

# КОМПЛАНАРНА БАГАТОПРОМЕНЕВА ДИНАМІЧНА ТЕОРІЯ ДИФРАКЦІЇ Х-ПРОМЕНІВ У ШАРУВАТИХ СТРУКТУРАХ

О.М. ЄФАНОВ, В.П. КЛАДЬКО, В.Ф. МАЧУЛІН

УДК  
© 2006 р.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України  
(Просп. Науки, 45, Київ 03680; e-mail: kladko@isp.kiev.ua)

Розвинено компланарну теорію динамічної дифракції Х-променів багат шарових структурах для  $N$  сильних хвиль. Теорія адекватна для широких кутових діапазонів, ковзної геометрії, розрахунку відбитого променя, для будь-якої товщини шарів і практично будь-якої кількості точок оберненого простору, що беруть участь у дифракції.

Оскільки найчастіше зустрічається компланарна багатпроменева дифракція Х-променів [2], розглянуто було саме цей випадок. Крім того, такий розгляд дозволяє у декілька разів зменшити час обчислень, що особливо важливо у разі автоматизованого фітування спектрів.

## 1. Вступ

Сучасна електроніка йде шляхом зменшення характерних розмірів складових частин інтегральних мікросхем, при цьому зростають труднощі не тільки із створенням цих нанорозмірних структур, але й з контролем їхньої геометрії та складу.

Одним з основних засобів неруйнівного структурного аналізу є дифракція Х-променів. В основі більшості методик аналізу, що застосовуються сьогодні, лежить розв'язання зворотної задачі за допомогою кінематичної або двопроменевої динамічної теорії. Обидві теорії створювалися з безліччю спрощень і для структур з товстими шарами, ширококутної дифракції, дифракції одночасно від декількох наборів кристалічних площин і т.д. дають неправильні результати. Тому часто є необхідним застосування коректніших (з меншою кількістю спрощень) теорій. Крім того, для збільшення точності і розширення кутового діапазону хвильові вектори в середовищі треба знаходити чисельно [1].

У даній роботі викладено теорію багатпроменевої дифракції Х-променів у шаруватих структурах. В основу лягли роботи [2, 3], присвячені багатпроменевій дифракції в одношарових структурах, а також роботи [4, 5] і [6]. Роботи Кона і Степанова були враховані і при розв'язанні проблем з товстими шарами [4], і у ковзній геометрії [7]. Деякі корисні думки щодо розв'язування дисперсійного рівняння було запозичено в роботі [8].

## 2. Дисперсійне рівняння

У рамках динамічної теорії Х-промені розглядаються як електромагнітні хвилі, тому, якщо в рівняння Максвелла (для нульової провідності і за відсутності впливу вільних зарядів, що так і є для Х-променів [9]) підставити розв'язок у вигляді блохівської хвилі і поляризуємість у вигляді суми її фур'є-компонент ( $\chi_{h-p}$ ), одержимо систему рівнянь для ненульових напруженостей  $\vec{E}_h$  хвиль у кристалі [9]:

$$\frac{|k_h|^2 \vec{E}_h - K^2 \vec{E}_h}{K^2} \approx \sum_p \chi_{h-p} \vec{E}_p, \quad (1)$$

де  $K = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$  — довжина хвильового вектора у вакуумі,  $k = nK$  — довжина хвильового вектора в середовищі з коефіцієнтом заломлення  $n \approx \sqrt{1 + \chi_0}$ .

Перейдемо до зведених координат

$$\frac{k_h}{K} \rightarrow k_h, \quad \frac{h}{K} \rightarrow h, \quad (2)$$

де  $h$  — довжина вектора оберненої ґратки.

Якщо взяти до уваги, що насправді в кристалі може існувати нескінченна кількість хвильових полів, з яких  $N$  хвиль можуть виявитися достатньо сильними, то амплітуда хвилі в точці, яка описується радіус-вектором  $\vec{r}$ , буде дорівнювати

$$E(\vec{r}) = \sum_{h=0}^{N-1} E_h \exp(i\vec{k}_h \vec{r}),$$

Тоді рівняння (1) у компланарному випадку набуває вигляду

$$(k_h^2 - n^2)E_h = \sum_{p \neq h} \chi_{h-p} E_p. \quad (3)$$

Розділивши (3) на амплітуду падаючої хвилі і записавши у матричному вигляді, одержимо

$$\Delta_E E = 0, \quad (4)$$

де

$$\Delta_E = \begin{pmatrix} k_0^2 - n^2 & -\chi_{0,-1} & -\chi_{0,-2} & \cdots & -\chi_{0,-(N-1)} \\ -\chi_{1,0} & k_1^2 - n^2 & -\chi_{1,-2} & \cdots & -\chi_{1,-(N-1)} \\ -\chi_{2,0} & -\chi_{2,-1} & k_2^2 - n^2 & \cdots & -\chi_{2,-(N-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\chi_{N-1,0} & -\chi_{N-1,-1} & -\chi_{N-1,-2} & \cdots & k_{N-1}^2 - n^2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

та

$$E = \begin{pmatrix} 1 \\ c_1 \\ c_2 \\ \cdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

коефіцієнти  $c_i = E_h^i / E_0^i$ .

Відповідно дисперсійне рівняння виглядає в загальному випадку так:

$$\Delta_E = 0. \quad (7)$$

Шукати хвильові вектори у тій формі, в якій вони фігурують в  $\Delta_E$ , досить незручно: знайшовши їх довжину, необхідно буде окремо шукати напрямок. Тому скористаємося тим фактом, що при заломленні тангенціальна компонента хвильового вектора зберігає свою довжину, і введемо величину  $\varepsilon$ , що характеризує різницю нормальних компонент хвильових векторів у середовищі  $k_h$  і у вакуумі  $K$  (рис.1).

Тоді  $\vec{k}_h$  запишеться як

$$\vec{k}_h = \vec{K}_0 + \vec{h} + K\varepsilon\vec{n}, \quad (8)$$

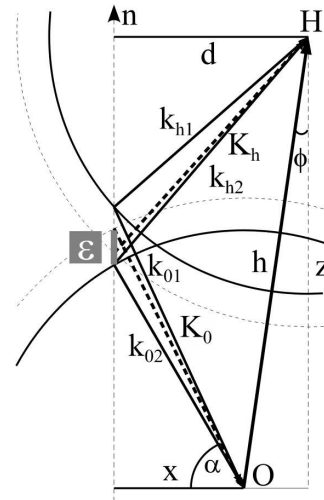


Рис. 1. Дисперсійна поверхня у двоххвильовому випадку

де  $\vec{h}$  — відповідний вектор дифракції,  $\vec{K}_0$  — хвильовий вектор падаючої хвилі, а  $\vec{n}$  — вектор нормалі. Очевидно, що для нульового хвильового поля  $\vec{h} = 0$  і  $\vec{k}_0 = \vec{K}_0 + K\varepsilon\vec{n}$ .

Враховуючи введене позначення і прийняте раніше (2) нормування, одержимо

$$\begin{aligned} k_h^2 &= (\vec{S}_0 + \vec{h} + \varepsilon\vec{n}) \cdot (\vec{S}_0 + \vec{h} + \varepsilon\vec{n}) = \\ &= 1 + 2(\vec{S}_0 \cdot \vec{h}) + 2\varepsilon(\vec{S}_0 \cdot \vec{n}) + 2\varepsilon(\vec{h} \cdot \vec{n}) + h^2 + \varepsilon^2, \end{aligned} \quad (9)$$

де  $\vec{S}_0$  — орт уздовж  $\vec{K}_0$ ,  $\vec{S}_0 \equiv \frac{\vec{K}_0}{K}$ . Очевидно, що

$$(\vec{S}_0 \cdot \vec{n}) = \cos(90^\circ - \alpha) = -\sin \alpha,$$

$$(\vec{S}_0 \cdot \vec{h}) = h \cos(\alpha + 90^\circ - \varphi) = -h \sin(\alpha - \varphi),$$

$$(\vec{h} \cdot \vec{n}) = h \cdot \cos \varphi,$$

де  $\alpha$  — кут між падаючим променем і поверхнею,  $\varphi$  — між вектором  $\vec{h}$  і нормаллю до поверхні.

Отже,

$$k_0^2 = \varepsilon^2 + 1 - 2\varepsilon \sin \alpha,$$

$$k_h^2 = \varepsilon^2 + 1 + h^2 - 2\varepsilon \sin \alpha - 2h \sin(\alpha - \varphi) + 2\varepsilon h \cos \varphi.$$

I, у свою чергу, шукані величини

$$k_0^2 - n^2 = \varepsilon^2 - 2 \sin \alpha \cdot \varepsilon + (1 - n^2),$$

$$k_h^2 - n^2 = \varepsilon^2 + 2(h \cos \varphi - \sin \alpha) \varepsilon +$$

$$+ (1 - n^2) + h(h - 2 \sin(\alpha - \varphi)).$$

Тоді дисперсійне рівняння (7) набуває вигляду

$$\Delta_E = \varepsilon^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} -2 \sin \alpha & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2(h_1 \cos \varphi_1 - \sin \alpha) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 2(h_1 \cos \varphi_1 - \sin \alpha) \end{pmatrix} +$$

$$\begin{pmatrix} 1 - n^2 & -\chi_{0,-1} & \dots & -\chi_{0,-(N-1)} \\ -\chi_{1,0} & 1 - n^2 + h_1(h_1 - 2 \sin(\alpha - \varphi_1)) & \dots & -\chi_{1,-(N-1)} \\ -\chi_{2,0} & -\chi_{2,-1} & \dots & -\chi_{2,-(N-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\chi_{N-1,0} & -\chi_{N-1,-1} & \dots & 1 - n^2 + h_N(h_N - 2 \sin(\alpha - \varphi_N)) \end{pmatrix} = 0. \tag{10}$$

Або у відповідних позначеннях

$$\Delta_E = \varepsilon^2 I + \varepsilon A + B, \tag{11}$$

де  $I$  — одинична матриця, а  $A$  і  $B$  — відповідні матриці з (10):

$$A = \{\delta_{ij} \cdot 2(h_i \cos \varphi_i - \sin \alpha)\},$$

$$B = \begin{cases} i = j : & 1 - n^2 + h_i(h_i - 2 \sin(\alpha - \varphi_i)), \\ i \neq j : & -\chi_{i,-j}, \end{cases}$$

при чому  $h_0 \equiv 0, \varphi_0 \equiv 0, j, i = 0, \dots, N - 1$ .

Підставляючи (11) в (4) маємо

$$\varepsilon^2 IE + \varepsilon AE = \varepsilon(\varepsilon IE + AE) = -BE \tag{12}$$

і, ввівши позначення

$$\varepsilon IE \equiv E_S, \tag{13}$$

перепишемо (12) у вигляді

$$\varepsilon(E_S + AE) = -BE. \tag{14}$$

Об'єднуючи рівняння (13) і (14) одержимо

$$\begin{pmatrix} -B & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ D_S \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} A & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ D_S \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Рівняння (15) є узагальненою проблемою власних значень  $\varepsilon$  і розв'язується за допомогою стандартних алгоритмів (наприклад, функціями, що входять у бібліотеки NAG або IMSL, або програмами, представленими на [www.srcc.msu.su](http://www.srcc.msu.su)).

Розв'язками цього рівняння є  $2N$  власних значень  $\varepsilon$  і  $[N \times 2N]$  значень власних векторів, які є амплітудами хвиль всіх хвильових полів. Проте ці хвильові вектори необхідно нормувати, розділивши кожний з  $N$  стовпців на перше в стовпці значення, яке відповідає падаючій хвилі і повинно дорівнювати одиниці. Далі необхідно визначити  $[N \times 2N]$  нормальних компонент хвильових векторів:

$$k_{hz} = (\vec{k}_h \cdot -\vec{n}) = \sin \alpha - \varepsilon - h_i \cos \varphi_i. \tag{16}$$

Таким чином, задача визначення хвильових полів у даній речовині вирішена. Тепер знайдемо точні значення хвильових полів і поширимо цю задачу на структуру, що складається з  $M$  плоскопаралельних шарів (надгратку). Для цього необхідно записати граничні умови.

### 3. Застосування граничних умов

Граничними умовами для електромагнітних хвиль є неперервність тангенціальної (паралельної поверхні)

компоненти електричного  $\vec{E}$  і магнітного  $\vec{H}$  полів. З цього одержимо умови на кожному інтерфейсі [10]:

$$\sum_{n=0}^{2N-1} c_n E_{0n} = \text{const},$$

$$\sum_{n=0}^{2N-1} c_n k_{zn} E_{0n} = \text{const}, \quad (17)$$

де  $c_n$  — шукані коефіцієнти,  $k_{zn}$  — нормальні компоненти хвильових векторів.

Записавши умови (17) і врахувавши ослаблення внаслідок поглинання хвилі, що проходить через  $m$ -й шар, одержимо для інтерфейсу

$$S_m F_m E_m = S_{m+1} E_{m+1}, \quad (18)$$

де  $E_m$  — вектор-стовпець амплітуд напруженостей в  $m$ -му шарі,

$$S_m = \begin{pmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & \cdots & c_{0,2N-1} \\ c_{1,0} & c_{1,1} & \cdots & c_{1,2N-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{N-1,0} & c_{N-1,1} & \cdots & c_{N-1,2N-1} \\ c_{0,0} k_{z0,0} & c_{0,1} k_{z0,1} & \cdots & c_{0,2N-1} k_{z0,2N-1} \\ c_{1,0} k_{z1,0} & c_{1,1} k_{z1,1} & \cdots & c_{1,2N-1} k_{z1,2N-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{N-1,0} k_{zN-1,0} & c_{N-1,1} k_{zN-1,1} & \cdots & c_{N-1,2N-1} k_{zN-1,2N-1} \end{pmatrix} \quad (19)$$

і

$$F_m = \delta_{ij} \exp(-ik_{0z}^j K t_m). \quad (20)$$

Тут  $t_m$  — товщина шару,  $k_{0z}^j$  —  $2N$  розв'язків дисперсійного рівняння (перший рядок матриці  $k_z$ ), що відповідають падаючій хвилі.

Для знаходження значень амплітуд хвиль у всій структурі необхідно розв'язати таке матричне рівнян-

ня:

$$E'_0 = S_0^{-1} S_1 F_1 S_1^{-1} S_2 F_2 \cdots S_{M-1}^{-1} S_M \Phi_M^{(U)} E_M, \quad (21)$$

де  $M$  — кількість шарів (0 — відповідає повітрю,  $M$  — підкладці),  $\Phi_m^{(U,L)} = \delta_{ij} \exp(ik_{0z}^j K z_m^{(U,L)})$ ,  $z_m^{(U,L)}$  — відстань від верхньої ( $U$ ) і нижньої ( $L$ ) поверхонь  $m$ -го шару,  $E'_0$  — амплітуди напруженостей повітрі,  $S_0$  — граничні умови на поверхні структури, які для випадку Брегга дорівнюють

$$S_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ K_{z0} & 0 & \cdots & 0 & -K_{z0} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & K_{z1} & \cdots & 0 & 0 & -K_{z1} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & K_{zN} & 0 & 0 & \cdots & -K_{zN} \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$E'_0 = \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \\ E_R \\ E_1 \\ \vdots \\ E_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

де  $E_0$  — амплітуда падаючої хвилі (зазвичай, приймається рівною одиниці),  $E_R$  — відбита від поверхні хвиля,  $E_1, \dots, E_{N-1}$  — дифраговані хвилі,  $K_{zh} \equiv \gamma_0 = \sin \alpha$ ,  $K_{zh} \equiv -\gamma_h = \sqrt{1 - (\cos \alpha - h \sin \varphi)^2}$ .

Розв'язок рівняння (21) приводить до великих значень похибок у ковзній геометрії і для товстих

шарів, оскільки матриця  $F_m$  містить рівну кількість зростаючих і спадаючих експонент (половина коренів дисперсійного рівняння має від'ємну уявну частину, а друга половина – додатну). Тому скористаємося підходом, запропонованим у роботі [5].

По-перше, відсортуємо корені дисперсійного рівняння за зменшенням уявної частини, тобто за першим рядком відповідних матриць  $C_n$  і  $k_z$ . По-друге, введемо ренормалізацію

$$E_m \equiv \Phi_m^L E_m, \tag{24}$$

де  $\Phi_m^L$  – фаза хвилі на нижній межі  $m$ -го шару.

І введемо у розгляд матрицю

$$X_m = \begin{pmatrix} X^{tt} & X^{tr} \\ X^{rt} & X^{rr} \end{pmatrix} = S_{m-1}^{-1} S_m. \tag{25}$$

Тоді рівняння (18) можна записати у вигляді

$$E_m = X_{m+1} F_{m+1} E_{m+1}. \tag{26}$$

Враховуючи введене нами сортування коренів, перші  $N$  елементів матриці  $E_m$  представлятимуть падаючі хвилі, а другі  $N$  елементів – відбиті (або дифраговані) хвилі. Тобто  $E_m = \begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix}$ , наприклад, для повітря  $T_0 = (E_0 \ 0 \ 0 \dots 0)$  і  $R_0 = (E_S \ E_1 \ E_2 \dots E_{N-1})$ . Тоді (26) виглядатиме так:

$$\begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{tt} & X^{tr} \\ X^{rt} & X^{rr} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} F_+ & 0 \\ 0 & F_- \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_{m+1} \\ R_{m+1} \end{pmatrix}, \tag{27}$$

де  $F_+$  і  $F_-$  – діагональні матриці розміром  $N \times N$  вигляду (20), що містять зростаючі і спадаючі експоненти відповідно.

Далі введемо такі матриці:

$$\begin{aligned} M^{tt} &= (F_+)^{-1} (X^{tt})^{-1}, \\ M^{tr} &= -M^{tt} X^{tr} F_-, \\ M^{rt} &= X^{rt} (X^{tt})^{-1}, \\ M^{rr} &= (X^{rr} - M^{rt} X^{tr}) F_- \end{aligned} \tag{28}$$

і перепишемо (27) у вигляді

$$\begin{pmatrix} T_{m+1} \\ R_{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{tt} & M^{tr} \\ M^{rt} & M^{rr} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_m \\ R_m \end{pmatrix}. \tag{29}$$

Ввівши матриці

$$W_m^{tt} = A_m W_{m-1}^{tt},$$

$$W_m^{tr} = M_m^{tr} + A_m W_{m-1}^{tr} M_m^{rr},$$

$$W_m^{rt} = W_m^{rt} + B_m M_m^{rt} W_{m-1}^{tt},$$

$$W_m^{rr} = B_m M_m^{rr},$$

$$A_m = M_m^{tt} (1 - W_{m-1}^{tr} M_m^{rt})^{-1},$$

$$B_m = W_{m-1}^{rr} (1 - M_m^{rt} W_{m-1}^{tr})^{-1}, \tag{30}$$

одержимо

$$\begin{pmatrix} T_m \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W^{tt} & W^{tr} \\ W^{rt} & W^{rr} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_0 \\ R_m \end{pmatrix}. \tag{31}$$

В результаті, відбиття від кристала виражатиметься матричним рівнянням:

$$R_0 = W_M^{rt} T_0. \tag{32}$$

#### 4. Процедура розв'язання

Для отримання інтенсивності дифрагованих на багатшаровій структурі X-хвиль необхідно виконати такі дії:

- 1) із знайденої для попереднього шару матриці  $S$  знаходимо  $S_{m-1}^{-1}$  (для повітря  $S_0$  задана рівнянням (22));
- 2) розв'язуємо дисперсійне рівняння (16) і знаходимо матриці  $k_{hz}$  і  $c_n$  для  $m$ -го шару;
- 3) будуємо матрицю  $S_m$ ;
- 4) знаходимо  $X_m = S_{m-1}^{-1} \cdot S_m$ ;
- 5) будуємо матрицю  $F_-$  для перших  $N$  коренів і  $F_+^{-1}$  для решти;
- 6) обчислюємо матриці  $M_m$ ;
- 7) знаходимо рекурсивно  $W_m$ , причому для повітря  $W_0^{tt} = I$ ,  $W_0^{rr} = I$ ,  $W_0^{rt} = 0$ ,  $W_0^{tr} = 0$  і для першого шару  $W_1^{tt} = M_1^{tt}$ ,  $W_1^{tr} = M_1^{tr}$ ,  $W_1^{rt} = M_1^{rt}$ ,  $W_1^{rr} = M_1^{rr}$ ;
- 8) знаходимо коефіцієнт дифракції від досліджуваної структури

$$R_0 = \begin{pmatrix} E_R \\ E_1 \\ E_2 \\ \dots \\ E_{N-1} \end{pmatrix} = W_N^{rt} \cdot \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix},$$

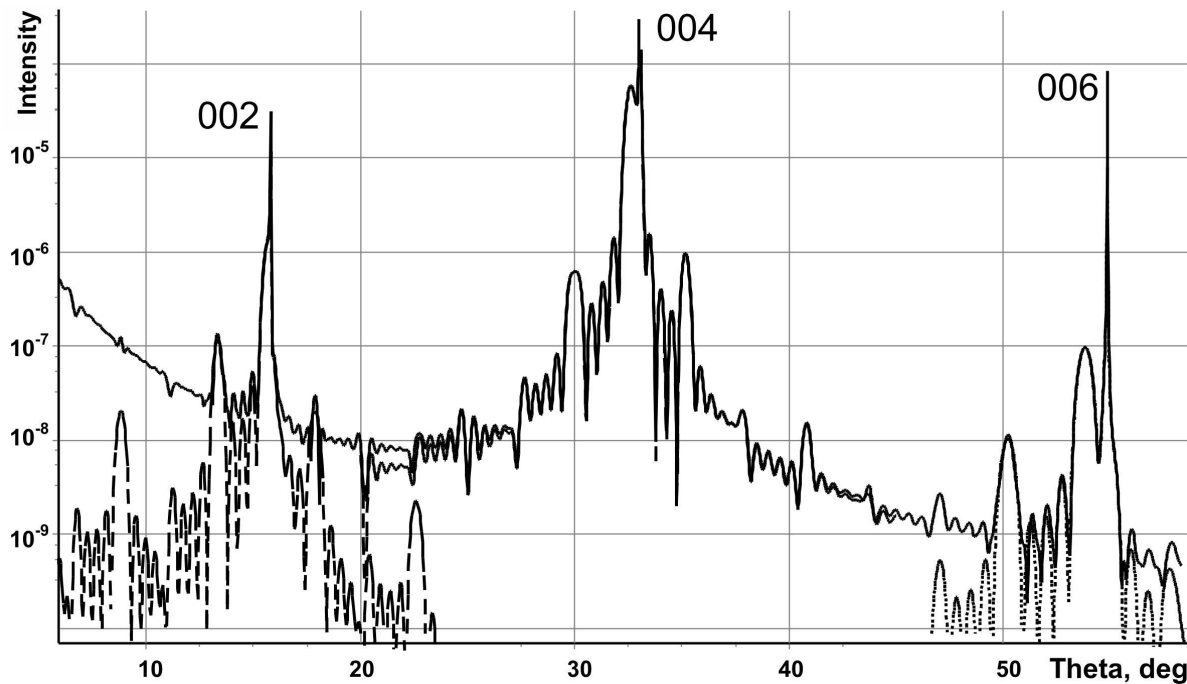


Рис. 2. Приклад ширококутової дифракції від надґратки (рефлекси зліва на право 200, 400, 600). Суцільна крива — багатопроемова теорія із врахуванням відбитого променя, пунктирні — звичайна двопроемова

тобто  $E_R = W_N^{rt}[0][0]$ ,  $E_{hi} = W[i+1][0]$ ;

9) знаходимо інтенсивність  $\text{Re} = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} |R|^2$ ;

10) виводимо залежність інтенсивності від кута падіння.

На рис. 2 представлена так звана ширококутна дифракція Х-променів на шаруватій структурі. У дифракції беруть участь чотири вузли оберненої ґратки: 000, 002, 004, 006.

## 5. Висновки

У даній роботі розроблено динамічну теорію взаємодії Х-хвиль з речовиною для випадку, коли у формуванні дифракційної картини бере участь одночасно декілька точок оберненої ґратки. Дана теорія відрізняється від розроблених раніше за такими позиціями:

— коректна інтерпретація експерименту у ковзній геометрії;

— розв'язана проблема нескінченно зростаючих в деякому кутовому діапазоні експонент;

— для розв'язання дисперсійного рівняння введено змінну, використання якої дозволяє уникнути похибок, котрі виникають при розрахунку дифракції від великої кількості вузлів оберненої ґратки;

— зменшено розмір матриць, які описують граничні умови, і тим самим збільшено швидкість розрахунку;

— розв'язок розширений на кутовий діапазон, далекий від точного положення Бреґґа (рис. 2);

— задачу вирішено з мінімумом спрощень: наближення плоских хвиль, що проходять крізь кристал, компланарна геометрія і наявність лише  $\sigma$ -поляризації випромінювання.

Найближчим часом теорія багатопроемної дифракції в шаруватих структурах буде розвинута на некопланарну геометрію і довільний стан поляризації.

1. Ефанов А. Н., Кладько В. П. // *Металлофизика и новейшие технологии.* — 2006. — **28**, № 2 — С. 231.
2. Чюсан Ш. *Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах.* — М.: Мир, 1987.
3. Collela R. // *Acta cryst. A.* — 1974. — **30**. — Р. 413.
4. Кон В.Г. // *ФТТ.* — 1977. — **19**, вып. 12. — С. 3567.
5. Кон В.Г. // *Металлофизика.* — 1988. — **10**, № 2. — С. 78.
6. Stepanov S.A., Ulyanikov A.P. // *Acta cryst. A.* — 1994. — **50**. — Р. 579.
7. Stepanov S.A., Kondrashkina E.A., Kohler R. et al. // *Phys. Rev. B.* — 1998. — **57**, N 8. — Р.4829.
8. Huang X., Dudley M. // *Acta cryst. A.* — 2003. — **59**. — Р. 163.
9. Stetsko Y.P., Chang S.-L. // *Ibid.* — 1997. — **53**. — Р. 28.

10. *Authier A.* Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. — New York: Oxford University Press, 2001.

Одержано 13.03.06

КОМПЛАНАРНАЯ МНОГОЛУЧЕВАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ Х-ЛУЧЕЙ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ

*А.Н. Ефанов, В.П. Кладько, В.Ф. Мачулин*

Резюме

Развита компланарная теория динамической дифракции Х-лучей в многослойных структурах для  $N$  сильных волн. Теория адекватна для широких угловых диапазонов, скользящей геометрии, расчета отраженного луча, для произвольных толщин слоев и практически любого количества точек обратного пространства, принимающих участие в дифракции.

DYNAMICAL THEORY OF COPLANAR  $N$ -BEAM X-RAY DIFFRACTION IN MULTILAYERED STRUCTURES

*O.M. Yefanov, V.P. Kladko, V.F. Machulin*

V.E. Lashkarev Institute of Semiconductor Physics,  
Nat. Acad. Sci. of Ukraine  
(45, Nauky Ave., Kyiv 03680, Ukraine;  
e-mail: kladko@isp.kiev.ua)

S u m m a r y

A new approach to calculating the coplanar  $N$ -beam X-ray dynamical diffraction in multilayered structures has been presented. The theory produces adequate results in the wide range of angles, including the grazing incidence. It can be applied to calculate the reflected beam and diffraction by thick layers. It can also be used to take into account practically any number of reciprocal lattice sites that participate in diffraction.