© 1999 р. Л.Л.Гультай, М.Д.Борча, І.М.Фодчук, М.Д.Раранський

Чернівецький державний університет ім.Ю.Федьковича, Чернівці

ВПЛИВ ПЕРІОДИЧНИХ СПОТВОРЕНЬ КРИСТАЛУ НА ТРИХВИЛЬОВЕ АНОМАЛЬНЕ ПРОХОДЖЕННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ

Проведено моделювання впливу періодичного поля акустичних деформацій на трихвильову рентгенівську дифракцію у Ge. Виявлені певні закономірності змін зображень трихвильових областей розсіяння в залежності від трихвильової конфігурації та довжини акустичної хвилі.

Influence of periodic field of acoustic strains on three-wave x-ray diffraction in Ge is modulated. Some laws of image changes of three-wave scattering areas depending on three-wave configuration and acoustic wave length are revealed.

Алгоритм розв'язку рівнянь Такагі у випадку багатохвильової дифракції для загального вигляду поля деформацій $\vec{U}(\vec{r})$ досі ще не розроблений [1]. Проте у деяких випадках, як показано у роботах [1-5], багатохвильова дифракція (зокрема, ефект багатохвильового аномального проходження рентгенівського випромінювання) виявляється більш чутливою до деформацій, ніж двохвильова. Це спонукало до проведення досліджень впливу періодичного згину атомних площин на топографічні зображення перетинів двохвильових областей розсіяння і на ефект аномального багатохвильового проходження рентгенівського випромінювання у досконалих кристалах германію.

Як відомо, взаємодія одномірного поля деформацій з рентгенівськими полями багатохвильової симетричної дифракції описується системою звичайних диференціальних рівнянь, які у матричному вигляді представляються так (позначення загальноприйняті) [6, 8]:

$$\frac{d\hat{E}}{dz} = (\hat{A} - \hat{\alpha}(z))\hat{E}(z).$$
(1)

Для Лауе *N*-дифракції граничні умови мають такий вигляд

$$\hat{E}(0) = \hat{E}_a , \qquad (2)$$

а елементи матриці α̂, в які входять кутові локальні розорієнтації атомних площин, такий:

$$\alpha_m(z) = \alpha_m^0 - 2\pi \frac{d}{dz} \left(\vec{H}_m \vec{U}(z) \right) = \alpha_m^{(0)} - \alpha'_m,$$

де $\vec{U}(\vec{r}) = (U_x, 0, 0)$. При акустичному полі змі-

щень $U_x = D\cos(Bz + \psi)$, $\psi = 0$ або $\pi/2$, D=ma, $B=2\pi/(n\Lambda)$, a - період гратки, Λ - екстинкційна довжина.

У випадку трихвильових дифракцій:

$$\begin{aligned} \alpha_H &= \alpha_H^0 - p_H \cdot \sin(Bz); \\ \alpha_K &= \alpha_K^0 - p_K \cdot \sin(Bz), \end{aligned}$$
де $p_H = P\cos(\alpha), \ p_K = P\cos(\alpha - \varphi), \ \alpha$ - кут між
 \vec{H}_H і $\vec{H}_K, \ P = DB \lambda \gamma_0 \left| \vec{H}_m \right|.$ При цьому

$$\alpha_m^0 = 2\lambda \cdot \left[(\vec{H}_m \cdot \vec{e}_1) \Delta \varphi + (\vec{H}_m \vec{e}_2) \Delta \theta \right],$$

де $\vec{e}_1 = \lambda [\vec{K}_0 \times \vec{n}]$ і $\vec{e}_2 = [\vec{e}_1 \times \vec{K}_0]$; \vec{K}_0 - хвильовий вектор, що задовільняє умову точного положення відбивання; кути $\Delta \theta$ і $\Delta \phi$ характеризують відхилення кристалу від \vec{K}_0 уздовж векторів \vec{e}_1 , \vec{e}_2 , відповідно. Хвильовий вектор акустичної хвилі спрямований уздовж осі *Oz*, яка співпадає з нормаллю до поверхні і направлена всередину кристалу, кут ϕ задає орієнтацію вектора поляризації акустичної хвилі $\vec{U}(\vec{r})$ відносно вектора \vec{H}_H .

Вибраний тип спотворень є одним із найбільш складних, оскільки точка збудження дисперсійної поверхні багаторазово проходить через трихвильову область розсіяння. В якості критерію поділу спотворень на слабкі і сильні виступало співвідношення між ефективною довжиною деформації λ_u і Λ [7]. Дослідження проведені для трьох областей довжин хвиль ультразвуку: короткохвильової - $\lambda_u = 0.5\Lambda$, резонансної - $\lambda_u = \Lambda$ і довгохвильової - $\lambda_u = t$, де t - товщина). Розглянуті трихвильові ($\overline{1}11,111/200$), ($111,\overline{1}\overline{1}1/220$), ($220,\overline{2}02/02\overline{2}$) дифракції Си K_{α} -випромінювання у випадку $\mu t > 10$, де μ - нормальний коефіцієнт поглинання (рис.1).

Для зручності аналізу й порівняння з експериментом результати досліджень на рис.1-4 приведені у вигляді двомірних розподілів інтенсивності для заломленої хвилі $I_0(\Delta \varphi, \Delta \theta)$ при двох орієнтаціях вектора зміщень у площині трихвильових векторів дифракції - паралельно і перпендикулярно до зв'язуючого відбивання $\vec{H}_{H-K} = \vec{H}_H - \vec{H}_K$. Такий вибір орієнтацій \vec{U} обумовлений тим, що у першому випадку трихвильова дифракція більш чутлива до деформації, ніж двохвильова [6]. Параметр R характеризує зміну інтенсивності трихвильової області: $R = I^{(3)}/I_{id}^{(3)}$, де $I_{id}^{(3)}$ та $I^{(3)}$ - максимальні інтенсивності ідеального і деформованого кристалу.

Конфігурація (111,111/200) має зв'язуюче відбивання, заборонене структурою. Для Си $K_{\alpha 1}$ випромінювання і положення кристалу, що відповідає точній (111,11/200)-дифракції, хвильові моди, точки збудження яких найближчі до точки Лауе, мають мінімальне поглинання – $\mu_{min}^3 = 0,053\mu_0 = 19 \text{ см}^{-1}$ [2]. Для даної конфігурації різними авторами досить детально досліджено вплив акустичних деформацій на товщинні осцилляції інтенсивності [2-5]. Нами ж показана розгорнута картина впливу акустичних деформацій на багатохвильовий ефект аномального проходження, зручна для порівняння з експериментом.

Для випадку $\vec{U} \parallel \vec{H}_{200}$ умова рентгеноакустичного резонансу виконується при $\lambda_u = 2\Lambda$, а для $\vec{U} \perp \vec{H}_{200}$ при $\lambda_u = \Lambda$ [8]. Крім того, товщина кристалу підібрана таким чином, що резонанс має місце у двох- і трихвильовій областях дифракції. У випадку $\lambda_u = \Lambda$ при збільшенні амплітуди ультразвуку для $\vec{U} \perp \vec{H}_{200}$ на рис.2 спостерігається пригнічення трихвильової області дифракції і поява характерних для даного типу спотворень провалів інтенсивності на двохвильових областях [12]. Зовсім інша картина має місце у випадку $\vec{U} \parallel \vec{H}_{200}$. При слабких деформаціях швидкість подавлення двохвильової дифракції вдвічі перевищує швидкість зменшення інтенсивності трихвильової. Обумовлено це взаємодією рентгенівських пучків, дифрагованих від площин (111) і ($\overline{1}11$). Подальше збільшення амплітуди акустичних коливань призводить також до появи у двохвильових областях розсіяння характерних провалів інтенсивності вздовж короткохвильового краю ліній.

Отримані результати можна пояснити різним ступенем перемішування степеней збудження хвильових полів. При виконанні умови резонансу зміна періоду і амплітуди товщинних осциляцій відбувається у достатньо вузькій області довжин хвиль [7-9]. Періодичне поле впливає, в основному, на період перерозподілу маятникових осциляцій інтенсивності. Треба відзначити, що зі збільшенням параметра деформації P відбувається деякий зсув умови виконання резонансу в область коротких хвиль. Це пов'язано, очевидно, із зменшенням екстинкційної довжини.

У короткохвильовій області ультразвуку топограми розподілу інтенсивності для обох орієнтацій вектора \vec{U} майже ідентичні. При $\lambda_u = t$ відбуваються зміщення і розмиття трихвильових областей розсіяння. Причому вони подавлюються швидше від двохвильових: на 20% для $\vec{U} \perp \vec{H}_{200}$ і на 12% для $\vec{U} \parallel \vec{H}_{200}$.

На відміну від попередньої, $(111,\overline{111},220)$ конфігурація має сильне об'єднане відбивання (220), що суттєво впливає на процеси перерозподілу інтенсивності між дифрагованими хвилями. Коефіцієнт поглинання для слабопоглинаючої моди у трьохвильовій області рівний мінімальному коефіцієнту поглинання відбивання (220) $\mu_{min}^3 = 15 \text{ см}^{-1}$. Для даної конфігурації відсутність підсилення ефекту аномального проходження пояснюється тим, що степені збудження слабопоглинаючих хвильових полів з μ_{min}^3 рівні нулю. Тому на топограмах заломленої хвилі області підсилення відсутні, у той же час як для дифрагованих хвиль такі області спостерігаються і $\mu_{min}^3 = 26 \text{ см}^{-1}$ [2].

Як показано у роботах [10-11], обробка поверхні досліджуваного кристалу може приводити для даної конфігурації як до підсилення аномального проходження, так і до його послаблення. При цьому найбільше підсилення аномального проходження відбувається саме у дифрагованих пучках.



Рис.1. Область трихвильової дифракції для ідеального кристалу: (111, <u>1</u>11/200), товщина кристалу *t*=270 мкм (а); (111, <u>1</u>11/220), товщина кристалу *t*=310,5 мкм (б); (220, 022/202), товщина кристалу *t*=310,5 мкм (в).



Рис.2. Вплив акустичної деформації на (111, 11/200)-дифракцію.



Рис.4. Вплив акустичної деформації на (220, 022 /202)-дифракцію.

Отримані топограми для даного типу спотворень наведені на рис.3. На відміну від попереднього випадку, спостерігається значна трансформація областей дво- і багатохвильового розсіяння. Для $\vec{U} \perp \vec{H}_{220}$ при всіх довжинах ультразвукової хвилі відбувається роздвоєння трихвильової області розсіяння і асиметричне подавлення двохвильових областей. У той же час для U || H₂₂₀ у трихвильовій області розсіяння починає діяти ефект аномального проходження на фоні сильного подавленння двохвильових областей. Особливо це проявляється у випадку $\lambda_u = 0.5\Lambda$, де відношення дво- і трихвильової інтенсивностей становить 0,16. При $\lambda_u = \Lambda$ спостерігається зміщення трихвильової області розсіяння у бік від'ємних значень $\Delta \theta$.

Для конфігурації (202,220/022), як показано у роботах [3,4], ефект аномального проходження не спостерігається. Поскільки у даному випадку дисперсійна поверхня містить точку виродження, то трихвильовий та двохвильовий мінімальні коефіцієнти поглинання дорівнюють: $\mu_{min}^3 = \mu_{min}^2$. Відсутність області аномального проходження рентгенівського випромінювання (рис.1в) для даної конфігурації призводить до простого накладання двох незалежних дифракцій (220) і (202) - відбувається модальне підсилення.

Для даної конфігурації результати моделювання наведені на рис.4. В залежності від орієнтації і типу спотворень відбуваються різні трансформації топографічних зображень. Характер впливу періодичних коливань аналогічний до першого випадку дифракції (рис.2). Слід зазначити, що у нерезонансних випадках проявлення модального підсилення не порушується, а загальне послаблення інтенсивності відбувається швидше, коли $\vec{U} \perp \vec{H}_{220}$: на 24% при $\lambda_u = 0,5\Lambda$ і на 50% при $\lambda_u = t$.

У резонансному випадку спостерігається асиметричне подавлення двохвильових та симетричне подавлення трихвильових областей розсіяння. При $\vec{U} \| \vec{H}_{202}$ відбувається деяке підсилення ($\approx 15\%$) трихвильової області, яка трансформується у витягнуту пляму уздовж напрямку дії деформації. Це обумовлено тим, що при певних значеннях амплітуди ультразвуку розмиття вузлів оберненої гратки настільки значне, що виникають міжвіткові процеси взаємодії, які

приводять до своєрідних перерозподілів інтенсивності між дифрагованими хвилями.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Borrmann C., Hartwig W. Die Absorbtion der Röntgenstrahlen im Dreistrahlfall der Interferenz // Z. Krystallogr. - 1965. - 121, No. 6. - S.401-409.
- Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. - М.: Мир, 1987
- 3. *Takagi S*. Dynamical theory of diffraction applicable crystals with any kind of small distortion // Acta Crystall. 1962. **15**, No.12. P.1311-1312.
- Михайлюк И.П., Козьмик В.Д., Кшевецкий С.А. Аномальное прохождение рентгеновских лучей при трехволновой дифракции (220, 202). Свойства дисперсионной поверхности, ИКП и степеней возбуждения волновых полей // УФЖ. - 1978. - 23, №1. - С.25-30.
- Михайлюк И.П., Кшевецкий С.А., Остапович М.В., Поляк М.И. Многоволновые маятниковые полосы запрещенного отражения (220) монокристалла Ge // УФЖ. - 1982. - 27, №3. - С.404-408.
- Раранский Н.Д., Остапович М.В., Фодчук И.М., Остапович В.Н. Трехволновые маятниковые осцилляции в кристаллах с эквидистантно изогнутыми отражающими плоскостями // УФЖ. - 1986. - №7. -С.1080-1088.
- 7. *Тихонова Е.А.* Динамическое рассеяние на эквидистантно изогнутых отражающих плоскостях. 1. Уравнения // Металлофизика. - 1980. - **2**, №1. -С.32-43.
- Раранский Н.Д., Фодчук И.М., Струк Я.М., Новиков С.Н. Трехволновая (111,111) дифракция рентгеновских лучей в кристалле Ge с периодическим полем смещений // Металлофизика. - 1988. - 10, №5. - С.59-63.
- Раранский Н.Д., Фодчук И.М., Струк Я.М., Сергеев В.Н., Новиков С.Н. Аномальное прохождение рентгеновских лучей в случае трехволновой (111,111) дифракции в кристалле с акустическим полем смещений // Кристаллография. - 1989. - 34, №6. -С.1563-1565.
- 10. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А., Рунова Т.К. Влияние обработки граничных поверхностей на многоволновую дифракцию в кристаллах со структурой алмаза // Кристаллография. - 1981. - 26, №6. -С.1320-1322.
- 11. Авдюхина В.М., Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Исследование упругой деформации в кристаллах GaAs и Ge // Пленарные доклады Всесоюзного совещания "Проблемы рентгеновской диагностики совершенства кристаллов". - Ереван: ЕрГУ, 1985. - С.19-20.
- Энтин И.Р. Эффект резонансного подавления ультразвуком аномального прохождения рентгеновских лучей // Письма в ЖЭТФ. - 1977. - 26, №5. -С.392-395.

Науковий вісник Чернівецького університету. 1999. Випуск 50. Фізика.