

РАРАНСЬКИЙ М.Д., ФОДЧУК І.М., БОРЧА М.Д.,
КРИЦУН І.І., МІХАЛЬОВ І.В.

АНОМАЛЬНЕ ПРОХОДЖЕННЯ ПРИ ТРЬОХВИЛЬОВІЙ РЕНТГЕНІВСЬКІЙ ДИФРАКЦІЇ В ДЕФОРМОВАНОМУ ПРИПОВЕРХНЕВОМУ ШАРІ

Представляється метод визначення компонент тензора деформацій для оцінки напруженого стану реальних кристалів на основі багатохвильової дифрактометрії. Досліджено вплив величини і напрямку деформацій на зміну місцеположень багатохвильових максимумів.

Одночасна дифракція рентгенівських променів від кількох по різному орієнтованих кристалографічних площин приводить до збільшення кількості дифрагованих хвиль і тому супроводжується, як правило, якісними і кількісними змінами в процесах дифракції [1-3]. Це і обумовило нові можливості для структурних досліджень реальних кристалів методами багатохвильової дифракції.

Експериментальні дослідження впливу акустичної деформації на поведінку багатохвильових максимумів в ефекті Ренінгера [1] виявили високу чутливість його до слабких деформацій [2,3]. При цьому змінювались кутове положення ψ , інтенсивність і напівширина піків. Розглянемо спосіб визначення кількісних значень деформації з аналізу лише однієї багатохвильової дифрактограми.

Введемо наступні позначення: $\mathbf{a}_i^{*'} -$ базисні вектори оберненої ґратки ідеального кристалу, $\mathbf{a}_j^{*'} -$ деформованого, а вектори дифракції \mathbf{H}_n представимо таким чином [1]:

$$\mathbf{H}_n = h_n \mathbf{a}_i^* \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1)$$

де $h_n -$ індекси Мілера. Для визначення постійної ґратки кубічного

кристалу використаємо наступне співвідношення [1]:

$$\cos 2\psi = \frac{(\mathbf{H}_m \cdot \mathbf{H}_{mc})}{\sqrt{4/(\lambda^2 \cdot H^2) - 1 \cdot |\mathbf{H} \times \mathbf{H}_m|}} \quad (2)$$

Скалярні і векторні добутки в (2) містять величини $x_k = \mathbf{a}_i^* \cdot \mathbf{a}_j^*$, які необхідно визначити для деформованого кристалу (\mathbf{a}_i^* і \mathbf{a}_j^* в певній точці такого кристалу невідомі). Міжпікову кутову відстань ψ у формулі (2) можна представити у вигляді такої функції:

$$\psi = f(x_1, x_2, \dots, x_6) \quad (3)$$

Для знаходження компонент тензора деформацій необхідно знайти зміну кутової відстані Δf між відповідними багатохвильовими максимумами та розв'язати систему з шести рівнянь типу (3). Доцільно здійснити перехід від системи нелінійних рівнянь (3) до системи лінійних неоднорідних рівнянь:

$$\Delta f = \frac{\partial f}{\partial x_1} \cdot \Delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \cdot \Delta x_2 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_6} \cdot \Delta x_6 \quad (4)$$

Похідні $\partial f / \partial x_i$ визначаються аналітично, для чого були введені такі позначення:

$$u_m = hk_m - kh_m, \quad v_m = hl_m - lh_m, \quad w_m = kl_m - lk_m,$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t_1 = h_m(h_m - h) \\ t_2 = k_m(h_m - h) + h_m(k_m - k) \\ t_3 = l_m(h_m - h) + h_m(l_m - l) \\ t_4 = k_m(k_m - k) \\ t_5 = l_m(k_m - k) + k_m(l_m - l) \\ t_6 = l_m(l_m - l) \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} s_1 = h^2 \\ s_2 = 2hk \\ s_3 = 2hl \\ s_4 = k^2 \\ s_5 = 2kl \\ s_6 = l^2 \end{array} \right. ,$$

$$\left\{ \begin{array}{l} q_1 = u_m^2 x_4 + 2u_m v_m x_5 + v_m^2 x_6 \\ q_2 = -2u_m^2 x_2 - 2u_m v_m x_3 + 2u_m w_m x_5 + 2v_m w_m x_6 \\ q_3 = -2u_m v_m x_2 - 2u_m w_m x_4 - 2v_m^2 x_3 - 2v_m w_m x_5 \\ q_4 = u_m^2 x_1 - 2u_m w_m x_3 + w_m^2 x_6 \\ q_5 = 2u_m v_m x_1 + 2u_m w_m x_2 - 2v_m w_m x_3 - 2w_m^2 x_5 \\ q_6 = v_m^2 x_1 + 2v_m w_m x_2 + w_m^2 x_4 \end{array} \right. .$$

Функцію $f(x_1, \dots, x_6)$ можна представити таким чином:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_6) = \frac{T}{\sqrt{S \cdot Q}}, \quad (5)$$

де $T = (\dot{\mathbf{H}}_m \cdot \dot{\mathbf{H}}_{mc})$, $S = \frac{4}{\lambda^2 \cdot H^2} - 1$, $Q = |\dot{\mathbf{H}} \times \dot{\mathbf{H}}_m|^2$. Тоді:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{T^2}{S \cdot Q}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{S \cdot Q}} \cdot \left(t_i + \frac{2 \cdot T \cdot s_i}{S \lambda^2 H^4} - \frac{T \cdot q_i}{2Q} \right). \quad (9)$$

Систему рівнянь (4), яка складається з шести рівнянь можна розв'язати ітераційним методом Гаусса [3]. В якості нульового наближення вибирались значення x_k , які відповідають ідеальному кристалу.

Згідно до розробленого алгоритму проведено моделювання впливу слабких деформацій ($\Delta d/d \sim 10^{-5}$) на зміну кутових положень багатохвильових дифракційних максимумів на сфері обмеження, проекції яких на екваторіальну площину відображає багатохвильова дифрактограма. Таке моделювання впливу величини та напрямку деформацій на розміщення дифракційних максимумів дозволяє при аналізі експериментальних даних визначати їх зміщення $\Delta\psi$ й вибрати оптимальні по чутливості до деформацій дифракційні максимуми.

Для проведення аналізу геометрії просторових зміщень дифракційних піків представимо схематично на рис.1 сферу обмеження. При зміщенні атомів у вказаних напрямках змінюється величина кута ψ . Для цього було проведено ряд детальних розрахунків при застосуванні ЕОМ.

Зміна кутової відстані між максимумами ψ аналізувалась в залежності від величини і напрямку зміщення атомів в ґратці. Виявилось, що для максимумів, що мають мінімальне значення ψ (тобто найбільш спектральночутливих) чутливість до зміни періоду ґратки залежить від напрямку дії деформації. Якщо напрямок деформації близький або співпадає з нормаллю до відбиваючої площини або до площини зв'язуючого відбивання,

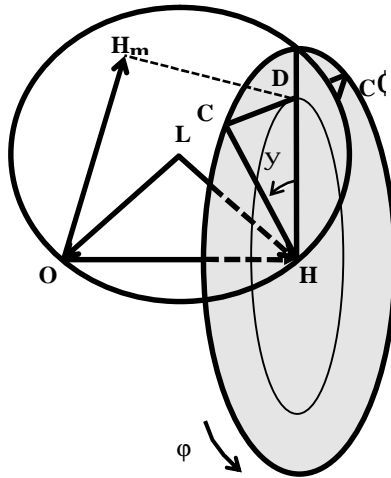


Рис.1. Схема азимутального сканування в оберненому просторі та проекції вектора дифракції на коселівську площину при вході і виході вузла оберненої ґратки на сферу Евальда.

то для відповідних дифракційних максимумів спостерігається найбільша зміна ψ . Це слідує з модельних представлень на рис.2-3. Розрахунки проводились для базисних відбивань (600) і (222) кристалу Si в Cu K_α -випромінюванні при деформаціях $e = \Delta a / a = 1.86 \cdot 10^{-5}$.

На рис.2-3 схематично показано вплив величини і напрямку ϵ на зміну форми деякої «ефективної» поверхні. Вважається, що дана поверхня в недеформованому кристалі представляє собою сферу, кожна точка якої відповідає певному напрямку вектора дифракції. Для відображення просторового кутового зміщення дифракційних максимумів, довжини відповідних векторів дифракції змінювались на величину, пропорційну $\Delta\psi$. В цілому спостерігається спотворення форми вихідної сфери. Проте таке викривлення не є однозначним. Спільним для всіх поверхонь є те, що найбільша зміна їхньої форми має місце в напрямку тих векторів дифракції, які найбільш спектрально чутливі, і крім того, близькі до напрямку деформації.

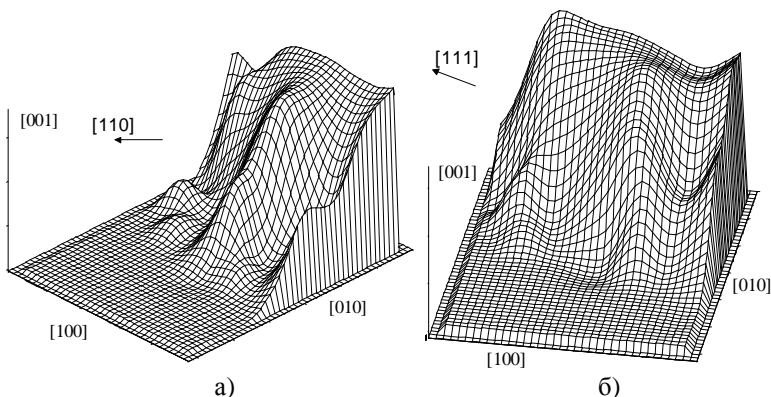


Рис. 2. Модельне представлення впливу направленої деформації. Кристал Si, CuK_α випромінювання, базисне відбивання (600).

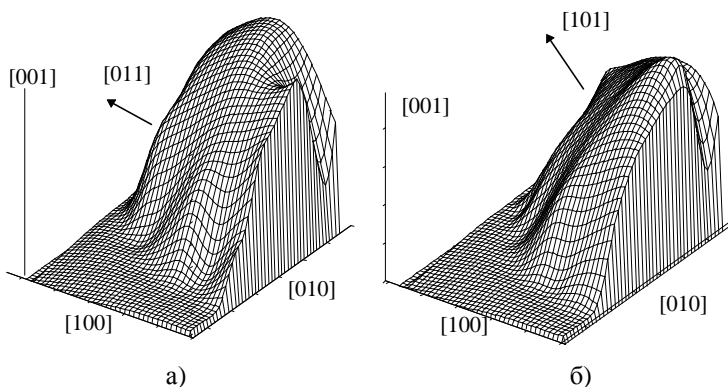


Рис. 3. Модельне представлення впливу направленої деформації. Кристал Si, CuK_α випромінювання, базисне відбивання (222).

При використанні в якості базисного відбивання заборонене відбивання типу (600) в напрямках [001] і [101] найбільш чутливі до деформації є структурноеквівалентні відбивання $(31\bar{5})$, $(3\bar{1}5)$, $(3\bar{1}\bar{5})$, $(31\bar{5})$, а у напрямку [110] - (351) , $(35\bar{1})$, $(3\bar{5}1)$, $(3\bar{5}\bar{1})$. Відповідно, для даних структурно еквівалентних максимумів спостерігаються і найбільші кутові відхилення $\Delta\psi$, проте, що характерно, не для всіх однакові. При деформаціях в напрямку [111] відстань між будь-

якими двома сусідніми атомами змінюється однаково по всіх напрямках в площині (111). Тому для відповідної групи піків кутове зміщення $\Delta\psi$ однакове.

При використанні в якості базисного відбивання заборонене структурою відбивання (222) теж спостерігається полярність в зображеннях відповідних кутових зміщень дифракційних максимумів, що також пов'язана з напрямком і величиною деформації (рис.3).

Таким чином, найбільшу зміну кута ψ виявляють ті дифракційні максимуми, для яких вектор дифракції даного або об'єднаного відбивання близький по напрямку до вектора деформації.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах.-М.: Мир, 1987.-332 с.
2. Кшевецкий С.А., Стецко Ю.П., Шелудько С.А. Многоволновой дифрактометрический метод определения фазовых инвариантов. // Кристаллография.-1987.-**32**, вып.2.-С.308-310.
3. Определение напряженного состояния и тензора деформаций в кристаллах методом многоволновой дифракции / Раранский Н.Д., Фодчук И.М., Борча М.Д., Кшевецкая М.Л. // Металлофизика и новейшие технологии.-1995.-**17**, №6.-С.35-39.

SUMMARY

RARANSKY M.D., FODCHUK I.V., BORCHA M.D.,
KRYTSUN I.I., MIKHALEV I.V.

X-RAY MULTIPLE TENSOMETRY OF DEFORMATION DISTRIBUTION IN REAL CRYSTALS

The method of determination the deformation tensor components for valuation of a real crystals strains on the basis of multiple diffractometry is represented. Influence of deformation value and direction on change of multiwave maxima sites is investigated.