

УДК 538.9; 539.26
PACS 61.05.C, 61.10.Nz

Моделирование кривых дифракционного отражения рентгеновских лучей от протонообменных слоев монокристалла ниобата лития

О. Р. Семенова, А. В. Сосунов, А. И. Чуракова

Пермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15
email: okcem57@gmail.com

В работе в рамках динамической теории рассеяния рентгеновских лучей построена модель, описывающая кривые дифракционного отражения, полученные от протонообменных слоев монокристалла ниобата лития, подвергнутых постобменному отжигу. Экспериментально получены планарные протонообменные волноводы, созданные на основе X-среза монокристалла ниобата лития. Показано, что протонная имплантация приводит к формированию новых кристаллических фаз с большим параметром решетки. Исследованы изменения структуры (методом дифракционного структурного анализа) и оптические свойства (методом модовой спектроскопии) полученных волноводов в различных температурных режимах. По уширению дифракционных максимумов проведена оценка величины микродеформации кристаллической решетки, обусловленной протонной имплантацией. Показано, что толщина волноводного слоя и количество новых кристаллических фаз зависят не только от температурного режима протонного обмена, но и от продолжительности постобменного отжига. Проведено моделирование экспериментально полученных кривых дифракционного отражения в рамках описанной модели. В результате моделирования определена глубина волноводного слоя, которая согласуется с данными, полученными методом модовой спектроскопии. Представлены модели предполагаемых профилей деформации кристаллической решетки, обусловленных протонной имплантацией, определены средние значения микродеформации решетки и фазовый состав протонообменных слоев ниобата лития.

Ключевые слова: ниобат лития; протонный обмен; кривые дифракционного отражения

Поступила в редакцию 30.07.2020; принята к опубликованию 17.09.2020

Modelling of the X-ray diffraction curves from the proton-exchange layers of a lithium niobate monocrystal

O. R. Semenova, A. V. Sosunov, A. I. Churakova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm
email: okcem57@gmail.com

In this work, within the framework of the dynamic theory of the X-ray scattering, a model is constructed that describes the diffraction reflection curves obtained from the proton-exchange layers of a lithium niobate monocrystal subjected to the post-exchange annealing. Planar proton-exchange waveguides based on the X-cut of the lithium niobate monocrystal are obtained experimentally. It was shown that the proton implantation leads to the formation of the new crystalline

phases with a larger lattice parameter. The structure changes (by the method of the diffraction structural analysis) and the optical properties (by the method of the mode spectroscopy) of the obtained waveguides are investigated in the various temperature regimes. The microstrain of the crystal lattice caused by epy proton implantation was estimated by the analysis of X-ray diffraction line broadening. It is shown the thickness of the waveguide layer and the number of new crystalline phases depend not only on the temperature regime of the proton exchange, but also on the duration of post-exchange annealing. The simulation of the experimentally obtained curves of the diffraction reflection is carried out within the framework of the described model. As a result of the modeling, the depth of the waveguide layer was determined, which is consistent with the data obtained by the method of the mode spectroscopy. The models of the assumed profiles of the crystal lattice deformation caused by proton implantation are presented. The average values of the lattice microstrain and the phase composition of proton-exchange lithium niobate layers are determined.

Keywords: lithium niobate; protone exchange; X-ray diffraction curves

Received 30.07.2020; accepted 17.09.2020

doi: 10.17072/1994-3598-2020-4-17-28

Введение

Благодаря возможности управления свойствами посредством изменения состава кристаллы ниобата лития являются универсальными для использования в оптике. Классическим методом изготовления волноводов на ниобате лития является протонный обмен (ПО), представляющий собой реакцию ионного обмена между кристаллом ниобата лития и, например, расплавом бензойной кислоты [1, 2].

ПО приводит к возникновению слоистых зон с сильнодеформированной решеткой монокристалла, так как вблизи поверхности формируются различные кристаллические фазы [3–5]. Одним из методов отслеживания структурных изменений в кристаллической решетке монокристаллов является метод двухкристальной дифракции рентгеновских лучей. Этот метод часто используют при изучении слоистых структур [6–8], возникающих при ионной имплантации или выращивании эпитаксиальных слоев. В основе метода лежит регистрация кривой дифракционного отражения (КДО), форма которой зависит от степени деформации кристаллической решетки изучаемого объекта, а также толщины деформированного слоя. Анализ КДО обычно проводят в рамках кинематического приближения теории рассеяния рентгеновских лучей, которая не учитывает ряд физических процессов, например, эффекты многократного рассеяния в практически совершенных кристаллах. Самое главное, кинематическая теория не решает основной проблемы дифракционного анализа, так называемой «фазовой проблемы» при решении обратной задачи, т.е. при определении структуры приповерхностных слоев по форме КДО. В этом случае возникают значительные трудности, поскольку для однозначного описания структуры приповерхностного слоя по КДО необходимо знать комплексную амплитуду отражения кристалла во всем угловом интервале регистрации

КДО, а экспериментально измеряемый коэффициент отражения является лишь модулем этой величины. В данной работе мы действуем в рамках динамической теории рассеяния, в которой проблема неоднозначности фазы не существует. Придерживаясь мнения авторов работ [9–18], мы считаем, что однозначное восстановление структуры поверхностного слоя возможно только при использовании динамической теории дифракции рентгеновских лучей, а результаты вычисления по кинематической теории можно использовать только в качестве начального приближения.

Целью настоящей работы является выявление изменений в структуре кристалла ниобата лития при создании на его основе планарных волноводов, используя моделирование кривых дифракционного отражения в рамках динамической теории рассеяния рентгеновских лучей.

1. Модель рассеяния рентгеновских лучей в рамках динамической теории

1.1. Случай идеального монокристалла

Для описания процессов распространения рентгеновских лучей в кристаллической среде в самом общем случае, когда падающая и рассеянная волны взаимодействуют друг с другом, используют систему уравнений Максвелла [19], которая при некоторых преобразованиях может быть сведена к волновому уравнению:

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{1}{c^2} (1 + \chi(\mathbf{r})) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (1)$$

Волновое уравнение (1) описывает колебания электромагнитной волны с напряженностью электрического поля $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ в среде с поляризуемостью $\chi(\mathbf{r})$ в заданной радиус-вектором \mathbf{r} точке кристалла. Здесь c – скорость света в вакууме. Поляризуемость кристалла определяется выражением:

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{R\lambda^2}{\pi}\rho(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Здесь $R = e^2/(m_e c^2) = 2.8 \cdot 10^{-13}$ см – классический радиус электрона (e и m_e – заряд и масса электрона, соответственно); λ – длина электромагнитной (рентгеновской) волны; $\rho(\mathbf{r})$ – распределение электронной плотности в веществе.

Известно, что рассеяние рентгеновских волн происходит на электронах атомов, образующих кристалл [20]. Электроны колеблются под действием падающей электромагнитной волны и сами испускают электромагнитные волны, которые интерферируют между собой и с падающей волной. Устанавливается некоторое стационарное поле, охарактеризовать которое можно через функцию распределения электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ в кристалле. Функцию $\rho(\mathbf{r})$ можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки \mathbf{H} [20]:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{hkl} F(hkl) e^{-2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3)$$

где $F(hkl)$ – структурная амплитуда исследуемого кристалла, \mathbf{H} – вектор обратной решетки, $H = 1/d_{hkl}$ (d_{hkl} – межплоскостное расстояние для данной плоскости с индексами Миллера (hkl)), $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$, V – объем элементарной ячейки кристалла с параметрами обратной решетки \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* .

Подставляя выражение (3) в (2), для поляризуемости среды находим

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \chi_{hkl} e^{-2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4)$$

где $\chi_{hkl} = -\frac{R\lambda^2}{\pi V} F(hkl)$ – Фурье-компонента разложения поляризуемости среды по векторам обратной решетки.

Введем обозначение для краткости записи $\chi_{hkl} = \chi_H$.

Величина χ_H представляет собой комплексное число:

$$\chi_H = \chi_{Hr} + \chi_{Hi},$$

где $\chi_{Hr} = \text{Re } \chi_H$, $\chi_{Hi} = \text{Im } \chi_H$.

Случай $\chi_{Hi} \neq 0$ отвечает учету поглощения электромагнитных волн в среде. Отметим, что если у кристалла нет центра симметрии, то $\chi_H \neq \chi_{\bar{H}}$, $\chi_{\bar{H}} = \chi_H^*$ (* – операция комплексного сопряжения).

Волновое уравнение (1) имеет множество частных решений $\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{E}_3(\mathbf{r}, t), \dots$, например, в виде плоских волн $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$. Здесь ω – круговая частота, а волновой вектор \mathbf{k} перпендикулярен фронту волны, его величина равна $|\mathbf{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}$. Вектор \mathbf{k} характеризует направление распространения электромагнитной волны в вакууме. В случае распространения электромагнитной волны в среде следует учесть показатель преломления $n = \sqrt{\epsilon} = \sqrt{1 + \chi} \approx 1 + \frac{\chi}{2}$. Тогда частные решения имеют вид:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r})}, \quad (5)$$

где $|\mathbf{K}| = K = \sqrt{1 + \chi(\mathbf{r})} \frac{\omega}{c}$, или $K = n \cdot k$.

Общее решение волнового уравнения – это суперпозиция частных решений:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_j A_j \mathbf{E}_j(\mathbf{r}, t),$$

где A_j – амплитуды волн, не зависящие от времени, но зависящие от координат, т. е. $A_j = A_j(\mathbf{r})$.

1.2. Электромагнитная волна в искаженной кристаллической решетке

Для случая деформированного кристалла для решения уравнения (1) используем подход С. Такаги [9, 10], в котором уравнение (1) сводится к системе дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных.

Наличие искажений кристаллической решетки можно описать функцией смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Будем полагать, что смещения медленно меняются в пространстве. Для деформированного кристалла учет искажений следует произвести заменой $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})$, т. е.

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_H \chi_H e^{-2\pi i \mathbf{H} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})]}.$$

Опираясь на результаты работы [11] и допуская, что электромагнитная волна в кристалле слабо взаимодействует со средой и сохраняется поперечной, получим систему уравнений для амплитуд $\mathbf{E}_H(\mathbf{r})$ волнового поля, поляризованных перпендикулярно плоскости рассеяния, в кристалле в случае брэгговской дифракции:

$$\left(-\frac{2i}{K^2} \mathbf{K}_H \cdot \nabla + \alpha_H \right) \mathbf{E}_H(\mathbf{r}) = \sum_{H'} \mathbf{E}_{H'}(\mathbf{r}) \chi_{HH'}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где суммирование ведется по всем узлам обратной решетки идеального (индекс id) кристалла:

$$\mathbf{K}_H = \mathbf{K} + 2\pi \mathbf{H}, \quad \alpha_H = \frac{K_H^2 - K^2}{K^2},$$

$$\chi_{HH'}(\mathbf{r}) = \chi_{H\bar{H}}^{id} \cdot \exp\{-2\pi i [\mathbf{H} - \mathbf{H}'] \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\}.$$

В идеальном кристалле $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0$, поэтому $\chi_{HH'}(\mathbf{r}) = \chi_{H\bar{H}}^{id} = \text{const}$. В сильноискаженных кристаллах $\chi_{HH'}(\mathbf{r}) = \chi_0 \delta_{HH'}$, где $\delta_{HH'}$ – символ Кронекера, $\chi_0 = \frac{1}{V} \int_V \chi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ – средняя поляризуемость кристалла.

Далее, учитывая, что при дифракции рентгеновских лучей в кристалле возникает ограниченное число волн (это связано с тем, что длина волны рентгеновского излучения одного порядка с постоянной решетки кристалла или, что на поверхность сферы Эвальда может попасть ограниченное число узлов обратной решетки), ограничимся наиболее часто реализуемым в эксперименте случаем двухволнового приближения – двухволновой дифракцией.

Двухволновое приближение – это случай, когда ориентация кристалла близка к одному из брэггов-

ских положений, например, когда на сфере Эвальда лежат два узла обратной решетки: нулевой и заданный вектором \mathbf{H} , т.е. (000) и (hkl) . В двухволновом приближении индексы H и H' принимают два значения $H, H' = 0, H$. Из системы (6) определяются амплитуды двух сильных волн, образующих электромагнитное поле в кристалле, в проходящем и дифрагированном направлениях, т.е. амплитуды падающей \mathbf{E}_0 и рассеянной волн \mathbf{E}_H с соответствующими волновыми векторами \mathbf{K}_0 и \mathbf{K}_H :

$$\begin{cases} \left(-\frac{2i}{K^2}\mathbf{K}_0 \cdot \nabla + \alpha_0\right)\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \chi_{00}\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \chi_{0H}\mathbf{E}_H(\mathbf{r}), \\ \left(-\frac{2i}{K^2}\mathbf{K}_H \cdot \nabla + \alpha_H\right)\mathbf{E}_H(\mathbf{r}) = \chi_{H0}\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \chi_{HH}\mathbf{E}_H(\mathbf{r}). \end{cases} \quad (7)$$

Треугольник, образованный на волновых векторах векторами \mathbf{K}_0 и \mathbf{K}_H , с основанием $\mathbf{Q} = \mathbf{K}_H - \mathbf{K}_0$, лежит в плоскости, перпендикулярной поверхности кристалла [19]. Для определенности считаем, что ось x лежит в плоскости поверхности кристалла, ось z является нормалью к этой поверхности. Отметим, что система (7) записана в координатных осях, связанных с направлениями распространения волн, т.е. \mathbf{K}_0 и \mathbf{K}_H , в кристалле, в которых

$$\begin{aligned} \chi_{00} &= \chi_{00}^{id} e^0 = \chi_{00}^{id} \equiv \chi_0, \\ \chi_{0H} &= \chi_{0H}^{id} \exp\{-2\pi i(-\mathbf{H}) \cdot \mathbf{u}\} \equiv \chi_H e^{2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{u}}, \\ \chi_{H0} &= \chi_{H0}^{id} \exp\{-2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{u}\} \equiv \chi_H e^{-2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{u}}, \\ \chi_{HH} &= \chi_{HH}^{id} e^0 \equiv \chi_0. \end{aligned}$$

Вследствие периодичности функции $\chi(\mathbf{r})$ волновые вектора \mathbf{K}_0 и \mathbf{K}_H в кристалле связаны через вектор обратной решетки $\mathbf{K}_H - \mathbf{K}_0 = 2\pi\mathbf{H}$ (условие Вульфа-Брэгга $2d_{hkl}\sin\theta_B = m\lambda$ (m – порядок отражения)), а вектор \mathbf{K}_0 отличается от волнового вектора падающей волны в вакууме \mathbf{k} на величину аккомодации: $\mathbf{K}_0 = \mathbf{k} + \mathbf{n}\delta$, здесь \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности кристалла, δ – коэффициент аккомодации. В отсутствие дифракционного рассеяния, т.е. далеко от брэгговского угла θ_B , коэффициент δ характеризует преломление рентгеновских лучей на границе раздела вакуум – кристалл.

Отклонение от условия Вульфа-Брэгга из-за искажений решетки зададим вектором $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - 2\pi\mathbf{H}$. Тогда влияние деформации решетки учитывается функцией $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и изменением локального вектора обратной решетки \mathbf{q} , т.е. функции $\alpha(\mathbf{r})$. Вид этой функции связан с полем дефекта кристаллической решетки $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. В общем случае функция локальных разориентаций кристаллографических плоскостей имеет вид [9, 10, 13, 14, 19]:

$$\alpha(\mathbf{r}) \sim -\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right)(\mathbf{H}\mathbf{u}(\mathbf{r})).$$

Будем считать, как и в работах [11, 15, 16, 19]:

$$\alpha_0 = 0, \alpha_H = \alpha_H(0) - 2\lambda \frac{K_H}{K} \nabla(\mathbf{H}\mathbf{u}),$$

$$\alpha_H(0) = \lambda^2 \left(\frac{1}{d_{hkl}^2} - \frac{2\sin\theta}{\lambda d_{hkl}} \right).$$

Внесем также фазовый множитель $e^{2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{u}}$ в функцию χ_H .

Совершая переход от векторных величин к скалярным, а также сменив систему координат на декартовую (x, z) (далее считаем, что свойства кристалла изменяются вглубь кристалла вдоль одного направления (оси z)), получаем уравнение Топэна [19, 15-17] для отношения амплитуд $X = E_H/(E_0\sqrt{b})$:

$$i \frac{dX}{dz} = (1 - i\alpha)X^2 - 2CX + b(1 + i\alpha). \quad (8)$$

Здесь $A = \frac{\pi\chi_{Hr}}{\sqrt{b}\lambda\sin\theta}z$ – приведенная глубина; $\alpha = \frac{\chi_{Hi}}{\chi_{Hr}}$ – отношение мнимой и действительной компонент восприимчивости деформированного кристалла; $C = -\frac{\sqrt{b}}{2\chi_{Hr}}[(1-b)\chi_0 - b\alpha_H]$ – коэффициент, учитывающий поглощение рентгеновской волны в кристалле и отклонение от условия Вульфа-Брэгга из-за деформации (смещения атомных плоскостей) кристалла; коэффициент $b = -1$ учитывает геометрию эксперимента, θ – угол падения падающего рентгеновского луча на кристалл.

Дифференциальное уравнение (8) имеет граничное условие $X = 0$ при $z = z_{max}$. Кроме того, уравнение (8) имеет аналитическое решение для тонкого слоя и идеального кристалла [16]. Решение для тонкого слоя кристалла с однородной постоянной деформацией имеет вид рекуррентного соотношения амплитуд наверху (на выходе из слоя):

$$X(A) = \frac{SX_0 + i(D + CX_0)\text{tg}[S(A - A_0)]}{S - i(C + BX_0)\text{tg}[S(A - A_0)]}, \quad (9)$$

где $X_0 = X(A_0)$ – стартовое (начальное) значение отношения амплитуд; $B = \sqrt{b}(1 - i\alpha)$; $S = C^2 - BD$; $D = \sqrt{b}(1 + i\alpha)$, в качестве X_0 обычно берут отношение амплитуд отраженной и падающей волн на поверхности полубесконечного кристалла (идеальной) подложки [16]:

$$X_0 = -\frac{B}{C - \sqrt{C^2 - BD}}. \quad (10)$$

1.3. Моделирование кривых дифракционного отражения планарных волноводов

Полученное в предыдущем пункте уравнение (8) позволяет получить зависимость амплитуды рассеянной волны от глубины кристалла. Это дает возможность получить любое одномерное распределение деформации кристаллической решетки путем разбиения кристалла на ламели постоянной деформации, иными словами, появляется возможность оценить глубину волноводного слоя.

При моделировании кривых дифракционного отражения (КДО) протонообменных волноводных слоев, сформированных на поверхности ниобата лития, будем разбивать кристалл на произвольное количество параллельных пластин одинаковой толщины, считая деформацию каждого слоя постоянной и однородной. С учетом глубины проникновения рентгеновских лучей в монокристалл ниобата лития толщину таких слоев можно принять равной 100 Å.

Решение уравнения (8) для тонкого слоя дается выражением (9), которое является рекуррентным по отношению к амплитуде рассеяния нижнего слоя X_0 и верхнего слоя $X(A)$. Стартовое значение X_0 соответствует нижележащему слою, поэтому позволяет вести расчет от подложки (недеформированного кристалла), т.е. от выражения (10). Таким образом, вычисления следует начинать от самого глубокого слоя. Итерационный процесс следует повторить N раз, так как интегральное отражение в заданном направлении определяется следующим выражением [17]:

$$R(\theta) = X_N(A)X_N^*(A). \quad (11)$$

Как уже говорилось ранее, учет деформации кристаллической решетки осуществляется при помощи параметра α_H . Следуя работам [17, 18], прием его равным

$$\alpha_H = -2(\theta - \theta_B)\sin 2\theta_B - 2\varepsilon(z)\text{tg}\theta_B \sin 2\theta_B,$$

где $\varepsilon(z)$ – профиль одномерной деформации по толщине кристалла, который будет задаваться нами при моделировании КДО. Кроме этого, искажения кристаллической решетки, влияющие на структурную амплитуду, можно учитывать введением статистического фактора Дебая-Валлера (множителя $e^{2\pi iHu}$) в выражениях для χ_H :

$$\chi_{HH} = \chi_H e^{-\frac{8\pi^2 \sin^2 \theta}{\lambda^2} \langle u^2 \rangle(z)},$$

где $\langle u^2 \rangle(z)$ – профиль распределения среднеквадратичных смещений атомов из положения равновесия при наличии дефектов. В данной работе мы полагаем $\langle u^2 \rangle(z) = 0$.

2. Структура и свойства планарных волноводов

2.1. Получение планарных волноводов на основе ниобата лития

Протонный обмен проводился на образцах X-среза кристалла ниобата лития размером 10×15×1 мм³. Формирование планарных волноводов путем протонного обмена осуществлялось при температурах 175, 190 и 210°C в течение 2 ч в циркониевом реакторе закрытого типа в расплаве бензойной кислоты. Нагрев до необходимой температуры ПО осуществлялся со скоростью 4°C/мин.

Известно, что после ПО у волновода получается ступенчатый профиль показателя преломления [21]. В этом случае при стыковке оптического волокна с полученным волноводом получается большая разность между показателями преломления волновода и волокна, которая будет приводить к обратным отражениям. Для минимизации этого явления, а также стабилизации оптических свойств волноводов проводят отжиг. В настоящей работе он проводился в воздушной атмосфере при температуре 350°C в течение 5.5 ч.

2.2. Структурные исследования полученных планарных волноводов

Для изучения структурных изменений кристаллической решетки в результате протонирования монокристаллов ниобата лития проведен рентгенографический анализ $\theta/2\theta$ дифракционных кривых, полученных на рентгеновском двухкристальном дифрактометре ДРОН-УМ1. Используемое излучение отвечает β -линии К-серии характеристического спектра кобальтового анода ($\lambda_\beta = 1.62073$ Å).

На рис. 1–3 представлены кривые дифракционного отражения первого порядка (110) для исследуемых образцов. Наличие асимметрии пиков у кривых для исходных образцов свидетельствует о присутствии деформации кристаллической решетки в приповерхностном слое образцов. Возможно, наличие деформации у исходных образцов обусловлено способом их подготовки. На рис. 1–3 (случай а) кривые намеренно представлены с длинными «хвостами» слева с целью демонстрации отсутствия каких-либо структурных дифракционных максимумов вблизи пика подложки.

Из анализа кривых на рис. 1–3 (случай б) видно, что в ходе протонного обмена образуется не менее одной кристаллических фаз. Этот вывод следует из того, что кривые $\theta-2\theta$ имеют несколько разных по величине пиков. Все они расположены в области меньших углов и, следовательно, отвечают фазе с большим параметром решетки.

Максимальный пик на рис. 1–3, б соответствует пику подложки. Отметим, что у КДО на рис. 1–3, б пик подложки отделен от остальных пиков областью, которая по интенсивности близка к фону дифрактограммы. Это свидетельствует о том, что в результате протонного обмена, при движении из глубины образца к его поверхности, скачком меняется параметр решетки.

На рис. 1–3 (случай в) так же намеренно оставлены длинные «хвосты» дифракционных кривых в области малых углов отражения относительно основного максимума для удобства их качественного сравнения с КДО протонированных образцов до отжига. Предположительно, пики данных кривых соответствуют волноводному слою, состоящему из α -фазы, и подложки, наложенных друг на друга.

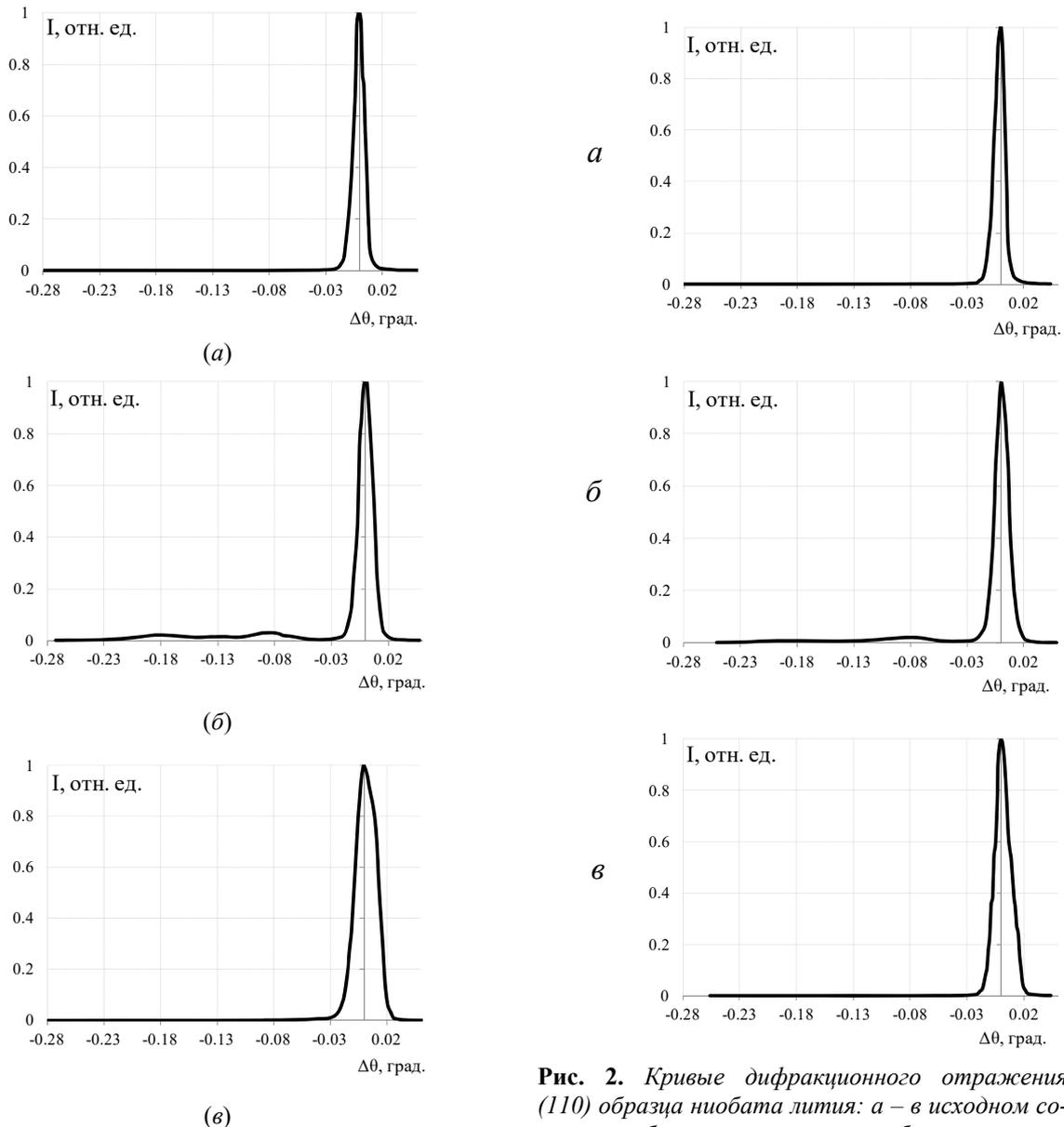


Рис. 1. Кривые дифракционного отражения (110) образца ниобата лития: а – в исходном состоянии; б – после протонного обмена при температуре 175°C в течение 2 ч; в – после отжига

Согласно авторам работы [22] волноводы, содержащие α -фазу, характеризуются градиентным профилем показателя преломления и малым приращением показателя преломления необыкновенного луча на поверхности $\Delta n_e < 0.03$. Эта кристаллическая фаза, соответствующая, по всей видимости, равновесной α -фазе, может быть сформирована протонным обменом при температуре 200–350°C в расплаве бензойной кислоты, содержащей от 2.5 до 3.5 mol % бензоата лития.

Для гауссова приближения формы КДО справедливо выражение, связывающее ширину КДО B , физическое β и инструментальное b уширения [20]

$$B^2 = b^2 + \beta^2.$$

Рис. 2. Кривые дифракционного отражения (110) образца ниобата лития: а – в исходном состоянии; б – после протонного обмена при температуре 190°C в течение 2 ч; в – после отжига

Физическое уширение дифракционной линии β в приближении Гаусса так же связано с размером области когерентного рассеяния D и величиной микродеформации ε кристаллической решетки соотношением [20]:

$$\beta^2 = \frac{\lambda^2}{D^2 \cos^2 \theta} + 16\varepsilon^2 \operatorname{tg}^2 \theta.$$

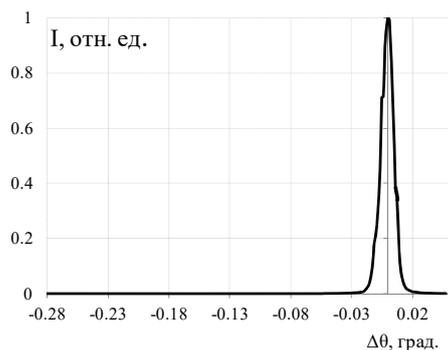
Измеряя экспериментальную полуширину B_1 и B_2 линий, соответствующих КДО двух порядков отражения (110) и (220), и используя систему уравнений:

$$\begin{cases} \beta_1^2 = \frac{\lambda^2}{D^2 \cos^2 \theta_1} + 16\varepsilon^2 \operatorname{tg}^2 \theta_1, \\ \beta_2^2 = \frac{\lambda^2}{D^2 \cos^2 \theta_2} + 16\varepsilon^2 \operatorname{tg}^2 \theta_2, \end{cases} \quad (12)$$

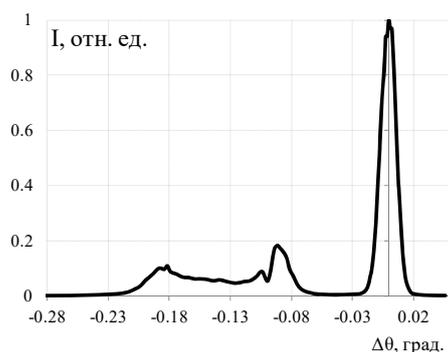
где $\beta_{1,2}^2 = B_{1,2}^2 - b_{1,2}^2$, θ_1 и θ_2 – соответствующие брэгговские углы, позволило нам определить деформацию ε по кривым $\theta/2\theta$ в приближении Гаусса

для образцов на рис. 1–3 после отжига. Кривые (220) в данной работе не представлены. В качестве кристалла эталона нами использован исходный ниобат лития (линии (110) и (220), уширения которых мы обозначили ранее как b_1 и b_2 , соответственно). Результаты расчетов приведены в табл. 1.

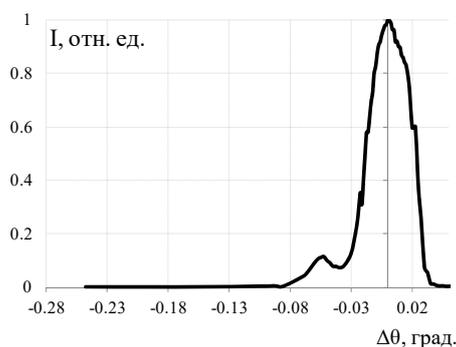
Полученные величины деформации, как следует из структурно-фазовой диаграммы, приведенной в работе [5], соответствуют α -фазе. Однако окончательное подтверждение этому мы можем получить, имея информацию о величине приращения показателя преломления необыкновенного луча.



(а)



(б)



(в)

Рис. 3. Кривые дифракционного отражения (110) образца ниобата лития: а – в исходном состоянии; б – после протонного обмена при температуре 210°C в течение 2 ч; в – после отжига

Таблица 1. Результаты расчета деформации кристаллической решетки ϵ по КДО, отвечающих двум порядкам отражения (110) и (220)

№ п/п	(hkl)	$b \cdot 10^4$, рад	$B \cdot 10^4$, рад	$\beta \cdot 10^4$, рад	ϵ , 10^{-4}
1	(110)	1.94	3.61	3.04	1.98
	(220)	4.12	7.81	6.64	
2	(110)	1.91	2.96	2.26	3.41
	(220)	3.38	10.7	10.2	
3	(110)	2.21	7.67	7.34	3.78
	(220)	4.29	14.3	13.6	

2.3. Результаты измерения приращения показателя преломления необыкновенного луча методом модовой спектроскопии

Для полученных планарных волноводов определены профили приращения показателя преломления необыкновенного луча $\Delta n_e(z)$ на поверхности волноводного слоя методом модовой спектроскопии. С помощью призматического ввода излучения (длина волны $\lambda = 0.633$ мкм) были измерены эффективные показатели преломления волноводных мод. По ним был восстановлен профиль $\Delta n_e(z)$ по глубине волноводного слоя в среде MatLab с помощью обратного метода Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна [23] и определена глубина волновода (см. табл. 2). Профили $\Delta n_e(z)$ для исследуемых образцов представлены на рис. 4.

Таблица 2. Характеристики полученных волноводов на ниобате лития

Образец	Δn_e	Глубина волновода, мкм
ПО 175°C + отжиг	0.02676	4.57
ПО 190°C + отжиг	0.04785	4.82
ПО 210°C + отжиг	0.02438	7.76

Как видно из табл. 2, с повышением температуры ПО глубина волновода увеличивается. Значения Δn_e для 1 и 3 образцов соответствуют α -фазе [5], чего нельзя сказать об образце №2, который требует дополнительных исследований.

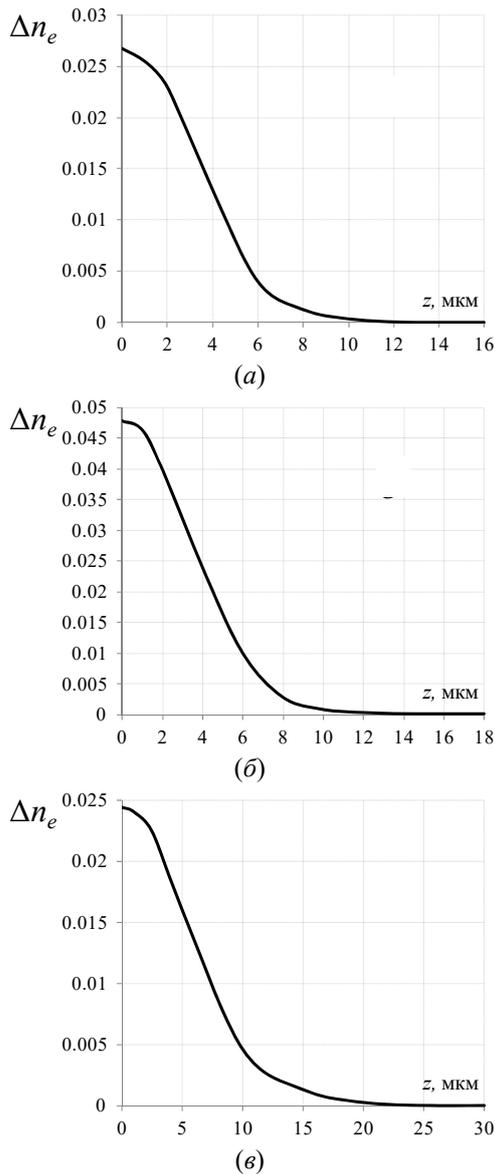


Рис. 4. Зависимость распределения Δn_e по глубине волновода z для отожженных образцов, протонированных при разных температурах: *а* – ПО 175°C; *б* – ПО 190°C; *в* – ПО 210°C

Заметим, что в ходе работы мы не учли тот факт, что при проведении отжига образцов следовало увеличить продолжительность постобменного отжига по мере увеличения температуры ПО.

3. Моделирование кривых дифракционного отражения

Как уже было отмечено, после отжига ниобата лития, подвергнутого ПО, формируется волновод, состоящий из равновесной α -фазы. Схематично такой волновод можно представить в виде рис. 5, *а*. На подложке ниобата лития (NL) (3) располагается слой α -фазы (1) с решеткой, имеющей больший параметр и сопряженной с кристаллической решеткой подложки (3) посредством переходной зоны (2).

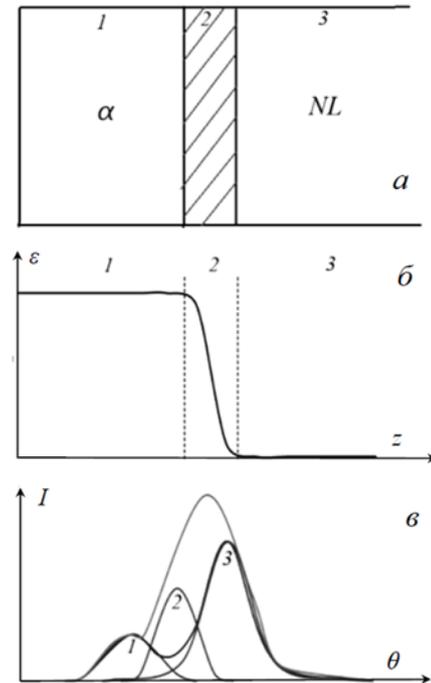


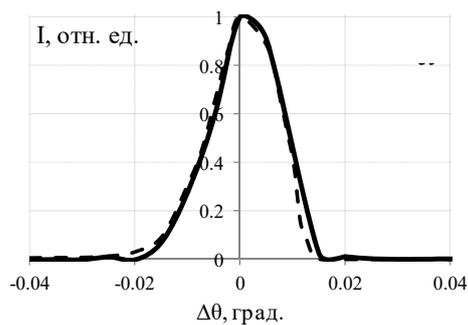
Рис. 5. Иллюстрация, поясняющая алгоритм моделирования КДО: *а* – многослойный монокристалл; *б* – заданный профиль деформации $\varepsilon(z)$; *в* – КДО

Если проследить за изменением межплоскостных расстояний d' в направлении нормали к пластинке ниобата лития, т. е. за профилем деформации $\varepsilon(z)$, то мы предполагаем, что он имеет ступенчатую форму, схематично представленную на рис. 5, *б*. При этом мы считаем, что чем протяженнее область (2), тем выше ступенька. Если параметр решетки меняется скачком, т.е. зона (2) отсутствует, то мы имеем дело с КДО «двухпиковой» (пики 1 и 3 на рис. 5, *в*); протяженная же зона (2) может расцениваться как отдельная фаза, дающая дифракционный максимум 2, отвечающий деформациям переходной области (2). Суммарная же КДО, регистрируемая в эксперименте, – это широкий максимум, представляющий собой суммарную кривую пиков 1–3 (см. рис. 5, *в*).

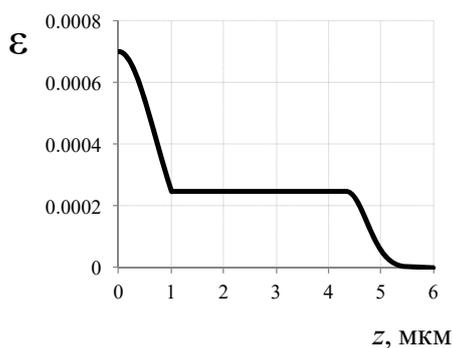
Опираясь на описанную схему, в работе проведено моделирование КДО с использованием алгоритма из п. 1.3. Моделируемая область в этом случае равна протяженности зон 1 и 2. Поэтому при сравнении расчетных КДО с экспериментальными кривыми, показанными на рис. 1–3, *в*, из последних исключены КДО исходных образцов, т. е. подложки.

Функцию, описывающую профиль $\varepsilon(z)$, вслед за авторами работы [24] в нашей модели использовали следующего вида:

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_0, & \text{при } z < h_1, \\ \varepsilon_0 e^{-\frac{(z-h_1)^2}{a^2}}, & \text{при } z \geq h_1, \end{cases} \quad (13)$$



(а)



(б)

Рис. 6. Образец после ПО при 175°C и постоб-
менного отжига: а – кривые дифракционного
отражения; б – профиль деформации. Сплошная
линия – эксперимент, штриховая – расчет

здесь ε_0 – максимальное значение деформации (высота ступеньки), h_1 – протяженность зоны (1) (длина ступеньки), параметр a определяет протя-
женность зоны (2).

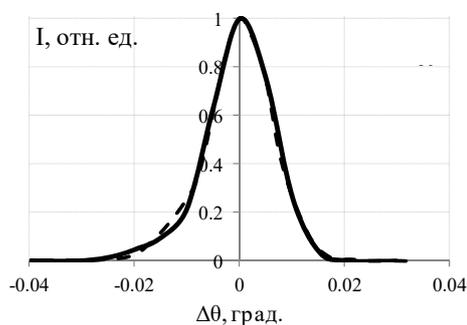
При задании ступенчатого профиля $\varepsilon(z)$ перво-
начально предполагалось, что деформация соот-
ветствует значениям деформации α -фазы [5], тол-
щина деформированного слоя составляет ~ 5 мкм.
Таким образом, вариацией параметров ε_0 , h_1 , a
следовало добиться совпадения эксперименталь-
ной и расчетной КДО. Профилем, который лучше
всего отражает значение параметров по толщине
деформированного слоя, считается профиль, кото-
рому соответствует минимальное среднеквадрат-
ичное отклонение расчетной КДО от эксперимен-
тальной кривой.

В ходе многочисленных итераций моделирова-
ния КДО с одноступенчатым профилем деforma-
ции $\varepsilon(z)$ перебор параметров ε_0 , h_1 , a не привел к
желаемому результату. Поэтому был использован
многоступенчатый профиль $\varepsilon(z)$, как, например,
это было сделано в работе [18].

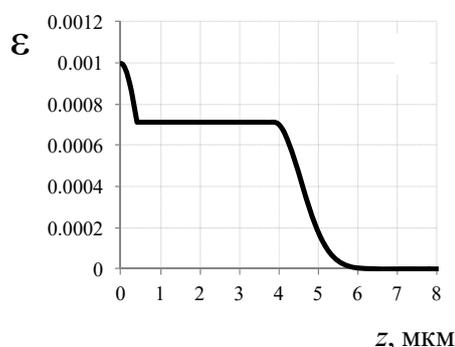
В качестве стартового профиля $\varepsilon(z)$ использо-
ван двухступенчатый профиль, каждая ступень ко-
торого имела вид (13).

На рис. 6 представлены расчетная (пунктирная)
и экспериментальная (сплошная) КДО для образца
с режимом ПО при температуре 175°C и соответ-

ствующий профиль деформации. Как видно из
рис. 6, б, толщина деформированного слоя состав-
ляет 5.43 мкм, а средняя деформация по слою рав-
на $\varepsilon_{\text{сред}} = 2.70 \cdot 10^{-4}$.



(а)



(б)

Рис. 7. Образец после ПО при 190°C и постоб-
менного отжига: а – кривые дифракционного
отражения; б – профиль деформации. Сплошная
линия – эксперимент, штриховая – расчет

На рис. 7 представлен результат моделирова-
ния КДО для отожженного образца с температу-
рой ПО 190°C. Предполагаемый профиль деforma-
ции так же был выбран двухступенчатым. Как
видно из рис. 7, б, толщина деформированного
слоя составляет около 6 мкм, средняя деформация
равна $\varepsilon_{\text{сред}} = 3.45 \cdot 10^{-4}$, что также соответствует
значениям деформации α -фазы [5].

Заметим, что форма КДО третьего образца (ПО
при 210°C) после отжига, представленная на рис.
3, в, отличается от КДО на рис. 1, в и 2, в: пик ши-
рокий и имеется дополнительный максимум со
стороны меньших углов отражения. Расчет пока-
зал, что двухступенчатые профили $\varepsilon(z)$ дают по
сравнению с ним более узкие КДО. Так же было не
ясно, что следует взять в качестве нулевого при-
ближения профиля $\varepsilon(z)$. Поэтому было принято
решение – разложить профиль на рис. 3, в в про-
грамме Fituk на подпики. Оказалось, что КДО мо-
жет быть разложена на 4 подпики, поэтому было
сделано предположение, что профиль $\varepsilon(z)$ может
быть четырехступенчатым, высота каждой сту-
пеньки определяется значением угла смещения

при вершине каждого подпика относительно пика подложки. Значения полученных деформаций имеют следующие величины (при подсчете пиков слева направо): $3 \cdot 10^{-3}$, $6.7 \cdot 10^{-4}$, $2 \cdot 10^{-5}$, $4 \cdot 10^{-4}$. Эти значения деформации и послужили «отправной точкой» начала итераций.

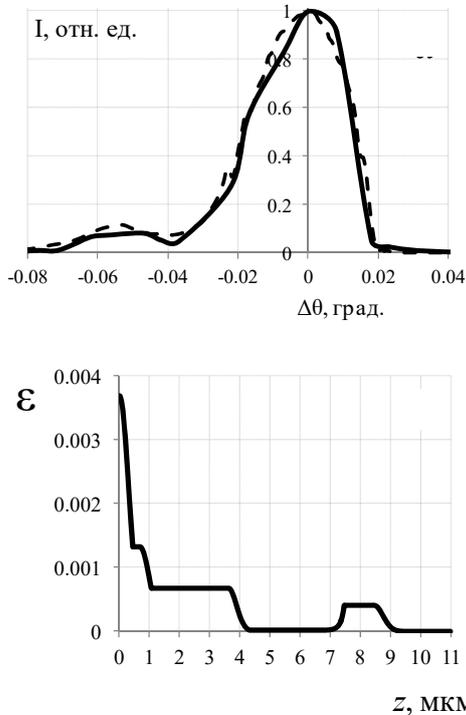


Рис. 8. Образец после ПО при 210°C и постобъемного отжига: а – кривые дифракционного отражения; б – профиль деформации. Сплошная линия – эксперимент, штриховая – расчет

На рис. 8 приведен результат моделирования КДО для отожженного образца с температурой ПО 210°C . Отметим, что определение профиля $\varepsilon(z)$ для данного образца оказалось непростой задачей, т. к. ступени этого профиля не являются убывающей функцией, кроме того, первые результаты давали два отдельностоящих пика и не удавалось получить требуемую ширину моделируемого максимума. По этой причине, между «ступенями» $\varepsilon_0^{(1)} = 0.003$ и $\varepsilon_0^{(2)} = 0.00067$ была добавлена промежуточная область однородной деформации. Мы полагаем, что этот участок кристалла ориентирован таким образом, чтобы давать отражение под брэгговскими углами между подпиками 1 и 2. Данное предположение подтвердилось расчетом, а положение еще одной «ступени» в профиле $\varepsilon(z)$ подобрано численно. Согласно полученному результату протяженность деформированной области составляет 9.3 мкм, величина средней деформации $\varepsilon_{\text{сред}} = 4.14 \cdot 10^{-4}$.

Многоступенчатый профиль $\varepsilon(z)$ свидетельствует о том, что состав образца не ограничивается только α -фазой и подложкой и еще раз подтвер-

ждает недостаточность времени постобъемного отжига для этого образца.

В табл. 3 приведены значения деформации, рассчитанной по КДО, отвечающие двум порядкам отражения и средней деформации, определенной по профилям $\varepsilon(z)$ при моделировании.

Таблица 3. Значения микродеформации кристаллических решеток для исследуемых образцов

Образец	ε по двум порядкам отражения, 10^{-4}	$\varepsilon_{\text{сред}}$ по профилю $\varepsilon(z)$, 10^{-4}
1	1.98	2.70
2	3.41	3.45
3	3.78	4.14

Приведенные значения деформации по фазовой диаграмме [5] указывают на α -фазу, в то время как профили на рис. 6–8, б демонстрируют наличие α , $\alpha+\varepsilon$ и $\beta+\varepsilon+\alpha$ фаз, соответственно.

Заключение

В работе получены структурные характеристики планарных волноводов, сформированных в ходе реакции протонного обмена на кристаллах X-среза ниобата лития. Протонный обмен был проведен в разных температурных режимах. Показано, что увеличение температуры протонного обмена приводит к увеличению глубины проникновения протонов, которая определяет толщину волноводного слоя.

Показано, что после протонного обмена в приповерхностном слое монокристалла ниобата лития образуется область с увеличенным параметром решетки, т.е. возникают области с повышенной концентрацией ионов водорода. Это подтверждается результатами проведенного рентгеноструктурного анализа приповерхностных слоев монокристалла и модовой спектроскопии.

Опираясь на теорию рассеяния рентгеновских лучей деформированными монокристаллами (модель Такаги–Топэна), удалось смоделировать кривые дифракционного отражения, полученные от волноводных образцов ниобата лития. В результате моделирования определена глубина волноводного слоя, которая согласуется с данными, полученными методом модовой спектроскопии. Так же определен предполагаемый профиль деформации кристаллической решетки, обусловленной протонной имплантацией.

По уширению дифракционных максимумов, отвечающих различным порядкам отражения, определена величина микродеформации кристаллической решетки, которая так же коррелирует со значением средней деформации, полученной в ходе моделирования кривых дифракционного отражения.

Список литературы

1. Wooten E. L., Kissa K. M., Yan A. Yi, Murphy E. J., Lafaw D., Hallemeier P. F., Maack D. R., Attanasio D.V., Fritz D. J., McBrien G. J., Bossie D. E. A review of lithium niobate modulators for fiber-optic communications systems // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2000. Vol. 6. N. 1. P. 69–82. DOI: 10.1109/2944.826874
2. Bazzan M., Cinzia S. Optical waveguides in lithium niobate: Recent developments and applications // *Applied physics reviews*. 2015. Vol. 2. P. 040603-1-25. DOI: 10.1063/1.4931601
3. Jackel J. L., Rice C. E. Topotactic LiNbO₃ to cubic perovskite structural transformation in LiTaO₃ and LiNbO₃ // *Ferroelectrics*. 1981. Vol. 38. P. 801–811. DOI:10.1016/0022-4596(82)90150-5
4. Jackel J. L., Rice C. E., Veselka J. J. Proton exchange for high-index waveguides in LiNbO₃ // *Appl. Phys. Lett.* 1982. Vol. 41. N. 7. P. 607–608. DOI: 10.1063/1.93615
5. Коркишко Ю. Н., Федоров В. А. Структурно-фазовая диаграмма протонообменных H_xLi_{1-x}NbO₃ волноводов в кристаллах ниобата лития // *Кристаллография*. 1999. Т. 44. № 2. С. 271–280.
6. Afanas'ev A. M., Imamov R. M. Structural characterization of quantum-well layers by double-crystal X-ray diffractometry // *Crystallography Reports*. 2003. Vol. 5. N. 5. P. 728–743. DOI: 10.1134/1.1612593
7. Fewster P. F. The simulation and interpretation of diffraction profiles from partially relaxed layer structures // *J. Appl. Cryst.* 1992. Vol. 25. P. 714–723.
8. Пунегов В. И. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в кристалле с поверхностной решеткой другого материала // *ЖЭТФ*. 2019. Т. 156. №. 2(8). С. 239–253. DOI: 10.1134/S0044451019080030.
9. Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion // *Acta Crystallogr.* 1962. Vol. 15. N. 12. P. 1131–1312. DOI: 10.1107/S0365110X62003473
10. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1969. Vol. 26. № 5. P. 1239–1253. DOI:10.1143/JPSJ.26.1239
11. Afanas'ev A. M. Dynamical theory of X-ray diffraction in crystals with defects // *Acta Crystallogr.* 1971. Vol. 27. P. 421–430. DOI: 10.1107/S0567739471000962
12. Афанасьев А. М., Александров П. А., Имам-ов Р. М. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. М.: Наука, 1986. 96 с.
13. Kato N. Perdellösung fringers in distorted crystals. II. Application to two-beam cases // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1964. Vol. 19. N. 1. P. 67–77. DOI: 10.1143/JPSJ.19.67
14. Суворов Э. В., Смирнова И. А. Новый подход в понимании механизмов дифракционного изображения дислокаций в рентгеновской топографии // *Письма в ЖТФ*. 2012. Т. 38. Вып. 21. С. 70–76.
15. Taupin D. Theorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux deforms // *Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst.* 1964. Vol. 87. N. 2. P. 469–511. DOI:10.3406/bulmi.1964.5769
16. Боуэн Д. К., Таннер Б.К. Высокора разрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. СПб.: Наука, 2002, 270 с.
17. Бублик В. Т., Щербачев К. Д., Воронова М. И., Мильвидский А. М. Дифракционные методы изучения материалов и приборных структур: ионная имплантация: учеб. пособие. М.: Изд. дом МИСиС, 2013. 67 с.
18. Wie C. R., Tombrello T. A., Vreeland T. Dynamical x-ray diffraction from nonuniform crystalline films: Application to x-ray rocking curve analysis // *J. Appl. Phys.* 1986. Vol. 59. N. 11. P. 3743–3746. DOI: 10.1063/1.336759
19. Пинскер З. Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М.: Наука, 1974. 368 с.
20. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ. М.; Л.: Гос. изд-во техн.-теор. лит., 1950. 650 с.
21. Korkishko Y. N., Fedorov V. A. Structural phase diagram of H_xLi_{1-x}NbO₃ waveguides: The correlation between optical and structural properties // *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 1996. Vol. 2 (2). P. 187–196.
22. Жундриков А. В., Кичигин В. И., Петухов И. В., Шевцов Д. И. Процессы старения и изменения структуры протонообменных волноводов в кристаллах ниобата лития // *Труды МАИ*. 2011. Т. 42. С. 1–9.
23. Колосовский Е. А., Петров Д. В., Царев А. В. Численный метод восстановления профиля показателя преломления диффузных волноводов // *Ж. квант. электрон.* 1981. Т. 8. № 12. С. 2557–2568.
24. Остафійчук Б. К., Яремій І. П., Кравець В. І., Федорів В. Д., Коцюбинський В. О., Морущко О. В. Про можливість однозначного визначення профілів зміни міжплощинної відстані в риповерхневих шарах монокристалів за даними двокристалльної рентгенівської дифрактометрії // *Фізика і хімія твердого тіла*. 2002. Т. 3. №. 1. С. 148–153.

References

1. Wooten E. L., Kissa K. M., Yan A. Yi, Murphy E. J., Lafaw D., Hallemeier P. F., Maack D. R., Attanasio D.V., Fritz D. J., McBrien G. J., Bossie D. E. A review of lithium niobate modulators for fiber-optic communications systems. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2000, vol. 6, no. 1, pp. 69–82. DOI: 10.1109/2944.826874
2. Bazzan M., Cinzia S. Optical waveguides in lithium niobate: Recent developments and applications. *Applied Physics Reviews*, 2015, vol. 2, 040603. DOI: 10.1063/1.4931601

3. Jackel J. L., Rice C. E. Topotactic LiNbO_3 to cubic perovskite structural transformation in LiTaO_3 and LiNbO_3 . *Ferroelectrics*, 1981, vol. 38, pp. 801–811. DOI: 10.1016/0022-4596(82)90150-5
4. Jackel J. L., Rice C. E., Veselka J. J. Proton exchange for high-index waveguides in LiNbO_3 . *Appl. Phys. Lett.*, 1982, vol. 41, no. 7, pp. 607–608. DOI: 10.1063/1.93615
5. Korkishko Ju. N., Fedorov V. A. Strukturno-fazovaja diagramma protonoobmennyh $\text{H}_x\text{Li}_{1-x}\text{NbO}_3$ volnovodov v kristallah niobata litija. *Kristallografija*, 1999, vol. 44, no. 2, pp. 271–280. (In Russian)
6. Afanas'ev A. M., Imamov R. M. Structural characterization of quantum-well layers by double-crystal X-ray diffractometry. *Crystallography Reports*, 2003, vol. 5, no. 5, pp. 728–743. DOI: 10.1134/1.1612593
7. Fewster P. F. The simulation and interpretation of diffraction profiles from partially relaxed layer structures. *J. Appl. Cryst.*, 1992, vol. 25, pp. 714–723.
8. Punegov V. I. Dynamical theory of X-ray diffraction in a crystal with a surface grating of another material. *J. Exp. Theor. Phys*, 2019, vol. 129, pp. 197–209. DOI: 10.1134/S1063776119070185
9. Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion. *Acta Crystallogr.*, 1962, vol. 15, no. 12, pp. 1131–1312. DOI: 10.1107/S0365110X62003473
10. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1969, vol. 26, no. 5, pp. 1239–1253. DOI:10.1143/JPSJ.26.1239
11. Afanas'ev A. M. Dynamical theory of X-ray diffraction in crystals with defects *Acta Crystallogr.*, 1971, vol. 27, pp. 421–430. DOI: 10.1107/S0567739471000962
12. Afanas'ev A. M., Aleksandrov P. A., Imamov R. M. Rentgenovskaja strukturnaja diagnostika v issledovanii pripoverhnostnyh sloev monokristallov. M.: Nauka, 1986, 96 p. (In Russian).
13. Kato N. Perdellösung fringers in distorted crystals. II. Application to two-beam cases. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1964, vol. 19, no. 1, pp. 67–77. DOI: 10.1143/JPSJ.19.67
14. Suvorov E. V., Smirnova I. A. A new approach to understanding the mechanisms of diffraction imaging of dislocations in X-ray topography. *Technical Physics Letters*, 2012, vol. 38, no. 11, pp. 991–994. DOI: 10.1134/S1063785012110132
15. Taupin D. Theorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux deforms. *Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst.*, 1964, vol. 87, no. 2, pp. 469–511. DOI:10.3406/bulmi.1964.5769
16. Bowen D. K., Tanner B. K. High resolution X-ray diffractometry and topography. CRC Press, 1998, 252 p.
17. Bublik V. T., Shherbachev K. D., Voronova M. I., Mil'vidskij A. M. *Difrakcionnye metody izuchenija materialov i pribornyh struktur : ionnaja implantacija: ucheb. posobie*. M.: Izd. dom MISiS, 2013. 67 p. (In Russian).
18. Wie C. R., Tombrello T. A., Vreeland T. Dynamical x-ray diffraction from nonuniform crystalline films: Application to x-ray rocking curve analysis. *J. Appl. Phys.*, 1986, vol. 59, no. 11, pp. 3743–3746. DOI: 10.1063/1.336759
19. Pinsker Z. G. Dinamicheskoe rassejanie rentgenovskih luchej v ideal'nyh kristallah. M.: Nauka, 1974, 368 p. (In Russian).
20. Kitajgorodskij A. I. Rentgenostrukturnyj analiz. M.; L.: Gos. izd-vo tehn.-teor. lit., 1950, 650 p. (In Russian).
21. Korkishko Y. N., Fedorov V. A. Structural phase diagram of $\text{H}_x\text{Li}_{1-x}\text{NbO}_3$ waveguides: The correlation between optical and structural properties. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron*, 1996, vol. 2 (2), pp. 187–196.
22. Zhundrikov A. V., Kichigin V. I., Petuhov I. V., Shevcov D. I. Processy starenija i izmenenija struktury protonoobmennyh volnovodov v kristallah niobata litija. *Trudy MAI*, 2011, vol. 42, pp. 1–9. (In Russian).
23. Kolosovskij E. A., Petrov D. V., Carev A. V. Numerical method for the reconstruction of the refractive index profile of diffused waveguides. *Soviet Journal of Quantum Electronics*, 1981, vol. 11 (12), pp. 1560–1566. DOI: 10.1070/QE1981v011n12ABEH008650
24. Ostafiychuk B. K., Yaremiy I. P., Fedoriv V. D., Kravets V. I., Kotsubunskiy V. O., Morushko O. V. Possibility of one-valued definition of a relative modification of interplanar distance profiles in surface layers of single crystals from data of a two-crystalline X-ray diffractometry. *Physics and Chemistry of Solid State*, 2002, vol. 3, no. 1, pp. 148–153.

Просьба сослаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Семенова О. Р., Сосунов А. В., Чуракова А. И. Моделирование кривых дифракционного отражения от протонообменных слоев монокристалла ниобата лития // Вестник Пермского университета. Физика. 2020. № 4. С. 17–28. doi: 10.17072/1994-3598-2020-4-17-28

Please cite this article in English as:

Semenova O. R., Sosunov A. V., Churakova A. I. Modelling of the X-ray diffraction curves from the proton-exchange layers of a lithium niobate monocrystal. Bulletin of Perm University. Physics, 2019, no. 1, pp. 17–28. doi: 10.17072/1994-3598-2020-4-17-28