

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ ОГРАНИЧЕННЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ПУЧКОВ: I. КОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ ПОРИСТЫМ КРИСТАЛЛОМ

*В. И. Пунегов**

*Физико-математический институт Коми научного центра
Уральского отделения Российской академии наук
167982, Сыктывкар, Россия*

Поступила в редакцию 16 февраля 2018 г.

Разработана динамическая теория когерентного рассеяния пространственно-ограниченных рентгеновских пучков в пористых кристаллах. Получены решения для амплитудных коэффициентов прохождения и отражения в зависимости от размеров пучков и структурных характеристик кристалла. Показаны особенности формирования контуров равной интенсивности, а также вертикальных и поперечных сечений когерентного рассеяния в обратном пространстве от пористых пленок, градиентных структур и сверхрешеток.

DOI: 10.1134/S0044451018080047

1. ВВЕДЕНИЕ

Статистическая динамическая теория рентгеновской дифракции [1] описывает когерентное и диффузное рассеяние от кристаллов с хаотически распределенными [2] или коррелированными дефектами [3]. Эта теория используется также для описания дифракции в пористых кристаллических слоях [4] или в кристаллических системах с наноструктурами [5], поскольку наличие пор или, например, квантовых точек приводит к нарушению строгой трансляционной периодичности кристаллической среды.

В настоящее время пористые материалы широко используются в изготовлении светоизлучающих приборов, биохимических сенсоров, датчиков влажности, интерференционных фильтров, оптических волноводов, фотонных кристаллов и т.д. [6], исследование структурных и других физических свойств пористых кристаллов является весьма актуальной задачей.

Неразрушающие и чувствительные методы рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения оказались перспективными в задачах диагностики пористых материалов [4]. Изначально рентгенодифракционные структурные исследования пористых слоев выполнялись с использованием двухкристаль-

ной дифрактометрии [7]. Однако более информативными являются измерения на трехкристальном дифрактометре [4, 8].

Отметим, что статистическая динамическая теория дифракции, ранее разработанная применительно к трехкристальной дифрактометрии [9, 10], рассматривалась для плоской, пространственно-неограниченной рентгеновской волны. Количественный анализ структурных характеристик в рамках этих теорий требовал определенных приближений, поскольку когерентная составляющая интенсивности рассеяния для плоской волны в обратном пространстве представляет собой дельта-функцию [11]. С другой стороны, в эксперименте как падающий, так и дифракционно отраженный рентгеновский пучок пространственно ограничен наличием щелей и коллиматоров. Поэтому для более глубокого анализа структурных особенностей пористых систем возникает потребность развития адекватной теории и численного моделирования рентгеновского рассеяния на пористых структурах. Решению этой задачи посвящена данная работа.

2. ДИНАМИЧЕСКОЕ КОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ ОГРАНИЧЕННЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ПУЧКОВ В ПОРИСТОМ КРИСТАЛЛЕ

Рассмотрим динамическую дифракцию падающего на пористый кристалл пространственно-огра-

* E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

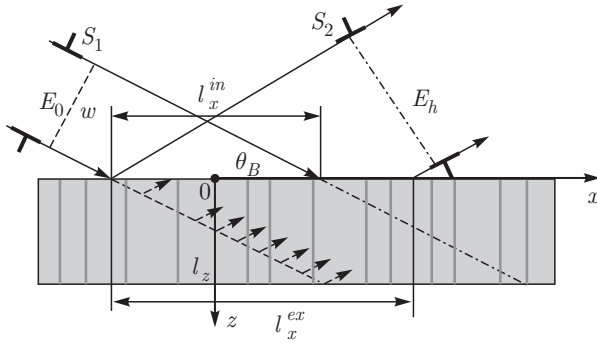


Рис. 1. Схематическое изображение дифракции пространственно-ограниченного рентгеновского пучка в пористом кристалле толщиной l_z

ниченного щелью S_1 рентгеновского пучка шириной w (рис. 1).

Введем систему координат, согласно которой ось x направлена вдоль поверхности слоя, а ось z — в глубь этого слоя. Ширина засветки поверхности кристалла падающим пучком равна $l_x^{in} = w / \sin(\theta_B)$. Поперечный размер выходящего пучка ограничен щелью S_2 , латеральная проекция размера отраженного пучка равна l_x^{ex} (рис. 1). Дифракцией рентгеновских лучей на краях щелей падающего S_1 и отраженного S_2 пучков пренебрегаем (приближение геометрической оптики).

Для простоты, рассмотрим симметричную брэгговскую дифракцию в несовершенном кристалле. Пусть на кристалл под углом $\theta = \theta_B + \omega$ падает плоская рентгеновская волна, где $\omega = \theta - \theta_B$ — отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга θ_B . Динамическая дифракция рентгеновских лучей в несовершенном кристалле описывается уравнениями Такаги [12], которые в декартовой системе координат имеют вид

$$\begin{aligned} \left(\operatorname{ctg} \theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right) E_0(\eta; x, z) &= i a_0 E_0(\eta; x, z) + \\ &+ i a_{-h} \phi(x, z) E_h(\eta; x, z), \\ \left(\operatorname{ctg} \theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} \right) E_h(\eta; x, z) &= \\ &= i(a_0 + \eta) E_h(\eta; x, z) + i a_h \phi^*(x, z) E_0(\eta; x, z), \end{aligned} \quad (1)$$

где $a_0 = \pi \chi_0 / (\lambda \gamma_0)$, $a_{h, \bar{h}} = C \pi \chi_{h, \bar{h}} / (\lambda \gamma_{h, 0})$, $\gamma_{0, h} = \sin(\theta_B)$, $\eta = 2k \cos(\theta_B) \omega$ — угловой параметр, используемый в двухкристальной дифрактометрии в режиме $\theta - 2\theta$ -сканирования, $k = 2\pi / \lambda$ — волновое число, λ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме, C — поляризационный фактор, $\chi_g = -r_0 \lambda^2 F_g / (\pi V_c)$ ($g = 0, h, \bar{h}$) — фурье-компонента рентгеновской поляризуемости, V_c — объем элемен-

тарной ячейки, $r_0 = e^2 / (mc^2)$ — классический радиус электрона, e , m — заряд и масса электрона, F_g — структурный фактор.

В уравнениях (1) присутствует фазовый фактор $\phi(x, z) = \exp(ihu_z(x, z))$, при этом «звездочка» означает комплексное сопряжение, h — величина вектора обратной решетки, причем $h = 2\pi / d_{hkl}$, где d_{hkl} — межплоскостное расстояние, $u_z(x, z)$ — проекция вектора атомных смещений на направление вектора обратной решетки.

Отметим, что при наличии дефектов кристаллической структуры функция атомных смещений $u_z(x, z)$ и, следовательно, фазовая функция $\phi(x, z) = \exp(ihu_z(x, z))$ в системе уравнений (1) представимы в виде суммы усредненной и флуктуационной частей: $u_z(x, z) = \langle u_z(x, z) \rangle + \delta u_z(x, z)$. Усредненная часть фазовой функции может быть записана как произведение $\langle \phi(x, z) \rangle = \bar{\phi}(x, z) f(x, z)$, где $\bar{\phi}(x, z) = \exp(ih \langle u_z(x, z) \rangle)$ описывает неслучайные усредненные крупномасштабные деформации в кристалле, $f(x, z) = \langle \exp(ih \delta u_z(x, z)) \rangle$ — статистический фактор Дебая–Валлера.

Статистическое усреднение системы (1) приводит к следующим уравнениям для когерентных амплитуд (в геометрии Брэгга мы пренебрегаем эффектами вторичной экстинкции для диффузного рассеяния) [10]:

$$\begin{aligned} \left(\operatorname{ctg} \theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right) E_0^c(\eta; x, z) &= i \bar{a}_0 E_0^c(\eta; x, z) + \\ &+ i a_{-h} f \bar{\phi}(x, z) E_h^c(\eta; x, z), \\ \left(\operatorname{ctg} \theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} \right) E_h^c(\eta; x, z) &= \\ &= i(\bar{a}_0 + \eta) E_h^c(\eta; x, z) + i a_h f \bar{\phi}^*(x, z) E_0^c(\eta; x, z). \end{aligned} \quad (2)$$

В уравнениях (2) для простоты считаем, что поры однородно распределены по объему кристалла, тогда статистический фактор Дебая–Валлера в нашем рассмотрении является постоянной величиной: $f(x, z) = f$. Одной из основных характеристик среды является пористость кристалла $P = 1 - \nu / \nu_0$, где ν_0 и ν — плотности слоев до и после электрохимического травления (анодирования). Фактор Дебая–Валлера f в общем случае может быть представлен в виде произведения $f = f_s f_p$, где f_s вызван структурными нарушениями «скелета» пористого кристалла и f_p — его пористостью, т. е. отсутствием объема рассеивающего материала в результате электрохимического травления. Если пористый слой лежит на подложке, а процесс электрохимического травления вызывает рассогласования параметров решетки Δd , в рассмотрении необходимо учитывать

относительную деформацию $\varepsilon_z = \Delta d/d_{hkl}$, связанную с полем решеточных смещений $\langle u_z(x, z) \rangle$. За преломление и поглощение рентгеновских волн в среде в уравнениях (2) отвечает коэффициент

$$\bar{a}_0 = (1 - P)\pi\chi_0/(\lambda\gamma_0) + ia_h a_{-h}(1 - f^2)\tau, \quad (3)$$

где множитель $(1 - P)$ в первом слагаемом (3) характеризует уменьшение зарядовой плотности из-за наличия пор, τ — величина комплексной корреляционной длины, которая обусловлена диффузным поглощением и пропорциональна размерам пор в направлении, параллельном вектору обратной решетки $\mathbf{h}$. Как правило, второе слагаемое в (3) при малой пористости существенно меньше первого. При большой пористости диффузное поглощение может заметно превышать фотопоглощение.

Выполним фурье-преобразование для когерентных амплитуд рентгеновских полей в системе уравнений (2)

$$E_{0,h}^c(\eta; x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp(i\kappa x) \hat{E}_{0,h}^c(\kappa, \eta; z), \quad (4)$$

где фурье-образы запишутся как

$$\hat{E}_{0,h}^c(\kappa, \eta; z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-i\kappa x) E_{0,h}^c(\eta; x, z). \quad (5)$$

Проведем также фурье-преобразование для фазового множителя $\bar{\phi}(x, z) = \exp(ih\langle u_z(x, z) \rangle)$:

$$\bar{\phi}(x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \exp(i\kappa' x) \bar{\phi}(\kappa', z), \quad (6)$$

где

$$\bar{\phi}(\kappa', z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-i\kappa' x) \bar{\phi}(x, z). \quad (7)$$

Подставляя (4), (6) в (3), получаем систему интегро-дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_0^c(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i(\bar{a}_0 - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_0^c(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_h \frac{f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \bar{\phi}(\kappa', z) \hat{E}_h^c(\kappa - \kappa', \eta; z), \\ - \frac{\partial \hat{E}_h^c(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i(\bar{a}_0 + \eta - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_h^c(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_h \frac{f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \bar{\phi}^*(\kappa', z) \hat{E}_0^c(\kappa - \kappa', \eta; z). \end{aligned} \quad (8)$$

Система уравнений (8) существенно упростится при отсутствии в пористом кристалле крупномасштабных упругих деформаций, поскольку в этом случае $\bar{\phi}(\kappa', z) = \bar{\phi}^*(\kappa', z) = 2\pi\delta(\kappa')$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_0^c(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i(\bar{a}_0 - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_0^c(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_h f \hat{E}_h^c(\kappa, \eta; z), \\ - \frac{\partial \hat{E}_h^c(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i(\bar{a}_0 + \eta - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_h^c(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_h f \hat{E}_0^c(\kappa, \eta; z). \end{aligned} \quad (9)$$

Структура системы уравнений (9) совпадает с хорошо известными одномерными уравнениями Такаги [12]. Отличие от традиционных уравнений состоит в зависимости амплитуд когерентных полей от переменной фурье-пространства κ . Такая функциональная зависимость позволяет рассмотреть динамическую дифракцию в кристалле с ограниченным по размерам фронтом падающей рентгеновской волны.

Уравнения (9) должны быть дополнены граничными условиями. В нашем рассмотрении ограничение ширины рентгеновского пучка на поверхности кристалла задается функцией

$$Y(x, l_x^{in}) = \begin{cases} 1, & x \in \pm l_x^{in}/2, \\ 0, & x \notin \pm l_x^{in}/2, \end{cases} \quad (10)$$

которую представим в виде интеграла Фурье

$$Y(x, l_x^{in}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \exp(i\kappa x) d\kappa.$$

Для рентгеновского пучка с шириной засветки поверхности кристалла 100 мкм граничные условия (10) показаны на рис. 2 (кривая 1). Фурье-образ этой функции имеет следующее аналитическое выражение:

$$\hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) = \frac{\sin(\kappa l_x^{in}/2)}{\kappa/2}, \quad (11)$$

где κ — переменная обратного пространства. Изображения этой функции для граничных условий (10) демонстрируются кривой 2 на рис. 2.

Если на кристалл падает плоская волна, амплитуда которой пространственно ограничена и описывается функцией (10), в прямом пространстве на поверхности кристалла имеем следующее граничное условие: $E_0^c(\eta; x, 0) = Y(x, l_x^{in})$. Согласно фурье-преобразованиям (5) и (11), граничное условие в обратном пространстве запишется как $\hat{E}_0^c(\kappa, \eta; 0) = \hat{Y}(\kappa, l_x^{in})$. Для дифракционно отраженной волны

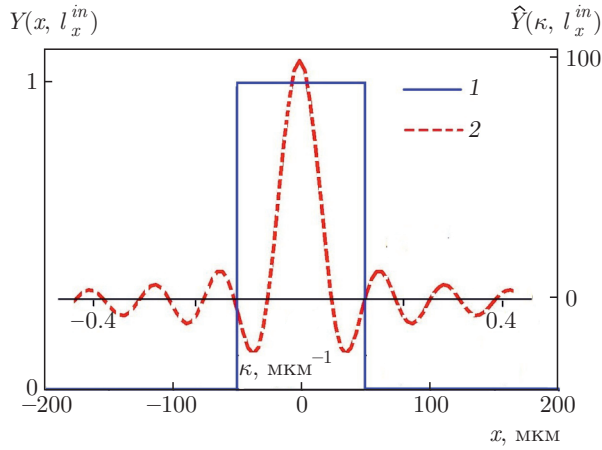


Рис. 2. Граничные условия для пространственно-ограниченного рентгеновского пучка в прямом (кривая 1) и в фурье-пространстве (кривая 2) для $l_x^{in} = 100$ мкм

от кристалла толщиной l_z выполняется второе граничное условие $\hat{E}_h^c(\kappa, \eta; l_z) = 0$.

Аналитические решения системы связанных уравнений (9) для фурье-амплитуд проходящей и дифракционной волны (5) в объеме кристалла имеют вид

$$\hat{E}_0^c(\kappa, \eta; z) = \frac{\tilde{\xi}_1 \exp(i\tilde{\xi}l_z) - \tilde{\xi}_2 \exp(i\tilde{\xi}z)}{\tilde{Q}} \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \exp(i[\sigma_0 + \tilde{\xi}_2]z), \quad (12)$$

$$\hat{E}_h^c(\kappa, \eta; z) = a_h f \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - \exp(i\tilde{\xi}z)}{\tilde{Q}} \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \exp(i[\sigma_0 + \tilde{\xi}_2]z), \quad (13)$$

где угловая переменная $\tilde{\psi} = \eta + 2\bar{a}_0 - 2\kappa \operatorname{ctg} \theta_B$, $\sigma_0 = (\bar{a}_0 - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B)$, $\tilde{Q} = \tilde{\xi}_1 \exp(i\tilde{\xi}l_z) - \tilde{\xi}_2$, $\tilde{\xi}_{1,2} = (-\tilde{\psi} \pm \tilde{\xi})/2$, $\tilde{\xi} = \sqrt{\tilde{\psi}^2 - 4f^2 a_h a_{\bar{h}}}$.

Подставляя (12) и (13) в (4), получаем, в частности, решение для амплитуды проходящего и дифракционного рентгеновского поля в объеме кристалла:

$$\hat{E}_0^c(\eta; x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\tilde{\xi}_1 \exp(i\tilde{\xi}l_z) - \tilde{\xi}_2 \exp(i\tilde{\xi}z)}{\tilde{Q}} \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \exp(i[(\sigma_0 + \tilde{\xi}_2)z + \kappa x]), \quad (14)$$

$$\hat{E}_h^c(\eta; x, z) = \frac{a_h f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - \exp(i\tilde{\xi}z)}{\tilde{Q}} \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \exp(i[(\sigma_0 + \tilde{\xi}_2)z + \kappa x]). \quad (15)$$

Соотношения (14) и (15) представляют собой решения для когерентных амплитуд проходящей и дифракционной волн в случае ограниченного фронта падающей рентгеновской волны как функции углового параметра η . С экспериментальной точки зрения, эти решения относятся к двухкристальной геометрии или, иными словами, интегральной регистрации рентгеновских полей с широкой апертурой детектора.

Пусть $\mathbf{k}_{0,h}$ — волновые векторы падающего и отраженного рентгеновского пучка. В обратном пространстве угловое распределение интенсивности рассеяния зависит от вектора $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$, задающего отклонение вектора рассеяния $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ от узла обратной решетки $\mathbf{h}$. Дифференциальная или трехосевая [13] регистрация рентгеновских волн в обратном пространстве зависит от параметров ω и ε , определяющих угловое положение образца и анализатора. Эти параметры связаны с проекциями $q_{x,z}$ вектора $\mathbf{q}$ соотношениями:

$$q_x = k \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon), \quad (16)$$

$$q_z = -k \cos \theta_B \varepsilon. \quad (17)$$

Переходя к решениям, описывающим трехосевую регистрацию рентгеновских полей в обратном пространстве, необходимо выполнить фурье-преобразование $E_{0,h}^c(\eta; x, z)$ в формулах (14) и (15) по переменной q_x :

$$\hat{E}_{0,h}^c(q_x, \eta; z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-iq_x x) E_{0,h}^c(\eta; x, z).$$

Если дифракционно отраженная волна ограничена щелью S_2 (рис. 1) и в латеральном направлении имеет ширину на поверхности кристалла l_x^{ex} , решения для амплитуд полей имеют вид

$$\hat{E}_0^c(q_x, \eta; z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\tilde{\xi}_1 \exp(i\tilde{\xi}l_z) - \tilde{\xi}_2 \exp(i\tilde{\xi}z)}{\tilde{Q}} \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}) \exp(i(\sigma_0 + \tilde{\xi}_2)z), \quad (18)$$

$$\hat{E}_h^c(q_x, \eta; z) = \frac{a_h f}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - \exp(i\tilde{\xi}z)}{\tilde{Q}} \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}) \exp(i(\sigma_0 + \tilde{\xi}_2)z), \quad (19)$$

где

$$\hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}) = \frac{\sin([[\kappa - q_x]l_x^{ex}/2])}{[\kappa - q_x]/2}.$$

Угловая переменная $\eta = q_x \operatorname{ctg} \theta_B - q_z$ для трехосевой геометрии становится функцией от проекций (16) и (17). Тогда для рентгеновских полей (18) и (19) можно записать

$$\hat{E}_{0,h}^c(q_x, \eta; z) = \hat{E}_{0,h}^c(q_x, q_z; z)$$

и основной угловой параметр в (13) будет иметь вид

$$\tilde{\psi} = 2\bar{a}_0 - q_z + [q_x - 2\kappa] \operatorname{ctg} \theta_B.$$

Отметим, что решения (18) и (19) являются наиболее общими в задачах динамической рентгеновской дифракции пространственно-ограниченных пучков в пористых кристаллах. Амплитудные коэффициенты прохождения (АКП)

$$T^c(q_x, q_z) = \hat{E}_0^c(q_x, q_z; z = l_z)$$

и отражения (АКО)

$$R^c(q_x, q_z) = \hat{E}_h^c(q_x, q_z; z = 0)$$

будут равны

$$T^c(q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\tilde{\xi}}{\bar{Q}} \exp(i(\sigma_0 + \tilde{\xi}_1)l_z) \times \\ \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}), \quad (20)$$

$$R^c(q_x, q_z) = \frac{a_h f}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - 1}{\bar{Q}} \times \\ \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}). \quad (21)$$

Величина l_{norm} равна наименьшему из значений l_x^{in} и l_x^{ex} . Нормированное распределение интенсивности (коэффициент отражения) когерентного рассеяния в обратном пространстве от кристалла с ограниченным фронтом падающей рентгеновской волны находится из соотношения

$$I_R^c(q_x, q_z) = |R^c(q_x, q_z)|^2, \quad (22)$$

где $R^c(q_x, q_z)$ определяется выражением (21). Решения (22) являются базовыми для расчетов когерентной составляющей пространственно-ограниченных рентгеновских пучков.

Далее рассмотрим некоторые частные случаи.

В отсутствие в схеме дифракции щели S_2 (рис. 1) граничная функция $\hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex})$ при $l_x^{in} \rightarrow \infty$ трансформируется в δ -функцию Дирака

$$\hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}) = 2\pi\delta(\kappa - q_x).$$

Интегрирование (19) и (20) при наличии δ -функции приводит к результату

$$\hat{E}_0^c(q_x, q_z; z) = \frac{\tilde{\xi}_1 \exp(i\tilde{\xi}l_z) - \tilde{\xi}_2 \exp(i\tilde{\xi}z)}{\bar{Q}} \times \\ \times \exp(i(\bar{\sigma}_0 + \bar{\xi}_2)z) \hat{Y}(q_x, l_x^{in}), \quad (23)$$

$$\hat{E}_h^c(q_x, q_z; z) = a_h f \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - \exp(i\tilde{\xi}z)}{\bar{Q}} \times \\ \times \exp(i[\bar{\sigma}_0 + \bar{\xi}_2]z) \hat{Y}(q_x, l_x^{in}), \quad (24)$$

где

$$\hat{Y}(q_x, l_x^{in}) = \frac{\sin(q_x l_x^{in}/2)}{q_x/2}, \quad \bar{\sigma}_0 = \bar{a}_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_B,$$

$$\bar{\psi} = 2\bar{a}_0 - q_x \operatorname{ctg} \theta_B - q_z, \quad \bar{\xi} = \sqrt{\bar{\psi}^2 - 4f^2 a_h a_{\bar{h}}},$$

$$\bar{\xi}_{1,2} = (-\bar{\psi} \pm \bar{\xi})/2, \quad \bar{Q} = \bar{\xi}_1 \exp(i\tilde{\xi}l_z) - \bar{\xi}_2.$$

В отличие от (18) и (19) формулы для когерентных рентгеновских полей существенно упростились. Соответственно имеет место и более простая запись для АКП и АКО:

$$T^c(q_x, q_z) = \frac{\bar{\xi}}{[l_x^{in} \bar{Q}]} \exp(i[\bar{\sigma}_0 + \bar{\xi}_1]l_z) \hat{Y}(q_x, l_x^{in}), \quad (25)$$

$$R^c(q_x, q_z) = a_h f \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - 1}{\bar{Q} l_x^{in}} \hat{Y}(q_x, l_x^{in}). \quad (26)$$

В случае, когда на кристалл падает плоская неограниченная рентгеновская волна (в дифракционной схеме отсутствует щель S_1 , рис. 1), решения для АКП и АКО по своей структуре соответствуют (25) и (26), при этом следует сделать замену $l_x^{in} \rightarrow l_x^{ex}$, $\hat{Y}(q_x, l_x^{in}) \rightarrow \hat{Y}(q_x, l_x^{ex})$ и $\bar{\psi} = 2a_0 + q_x \operatorname{ctg} \theta_B - q_z$.

Кинематическое приближение решения для АКО следует из (21) при условии $a_{-h} = 0$. Поскольку в этом случае $\xi = \tilde{\psi}$, $\xi_1 = 0$, $\xi_2 = -\tilde{\psi}$ и $Q = \tilde{\psi}$, получаем

$$R_{kin}^c(q_x, q_z) = \frac{a_h f}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\exp(i\tilde{\psi}l_z) - 1}{\tilde{\psi}} \times \\ \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}), \quad (27)$$

где $\tilde{\psi} = 2\bar{a}_0 - q_z + [q_x - 2\kappa] \operatorname{ctg} \theta_B$.

3. ДИФРАКЦИЯ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ ПОРИСТЫХ СТРУКТУРАХ

Решения для АКП (20) и АКО (21) от пористого кристалла толщиной l_z без крупномасштабных упругих деформаций кристаллической решетки для пространственно-ограниченных рентгеновских пучков формально можно переписать как

$$T^c(q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa T_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z) \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}), \quad (28)$$

$$R^c(q_x, q_z) = \frac{a_n f}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa R_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z) \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{in}) \hat{Y}(\kappa - q_x, l_x^{ex}), \quad (29)$$

где выражения

$$T_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z) = \frac{\tilde{\xi}}{\tilde{Q}} \exp(i(\sigma_0 + \tilde{\xi}_1)l_z),$$

$$R_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z) = \frac{\exp(i\tilde{\xi}l_z) - 1}{\tilde{Q}}$$

имеют структуру решения АКП и АКО для плоской неограниченной рентгеновской волны с угловым коэффициентом $\tilde{\psi}$. В действительности, структура решений (28) и (29) справедлива и для кристаллов с деформациями кристаллической решетки. К сожалению, аналитические решения в рамках динамической дифракции для $T_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ и $R_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ деформированных кристаллов найдены лишь в случаях постоянного градиента кристаллической решетки [14, 15], переходного градиентного слоя [16], а также гармонической [17] и полупроводниковой [18] сверхрешеток. Кроме того, все эти решения выражаются в терминах специальных функций [19], вычисление которых иногда более проблематично, чем прямое численное решение для $T_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ и $R_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$. Следовательно, вычисление АКП и АКО для пространственно-ограниченных пучков с использованием (28) и (29) является достаточно сложной проблемой.

Задача существенно упрощается, если $T_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ и $R_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ вычислять на основе рекуррентных соотношений. Для амплитудных коэффициентов отражения и прохождения выше получены решения (20) и (21), описывающие дифракцию в изолированном слое заданной толщины

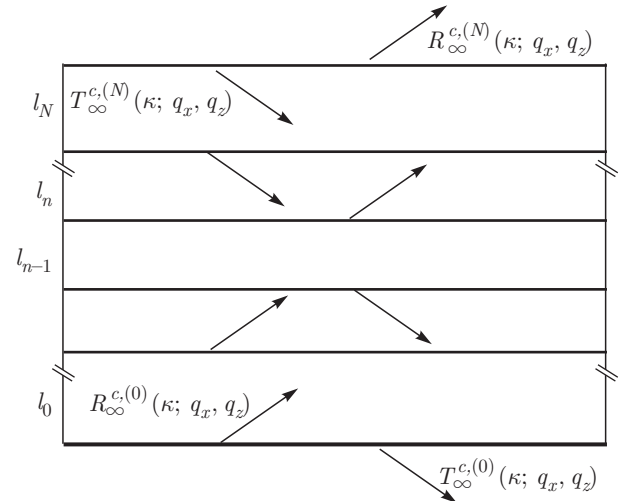


Рис. 3. Схематическое изображение амплитуд проходящих и отраженных рентгеновских волн в многослойной структуре

с характерной пористостью (зарядовой плотностью), статическим фактором Дебая – Валлера и постоянной решетки. В общем случае дифракции пространственно-ограниченных пучков от деформированных и многослойных пористых кристаллов произвольного совершенства можно использовать выражения (28) и (29), в которых подынтегральные коэффициенты $T_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ и $R_{\infty}^c(\kappa; q_x, q_z)$ могут быть вычислены последовательно с использованием рекуррентной процедуры.

В рассмотрение введем модель пористой слоисто-неоднородной системы, состоящей из N элементарных слоев. В рассматриваемой задаче нумерацию слоев удобно задать снизу вверх (рис. 3). В общем случае произвольный элементарный слой, например, с номером n , характеризуется своим статическим фактором Дебая – Валлера $f^{(n)} = f_s^{(n)} f_P^{(n)}$, где $f_s^{(n)}$ вызван структурными нарушениями «скелета» пористого слоя и $f_P^{(n)}$ — его пористостью $P^{(n)}$, а также толщиной l_n и относительной деформацией кристаллической решетки $\varepsilon_n = \Delta d_n / d_0$. Здесь d_0 — межплоскостное расстояние самого нижнего слоя с номером $n = 0$, которым, как правило, служит подложка, $\Delta d_n = d_n - d_0$, d_n — межплоскостное расстояние слоя с номером n . Во введенных выше обозначениях за преломление и поглощение рентгеновских волн в n -м слое отвечает коэффициент

$$\bar{a}_0^{(n)} = (1 - P^{(n)})\pi\chi_0/(\lambda\gamma_0) + ia_n a_{-n}(1 - [f^{(n)}]^2)\tau.$$

Для элементарного слоя с номером n решения для АКП и АКО имеют структуру (20) и (21), где

вместо толщины l_z следует записать l_n , а также ввести угловые переменные: $\tilde{\psi}^{(n)} = 2\tilde{a}_0^{(n)} - q_z + \varepsilon_n h + [q_x - 2\kappa] \operatorname{ctg} \theta_B$, $\xi^{(n)} = \sqrt{(\tilde{\psi}^{(n)})^2 - 4a_h a_{-h} (f^{(n)})^2}$, $\xi_{1,2}^{(n)} = (-\tilde{\psi}^{(n)} \pm \xi^{(n)})/2$.

Для всей пористой слоисто-неоднородной системы АКП и АКО вычисляются по формулам (28) и (29) с заменой $T_\infty^c(\kappa; q_x, q_z) \rightarrow T_\infty^{c,(0)}(\kappa; q_x, q_z)$, $R_\infty^c(\kappa; q_x, q_z) \rightarrow R_\infty^{c,(N)}(\kappa; q_x, q_z)$. Амплитудный коэффициент прохождения многослойной структуры плоской волны является произведением АКП отдельных элементарных слоев

$$t^{(n)} = \frac{S_1^{(n)} \exp(-i\xi^{(n)} l_n) - S_2^{(n)}}{S_1^{(n)} - S_2^{(n)}} \exp(i[\tilde{a}_0^{(n)} + \xi_1^{(n)}] l_n):$$

$$T_\infty^{c,(0)}(\kappa; q_x, q_z) = \prod_{n=0}^{N-1} t^{(n)}. \quad (30)$$

Амплитудный коэффициент отражения плоской волны от N -слойной системы вычисляется по рекуррентной процедуре

$$R_\infty^{c,(N)}(\kappa; q_x, q_z) = \frac{S_1^{(N)} b_2^{(N)} - S_2^{(N)} b_1^{(N)}}{S_1^{(N)} - S_2^{(N)}}, \quad (31)$$

где

$$S_1^{(N)} = (R_\infty^{c,(N-1)}(\kappa; q_x, q_z) - b_1^{(N)}) \exp(i\xi^{(N)} l_N),$$

$$S_2^{(N)} = R_\infty^{c,(N-1)}(\kappa; q_x, q_z) - b_2^{(N)},$$

$$b_{1,2}^{(N)} = \frac{\xi_{1,2}^{(N)}}{f^{(N)} a_{-h}}.$$

Здесь $R_\infty^{c,(N-1)}(\kappa; q_x, q_z)$ — АКО от $(N-1)$ -слойной системы, вычисленной по формуле (31).

4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Известно, что наиболее информативными для анализа углового распределения интенсивности рассеяния от пористых кристаллов являются карты в обратном пространстве (Reciprocal Space Mapping (RSM)) [4, 8], содержащие как когерентную, так и диффузную составляющие отраженного излучения. Поскольку до недавней работы [11] в статистической динамической теории дифракции когерентное рассеяние рассматривалось в рамках падающей плоской волны, что в обратном пространстве приводило к δ -функции, для анализа RSM приходилось прибегать к некоторым приближениям. В частности, δ -функция заменялась войтовской

или псевдовойтовской функцией [20], профиль которой определялся размерами падающего рентгеновского пучка. В данной работе получены точные выражения (28) и (29) для когерентной составляющей, описывающие амплитудные коэффициенты прохождения и отражения в зависимости от размеров пространственно-ограниченных рентгеновских пучков. Более того, эти решения позволяют рассчитывать RSM без каких-либо приближений.

Численное моделирование выполнено для рентгеновского когерентного рассеяния на пористых кристаллах InP. Исследовано отражение (004) σ -поляризованного синхротронного излучения с длиной волны $\lambda = 1.24 \text{ \AA}$. Угол Брэгга для выбранного отражения составляет 24.99° , межплоскостное расстояние $d_{004} = 1.467 \text{ \AA}$, фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости $\chi_0 = (-1.74 + i0.0105) \cdot 10^{-5}$, $\chi_h = (-0.947 + i0.00894) \cdot 10^{-5}$ [21]. Глубина первичной экстинкции для кристалла InP в отсутствие пор $l_{ext}^{(004)} = 1.753 \text{ мкм}$.

Влияние пористости кристалла P на когерентное рассеяние учитывалось в коэффициенте $\tilde{a}_0^{(n)}$ и в величине статического фактора Дебая – Валлера $f_p = \exp(-c_p V_p) = \exp(-P)$, где c_p — концентрации пор, V_p — объем поры. Ширины падающего и отраженного рентгеновских пучков (размеры щелей S_1 и S_2) составляли 100 мкм. Карты распределения интенсивности рассеяния во всех вычислениях представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей соседних линий равно 0.273. Вычисленные распределения интенсивностей рассеяния на RSM и кривых отражения сдвинуты по угловой шкале на величину, вызванную эффектами преломления рентгеновских лучей в веществе.

4.1. Рентгеновская дифракция на пористом кристаллическом слое

Для анализа когерентного рассеяния рентгеновских лучей пористым кристаллическим слоем толщиной 10 мкм, лежащим на полубесконечной идеальной подложке, рассмотрены два примера. В первом случае $P = 0.1$, что соответствует малой пористости кристалла. Для кристалла с большой пористостью $P = 0.6$. Статические факторы Дебая – Валлера, вызванные несовершенством пористой структуры, равны 0.9 для первого случая и 0.4 для второго случая. Общие статические факторы Дебая – Валлера с учетом пористости соответствовали значениям $f_1 = 0.83$ и $f_2 = 0.17$. Вертикальный размер пор 0.2 мкм влиял на величину диффузного поглощения. Интересно отметить, что для малой пористо-

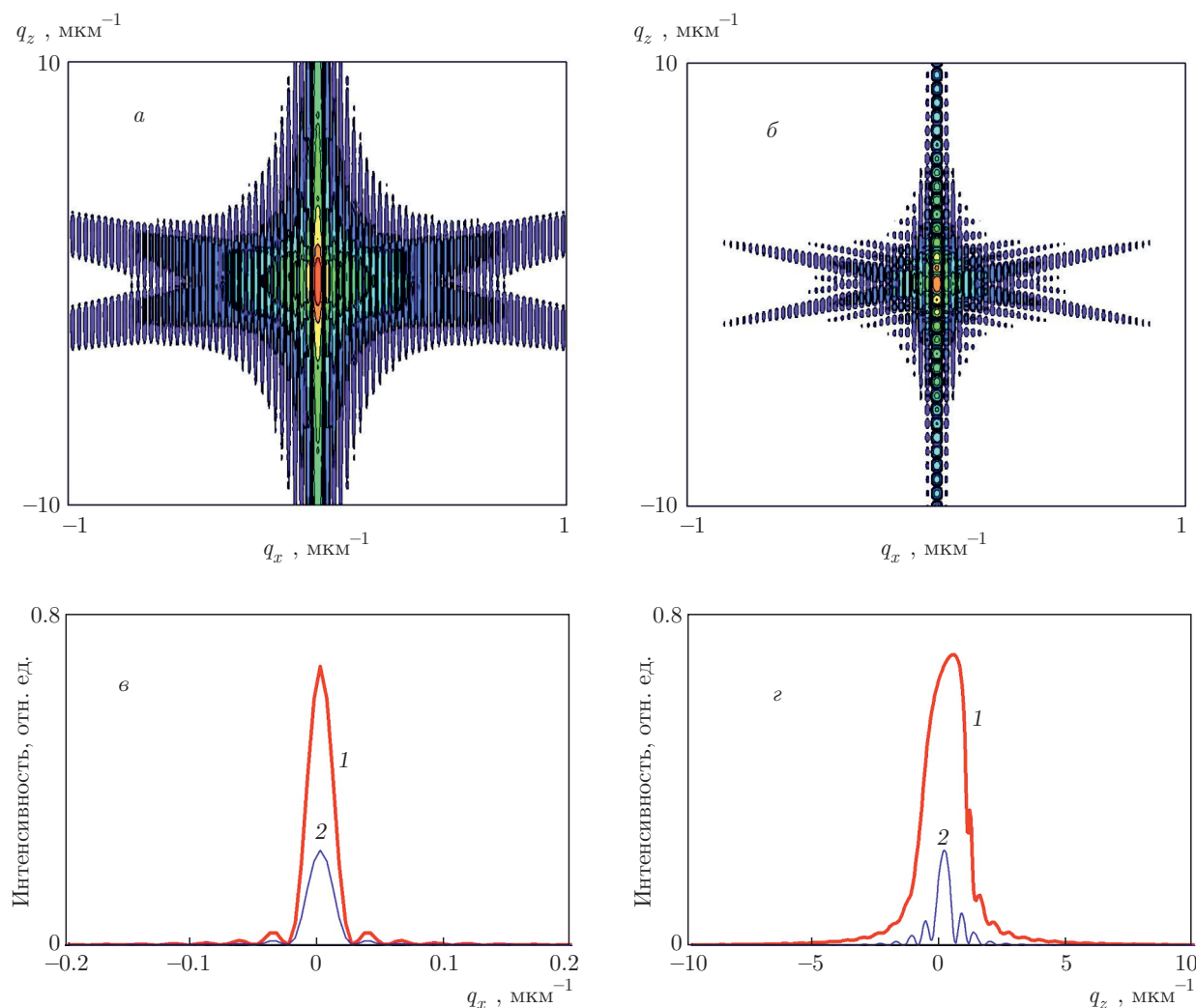


Рис. 4. (В цвете онлайн) RSM от кристаллов с пористостью $P = 0.1$ (а) и $P = 0.6$ (б), q_x — сечения RSM (в) и q_z -сечения RSM (г) через максимальные значения интенсивности рассеяния, $P = 0.1$ — кривая 1, $P = 0.6$ — кривая 2

сти коэффициент фотоэлектрического поглощения $\mu_1^{ph} = 0.113 \text{ мкм}^{-1}$, коэффициент диффузного поглощения $\mu_1^{dif} = 0.057 \text{ мкм}^{-1}$, т. е. фотопоглощение приблизительно в два раза превышает диффузное поглощение. В случае большой пористости $\mu_2^{ph} = 0.05 \text{ мкм}^{-1}$ из-за значительного отсутствия вещества и $\mu_2^{dif} = 0.124 \text{ мкм}^{-1}$, т. е. здесь, наоборот, фотопоглощение приблизительно в два раза меньше диффузного поглощения. Суммарное поглощение рентгеновских лучей в пористых слоях для обоих случаев приблизительно равно: $\mu_1 = \mu_1^{ph} + \mu_1^{dif} = 0.170 \text{ мкм}^{-1}$, $\mu_2 = \mu_2^{ph} + \mu_2^{dif} = 0.174 \text{ мкм}^{-1}$.

Расчеты карт RSM и их сечений (кривых отражения в латеральном и вертикальном направлениях) выполнены на основе решения (21). Угловое распределение интенсивности рассеяния $I_h^c(q_x, q_z) =$

$= |R^c(q_x, q_z)|^2$ на RSM состоит из вертикальной полосы главного дифракционного пика (красный цвет — максимальное значение, синий — минимальное значение интенсивности) и двух наклонных полос (рис. 4), появление которых непосредственно связано с ограниченностью рентгеновских пучков [11]. Направления наклонных полос совпадают с углом Брэгга в обратном пространстве (в терминах трехосевой рентгеновской дифрактометрии наклонны соответствуют направлениям псевдопиков анализатора и монохроматора).

В трехосевой дифракционной схеме вращением образца при неподвижном анализаторе измеряют так называемую ω -кривую отражения или, другими словами, q_x -сечение RSM. Профили таких сечений, как правило, имеют вид интерференционной функ-

ции Лауэ в кинематическом приближении [11, 22]. В данной работе для кристаллов разной пористости q_x -сечения представлены на рис. 4в. Нетрудно видеть, что различие в сечениях — только в интенсивности пиков.

Режим $\omega - 2\theta$ -сканирования трехосевого дифрактометра соответствует измерениям q_z -сечений RSM (кривым дифракционного отражения (КДО)). Глубина первичной экстинкции для кристалла InP с малой пористостью равна $l_{ext,1}^{(004)} = 2.36$ мкм, с большой пористостью — $l_{ext,2}^{(004)} = 10.2$ мкм. Следовательно, в первом случае имеет место динамическая дифракция с дарвиновским профилем КДО (рис. 4г, кривая 1), во втором случае толщина кристалла меньше глубины экстинкции, вид кривой отражения соответствует кинематической дифракции (рис. 4г, кривая 2).

4.2. Рассеяние рентгеновских лучей на пористых структурах с деформациями кристаллической решетки

В процессе создания пористых структур методом химического травления в кристаллах могут возникать упругие деформации, в частности, в легированных бором пластинах кремния [23]. В ряде случаев при определенных технологических условиях возникновение упругих деформаций наблюдалось и у пористых слоев InP [24]. Для анализа когерентного рассеяния от пористых структур с постоянным градиентом деформации кристаллической решетки выполнены вычисления RSM и кривых отражения от слоев с характеристиками, описанными в разд. 4.1. Предполагалось, что упругие деформации изменяются в объеме пористого слоя толщиной 10 мкм от $\varepsilon_0 = 0$ (на границе с подложкой) до $\varepsilon_N = 2 \cdot 10^{-4}$ (на входной поверхности пористого кристалла), где $N = 10$. Вычисления выполнены на основе решения (29) методом рекуррентных соотношений (31), результаты представлены на рис. 5.

В отличие от однородных пористых структур (рис. 4) наличие деформаций кристаллической решетки приводит к уширению углового распределения интенсивности рассеяния вдоль вертикальной оси RSM и влечет угловой сдвиг максимумов КДО (рис. 5в). При малой пористости наблюдается типичный профиль кривой отражения динамической дифракции от кристалла с линейным изменением параметра решетки [15, 25]. Из-за сильного взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллической решеткой толстого слоя дифракционный пик от подложки на КДО практически не проявляется

(кривая 1 на рис. 5в). В случае большой пористости дифракционное отражение от пористого слоя существенно слабее (кривая 2, рис. 5в). Интенсивность проходящего излучения из-за большой глубины первичной экстинкции достигает подложки и отражается от нее в виде осцилляционного пика на кривой 2 окрестности $q_z = 0$ (рис. 5в). Наличие осцилляций обусловлено интерференцией рентгеновского излучения на двухслойной системе пористый кристалл–подложка.

4.3. Рентгеновская дифракция на пористой сверхрешетке

Методом электрохимического анодирования можно создавать как одиночные пористые слои, так и многослойные системы с вариацией толщины, пористости и структурного совершенства. В частности, пористые сверхрешетки (СР) создаются методом электрохимического травления в режиме временной модуляции плотности тока. В результате формируется структура с периодическим изменением плотности материала (пористости) по глубине образца. Если эпитаксиальные модулированные структуры характеризуются атомарно гладкими интерфейсами, отсутствием флуктуаций в толщинах слоев и стабильным композиционным составом, то пористые сверхрешетки не обладают таким кристаллическим совершенством [26]. Как правило, интерфейсы пористых СР размыты, неоднородны и рельефны. Толщины периодов этих сверхрешеток не строго выдержаны, пористость слоев нестабильна и, как следствие, степень кристаллического совершенства далека от идеальности. Кроме того, возможны проявления градиента пористости и увеличения шероховатости межслойных границ с увеличением толщины периодической пористой структуры.

Методом рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения экспериментально исследованы пористые сверхрешетки на основе кристаллического кремния с толщинами чередующихся слоев в диапазоне 0.36–0.1 мкм [27, 28].

В данном разделе статьи приведены результаты численных расчетов когерентного рассеяния от модельных пористых сверхрешеток на основе InP. Численным моделированием исследована дифракция на двух двадцатипериодных пористых СР с чередующимися слоями толщиной $l_1 = 200$ нм, пористостью $P_1 = 0.1$ и $l_2 = 300$ нм, $P_2 = 0.6$. Различие между сверхрешетками заключается в том, что в первом случае в слоях отсутствуют упругие деформации

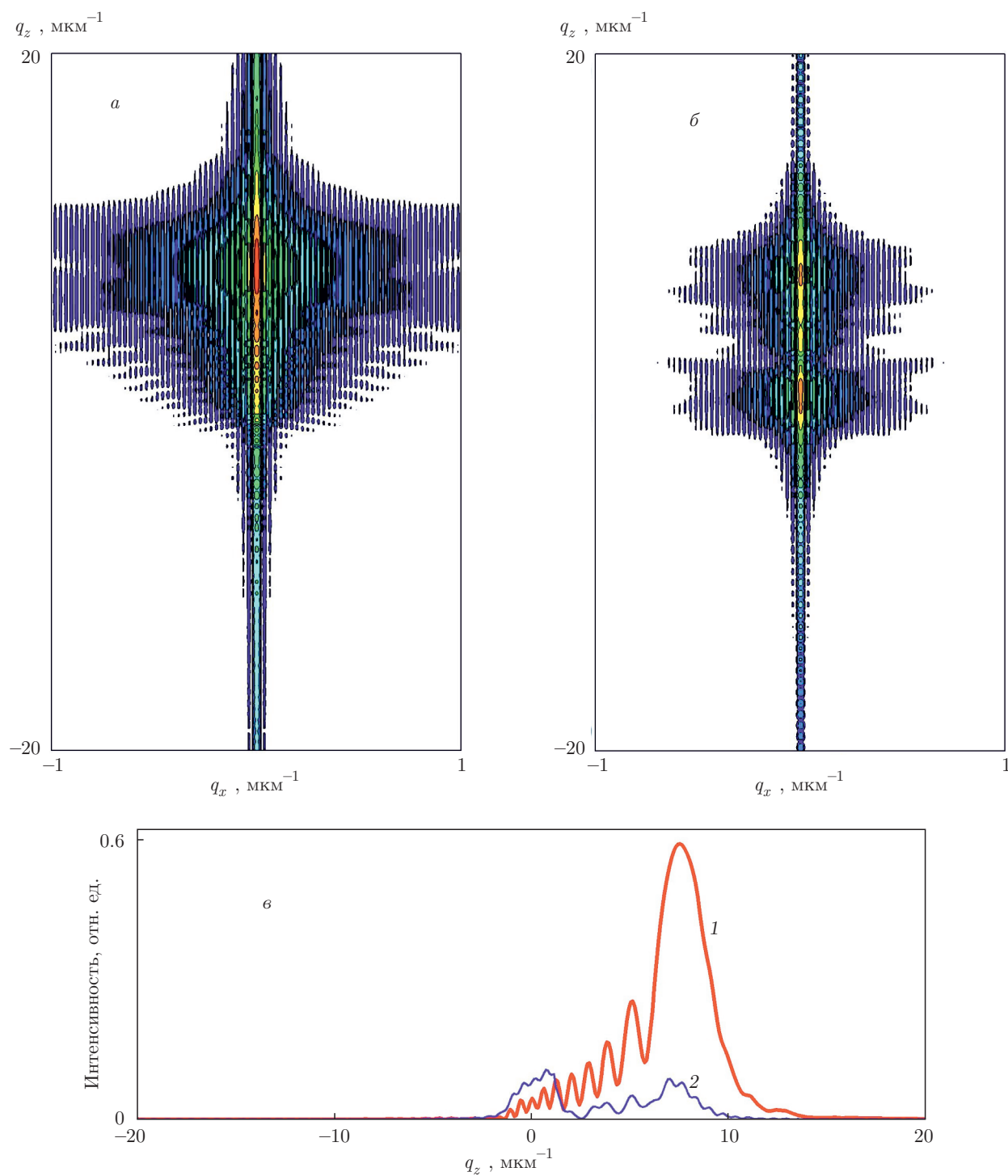


Рис. 5. RSM от деформированных кристаллических слоев с пористостью $P = 0.1$ (*a*) и $P = 0.6$ (*б*) и q_z -сечения RSM (*в*) через максимальные значения интенсивности рассеяния, $P = 0.1$ — кривая 1, $P = 0.6$ — кривая 2

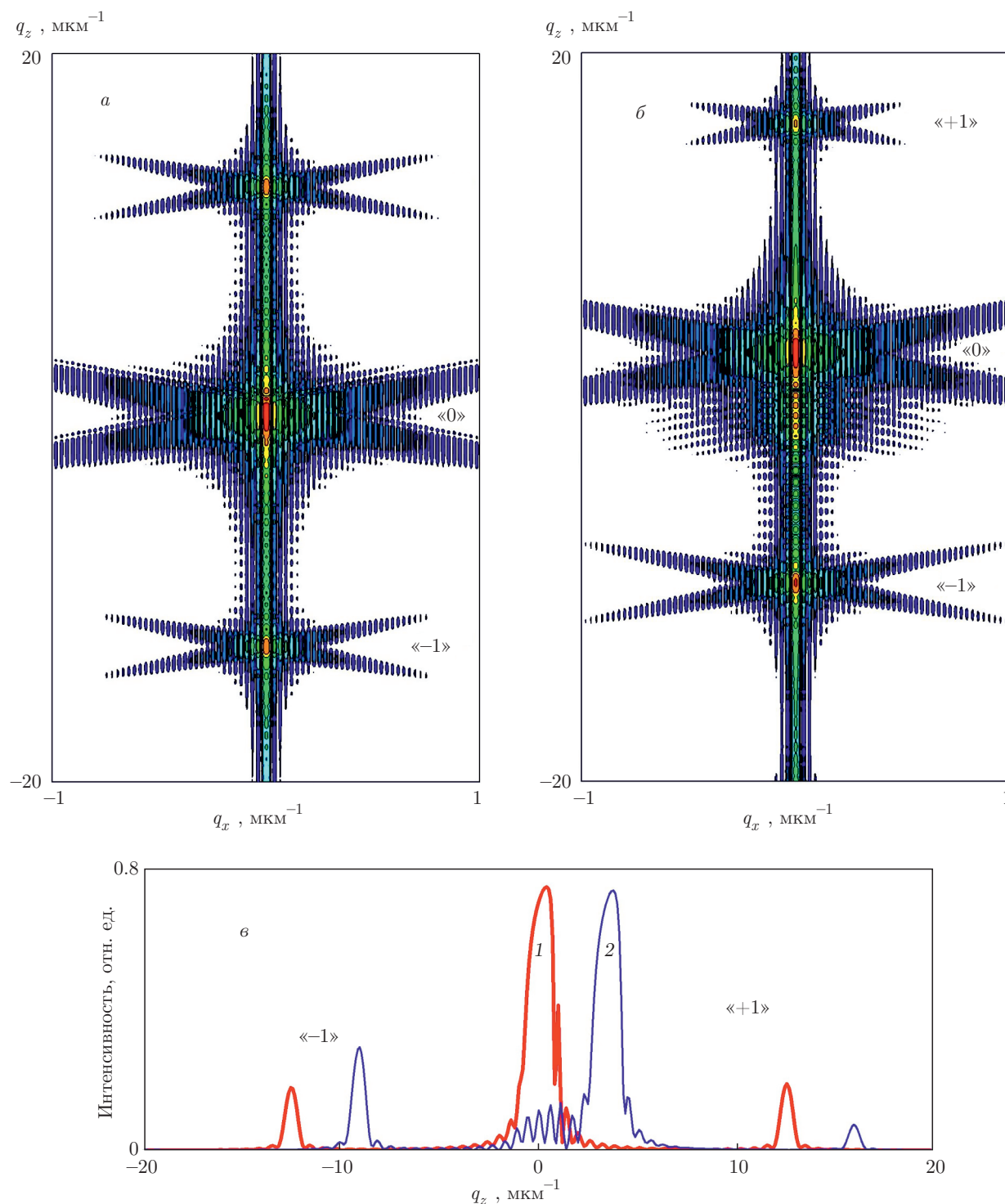


Рис. 6. RSM от двадцатипериодных пористых сверхрешеток с чередующимися слоями толщиной $l_1 = 200$ нм, пористостью $P = 0.1$ и $l_2 = 300$ нм, $P = 0.6$: а — СР №1, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ (упругие деформации в слоях отсутствуют); б — СР №2, $\varepsilon_1 = 0.2 \cdot 10^{-4}$, $\varepsilon_2 = 1.2 \cdot 10^{-4}$; в — q_z -сечения RSM через максимальные значения интенсивности рассеяния, СР №1 — кривая 1, СР №2 — кривая 2

ции (СР №1), во втором случае присутствуют деформации решетки $\varepsilon_1 = 0.2 \cdot 10^{-4}$ в слоях толщиной l_1 и $\varepsilon_2 = 1.2 \cdot 10^{-4}$ в слоях толщиной l_2 (СР №2).

Карты распределения интенсивностей рассеяния и соответствующие КДО двух сверхрешеток представлены на рис. 6. В случае, когда в слоях сверхрешетки отсутствуют упругие деформации (СР №1), формируется симметричная дифракционная картина с одинаковыми по интенсивности первыми дифракционными порядками (рис. 6а, 6в, кривая 1). Главный (нулевой) пик по углу совпадает с максимумом подложки и имеет форму дарвиновской кривой [22], что свидетельствует о динамической дифракции. Присутствие упругих деформаций в слоях пористой СР приводит к угловому сдвигу всего дифракционного спектра, величина сдвига определяется средней деформацией СР относительно подложки InP

$$\varepsilon_{SL}^A = (\varepsilon_1 l_1 + \varepsilon_2 l_2) / (l_1 + l_2) = 0.8 \cdot 10^{-4}.$$

Кроме того, первые дифракционные сателлиты по интенсивности не равны, «-1» дифракционный порядок значительно превышает интенсивность «+1» пика (кривая 2 на рис. 6в).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложен подход для описания динамической дифракции в пористом кристалле, позволяющий рассчитывать карты распределения интенсивности когерентного рассеяния в обратном пространстве без каких-либо приближений. В данном случае интенсивности когерентного рассеяния сопоставимы с диффузным рассеянием, что дает возможность выполнять количественный анализ структурных характеристик исследуемых материалов. Теоретическое исследование диффузного рассеяния и использование полученных результатов вместе с когерентным рассеянием для решения обратных задач дифракции на основе экспериментальных данных будет представлено в следующих работах.

Изложенные в данной статье результаты могут быть использованы в динамической теории дифракции электронов и нейтронов, а также в оптике фотонных и жидких кристаллов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке в рамках программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект №18-10-2-23) и РФФИ (проекты №№17-02-00090-а, 16-43-110350).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Kato, *Acta Cryst. A* **36**, 763 (1980).
2. В. И. Пунегов, *Кристаллография* **54**, 415 (2009).
3. В. И. Пунегов, *УФН* **185**, 449 (2015).
4. V. I. Punegov, A. A. Lomov, and K. D. Shcherbachev, *Phys. Stat. Sol. (a)* **204**, 2620 (2007).
5. В. И. Пунегов, Н. Н. Фалеев, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 483 (2010).
6. V. Kochergin and H. Föll, *Porous Semiconductors. Optical Properties and Applications*, Springer-Verlag, London (2009).
7. K. Barla, R. Herino, G. Bomchil et al., *J. Cryst. Growth* **68**, 727 (1984).
8. A. A. Lomov, V. I. Punegov, D. Nohavica et al., *J. Appl. Cryst.* **47**, 1614 (2014).
9. K. M. Pavlov and V. I. Punegov, *Acta Cryst. A* **56**, 227 (2000).
10. V. I. Punegov, Ya. I. Nesterets, and D. V. Roshchupkin, *J. Appl. Cryst.* **43**, 520 (2010).
11. V. I. Punegov, K. M. Pavlov, A. V. Karpov et al., *J. Appl. Cryst.* **50**, 1256 (2017).
12. S. Takagi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **27**, 1239 (1969).
13. A. Iida and K. Kohra, *Phys. Stat. Sol. (a)* **51**, 533 (1979).
14. F. N. Chukhovskii, K. T. Gabrielyan, and P. V. Petrashen', *Acta Cryst. A* **34**, 610 (1978).
15. A. V. Kolpakov and V. I. Punegov, *Sol. St. Comm.* **54**, 573 (1985).
16. F. N. Chukhovskii and Yu. P. Khapachev, *Phys. Stat. Sol. (a)* **88**, 69 (1985).
17. Yu. P. Khapachev, *Phys. Stat. Sol. (b)* **120**, 155 (1983).
18. D. M. Vardanyan, H. M. Manoukian, and H. M. Petrosyan, *Acta Cryst. A* **41**, 212 (1985).
19. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, ed. by M. Abramowitz and I. A. Stegun, Dover Publications, Washington (1972).
20. T. Ida, M. Ando, and H. Toraya, *J. Appl. Cryst.* **33**, 1311 (2000).
21. S. Stepanov and R. Forrest, *J. Appl. Cryst.* **41**, 958 (2008).

22. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction*, Oxford Univ. Press, New York (2001).
23. P. G. Abramof, A. F. Beloto, A. Y. Ueta et al., J. Appl. Phys. **99**, 024304 (2006).
24. I. N. Arsenyev, A. B. Bobyl, S. G. Konnikov et al., Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics **8**, 95 (2005).
25. V. I. Punegov and Yu. V. Vishnjakov, J. Phys. D: Appl. Phys. **28**, A184 (1995).
26. M. G. Berger, C. Dieker, M. Thonissen et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **27**, 1333 (1994).
27. D. Buttard, D. Bellet, and T. Baumbach, Thin Solid Films **276**, 69 (1996).
28. D. Buttard, D. Bellet, G. Dolino et al., J. Appl. Phys. **83**, 5814 (1998).