

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

Чернівецький державний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

ШЕСТИХВИЛЬОВА РЕНТГЕНІВСЬКА ДИФРАКЦІЯ У СПОТВОРЕНИХ КРИСТАЛАХ

Розглянуто вплив одномірних деформацій на шестихвильову рентгенівську Лауе дифракцію $(220,242,044,\bar{2}24,\bar{2}02)$ $\text{CuK}_{\alpha 1}$ випромінювання в Ge. Описано ефекти інтерференційної взаємодії хвиль із слабким поглинанням, на які сильно впливають тип і величина деформації, кривизна дисперсійної поверхні, порушення фазових співвідношень хвиль.

The of influence of one-dimensional strains on $(220,242,044,\bar{2}24,\bar{2}02)$ six-beam X-ray Laue diffraction of $\text{CuK}_{\alpha 1}$ is considered for Ge. It is discussed the effects of interference interaction of low-absorbing waves which depending on the kind and direction of strains, curvature of disperse surface, change of phase ratio between waves.

Вступ

Наявність слабких деформаційних полів у кристалі суттєво впливає на багатохвильові ефекти, які виникають при взаємодії рентгенівського випромінювання з кристалічною структурою. Це відкриває широкі можливості використання даних ефектів для структурної діагностики слабких порушень кристалічної будови з метою однозначного визначення дилатаційних і ротаційних змін атомних площин.

Шестихвильова $(220,242,044,\bar{2}24,\bar{2}02)$ рентгенівська дифракція викликає особливий інтерес. Це обумовлено складною взаємодією великої кількості хвильових полів, що виникають у кристалі при такій дифракції, і відповідними ефектами, що її супроводжують, зокрема, підсиленням аномального проходження (ПАП).

У багатьох роботах [1-4] експериментальні і теоретичні дослідження шестихвильової дифракції проводились для досконалих кристалів Ge і CuK_{α} -випромінювання. Така шестихвильова дифракція має хвильові моди, коефіцієнти поглинання яких наближаються до нуля ($\mu=0,48, 0,16, 0,16, 0,02 \text{ см}^{-1}$) [1] і які володіють значним збудженням. Тому ці моди проходять через товстий ($\mu_0 t > 10$, μ_0 – нормальний коефіцієнт поглинання, t – товщина кристалу) досконалий кристал, а решта порівняно швидко пригнічуються [2]. Цікаво, що третина енергії падаючого випромінювання

припадає на хвильові поля, що зазнали слабого поглинання, проте експериментально ефект ПАП довго не виявлявся. У роботі [3] це пояснюється особливостями форми дисперсійної поверхні поблизу точної умови шестихвильової дифракції і залежностей μ від кутового відхилення падаючого променя від цієї умови. Крім того, падаюча на кристал хвиля не плоска, оскільки розходження пучка перевищує $0,5''$. Шляхом сильного зменшення розмірів фокуса трубки ($\sim 10 \mu\text{м}$) у роботі [4] вдалося експериментально отримати невеликі дуги з дуплетною структурою $K_{\alpha 1, \alpha 2}$ -випромінювань, що з'єднують двоххвильові лінії $(20\bar{2})$ і $(0\bar{2}2)$ в області шестихвильової дифракції.

Шестихвильова дифракція в одномірно деформованому кристалі

У даній роботі проведені розрахунки для шестихвильової $(220, 242, 044, \bar{2}24, \bar{2}02)$ дифракції поляризованого $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання у Ge ($t=14/\mu_0=400 \mu\text{м}$). Оскільки кристал вибирався товстим, то для нього в ідеальному випадку чітко проявляється підсилення аномального проходження (рис.1).

Процеси аномального проходження рентгенівських променів при $(220,242,044,\bar{2}24,\bar{2}02)$ дифракції у кристалі германію, що містить одномірні деформації (еквідистантний і експоненційний згин відбивних атомних площин), досліджувались у плоскохвильовому наближенні.

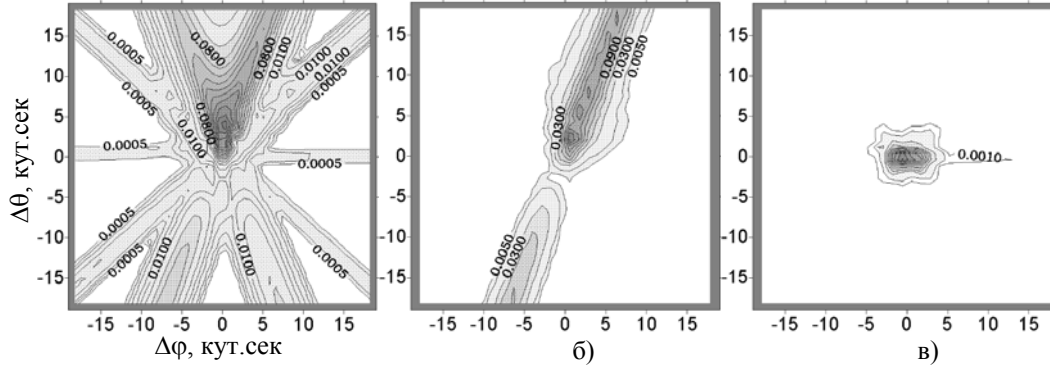


Рис.1. Ідеальний кристал. $(220,242,044,\bar{2}24,\bar{2}02)$ -дифракція. Заломлена хвиля (000) (а); дифраговані хвилі (220) (б), (044) (в).

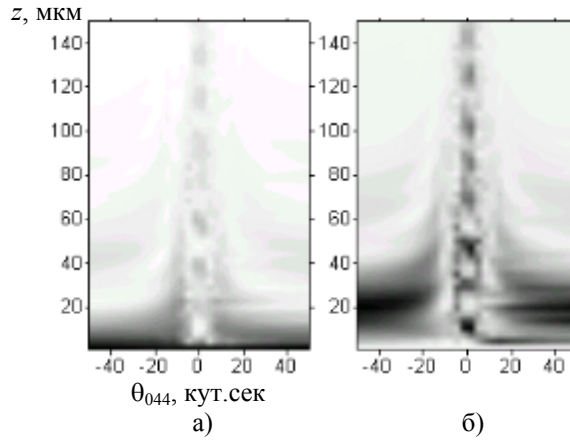


Рис.2. Ідеальний кристал. Маятникові смуги. Дифракція $(220,242,044,\bar{2}24,\bar{2}02)$. Заломлена хвиля (000) (а), дифрагована хвиля (044) (б).

Вплив різних типів деформацій на поведінку шестихвильової області дифракції проаналізований для двох напрямків вектора атомних зміщень \vec{U} – паралельного і перпендикулярного до вектора дифракції \vec{H}_{004} . Це обумовлено тим, що вздовж лінії (044) коефіцієнти поглинання згаданих мод зі слабким поглинанням зростають досить повільно при відхиленні від точної умови дифракції – цим досягається збереження ефекту ПАП, і, крім того, яскрава шестихвильова область на фоні двоххвильових ліній на експериментальній топограмі має форму, витягнуту вздовж осі симетрії, яка паралельна до \vec{H}_{004} .

У випадку одномірної деформації (вздовж осі x) локальні розорієнтації атомних площин в залежності від глибини z у кристалі такі [5]:

$$\alpha_i = \alpha_i^0 - p_i \frac{dU_x}{dz}, \quad (1)$$

де i відповідає послідовно двоххвильовим дифракціям на площинах (220), (242), (044), ($\bar{2}24$), ($\bar{2}02$), $p_i = p \cdot \cos(\gamma_i - \varphi)$, γ_i – кут між векторами дифракції \vec{H}_{220} і \vec{H}_i , φ – кут між \vec{H}_{220} і \vec{U} ,

$p = 4B\gamma_0^2\lambda^2 |\vec{H}_i| / \pi$, λ , γ_0 – довжина хвилі і косинус кута падіння рентгенівських променів, B – параметр, що задає величину деформації. При цьому $\alpha_i^0 = 2\lambda \cdot [(\vec{H}_i \cdot \vec{e}_1)\Delta\varphi + (\vec{H}_i \cdot \vec{e}_2)\Delta\theta]$, кути $\Delta\theta$ і $\Delta\varphi$ задають відхилення падаючої хвилі від точної умови дифракції вздовж векторів $\vec{e}_1 = \lambda[\vec{k}_0 \times \vec{n}]$, $\vec{e}_2 = [\vec{e}_1 \times \vec{k}_0]$, \vec{k}_0 – хвильовий вектор, який задовольняє умову точного положення відбивання, \vec{n} – нормаль до входної поверхні кристалу. Розраховано розподіли інтенсивності $R_i(\Delta\varphi, \Delta\theta)$. Для аналізу ефекту підсилення або пригнічення аномального проходження використано коефіцієнт $R = R_0^{\text{деф}} / R_0^{\text{ід}}$, де $R_0^{\text{ід}}$, $R_0^{\text{деф}}$ – максимальні інтенсивності шестихвильової області розсіяння в ідеальному та деформованому кристалі.

Шестихвильові маятникові смуги – складні аперіодичні осцилюючі функції товщини кристалу (рис.2). Відстані між екстремумами коефіцієнтів відбивання $R_i(\alpha_i^0, z)$ пов'язані зі степенями збудження хвильових полів, а також з геомет-

рією дисперсійної поверхні [6]. Розподіли товщинних осциляцій інтенсивності отримані при $\Delta\theta=0$, тому $R_i(\alpha_i^0, z) \equiv R_i(\Delta\varphi, z)$.

Еквідистантний згин

Функція локальних розорієнтацій при еквідистантному згині атомних площин має вигляд:

$$\alpha_i = \alpha_i^0 - p_i \cdot z. \quad (2)$$

На розподілах інтенсивності $R_i(\Delta\theta, \Delta\varphi)$ при $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$ для дифрагованих (220) (рис.3) і $(\bar{2}02)$ хвиль при збільшенні параметра деформації p відбувається поступове послаблення двохвильових областей і посилення шестихвильового аномального проходження. Для решти дифрагованих хвиль двохвильові області практично одразу пригнічуються, а залишаються лише шестихвильові області, які, на відміну від хвиль (000), (220) і $(\bar{2}02)$, зміщуються у напрямку дії деформації (рис.3).

Така неоднакова поведінка дифрагованих хвиль пояснюється різною кривиною дисперсійних поверхонь для відповідних мод у напрямках зміщення відбивних площин \vec{U} та асиметрією коефіцієнтів поглинання. Зокрема, швидке пригнічення (242), (044), $(\bar{2}24)$ дифрагованих хвиль обумовлене швидким зростанням коефіцієнтів поглинання при відхиленні від точного положення шестихвильової дифракції, хоча відносні збудження деяких мод досить сильно зростають. Отже, при значеннях $p > 0,5$ в інтенсивність заломленої хвилі роблять внесок лише (220) і (242) хвильові поля з підсиленням шестихвильового аномального проходження.

У випадку дії слабких деформацій $\vec{U} \perp \vec{H}_{044}$ для дифрагованих (220) і (242) хвиль спочатку характерне посилення багатохвильового аномального проходження (на 40% і 30% відповідно), а потім – його пригнічення (рис.4). При цьому двохвильові області поступово поглинаються, але повністю не зникають. При переході з шестихвильової у двохвильову область дифракції спостерігається досить помітний провал інтенсивності. Така асиметрія розподілу інтенсивності дозволяє визначати фазові співвідношення між дифрагованими хвилями, які зумовлені впливом даної деформації.

На всіх дифрагованих хвилях спостерігається зміщення багатохвильових областей в сторону дії деформації: (000) – вверху; (220) – вверху і вправо; (242) – вниз на 10 кут.сек і вліво на 5 кут.сек;

(044) – вниз; $(\bar{2}24)$ – вниз на 10 кут.сек і вправо на 5 кут.сек; $(\bar{2}02)$ – по двохвильовій лінії вниз. Найбільші трансформації відбуваються для (242) і $(\bar{2}24)$ дифрагованих хвиль майже симетрично. Збільшення деформації приводить до пригнічення аномального проходження як шестихвильової області, так і всіх двохвильових. Характерно, що при відносно великій деформації ($p=0,5$) розподіл інтенсивності багатохвильової області у заломленій хвилі повністю повторює розподіл у дифрагованій (044) хвилі, в той час як при менших деформаціях форма розподілу пов'язана з (220), $(\bar{2}02)$ хвилями. Крім того, загальна інтенсивність хвильових полів у напрямку проходження і (044)-дифракції зменшується набагато швидше, ніж інших дифрагованих хвиль.

Характер зміни шестихвильових товщинних осциляцій інтенсивності (рис.5) майже повністю такий самий, як для три- і чотирьохвильової дифракції [7-9]. При $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$ має місце швидке пригнічення як двохвильових так і шестихвильових товщинних осциляцій, в центрі топограми виявляється досить інтенсивна шестихвильова область, яка зміщується і розмивається. Спостерігається порушення симетрії у розподілі інтенсивності в напрямку дії деформації, а також відбувається складне аперіодичне затухання маятникових осциляцій.

Отже, у процесі шестихвильового розсіювання у кристалі з еквідистантним згином атомних площин спочатку відбувається порівняно незначне посилення багатохвильового аномального проходження в області слабких спотворень, а потім – його пригнічення. Відповідні двохвильові маятникові осциляції пригнічуються значно швидше порівняно з шестихвильовими. Такі ефекти пов'язані з:

- кривиною дисперсійної поверхні;
- взаємовпливом багатохвильових маятникових осциляцій і процесу аномального проходження;
- порушенням фазових співвідношень між дифрагованими хвилями при слабкому еквідистантному згині відбиваючих площин.

Разом з тим, завдяки вигину кристалічні площини виступають в якості збірної лінзи для одних дифрагованих хвиль і розсіюючої до інших. Величина деформації, кривина дисперсійної поверхні змінюють ступінь фокусування і розсіювання, що призводить до відповідного зміщення, розмиття і посилення багатохвильових областей дифракції.

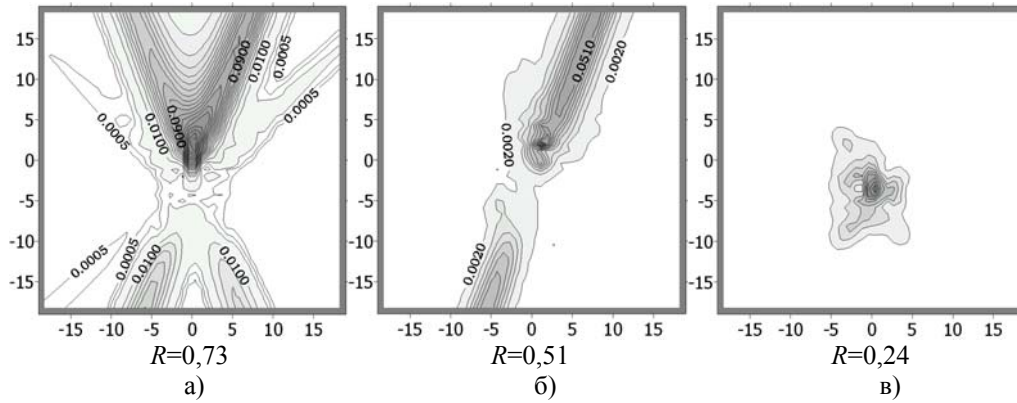


Рис.3. Еквідистантний згин, $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$, $p=0,05$. Заломлена хвиля (000) (а), дифраговані хвилі (220) (б), (044) (в).

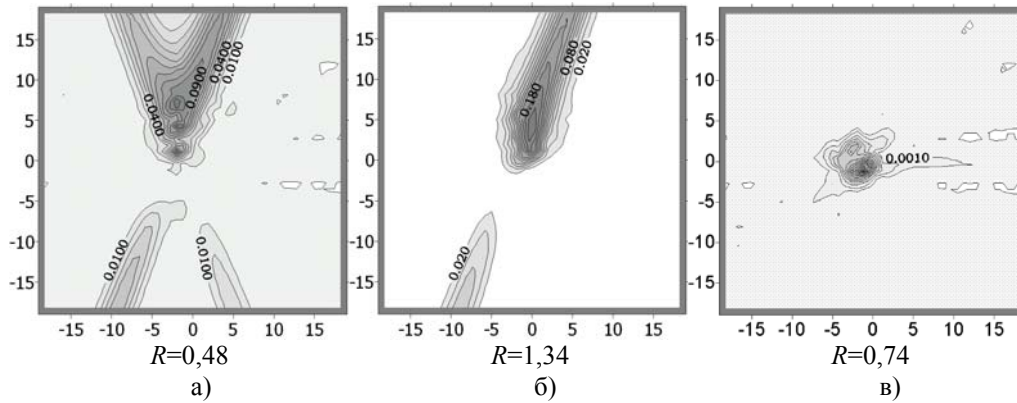


Рис.4. Еквідистантний згин, $\vec{U} \perp \vec{H}_{044}$, $p=0,05$. Заломлена хвиля (000) (а), дифраговані хвилі (220) (б), (044) (в).

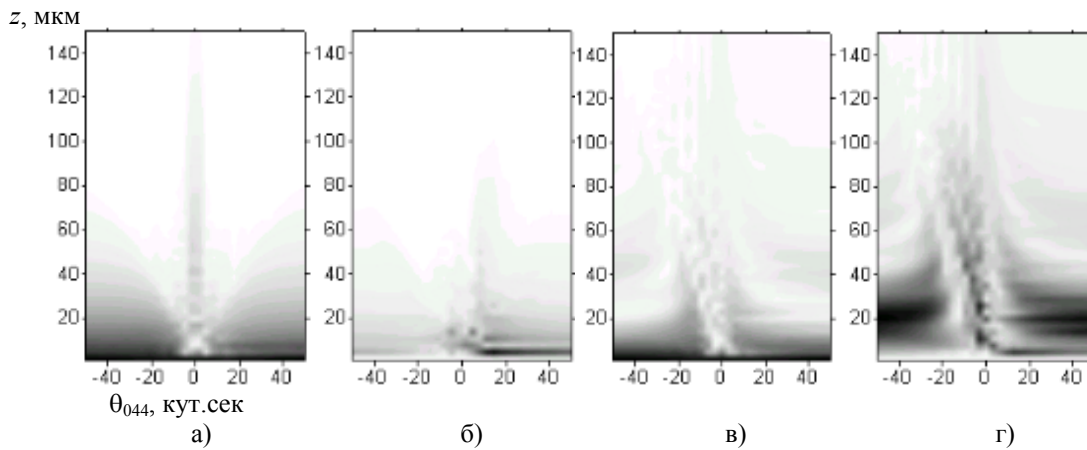


Рис.5. Шестихвильові маятникові смуги. Еквідистантний згин, $p=0,15$. Заломлена хвиля (а) і (в), дифрагована (044) (б) і (г); $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$ (а) і (б); $\vec{U} \perp \vec{H}_{044}$ (в) і (г)

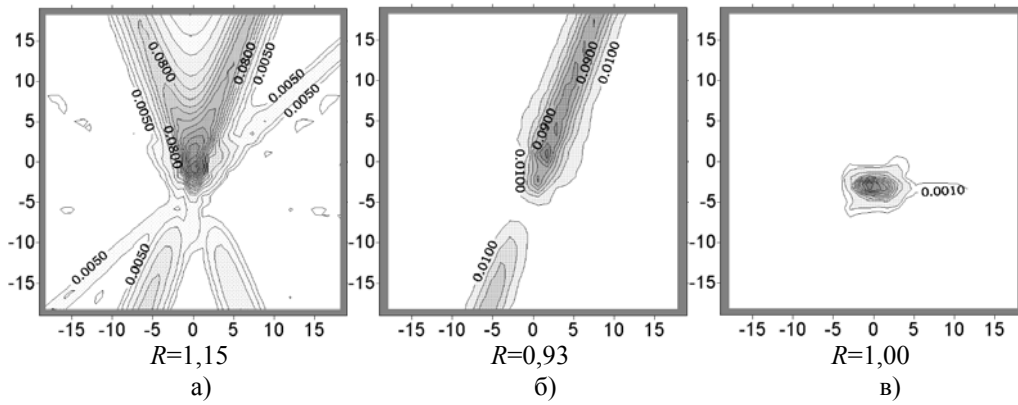


Рис.6. Експоненційний згин, $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$, $p=3$. Заломлена хвиля (000) (а), дифраговані хвилі (220) (б), (044) (в).

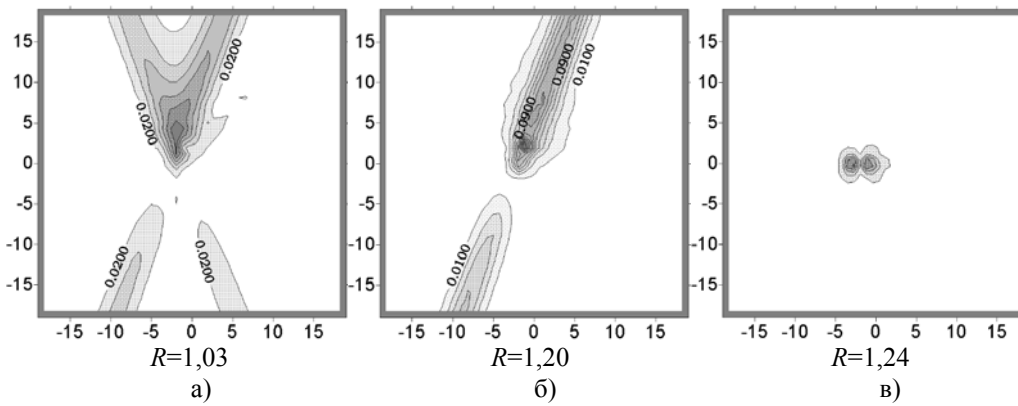


Рис.7. Експоненційний згин, $\vec{U} \perp \vec{H}_{044}$, $p=3$. Заломлена хвиля (000) (а); дифраговані хвилі (220) (б), (044) (в)

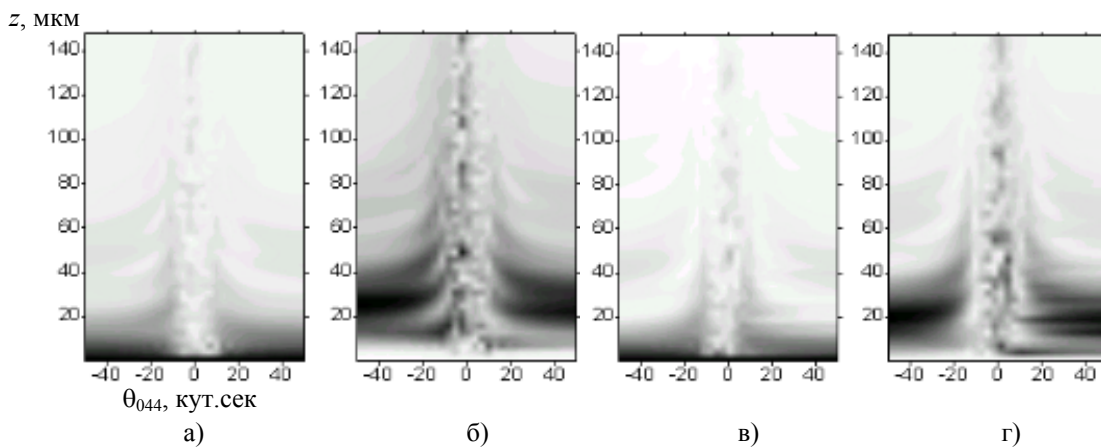


Рис.8. Маятникові смуги. Експоненційний згин входної поверхні. $p=3$. Заломлена хвиля (а) і (в), дифрагована (440) хвиля (б) і (г); $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$ (а) і (б); $\vec{U} \perp \vec{H}_{044}$ (в) і (г)

Експоненційний згин

При експоненційному спотворенні вхідної поверхні кристалу функція локальних розорієнтацій набуває вигляду:

$$\alpha_i = \alpha_i^0 - p_i \cdot \exp(-bz), \quad (3)$$

b – "протяжність" деформаційного прошарку, яка близька до екстинкційної довжини Λ , p_i – "потужність" даного прошарку.

Як видно з отриманих топограм $R_i(\Delta\theta, \Delta\varphi)$ (рис.6,7) і товщинних розподілів інтенсивності $R_i(\Delta\theta, z)$ (рис.8) шестихвильова область пригнічується і помітно зміщується у напрямку дії деформації, що дозволяє оцінювати величини і напрямки вигину поверхневих шарів.

При $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$ шестихвильові маятникові осциляції чітко проявляються на фоні ослаблених двохвильових осциляцій (рис.8). Як уже відзначалось, у їхньому формуванні бере участь кілька ледь послаблених хвильових полів. Інтерференційна взаємодія між даними хвильовими полями з порушеними відносно досконалого кристалу фазовими співвідношеннями і буде визначати дифракційну картину розсіяння. Ступінь порушення фазових співвідношень визначає розмиття, зміщення і посилення багатохвильових областей дифракції (рис.6,7).

Практично для всіх хвильових полів і певних значень деформації відбувається підсилення ефекту аномального проходження: при $\vec{U} \parallel \vec{H}_{044}$ і $p=0,5$ – на 15% для заломленої хвилі, 29% – для (220), 73% – (242), 8% – (044), 84% – ($\bar{2}24$), 12% – ($\bar{2}02$) дифрагованих хвиль.

Зміщення багатохвильових областей дифракції, які майже не змінюються в розмірах, відбувається у напрямку дії деформації (вниз топограми, рис.6). Шестихвильова область (044) набуває гантелеподібної форми з мінімумом на лінії, що проходить через $\Delta\theta=0$. Відзначимо також і порушення симетрії розподілу інтенсивності.

При $\vec{U} \perp \vec{H}_{044}$ (рис.7) також має місце посилення ефекту аномального проходження: на 3% для заломленої хвилі, на 20% – для (220) хвилі, 40% – (242), 28% – (044), 26% – ($\bar{2}24$), 6% – ($\bar{2}02$). Зміщення багатохвильових полів відбувається, як і в попередніх випадках, вздовж напрямку дії сили. Крім того, спостерігається роздвоєння багатохвильової (044) області.

Отже, внаслідок нечутливості посилення багатохвильового аномального проходження до орієнтації вектора зміщення, визначальне значення мають ефекти інтерференційної взаємодії кількох хвиль, що зазнали слабого поглинання, на які сильно впливають фазові співвідношення між хвилями, набуті у деформованому шарі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Huang T.C., Tillinger M.H., Post B. 6-Beam Wotmann Diffraction // Z.Naturforsch. - 1973. - **28a**. -S.600-603.
2. Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. - М.: Мир, 1987.
3. Михайлюк И.П., Кшевецкий С.А., Остапович М.В., Козьмик В.Д. // Кристаллография. - 1978. - **23**. С.403-407.
4. Козьмик В.Д., Кон В.Г., Михайлюк И.П., Федорук В.И. Влияние немонохроматичности характеристического излучения на топограммы аномального прохождения при шестиволновой дифракции // Кристаллография. - 1989. - **34**, в.4. - С.989-992.
5. Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystal with any kind of small distortion // Acta crystallogr. - 1962. - **15**, No.12. - P.1311-1312.
6. Kato N.A. Theoretical study of Pendellosung fringes. Part I. General considerations // Acta Crystallogr. - 1961. - **14**, No5. - P.526-532.
7. Фодчук И.М., Борча М.Д., Раранський М.Д., Гультай Л.Л. Дослідження впливу одноімерних деформацій на ефект аномального проходження для чотирьоххвильових дифракцій рентгенівських променів // Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика. - 1999. - в.57. - С.56-61.
8. Фодчук И.М., Борча М.Д., Раранський Н.Д., Гультай Л.Л. Влияние одномерных деформаций на эффект Бормана в случае трехволновой дифракции рентгеновских лучей // Металлофизика и новейшие технологии. - 1999. - **21**, №12. - С.56-60.
9. Гультай Л.Л., Фодчук И.М., Борча М.Д., Раранський Н.Д., Михалев И.В. Влияние периодических деформаций кристалла на трехволновое аномальное прохождение рентгеновских лучей // Металлофизика и новейшие технологии. - 1999. - **21**, №10. - С.69-74.