеля [14] для коэффициентов отражения R и прохождения T получаем

$$R_{\parallel} \approx R_{\perp} \approx \frac{x - \sqrt{x^2 - 1}}{x + \sqrt{x^2 - 1}},$$

$$T_{\parallel} \approx T_{\perp} \approx \frac{2x}{x + \sqrt{x^2 - 1}}, \quad (3)$$

где $x = \alpha/\alpha_c$, а знаками \parallel и \perp обозначена поляризация электрического поля в плоскости и перпендикулярно плоскости падения. При $\alpha < \alpha_c$ ($x < 1$) проходящая волна экспоненциально затухает внутри среды, и вклад излучения, рассеянного средой, пренебрежимо мал по сравнению с излучением, отраженным поверхностью раздела вакуум—среда. При $\alpha > \alpha_c$ ($x > 1$) коэффициент отражения быстро убывает по сравнению с коэффициентом прохождения, поэтому при углах, заметно превышающих угол полного внешнего отражения, практически все падающее излучение попадает внутрь среды.

При расчете интенсивности рассеяния на многослойных структурах используются два подхода — кинематический и динамический. В рамках динамического

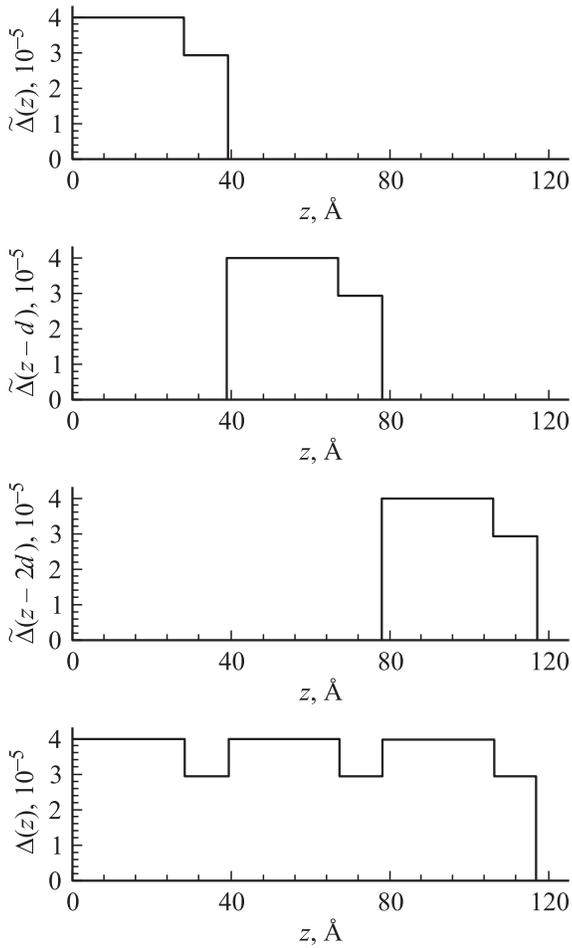


Рис. 2. Пространственное распределение величин $\tilde{\Delta}$ для первых трех бислоев и их суммы Δ .

подхода принимается во внимание зависимость поля, проходящего внутрь среды и вызывающего рассеяние, от оптических параметров системы. При этом учитываются многократные отражения от границ раздела сред и эффект экстинкции [15–20]. В рамках кинематического подхода изменением возбуждающего поля в среде пренебрегают и интенсивность рассеянного излучения рассматривают в борновском приближении [16,20,21].

При углах падения α , меньших или порядка угла полного внешнего отражения, когда коэффициенты прохождения и отражения сравнимы, необходимо использовать динамический подход. Данные по отражению в этой области углов дают информацию о структуре границы раздела вакуум–среда. Для исследования структуры интерфейсов многослойных систем более информативным является рассеянное рентгеновское излучение при углах падения, значительно больших угла полного внешнего отражения. В этом случае коэффициент отражения очень мал, и можно пользоваться борновским приближением, т. е. кинематическим подходом.

Нас будет интересовать рассеянное рентгеновское излучение в окрестностях брэгговских пиков достаточно высоких порядков, которые наблюдаются на углах паде-

ния гораздо больших α_c . В рамках первого борновского приближения для интенсивности рассеянного рентгеновского излучения $I(\mathbf{q})$ имеем [13]

$$I(\mathbf{q}) \sim |\Delta_{\mathbf{q}}|^2, \quad (4)$$

где $\Delta_{\mathbf{q}} = \int \Delta(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}d\mathbf{r}$, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$ — волновой вектор рассеяния, \mathbf{k}_i , \mathbf{k}_s — волновые векторы падающей и рассеянной волн. Для идеальной слоистой структуры вектор рассеяния ортогонален рассеивающим слоям, $\mathbf{q} = (0, 0, q_z)$, т. е. рассеяние является чисто зеркальным.

Здесь и далее считается, что подложка лежит в плоскости xy , а слоистая пленка занимает область $z \geq 0$. Величину $\Delta(z)$ в многослойной пленке удобно формально представить в виде суммы вкладов отдельных бислоев

$$\Delta(z) = \sum_{n=1}^N \tilde{\Delta}(z - (n-1)d), \quad (5)$$

где функция $\tilde{\Delta}(z - (n-1)d)$ относится к бислою с номером n . Она отлична от нуля лишь в пределах n -го слоя

$$\tilde{\Delta}(z) = \theta(z) \cdot \theta(d-z)[c_b + (c_a - c_b)\theta(d_a - z)], \quad (6)$$

где

$$\theta(z) = \begin{cases} 1 & \text{для } z \geq 0 \\ 0 & \text{для } z < 0 \end{cases}$$

— функция Хевисайда, c_a и c_b — постоянные, соответствующие значениям величины Δ в металлах A и B . Функции $\tilde{\Delta}(z)$ и $\Delta(z)$ представлены на рис. 2.

Величину $\Delta(z)$ в сверхрешетке можно представить в виде

$$\Delta(z) = \sum_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Delta}(z_1)\delta(z_1 - (z - (n-1)d))dz_1, \quad (7)$$

где $\delta(z)$ — δ -функция. Тогда

$$\Delta(z) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_z z} \Delta(z) dz = \tilde{\Delta}_{q_z} \sum_{n=1}^N e^{-iq_z d(n-1)}, \quad (8)$$

где

$$\tilde{\Delta}_{q_z} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq_z z} \tilde{\Delta}(z) dz. \quad (9)$$

Для интенсивности рассеянного излучения в этом случае имеем $I(\mathbf{q}) = I(q_z)\delta(q_x)\delta(q_y)$, где

$$I(q_z) \sim |\Delta_{q_z}|^2 = |\tilde{\Delta}_{q_z}|^2 S(q_z) = |\tilde{\Delta}_{q_z}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{Nq_z d}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{q_z d}{2}\right)}. \quad (10)$$

Дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma_{sc}}{d\Omega}$ определяется интенсивностью излучения в телесный угол $d\Omega$

$$\frac{d\sigma_{sc}}{d\Omega} \sim \frac{1}{q_z^2} I(\mathbf{q}).$$

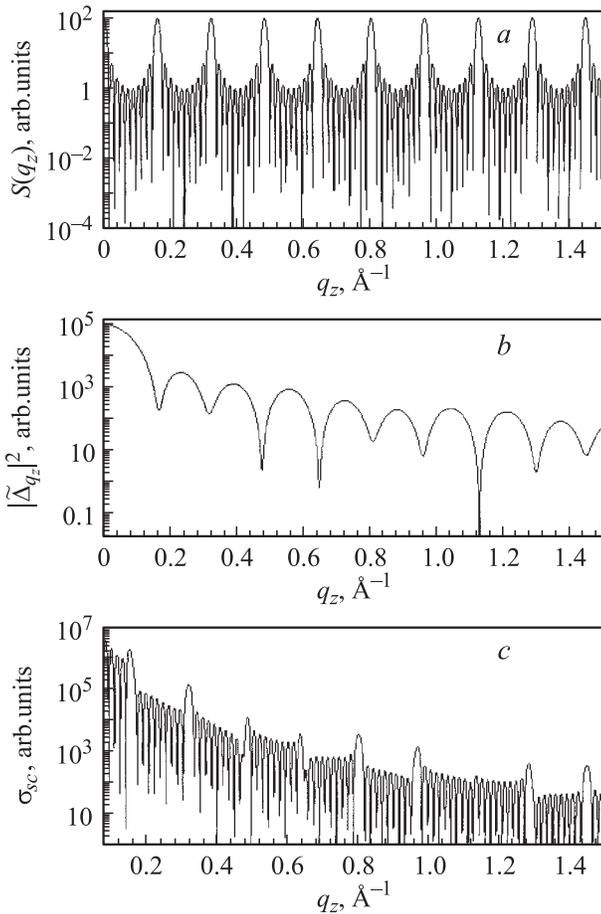


Рис. 3. Зависимость структурного фактора (а), форм-фактора (б) и сечения зеркального рассеяния (с) для идеальной сверхрешетки, состоящей из 10 бислоев Fe(28 Å)/Cr(11 Å), от волнового числа q_z .

Из формул (6) и (9) находим форм-фактор $|\tilde{\Delta}_{q_z}|^2$

$$|\tilde{\Delta}_{q_z}|^2 = \frac{1}{q_z^2} \left\{ c_a^2 + (c_a - c_b)^2 + c_b^2 - 2(c_a - c_b) \times [c_a \cos(q_z d_a) - c_b \cos(q_z d_b)] - 2c_a c_b \cos(q_z d) \right\}. \quad (11)$$

На рис. 3 показаны зависимости от q_z структурного фактора $S(q_z)$ (рис. 3, а), форм-фактора (рис. 3, б) и сечения зеркального рассеяния σ_{sc} , определяющего интенсивность рассеяния рентгеновского излучения на идеальной сверхрешетке (рис. 3, с). Структурный фактор содержит информацию о числе бислоев и толщине пленки. Форм-фактор определяется распределением электронной плотности в бислое.

4. Влияние перемешивания на структуру сверхрешетки

Интенсивность зеркально рассеянного рентгеновского излучения при наличии перемешивания описывается формулой (10). Однако электронная плотность в каждом

бислое $\tilde{\Delta}(z)$ уже не будет описываться формулой (6). При наличии перемешивания имеем

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}(z) &= \theta(z) \cdot \theta(d - z) [c_a x_A(z) + c_b x_B(z)] \\ &= \theta(z) \cdot \theta(d - z) [c_b + (c_a - c_b) x_A(z)], \end{aligned} \quad (12)$$

где $x_A(z)$ и $x_B(z) = 1 - x_A(z)$ получаются из формул (1) переходом от дискретной переменной k к непрерывной переменной z , а именно

$$\begin{aligned} x_A(z) &= \theta(d_a - z) \left[1 - \zeta^{\frac{z}{a}} (1 - \zeta) \frac{1 - \zeta^{\frac{d_b}{b}}}{1 - \zeta^{\frac{d_a}{a} + \frac{d_b}{b}}} - \zeta \frac{z + a - d_a}{a} \theta(z + a - d_a) \right] \\ &+ \theta(z - d_a) \left[\zeta^{\frac{z - d_a}{b}} (1 - \zeta) \frac{1 - \zeta^{\frac{d_a}{a}}}{1 - \zeta^{\frac{d_a}{a} + \frac{d_b}{b}}} + \zeta \frac{z + b - d}{b} \theta(z + b - d) \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

При переходе от дискретной переменной к непрерывной использованы обозначения a и b для толщин монослоев металлов A и B , а при учете членов с символами Кронекера в формуле (11) использована линейная интерполяция в пределах последнего монослоя каждого металла.

Так же как и для идеальной сверхрешетки, форм-фактор $|\tilde{\Delta}_{q_z}|^2$ легко вычисляется аналитически, однако получающееся выражение достаточно громоздко и потому здесь не приводится. На рис. 4 показана угловая зависимость интенсивности зеркального рассеяния на пленке из 10 бислоев при наличии ($\xi = 0.5$) и при отсутствии ($\xi = 0$) перемешивания. Видно, что влияние перемешивания сказывается начиная со второго брэгговского пика. Более детальная картина приведена на

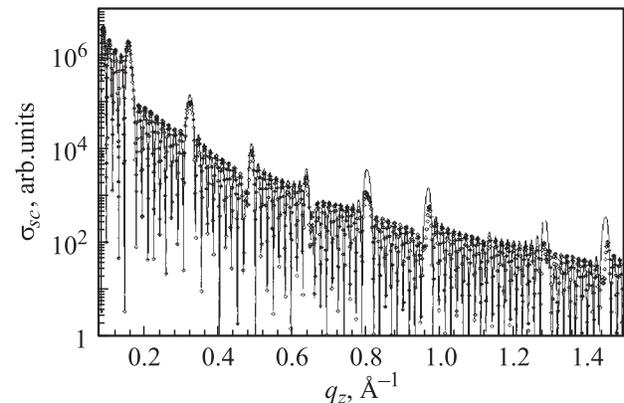


Рис. 4. Зависимость рассчитанного сечения зеркального рассеяния на пленке, содержащей 10 бислоев Fe(28 Å)/Cr(11 Å), от волнового числа q_z . Сплошная линия соответствует модели без перемешивания атомов, точками отмечены результаты вычислений для модели с перемешиванием $\xi = 0.5$.

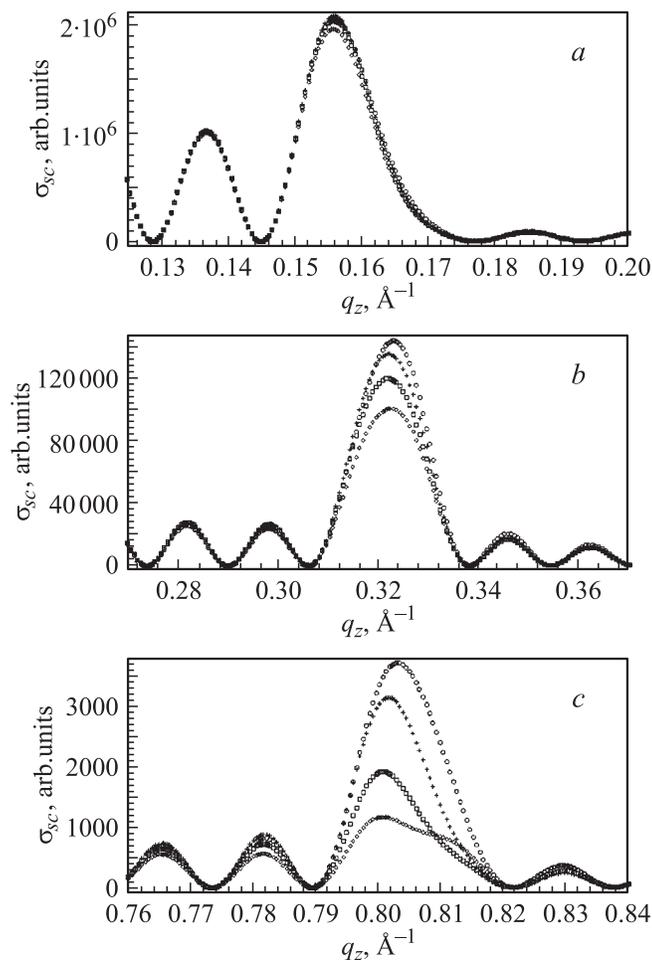


Рис. 5. Зависимость рассчитанного сечения зеркального рассеяния на пленке, содержащей 10 бислоев Fe(28 Å)/Cr(11 Å), от волнового числа q_z при различных значениях перемешивания. Кружки соответствуют $\xi = 0$, кресты — $\xi = 0.1$, квадраты — $\xi = 0.3$, ромбы — $\xi = 0.5$. *a, b* и *c* — соответственно окрестности первого, второго и пятого брэгговских максимумов.

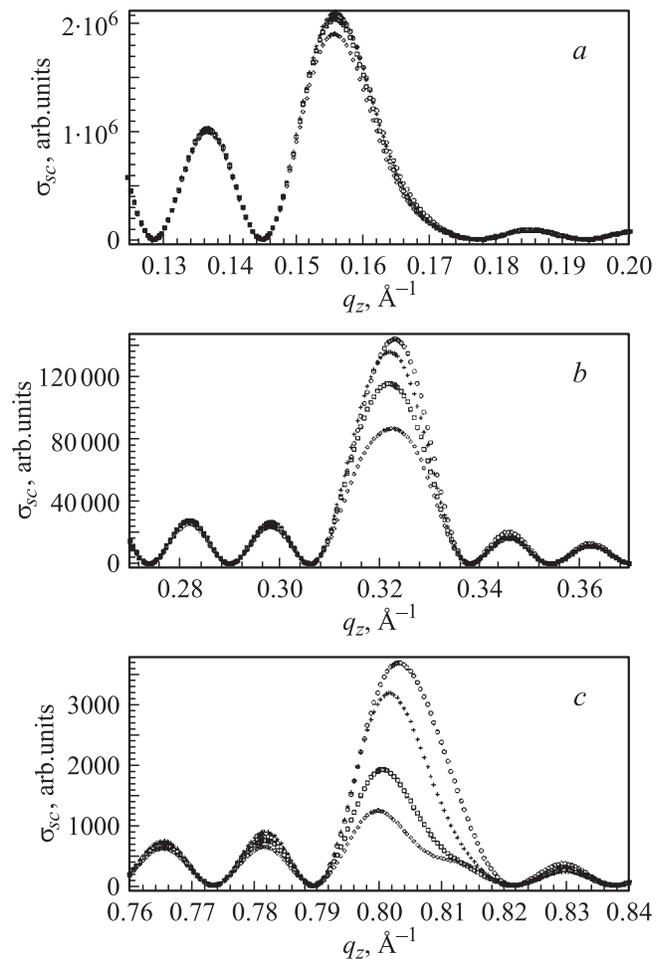


Рис. 7. Зависимость рассчитанного сечения зеркального рассеяния на пленке, содержащей 10 бислоев Fe(28 Å)/Cr(11 Å), от волнового числа q_z при различных значениях перемешивания для симметричной модели. Кружки соответствуют $\xi = 0$, кресты — $\xi = 0.1$, квадраты — $\xi = 0.3$, ромбы — $\xi = 0.5$. *a, b* и *c* — соответственно окрестности первого, второго и пятого брэгговских максимумов.

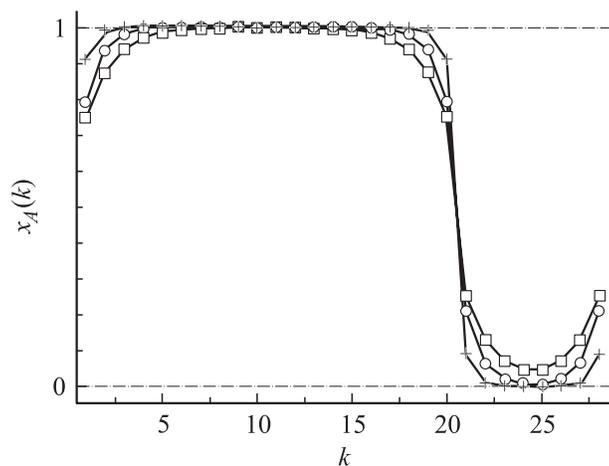


Рис. 6. Зависимость доли атомов *A* в монослое от его номера при различных перемешиваниях для симметричной модели. Бислой содержит 20 монослоев атомов *A* и 8 монослоев атомов *B*. Кружки, кресты и ромбы соответствуют значениям $\xi = 0.1, 0.3$ и 0.5 .

рис. 5, где показаны соответственно окрестности 1, 2 и 5 брэгговских пиков при различных значениях перемешивания ξ . Видно, что в зависимости от ξ резко меняется соотношение между амплитудами брэгговских пиков разных порядков. С ростом перемешивания значительно убывает высота и меняется форма пиков.

Интересно провести сравнение с аналогичными результатами для симметричной модели. Для этого мы формально ввели симметричное распределение для величины $\Delta(z)$ в пределах каждого слоя, используя модель типа модели с перемешиванием (1). Профили $x_A(k)$ для различных перемешиваний ξ показаны на рис. 6. На рис. 7 приведены угловые зависимости интенсивности рассеянного излучения в окрестностях 1, 2 и 5 брэгговских пиков для этой модели. Видно, что для симметричной модели высота брэгговских пиков немного меньше, чем для несимметричной модели, при одних и тех же значениях перемешивания.

5. Учет влияния шероховатости

Рассмотрим модель, в которой каждый слой состоит из чистых компонент A или B , а толщина каждого слоя не остается постоянной, а случайным образом меняется вдоль слоя из-за наличия ступенек и островков на интерфейсах [16–20]. Будем считать, что размер освещенной области в эксперименте по рассеянию рентгеновского излучения значительно больше характерной корреляционной длины, на которой меняется толщина слоя. В этом случае интенсивность рассеянного излучения можно рассматривать как сумму интенсивностей рассеяния от систем с разным распределением толщин слоев. Будем предполагать, что функция распределения слоев по толщине имеет гауссов вид. Тогда структура пленки кроме средних значений толщин слоев d_a и d_b характеризуется среднеквадратичными шероховатостями σ_a и σ_b . Информацию о шероховатостях обычно получают из спектров диффузного рассеяния. Однако их влияние должно проявляться и в зеркальном рассеянии из-за нарушений фазовых соотношений, возникающих вследствие случайного распределения толщин слоев.

Интенсивность зеркального рассеяния рентгеновского излучения на пленке имеет вид

$$I(q_z) \sim \langle |\Delta_{q_z}|^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 dz_2 e^{-iq_z z_1} e^{iq_z z_2} \langle \Delta(z_1) \Delta(z_2) \rangle, \quad (14)$$

где скобками $\langle \dots \rangle$ обозначено статистическое усреднение. Зависящая от координаты z величина $\Delta(z)$ в многослойной пленке формально может быть представлена в виде суммы величин $\Delta_l(z - \sum_{p=0}^{l-1} (d_a^{(p)} + d_b^{(p)}))$, отличных от нуля лишь в пределах одного бислоя

$$\Delta(z) = \sum_{l=1}^N \Delta_l \left(z - \sum_{p=0}^{l-1} (d_a^{(p)} + d_b^{(p)}) \right) = \sum_{l=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dz' \Delta_l(z') \delta \left(z' - \left(z - \sum_{p=0}^{l-1} (d_a^{(p)} + d_b^{(p)}) \right) \right), \quad (15)$$

где формально положено $d_a^{(0)} = d_b^{(0)} = 0$. Поскольку из-за шероховатостей толщины слоев становятся различными, в формуле (15) введен индекс l , указывающий номер бислоя. Величину $\Delta_l(z')$ с помощью θ -функций можно записать в виде

$$\Delta_l(z') = \theta(z') \cdot \theta(d_a^{(l)} + d_b^{(l)} - z') \times [c_b + (c_a - c_b)\theta(d_a^{(l)} - z')]. \quad (16)$$

Подставляя (15) в (14) и интегрируя δ -функции по z_1 и z_2 , получаем для интенсивности зеркального рас-

сеяния

$$I(q_z) \sim \sum_{l,j=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz' dz'' e^{-iq_z(z'-z'')} \times \left\langle \Delta_l(z') \Delta_j(z'') \prod_{p=0}^{(l-1)} e^{-iq_z(d_a^{(p)} + d_b^{(p)})} \prod_{t=0}^{(j-1)} e^{iq_z(d_a^{(t)} + d_b^{(t)})} \right\rangle. \quad (17)$$

Используя явные выражения (16) для $\Delta_l(z')$ и выполняя интегрирование по z' и z'' , имеем

$$I(q_z) \sim \frac{1}{q_z^2} \sum_{l,j=1}^N \left\langle \left(c_a + (c_b - c_a) e^{-iq_z d_a^{(l)}} - c_b e^{-iq_z (d_a^{(l)} + d_b^{(l)})} \right) \times \left(c_a + (c_b - c_a) e^{iq_z d_a^{(j)}} - c_b e^{iq_z (d_a^{(j)} + d_b^{(j)})} \right) \times \prod_{p=0}^{(l-1)} e^{-iq_z (d_a^{(p)} + d_b^{(p)})} \prod_{t=0}^{(j-1)} e^{iq_z (d_a^{(t)} + d_b^{(t)})} \right\rangle. \quad (18)$$

Если ввести обозначения для суммарной толщины l бислоев $L^{(l)} = \sum_{p=0}^l (d_a^{(p)} + d_b^{(p)})$ и для толщины l бислоев без последнего слоя $d_b^{(l)}$, $L^{(l-\frac{1}{2})} = L^{(l-1)} + d_a^{(l)}$, то интенсивность рассеяния можно записать в виде

$$I(q_z) = \frac{1}{q_z^2} \times \sum_{l,j=1}^N \left\langle \left(c_a e^{-iq_z L^{(l-1)}} + (c_b - c_a) e^{-iq_z L^{(l-\frac{1}{2})}} - c_b e^{-iq_z L^{(l)}} \right) \times \left(c_a e^{iq_z L^{(j-1)}} + (c_b - c_a) e^{iq_z L^{(j-\frac{1}{2})}} - c_b e^{iq_z L^{(j)}} \right) \right\rangle. \quad (19)$$

В зависимости от режима роста многослойной системы статистическое усреднение в (19) можно проводить различным образом. Будем предполагать, что шероховатости всех интерфейсов одинаковы и не коррелированы друг с другом. Рассмотрим два предельных случая. В первом случае среднее расстояние между любой парой интерфейсов фиксировано, но имеются флуктуации положений интерфейсов относительно их средних значений, причем дисперсия расстояния между l и j интерфейсами не зависит от $|l-j|$. Во втором случае флуктуируют толщины слоев, и дисперсия расстояния $|L^{(l)} - L^{(j)}|$ линейно растет с $|l-j|$.

Результаты расчетов по формуле (19) при гауссовом усреднении со среднеквадратичной шероховатостью интерфейсов $\sigma = \sqrt{\sigma_a^2 + \sigma_b^2} = 2 \text{ \AA}$ для этих двух случаев приведены на рис. 8, b, c соответственно. Для сравнения на рис. 8, a приведена кривая для идеальной сверхрешетки $\sigma = 0$. На рисунках показаны первые шесть брэгговских пиков. Наличие шероховатостей в первой модели приводит к небольшому уменьшению амплитуды брэгговских пиков без изменения их ширины. Во второй модели наблюдается значительное уширение пиков с ростом их порядкового номера. Для обеих моделей хорошо видно, что промежуточные пики, расположенные

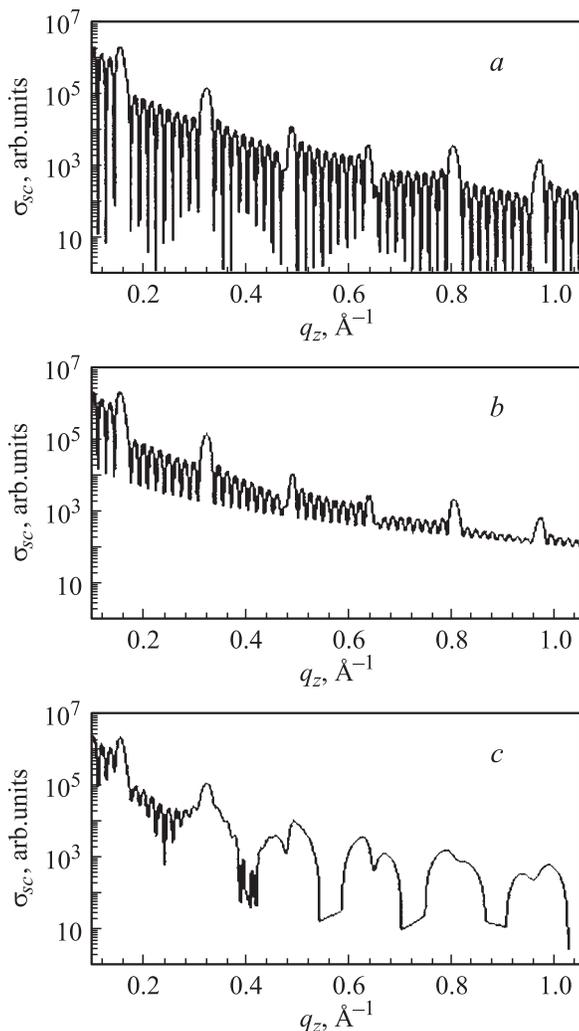


Рис. 8. Зависимость рассчитанного сечения зеркального рассеяния на пленке, содержащей десять бислоев Fe(28 Å)/Cr(11 Å), от волнового числа q_z при наличии шероховатости слоев: *a* — $\sigma = 0$, *b* — $\sigma = 2$ Å (первая модель учета шероховатостей), *c* — $\sigma = 2$ Å (вторая модель).

между соседними брэгговскими максимумами, размываются. Следует подчеркнуть, что эта картина очень чувствительна к величине среднеквадратичной шероховатости σ .

6. Заключение

Таким образом, рассмотрено влияние двух факторов — перемешивания и шероховатостей — на картину зеркального рассеяния рентгеновского излучения в многослойных пленках. В идеальной пленке с резкими плоскими границами картина зеркального рассеяния, согласно формулам (10), (11), определяется произведением структурного фактора и форм-фактора. Эффект перемешивания фактически сохраняет периодичность структуры, но размывает границы между слоями, делая их менее резкими. Эти изменения влияют только на

форм-фактор. В картине зеркального рассеяния перемешивание приводит к заметному уменьшению высоты брэгговских пиков, особенно высоких порядков, при этом малые промежуточные пики сохраняются. Влияние шероховатости интерфейса на картину зеркального рассеяния связано с нарушением периодичности слоевой структуры, что вызывает изменение как структурного фактора, так и форм-фактора. При этом интенсивность зеркального рассеяния не представляется в виде произведения структурного фактора и форм-фактора. Переменная толщина слоев, составляющих пленку, приводит к изменению формы, и, прежде всего, ширины брэгговских пиков, а также к исчезновению промежуточных пиков с ростом амплитуды шероховатости. Дифракционная картина рассеяния рентгеновского излучения многослойными пленками оказывается чувствительной к эффекту перемешивания и к шероховатости интерфейса и по-разному зависит от данных факторов. Это может служить основой для экспериментального определения параметров, характеризующих перемешивание и шероховатость, из картины зеркального рассеяния.

Список литературы

- [1] G.A. Prinz. *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 57 (1999).
- [2] Z.H. Ming, A. Krol, Y.L. Soo, Y.H. Kao, J.S. Park, K.L. Wang. *Phys. Rev. B* **47**, 24, 16373 (1993).
- [3] V. Uzdin, W. Keune, H. Schrör, M. Walterfang. *Phys. Rev. B* **63**, 104407 (2001).
- [4] A. Gupta, A. Paul, S. Mukhopadhyay, K. Mibu. *J. Appl. Phys.* **90**, 3, 1237 (2001).
- [5] A. Gupta, A. Paul, M. Gupta, C. Meneghini, U. Pietsch, K. Mibu, A. Maddalena, S. Dal Toé, G. Principi. *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276**, part 2, 1219 (2004).
- [6] В.М. Уздин, В. Койне. *ФММ* **91**, Suppl. 1, 82 (2001).
- [7] V. Uzdin, W. Keune, M. Walterfang. *J. Magn. Magn. Mater.* **240**, 1-3, 504 (2002).
- [8] V.M. Uzdin, C. Demangeat. *Phys. Rev. B* **66**, 92408 (2002).
- [9] A. Davies, J.A. Strosio, D.T. Pierce, R.J. Celotta. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 22, 4175 (1996).
- [10] T. Shinjo, W. Keune. *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 1-3, 598 (1999).
- [11] M. Almokhtar, K. Mibu, A. Nakanishi, T. Kobayashi, T. Shinjo. *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 44, 9247 (2000).
- [12] P.J. Schurer, Z. Celinski, B. Heinrich. *Phys. Rev. B* **51**, 4, 2506 (1995).
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред*. Наука, М. (1992). 664 с.
- [14] М. Борн, Э. Вольф. *Основы оптики*. Наука, М. (1973). 720 с.
- [15] G.H. Vineyard. *Phys. Rev. B* **26**, 8, 4146 (1982).
- [16] S.K. Sinha, E.B. Sirota, S. Garoff, H.B. Stanley. *Phys. Rev. B* **38**, 4, 2297 (1988).
- [17] V. Holy, T. Baumbach. *Phys. Rev. B* **49**, 15, 10668 (1994).
- [18] D.K.G. de Boer. *Phys. Rev. B* **53**, 10, 6048 (1996).
- [19] D.R. Lee, S.K. Sinha, D. Haskel, Y. Choi, S.A. Stepanov, G. Srajer. *Phys. Rev. B* **68**, 224409 (2003).
- [20] D.R. Lee, S.K. Sinha, C.S. Nelson, J.C. Lang, C.T. Venkataraman, G. Srajer, R.M. Osgood III. *Phys. Rev. B* **68**, 224410 (2003).
- [21] S.K. Sinha. *J. Phys. (France) III*, 4, 1543 (1994).