

МЕХАНІЗМИ ФОРМУВАННЯ РЕНТГЕНОДИФРАКЦІЙНОГО КОНТРАСТУ ДИСЛОКАЦІЇ ДОВІЛЬНОЇ ОРІЄНТАЦІЇ

З допомогою чисельного рішення рівнянь Такагі досліджено вплив стоячої поперечної ультразвукової хвилі на формування зображення нахиленої дислокації в кристалі Si. Розв'язки отримані за алгоритмом із змінним кроком інтегрування по всій палатці Бормана.

Якщо в кристалі присутні неоднорідності у вигляді локальних або розподілених по об'єму пружних деформацій, то характер розсіювання рентгенівського хвильового поля в кристалічній ґратці можна описати рівняннями Такагі [1]. Традиційно чисельний розв'язок рівнянь Такагі проводиться методом кінцевих різниць на сітці з постійним кроком інтегрування, що не завжди оправдано. Використання алгоритму інтегрування із змінним кроком дозволяє пристосувати крок інтегрування до локальних змін амплітуд хвильових полів у будь-якій точці всередині палатки Бормана. Застосування методу спроб та помилок на кожному кроці інтегрування для пристосування сітки інтегрування до локальних дифракційних умов, приводить до ускладнення алгоритму і потребує нераціонально великого часу при розрахунках. Іншим, більш перспективним і ефективним методом чисельного рішення задач розповсюдження рентгенівських променів в реальних кристалах є побудова сітки інтегрування, що базується на попередньому знанні дифракційних та геометричних умов [2].

Розташування екстинкційних смуг по товщині досконалого кристалу є добрим критерієм визначення змін осциляцій амплітуд хвильових полів D_0 , D_h . Вони отримуються через нулі J_0 -функції Беселя. Використаємо наступне асимптотичне наближення, яке є справедливим, окрім першого нуля:

$$J_0(\xi) \approx \sqrt{2/\pi\xi} \cos\left(\xi - \frac{\pi}{4}\right), \quad (1)$$

де ξ - координата вздовж вихідної поверхні кристалу. Вузли сітки інтегрування розташовуються вздовж ξ . Їх щільність змінюється таким чином, щоб забезпечувалась плавність зміни J_0 між двома нулями. По таким точкам будуються характеристичні лінії, паралельні $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_h$. Вузли в глибині кристалу на сітці інтегрування знаходяться на перетині цих ліній. Біля країв палатки Бормана кроки інтегрування мають бути досить малі і повинні збільшуватись посередині, де амплітуди хвильових полів змінюються повільно. Верхні і нижні значення кроків сітки $p = \Delta/2 \operatorname{tg} \theta \in$ функціями дифракційних умов, де Δ - відстань між двома послідовними точками вздовж осі ξ . Точність розрахунку задовільна, якщо Δ змінюється від $\Lambda/15$ до $\Lambda/30$ (Λ - екстинкційна довжина). Цей факт визначено з розрахунку великої кількості рентгенодифракційних зображень і оцінено згідно (1). Так як взаємодія дефектів з рентгенівським полем достатньо слабка поблизу \mathbf{s}_h -краю палатки Бормана, то там кроки p менші порівняно з \mathbf{s}_0 -краєм.

Якщо дефект перетинає \mathbf{s}_0 напрямком, то амплітуди хвильових полів дуже суттєво змінюються, що проявляється в появі на топограмах прямого зображення рис.2а. Такий контраст виникає від ділянок кристалу, де справедливе кінематичне наближення теорії розсіювання рентгенівських променів. Розмір цього зображення можна оцінити, розглянувши області, де розорієнтація відбиваючих поверхонь більша, ніж півширина кривої гойдання:

$$\Delta\theta \geq \frac{2}{\sin(2\theta)} \sqrt{\gamma_h / \gamma_0} \sqrt{\chi_h \chi_h^-} .$$

Так як розорієнтація сітки площин задається через

$$\Delta\theta = \frac{1}{K \sin(2\theta)} \frac{\partial(h\mathbf{U}(\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_h))}{\partial \mathbf{s}_h} ,$$

то кроки інтегрування зменшуються там, де

$$\left| \frac{\partial h\mathbf{U}(\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_h)}{\partial \mathbf{s}_h} \right| \geq 3K \sqrt{\gamma_h / \gamma_0} \sqrt{\chi_h \chi_h^-} . \quad (2)$$

\mathbf{h} - вектор дифракції, \mathbf{U} - вектор зміщення від дефекту, K - модуль

хвильового вектору рентгенівського променя в вакуумі, $\chi_h \cdot \chi_{\bar{h}}$ - Фур'є-поляризуємості кристалу.

Алгоритм з постійним кроком не в змозі врахувати зміну граничних умов вздовж \hat{s}_0, \hat{s}_h , а інтенсивність розсіяння швидко спадає біля країв палатки Бормана. Експериментальний розподіл інтенсивності прямого зображення більш узгоджений з денситометричними вимірами для алгоритму із змінним кроком. Це демонструє його переваги для моделювання секційних топограм. Інша перевага алгоритму із змінним кроком в тому, що зменшення кількості вузлів на сітці інтегрування, веде до значного прискорення розрахунків. Крім того вибір кроків не являє собою вже компроміс між часом розрахунку і точністю.

Рис.1. Чисельне моделювання 72° -дислокації в кристалі Si. Відбивання (220), $\text{MoK}\alpha$ -випромінювання. Координати точок A {34;285.5;187}, B {-60;-16;805.2} мкм.

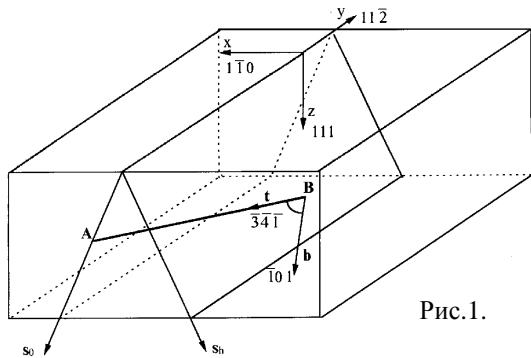


Рис.1.

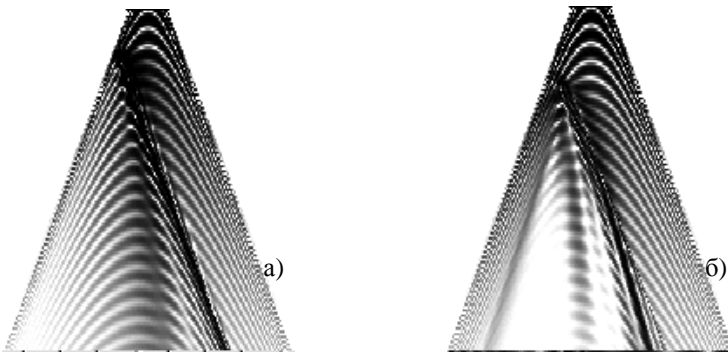


Рис.2. Перетин дислокації і площини дифракції
а) на перетині з \hat{s}_0 ; б) в центрі палатки.

Екстинкційні модуляції інтенсивності, як слідує з рис.2, притаманні не тільки старому хвильовому полю, а можуть виникати і в новонароджених полях. В реальних умовах на перший план частіше виходять ефекти інтерференції блохівських хвиль, які слабо поглинаються і належать як до нових, так і до старих полів. Ці ефекти не зникають навіть за умов сильного поглинання і обумовлюють виникнення характерного смугастого контрасту, де кожна смуга відповідає кратній 2π різниці фаз між блохівськими хвилями старого і нового полів. В залежності від геометрії розташування дислокацій та їх інтерференційних характеристик ці смуги можуть мати різну форму. Для випадку орієнтації дислокації нахиленої до площини дифракції нове хвильове поле створює складну дифракційну картину трикутної форми на вихідній поверхні. Утворені при взаємодії старих і нових хвильових полів інтерференційні смуги, розташовані в даній області і мають серповидну форму, причому їх краї асимптотично наближаються до сторін трикутника (рис.3,4). Дана інтерференційна картина по зовнішньому вигляду нагадує секційне зображення дефекту пакування [2].

Ультразвукова деформація моделювалась синусоїдальним спотворенням кристалічної ґратки. Параметрами ультразвуку є довжина хвилі λ_s і амплітуда W . Методика розрахункового експерименту в умовах ультразвукового впливу на рентгенівську дифракцію описана в [3].

Аналіз розрахункових топограм (рис.4а) показує, що в довгохвильовій області акустичних довжин хвиль суттєвих змін зображення та розмірів трикутника динамічного контрасту не відбувається, окрім незначних змін в періодах інтерференційних смуг. У резонансному випадку з ростом W спочатку має місце деяке покращання видимості екстинкційних модуляцій інтенсивності нового та старого полів. При цьому, в центрі трикутника значно (в декілька разів) зростає їх інтенсивність. Подальше зростання величини амплітуди коливань (до $W=10^{-9}$ см) (рис.4б) приводить до пригнічення міжвіткового розсіяння, або, іншими словами, проміжного зображення всередині трикутника. В загальному його окреслення на тлі різних трансформацій товщинних осциляцій секційної топограми

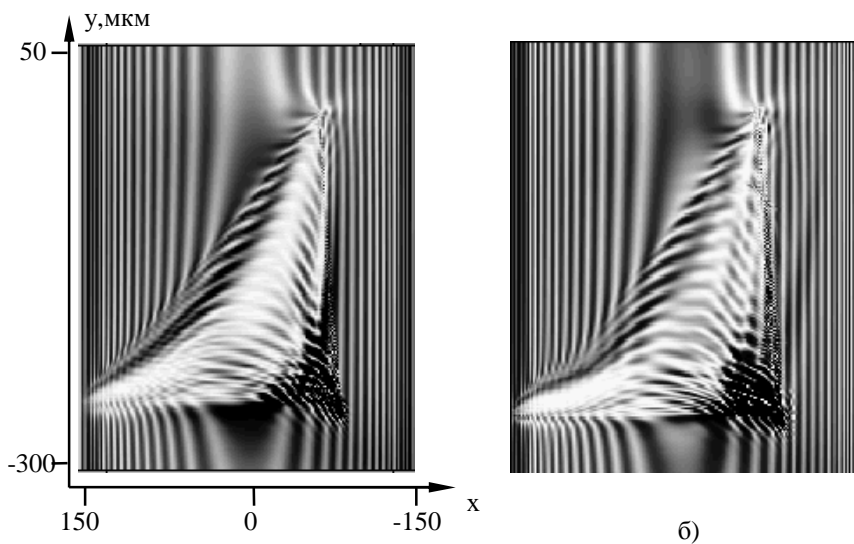


Рис.3. Розрахункова секційна топограма 72° -ної дислокації. МоК $_{\alpha}$ -випромінювання, відбивання (220).
 а) алгоритм з постійним кроком; б) алгоритм із змінним кроком.

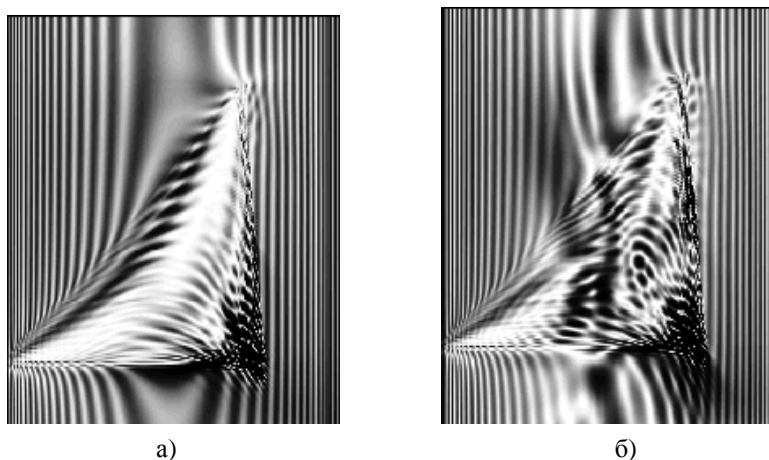


Рис.4. Розрахункова секційна топограма 72° дислокації (умови рис.3б). Параметри ультразвукового поля:
 а) $\lambda_s=3\Lambda$, $W=10^{-2}\text{\AA}$; б) $\lambda_s=\Lambda$, $W=10^{-1}\text{\AA}$.

має тенденцію до розмиття. При подальшому збільшенні W проміжне зображення зникає одночасно з динамічним зображенням, а характер міжвіткового розсіяння суттєвим чином змінюється тільки в резонансному випадку акустичної деформації.

Таким чином, використання ультразвукового деформаційного поля, як своєрідного зонду, обумовлює кероване підсилення неоднорідностей сумарного розорієнтаційного поля. Це приводить до зародження нових хвильових полів, які інтерферуючи із старими полями, утворюють складну дифракційну картину. Застосування алгоритму із змінним кроком інтегрування надає можливість детально визначити особливості формування дифракційного контрасту дислокацій, які можуть бути довільно орієнтовані в об'ємі кристалу.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystals // Phys.Stat.Sol.-1969.-**26**, №5.-P.1239-1253.
2. Epelboin Y. Simulation of X-ray topographs // Mater. Sci. and Eng.-1985.-**73**.-P.1-43.
3. Паранский Н.Д., Фодчук И.М., Новиков С.Н. Влияние акустических деформаций на формирование дифракционного контраста дислокаций в Si // Металлофизика.- 1994.- **16**,№4.-С.27-32.

SUMMARY

NOVIKOV S.M.

FORMATION MECHANISMS OF X-RAY DIFFRACTION PATTERN FOR DISLOCATION OF ARBITRARY ORIENTATION

Influence of a coincident cross ultrasonic wave on image formation of the inclined dislocation in the Si crystal is investigated by the numerical solution of Takagi equations. The solutions are received by algorithm of integration on all Borrmann fan with a varying step.