

ТОВЩИННІ ОСЦИЛЯЦІЇ ІНТЕНСИВНОСТІ У ДЕФОРМОВАНИХ КРИСТАЛАХ КРЕМНІЮ

Експериментально і на підставі чисельного розв'язку рівнянь Такагі досліджено вплив слабких і сильних спотворень, утворених дією зосередженого навантаження, на формування маятникових осциляцій інтенсивності у клиноподібному й плоскопаралельному кристалах кремнію. Показано, що у випадку слабких деформацій, на формування маятникових смуг впливають процеси розсіяння, які обумовлюють вигин і фокусування (дефокусування) траєкторій рентгенівських променів при проходженні через середовище зі змінним показником заломлення. В області сильних деформацій – процеси міжвіткового розсіювання.

Influences of slight and severe distortions, appearing under a focussed load, on intensity oscillation in thickness of wedge-similar and flat Si crystals are investigated experimentally and by the numerical solution of Takagi equations. It is shown that scattering processes cause the bend and focusing (defocusing) X-ray trace during transmission through an environment with slowly varied refraction parameter in the case of slight distortions. In the region of severe distortions the processes of interbranch scattering take place.

Для дослідження закономірностей і механізмів формування дифракційних зображень маятникових смуг у слабо- і сильно деформованих монокристалах використаний трикристальний рентгенівський LLL-спектрометр із клиноподібним аналізатором. Важливою характеристикою такого приладу є можливість одержати монохроматичні плоскі хвильові пакети після послідовної дифракції падаючого випромінювання у двох плоскопаралельних пластинках.

Поле деформацій у кристал-аналізаторі створювалось дією зовнішньої зосередженої сили P . Схема експерименту представлена на рис.1. Використовувалось $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання, відбивання (220). Експериментальні топограми, отримані при дії зосередженої сили на клиноподібний кристал, представлені на рис.2а, 5.

Теоретичні дослідження впливу зосередженого навантаження на формування маятникових смуг проводилися шляхом чисельного розв'язку системи рівнянь Такагі у наближенні падаючої плоскої хвилі [1]. Розрахунки проведені з використанням методу характеристик, запропонованого у роботі [2].

Дифракційне зображення спотвореної області кристала, як відомо, визначається виглядом функції локальних розорієнтацій $\alpha(\vec{r})$ [1,2]:

$$\alpha(r) = \alpha^{(0)} - 2 \sin \theta \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} - \text{ctg } \theta \frac{\partial u_x}{\partial z} \right), \quad (1)$$

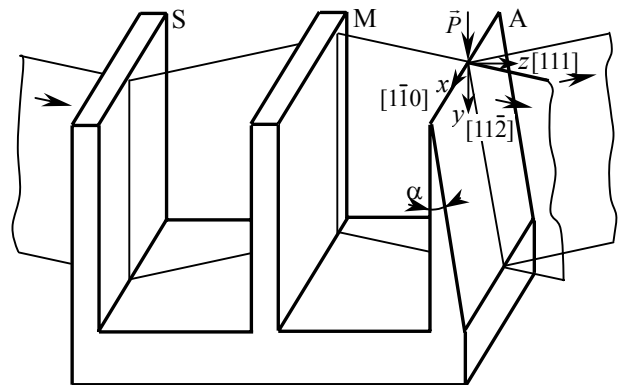


Рис.1. Схема експерименту: початок координат збігається з точкою прикладення сили P , площина xOy збігається з вхідною поверхнею кристала аналізатора (111), вісь Ox антипаралельна вектору дифракції \vec{H} . Сила P діє уздовж напрямку $[11\bar{2}]$. Кут крила $\alpha=2^\circ 30'$.

де $\vec{U}(\vec{r})$ – поле зміщень, що виникає при дії на кристал зосередженої сили P . У розглядуваному випадку це поле задається співвідношенням [3]:

$$U(r) = \frac{P}{4\pi r} \left[\left(\frac{xy}{\mu r^2} - \frac{x}{(\lambda + \mu)(r+y)} \right) i_x + \left(\frac{y^2}{\mu r^2} + \frac{\lambda + 2\mu}{\mu(\lambda + \mu)} \right) i_y + \left(\frac{yz}{\mu r^2} - \frac{z}{(\lambda + \mu)(r+y)} \right) i_z \right], \quad (2)$$

де $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, i_x, i_y, i_z – одиничні орти у напрямку осей координат, μ, λ – пружні константи Ляме.

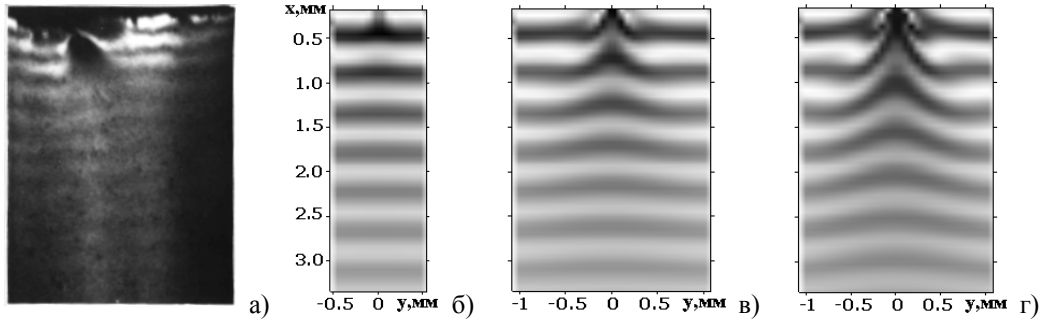


Рис.2. Експериментальна топограма при дії зосередженої сили на клиноподібний аналізатор інтерферометра $P=10p_0$ (а). Розрахункові розподіли інтенсивності $I_h(x,y)$ у випадку $P=3p_0$ (б), $P=9p_0$ (в), $P=15p_0$ (г).

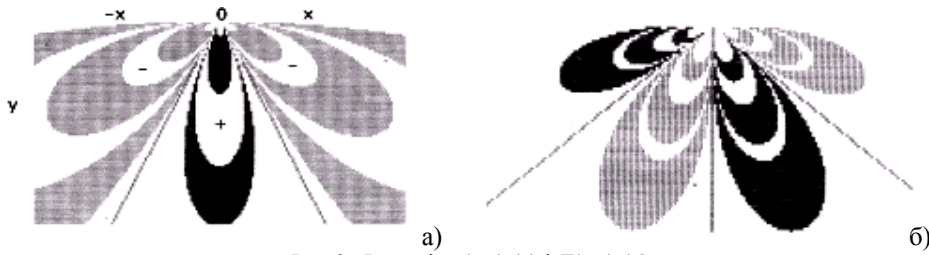


Рис.3. Функції $\alpha(x,y)$ (а) і $F(x,y)$ (б).

Дією зовнішньої зосередженої сили на клиноподібний кристал створювалися такі області спотворень, у межах яких значення функції локальних розорієнтацій змінювалися від $|\alpha(\vec{r})| \geq 0$ до $|\alpha(\vec{r})| \gg |\chi_0|$, де χ_0 – нульова компонента Фур'є-поляризованості кристала. Поступова зміна величини прикладеної зосередженої сили дозволяла керувати розмірами областей різного ступеня спотворень і, отже, більш повно аналізувати динаміку і механізми виникнення дифракційного контрасту у слабо- і сильнодеформованих областях кристала.

Маятникові смуги у слабодеформованому кристалі

Формування дифракційного зображення у пружно деформованих областях кристала суттєво залежить від характеру зміни деформації у кристалі. Якщо характерна довжина зміни спотворень у кристалі набагато більша від екстинкційної довжини, то хвильове поле у кристалі встигає пристосуватися до спотворень відбиваючих площин і основним механізмом формування дифракційного зображення є викривлення траєкторій блохівських хвиль, що беруть початок на різних вітках дисперсійної поверхні [4-7]. Виникаюча внаслідок цього додаткова різниця фаз $\Delta\Phi$ призводить до зсуву вихідних екстинкційних контурів і появи нових. У випадку однорідної деформації різниця фаз виражається співвідношенням [5-7]:

$$\Delta\Phi = \frac{n_0}{2} \sqrt{1 + p^2 + p^{-1} \operatorname{arcsinh}(p)}, \quad (3)$$

де n_0 – порядок інтерференції в ідеальному кристалі, $p = F(x,z)/m$. Параметр p у геометричній оптиці відіграє роль звичайного імпульсу релятивістської частки масою $m = \hbar k \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} / (2 \sin \theta)$, (θ – кут Брега, C – фактор поляризації, \vec{k} – хвильовий вектор). Траєкторії блохівських хвиль у слабо деформованому кристалі визначаються, в основному, характером сили $F(x,z)$, що змінює напрямки їх поширення:

$$F(x,z) = \pm \frac{\pi}{\lambda} \frac{d}{dz} \left(\frac{dx/dz}{\sqrt{1 - (dx/dz)^2}} \right) = \frac{\pi}{4\Lambda} (\partial/\partial z + \partial/\partial x) \alpha(x,z), \quad (4)$$

де Λ – період екстинкційних осциляцій. Співвідношення (4) показує, що період маятникових осциляцій визначається характером зміни поля зміщень як у напрямку проходження енергії – $\partial^2(\vec{H}\vec{U}(\vec{r}))/\partial z^2$, так і у перпендикулярному напрямку – $\partial^2(\vec{H}\vec{U}(\vec{r}))/\partial x^2$.

На рис.3 наведені картини ліній однакових значень $\alpha(x,y)$ і $F(x,y)$. З вигляду $\alpha(\vec{r})$ аналогічна функції локальних розорієнтацій дислокації, що лежить на поверхні кристала і зорієнтована вздовж лінії прикладення сили. Трипелюсткова розетка відповідає областям розтягу-стиску-розтягу, розділених лініями нульових деформацій. Кут між цими лініями визначається, як випливає з (2), пружними постійними кристала. Лінії нульових значень для функції $F(x,y)$ збігаються відпо-

відно з лініями максимальних значень $\alpha(x,y)$. При $F(x,z)>0$, тобто при спаданні $\alpha(\vec{r})$ вздовж напрямку заломленої хвилі, промені, що слабо поглинаються, відхиляються у сторону вектора дифракції, а ті, що сильно поглинаються, – у зворотну сторону. Відзначимо, що у випадку $\alpha=\alpha(x)$ області з від'ємною кривизною функції $\alpha(x)$ впливають на промені, що слабо поглинаються, як збірні лінзи, а на промені, що сильно поглинаються, як розсіюючі. Области з додатною кривизною $\alpha(x)$ здійснюють на хід променів зворотній вплив [9].

Розрахункові картини розподілу інтенсивності у дифрагованому пучку на вихідній поверхні клиноподібного кристалу у випадку різних значень P подані на рис.2б-г. Дані топограми отримані шляхом чисельного розв'язку рівнянь Такагі з функцією $\alpha(\vec{r})$, визначеною співвідношеннями (1,2) при $\alpha^{(0)}=0$.

З поданих на рис.2 топограм слідує, що маятникові смуги реагують на незначні спотворення (величина зосередженої сили подана в одиницях p_0 , де $p_0=\chi_0$) кристалічної ґратки. Спостерігається загальна закономірність для всього поля деформацій – зсув маятникових смуг до точки прикладення сили. В цілому поведінка маятникових смуг у полі дії зосередженої сили значно складніша, ніж у випадку однорідних деформацій [8,9]. Характер поведінки маятникових смуг у різних напрямках від точки прикладення сили істотно різниться: спостерігається одночасно значне зменшення і збільшення відстаней між сусідніми маятниковими смугами – змінюється їх період і розташування стосовно краю клиноподібного кристалу. Ці особливості формування маятникових смуг зумовлені характером зміни деформацій у різних напрямках, тому що в областях із $\alpha(\vec{r})>0$ і $\alpha(\vec{r})<0$ величина зсуву маятникових смуг різна. Якщо у напрямках максимальних значень сили $F(x,y)$ періоди екстинкційного биття зменшуються, тобто їх рух спрямований у товсту частину кристалу, то у напрямку мінімальних значень функції $F(x,y)$ – навпаки, їх рух спрямований у тонку частину кристалу. В цілому, планарний розподіл інтенсивності на експериментальних і розрахункових топограмах збігається з загальним виглядом $\alpha(\vec{r})$.

Відзначимо, що у першому наближенні, у випадку слабких спотворень, для визначення місця розташування екстинкційних смуг можна використовувати таке співвідношення [12]:

$$\Lambda = \Lambda_0 (1 + \alpha^2(\vec{r}))^{-1}. \quad (5)$$

Отже, для слабкодеформованих кристалів із гладким полем зміщень (характерна довжина зміни поля деформацій порядку товщини кристалу) основний внесок у формування товщинних осциляцій вносять процеси розсіювання, що зумовлюють відповідно згин і фокусування (дефокусування) траєкторій рентгенівських променів при проходженні через середовище зі змінним показником заломлення [8].

Випадок сильних деформацій кристала

До цього часу розсіювання рентгенівських променів у сильноспотворених областях кристала неодноразово розглядалося у роботах [7-12]. Якщо геометрична оптика виявилася зручною для опису формування зображення слабких полів деформацій в околі та на значних відстанях від дефектів, то процеси, що відбуваються у його ближньому полі деформацій, потребують для аналізу застосування дифракційної оптики блохівських хвиль математичного апарату, який найбільш повно поданий у роботах [8-10]. При збільшенні значень прикладеної сили P на експериментальних (рис.4) і розрахункових (рис.5) топограмах спостерігається різна швидкість руху маятникових смуг у тонку частину кристалу. Як уже відзначалося, найбільші зміни відстаней між маятниковими смугами відбуваються вздовж напрямків максимальних значень функції $\alpha(\vec{r})$, а дифракційне зображення пружних полів деформацій повторює її. Збільшення деформації або

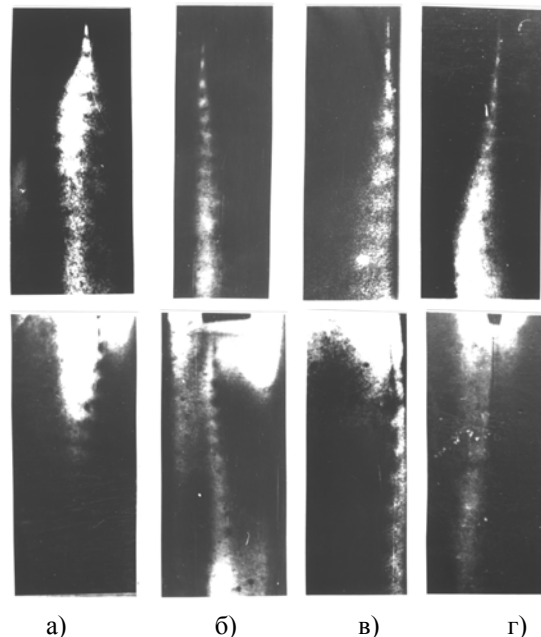


Рис.4. Експериментальні топограми кристала Si, отримані в дифрагованому (верхній ряд) і заломленому пучках при навантаженні на вістря клина - $P=12 p_0$ (а), $P=25 p_0$ (б), $P=35 p_0$ (в), $P=45 p_0$ (г).

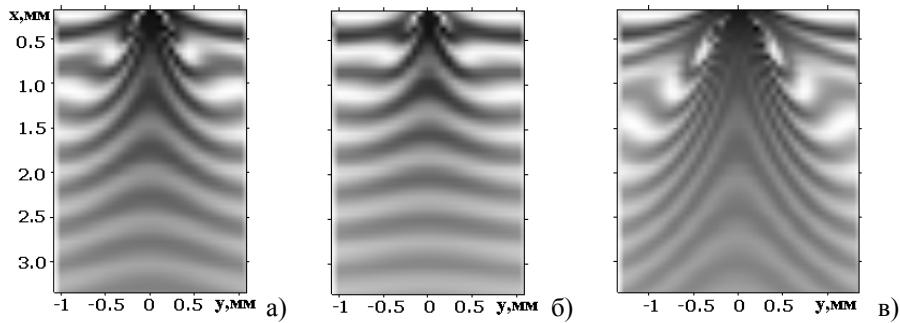


Рис.5. Розрахункові топограми для випадку дії зовнішньої зосередженої сили на клиноподібний кристал при $P=25p_0$ (а), $P=30p_0$ (б), $P=45p_0$ (в).

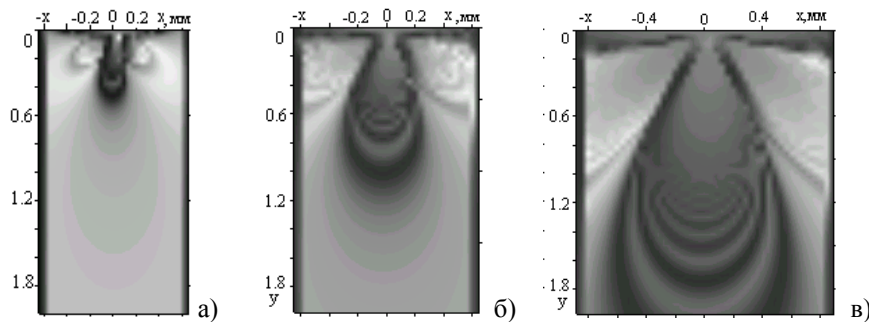


Рис.6. Розрахункові топограми при дії зосередженого навантаження на плоскопаралельну пластину ($\mu t=0,8$) при $P=p_0$ (а), $P=10p_0$ (б), $P=25p_0$ (в).

значень функції розорієнтації призводить до поступового витіснення маятникових смуг з областей кристалу, де $F(x,y)$ максимальна (рис.5а-в). Відзначимо якісну відповідність експериментальних і розрахункових топограм, хоча спостерігаються помітні відмінності в інтенсивностях центральних областей топограм.

В області сильних спотворень, для яких $|\alpha(\vec{r})| \gg |\chi_0|$ повинно спостерігатися порушення динамічного зв'язку між заломленою і дифрагованою хвилями, і зображення у дифрагованому пучку буде визначатися кінематичним розсіянням заломленої хвилі [9]. Дійсно, із зростанням навантаження P відність маятникових смуг далеко від точки прикладення сили погіршується, а при $P=45p_0$ (рис.4г) маятникові смуги зовсім зникають. Проте починаючи з певного рівня деформацій, при якому зміна ефективної розорієнтації дефекту l_{ef} порядку екстинкційної довжини або більша півширини кривої гойдання, поширення рентгенівських променів супроводжується розсіянням між вітками. Іншими словами, у сильнодеформованій області кристала можуть виникати нові хвильові поля з точками збудження, що лежать на іншій вітці дисперсійної поверхні, відмінній від вітки, що відповідає хвилі, яка поширюється [7].

Детальний аналіз, поданих на рис.4,5 топограм, виявляє особливості формування товщинних

осциляцій і зображень пружних полів деформацій у сильно спотворених областях кристала.

По-перше, із ростом сили P у дифрагованому пучку спостерігається звуження центральної області розсіювання вздовж вектора дифракції, контраст меж цієї області помітно посилюється при наближенні до точки прикладення сили. По-друге, існують товщинні осциляції інтенсивності майже від самої точки прикладення сили у напрямку її дії, де $\alpha(\vec{r}) > 0$ і відсутність інтенсивності у дифрагованому пучку у тих областях кристала, де $\alpha(\vec{r}) < 0$. Особливим тут є те, що величина параметру P , оцінена за співвідношенням (2), набагато перевищує допустимі межі значень деформацій, при котрих ще можливе спостереження звичайних маятникових смуг. Як показано у роботах Като [5-7], це значення ефективного параметра деформації повинно бути $p_0 \sim 1,5$. По-третє, збільшення навантаження спочатку призводить до зменшення періодів маятникових смуг (рис.4а-в), а потім, при певному рівні деформації збільшуються як період осциляцій (рис.4г – на 20-30% у порівнянні з рис.4в), так і їх контрастність. Зумовлено це тим, що значні деформації призводять до розмиття вузлів оберненої ґратки, що змінює відстань між дисперсійними вітками. Наслідком таких змін є поява міжвіткових процесів розсіювання, при яких і породжуються хвильові поля, період яких пере-

вищує значення звичайних товщинних осциляцій інтенсивності. По-четверте, спостерігаються взаємно доповнюючі осциляції інтенсивності у дифрагованому і заломленому пучках. Причому зі збільшенням деформації погіршується видність осциляцій у заломленому пучку і вздовж лінії дії сили спостерігається повне перекидання інтенсивності у дифрагований пучок у центрі топограми (рис.4г). Стрілоподібне зображення області осциляцій інтенсивності з різко вираженими краями, що спостерігається у заломленому пучку, зумовлено, очевидно, спільним проявом ефектів міжвіткового розсіяння і повного внутрішнього відбивання дифрагованого випромінювання на симетрично розташованих межах сильнодеформованих ділянок кристалу.

Інтерференційні смуги такої ж природи спостерігаються і при дії зосередженого навантаження на тонку ($\mu t=0,8$) плоскопаралельну пластину (рис.6). Характерно, що зі збільшенням P , поведінка цих смуг істотно відрізняється від звичайних маятникових смуг. Вони набувають U-подібної форми - вершини їх розташовані на лінії дії сили, а опуклості спрямовані до основи кристалу (рис.6).

Необхідно підкреслити принципову відмінність характеру зображення областей із сильними локалізованими спотвореннями й областей зі слабкими спотвореннями, що плавно змінюються. У першому випадку відбувається викид дифрагованого випромінювання зі спотвореної області і деталі зображення залежать від джерела збурення. У другому випадку рентгенівський контраст є прямим відображенням поля деформацій у даній області. Лінії рівної інтенсивності на рис.6 і інтерференційні смуги на рис.4 безпосередньо відтворюють розподіл спотворень. Так як у випадку, що розглядається, функція $\alpha(\vec{r})$ слабо змінюється з товщиною кристалу, то інтерференційні смуги, що спостерігаються на рис.5, 6 можуть бути інтерпретовані як смуги рівної деформації [9]. Появу такого роду "деформаційних" смуг можна пояснити зміною у деформованому кристалі, у порівнянні з ідеальним, фазових співвідношень для хвильових полів, які слабо і сильно поглинаються. Форма цих смуг свідчить про відповідність їх фазових співвідношень характеру зміни поля деформацій, тобто функції локальних розорієнтацій $\alpha(\vec{r})$.

При цьому, можливе виникнення екстинкційних модуляцій у результаті взаємодії старих і нових блохівських хвиль, що слабо поглинаються. Як видно з топограм (рис.4, 5), осциляції

інтенсивності не зникають навіть у області $\mu > 1$ і виявляються у вигляді характерного смугастого контрасту.

Кожній смузі на рис.6 відповідає кратна 2π різниця фаз між блохівськими хвилями старого і нового хвильових полів. Якщо врахувати, що розподіл фаз у вихідному полі відомий, а розподіл фаз у новому полі безпосередньо відображає поле зміщень в околі дії зосередженого навантаження, то можна розрахувати поверхні рівних різниць фаз для блохівських хвиль нового і старого полів [12].

Отже, дифракційне зображення полів пружних деформацій, сформоване на вихідній поверхні в результаті інтерференції нових і старих хвильових полів, є своєрідним фазовим зображенням сильноспотвореної області кристала, деформованого зосередженим навантаженням.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any Kind of small distortion // Acta Cryst. - 1962. - **15**, No.12. - P.1311-1312.
2. Epelboin Y. Problems in the numerical calculation of the contrast of defects in X-ray traverse topography // Acta Cryst. - 1977. - **A33**. - P.758-767.
3. Ляв А. Математическая теория упругости. - М.: Физ.-мат. ГИЗ, 1936.
4. Penning P., Polder A. Anomalous transmission of X-ray in elastically deformed crystals // Philips Res.Repts. - 1961. - **16**, No.2. - P.419-440.
5. Kato N. Pendellösung fringes in distorted crystals. I. Fermat's principle for Bloch waves // J. Phys. Soc. Japan. - 1963. - **18**, No.12. - P.1785-1791.
6. Kato N. Pendellösung fringes in distorted crystals. II. Application to two-beam cases // J.Phys.Soc.Japan. - 1964. - **19**, No.1. - P.67-77.
7. Kato N. Pendellösung fringes in distorted crystals. III. Application to homogeneously bent Crystals // J.Phys.Soc.Japan. - 1964. - **19**, No.6. - P.971-985.
8. Balibar F., Authier A. Etude theorique et experimentale du contraste Desimages de Dislocation // Phys.Stat.Sol. - 1967. - **21**, No.2. - P.413-422.
9. Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. Проблема изображения в рентгеновской оптике // УФН. - 1972. - **107**, №2. - С.229-265.
10. Чуховский Ф.Н. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. I. Лауэ-дифракция (обзор) // Металлофизика. - 1980. - **2**, №6. - С.3-27.
11. Инденбом В.Л., Суворов Э.В. Рентгеновский дислокационный контраст дислокаций // Пленарные доклады Всесоюзного совещания "Проблемы рентгеновской диагностики несовершенства кристаллов". - Ереван, 1985. - С.153-173.