

ЗОБРАЖЕННЯ ДИСЛОКАЦІЙ І МІКРОДЕФЕКТІВ НА СЕКЦІЙНИХ ТОПОГРАМАХ В АКУСТИЧНО ЗБУДЖЕНОМУ КРИСТАЛІ

На основі чисельного розв'язку системи рівнянь Такагі досліджено вплив параметрів поперечної ультразвукової хвилі на формування дифракційного контрасту мікроефектів і дислокацій на секційних топограмах, а також на інтегральні характеристики структурної досконалості реальних кристалів.

The influence of ultrasonic cross wave on the formation of the diffraction microdefect's and dislocation's images on section topograms, as well as on integral characteristics of real crystal structural imperfection are investigated. The research was carried out on the basis of numerical solution algorithm of Takagi equations.

Сучасний рівень розвитку динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів реальними кристалами, дозволяє замінити довготривалі експериментальні дослідження на чисельний експеримент по встановленню фізичної природи і механізмів рентгенодифракційного формування зображень любых дефектів і впливу на нього різних чинників. Це суттєво доповнює можливості отримання якісної і кількісної інформації про реальний стан спотворення кристалічної ґратки, що і визначає актуальність теми досліджень.

Мета даної роботи – дослідження впливу параметрів стоячої поперечної ультразвукової хвилі, як своєрідного зонду, на формування дифракційних зображень мікроефектів і дислокацій на секційних і проєкційних топограмах. Такі дослідження важливі з точки зору вивчення впливу комбінованих спотворень структури (короткодючі поля деформацій від мікроефектів, далекодючі від дислокацій і макроскопічні пружні деформації від ультразвуку) на динамічне розсіяння рентгенівських променів.

На даний час проведено досить багато експериментальних робіт пов'язаних із дифрактометрією акустично збуджених кристалів, які містять різні типи мікроефектів. У роботі [1] ультразвукове деформаційне поле використано для розділення когерентної і дифузної складових розсіяння. Це дозволило оцінити як розміри, так і концентрацію точкових дефектів після відпаду кристалів Si.

Інтенсивність розсіяння рентгенівських променів системою атомів, розміщених строго у вузлах періодичної ґратки ідеального кристалу, описуються вузькими брегівськими піками, максимумами яких лежать у вузлах оберненої ґратки. Теплові коливання атомів зменшують інтенсивність цих піків на фактор Дебая-Валера і приводять до появи плавного розподілу дифузного розсіяння поза піками. Структурні недосконалості у кристалах обумовлюють більшу різноманітність дифракційних ефектів, ніж теплові коливання. У залежності від типу спотворень вони приводять до зміщення рентгенівських ліній або плям (зберігаючи свою форму і ширину), до ослаблення їх інтенсивності і появи дифузного розсіяння, або до уширення ліній аж до їх зміщення. Дані про зміну положення і інтенсивності рентгенівських ліній, а також про їх уширення у випадку недосконалостей другого типу (дефекти з повільно спадними полями спотворень, наприклад, прямолінійні дислокації), як правило дають більше непряму інформацію. Це і обумовило інтерес до вивчення комбінованого впливу відносно невеликих концентрацій мікроефектів і дислокацій на рентгеноакустичну взаємодію у кристалі Si з метою уточнення деяких положень динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів.

Цікаво було співставити дані, отримані із аналізу кривих повної інтегральної відбивної здатності кристалів, що містять окремі типи дефектів і їх комбінації з теоретично розрахованими на основі рівнянь Такагі.

Досліджуються кристали, що містять відносно невисокі концентрації дефектів, коли неідеальність зручно представляти як результат комбінованої взаємодії окремих дефектів. Загальне поле зміщення відбивних площин $\vec{U}(\vec{r})$ визначалось як суперпозиція компонент поля зміщень дислокації \vec{U}_d , мікродефектів \vec{U}_m і поля зміщен-

ня поперечної ультразвукової стоячої хвилі \vec{U}_u . Система координат вибрана так, що вісь Ox – антипаралельна вектору дифракції, Oz – напрямлена у глибину кристала у площині розсіяння [2]. Розорієнтаційне поле визначається так:

$$\alpha = \frac{(\vec{H}\vec{n})}{2\pi K} \left(\frac{\partial U_x}{\partial z} \operatorname{ctg} \theta - \frac{\partial U_x}{\partial x} \right). \quad (1)$$

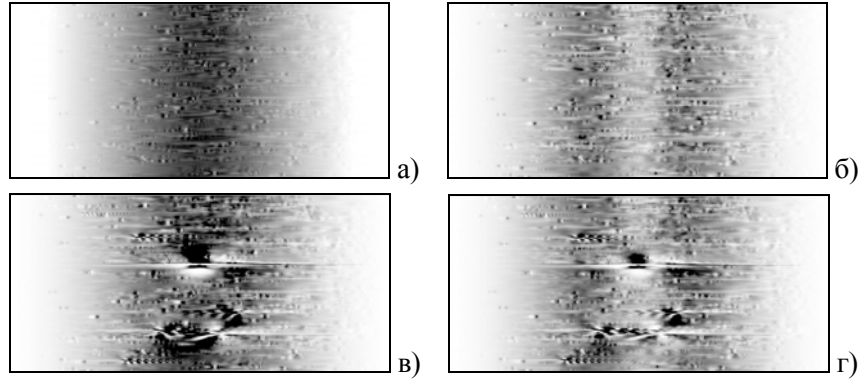


Рис.1. МоК α -випромінювання (220), $\mu t=6$. Дифракційні зображення мікродефектів ($n=10^6 \text{ см}^{-3}$) на секційних топограмах. Мікродефекти з дислокаціями ($N=10^3 \text{ см}^{-2}$) (в,г); ультразвукова деформація – $U_0=10^{-10} \text{ \AA}$, $\lambda_S=\Lambda$ (б,г).

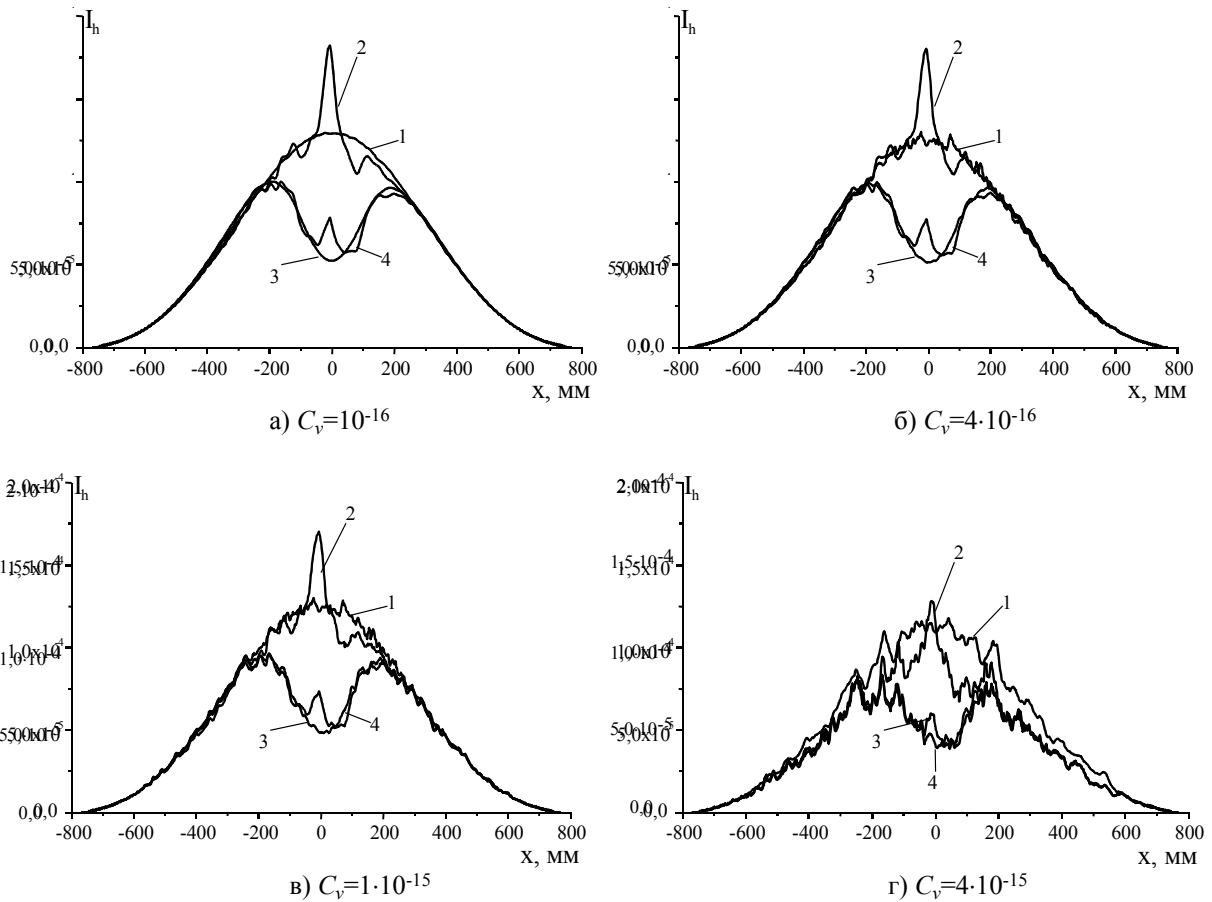


Рис.2. Розподіли $I_h(x)$ в залежності від потужності мікродефектів ($n=10^6 \text{ см}^{-3}$). Мікродефекти (1); дислокації ($N=10^3 \text{ см}^{-2}$) і ультразвукова дія $U_0=10^{-10} \text{ \AA}$ (2); мікродефекти і ультразвукова дія (3); мікродефекти, дислокації ультразвукова дія (4).

Чисельне моделювання експерименту проводилось при концентраціях мікроефектів: $n=10^5 \div 10^6 \text{ см}^{-3}$, крайових дислокацій – $N=10^3 \text{ см}^{-2}$, які хаотично розподілені по кристалу. Лінії дислокацій орієнтовані паралельно площинам розсіяння, напрямом вектора Бюргерса паралельний вектору дифракції \vec{H} . Такий вибір кількості і розміщення мікроефектів і дислокацій мав на меті створити найбільш реальні умови для дослідження механізмів впливу параметрів ультразвукової хвилі на формування топографічних зображень і просторових розподілів інтенсивності. Товщина кристалу $\mu t=6$. Орієнтація входної поверхні (001), відбивання (220) $\text{MoK}\alpha$ -випромінювання.

Дослідження проводились у резонансній ($\lambda_{\text{рез}} = \Lambda$, Λ – довжина екстинкції) області довжин ультразвукового поля при різних "потужностях" мікроефектів C_v . Сумарне розорієнтаційне поле в цьому випадку має вид:

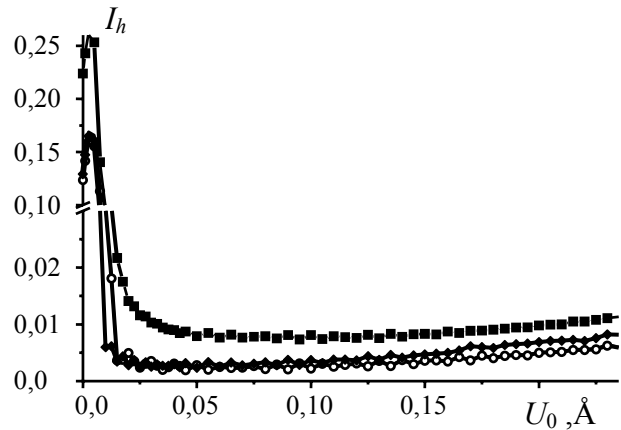
$$\alpha(\vec{r}) = \alpha_0 - (\alpha_m + \alpha_d + \alpha_u), \quad (2)$$

де α_m , α_d і α_u – функції локальних розорієнтацій для мікроефектів, дислокацій і акустичного поля.

Резонансна ультразвукова дія, як слідує із секційних на рис.1, суттєво впливає на контраст (значно зростає видність), на розміри дифракційної області (збільшується приблизно 10-20%), а також на відповідні товщинні розподіли $I_h(x)$ на рис.2, за рахунок пригнічення фону і когерентної складової розсіяння. Тут у більш повній мірі проявляються динамічна і кінематична складові розсіяння. Збільшення параметра деформації C_v і амплітуди ультразвуку викликає не тільки розширення дифракційної області зображень мікроефектів перпендикулярно вектору дифракції, але й проявляє їх тонку структуру. Для дислокацій рис.1в,г дифракційне зображення спостерігається як осцилюючий чорно-білий контраст по ширині проміжної області розсіяння, орієнтованої паралельно вектору дифракції.

Для кількісних оцінок структурної досконалості кристалів, як відомо, використовують аналіз товщинних розподілів $I_h(x)$ інтегральної відбивної здатності кристалу, а також амплітудної залежності $I_h(U)$. Їх аналіз дає можливість розв'язувати так звану пряму задачу рентгеновської дифракційної оптики – визначити тип, розміри і концентрацію мікроефектів [3].

Як впливає з амплітудних залежностей $I_h(U)$ на рис.3, наявність у кристалі мікроефектів різ-



ної

Рис.3. Амплітудні залежності $I_h(U_0)$ при $\Lambda=\lambda_{\text{с}}$. ($\mu t=6$). Відбивання (220), $\text{MoK}\alpha$ -випромінювання. \circ - мікроефекти $n=10^6 \text{ см}^{-3}$, $C_v=10^{-15}$; \blacksquare - дислокації 10^3 см^{-2} , \blacklozenge - мікроефекти+дислокації.

потужності і дислокацій подавляє рентгеноакустичну взаємодію – зменшується глибина провалу амплітудної залежності.

Для розв'язку прямої рентгенодифракційної задачі проаналізуємо залежність інтегральної відбивної здатності кристалу від амплітуди ультразвуку на поданих рисунках. Для цього використаємо співвідношення роботи [4], які дають змогу розділити вклади дифузної і когерентної складових розсіяння і таким чином визначити інтегральні характеристики структурної досконалості кристалу: фактор Дебая-Валера L і коефіцієнт додаткових втрат енергії при дифузному розсіянні на дефектах μ_d . Інтегральна відбивна інтенсивність – сума когерентної і дифузної складових: $I_h=I_B+I_D$. Збудження у кристалі ультразвукових коливань приводить до пригнічення аномального проходження [1]. Починаючи з деяких значень амплітуди ультразвуку інтенсивність $I_h(U)$ осцилює і повільно росте. Це явище пов'язане із збільшенням впливу структурних факторів сателітів і характерне для тонкого кристалу, коли пригнічення ефекту Бормана не суттєве.

Пригнічення слабким ультразвуковим полем когерентної складової I_B дозволяє розділити вклади в інтегральну інтенсивність I_h , оскільки дифузне розсіяння при не великих рівнях поглинання носить, в основному, кінематичний характер [4]. Тоді амплітудна залежність для слабо спотвореного кристалу подібна до такої в ідеальному кристалі:

Амплітудну залежність $I_p(U)$ для досконалого кристалу, як правило, отримують розрахунковим

шляхом, а у роботі [5] розроблено метод, який дозволяє без втрати інформативності обмежитися тільки виміром однієї амплітудної залежності для реального кристалу. Це досягається шляхом вибору такого рівня поглинання ($\mu t \approx 3$), при якому дефекти практично не змінюють інтенсивність відбивання, тобто:

$$\mu_d = -\frac{\gamma}{t} \ln \frac{1 - I_N}{1 - 2e^{-C\varepsilon h}}, \quad (3)$$

$$L = \frac{I_N - 2e^{-C\varepsilon h} e^{-z}}{1 - 2e^{-C\varepsilon h}} \frac{\Lambda}{4\pi^2 t} \frac{z}{(1 - e^{-z})} \sum_{\sigma, \pi} e^{C\varepsilon h},$$

t – товщина кристалу, C – поляризаційний множник, $\varepsilon = \chi_{hi} / \chi_{0i}$, $z = \mu_d t / \gamma$, $\gamma = \cos \theta$, $h = \mu t / \gamma$. У співвідношеннях (3) тільки один параметр $I_N = I_d^* / I_d$ визначається експериментально, або у нашому випадку вираховується (I_d – вихідна інтегральна інтенсивність слабосптовреного кристалу, I_d^* – точка перетину вісі абсцис асимптоту до плавної ділянки амплітудної залежності $I_h(U)$).

З іншого боку, параметри μ_d і L безпосередньо пов'язані з концентрацією n і радіусом R мікрodefektів таким чином:

$$\begin{aligned} \mu_d &= 8\pi^2 \gamma^2 LR / \Lambda^2, \\ L &= 8nR^{9/2} (\beta_0 H)^{3/2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Підставляючи $n = 1 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$, $\beta_0 = 0,01$ і $R = 1,2 \text{ мкм}$ із співвідношення (4) отримуємо, що $L_{220} = 0,68 \cdot 10^{-2}$, а $\mu_d = 4,66 \text{ см}^{-1}$.

У той же час, використовуючи рис.3 і співвідношення (3) отримуємо відповідні значення інтегральних характеристик шляхом розв'язання, так званої, оберненої задачі - $L = 0,2 \cdot 10^{-2}$, $\mu_d = 4,1 \text{ см}^{-1}$. Відзначимо їх задовільне узгодження.

Отже, вибрані певним чином параметри акустичної хвилі дозволяють провести топографічну і дифрактометричну експресну структурну діагностику кристалів. Це значно розширює можливості традиційних рентгенівських методів.

Висновки

Вивчення впливу параметрів ультразвуку, в якості своєрідного зонду, як на підсилення дифракційного контрасту, так і на збільшення розмірів дифракційної області різного типу дефектів, важливі з точки зору вивчення впливу комбінованих спотворень структури (короткодіючі поля деформацій від мікрodefektів, дислокацій і макроскопічні пружні деформації від ультразвуку) на динамічне розсіяння рентгенівських променів.

На просторових розподілах, а також амплітудних залежностях $I_h(U)$ наявність у кристалі мікрodefektів і дислокацій проявляється у пригніченні рентгеноакустичної взаємодії – зменшується глибина провалу в центрі просторового розподілу. Для розв'язку прямої рентгенодифракційної задачі проаналізовано залежність інтегральної відбивної здатності кристалу від амплітуди ультразвуку. Це дало змогу розділити внески дифузної і когерентної складових розсіяння і, таким чином визначити інтегральні характеристики структурної досконалості кристалу – фактор Дебая-Валера L і коефіцієнт дифузного поглинання μ_d .

Вибрані певним чином параметри акустичної хвилі дозволяють провести топографічну і дифрактометричну експресну структурну діагностику кристалів. Це значно розширює можливості використання традиційних рентгенівських методів. При виконанні умови рентгеноакустичного резонансу в кристалі, спостерігається не тільки значне збільшення дифракційного контрасту зображень мікрodefektів, а також підвищується роздільна здатність (майже на порядок) рентгеноакустичної топографії.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Энтин И.Р.* Эффект резонансного подавления ультразвуком аномального прохождения рентгеновских лучей // Письма в ЖЭТФ. - 1977. - **26**, №5. - С.392-395.
2. *Новіков С.М.* Рентгенодифракційні зображення дефектів у випадку акустичної дії на кристал // Науковий вісник ЧДУ. Вип. 63: Фізика. - Чернівці: ЧДУ, 1998. - С.67-73.
3. *Молодкин В.Б.* Динамическая теория диффузного рассеяния в кристаллах с хаотически распределенными дефектами // Металлофизика. - 1981. - **3**, № 4. - С.27-38.
4. *Мачулин В.Ф., Хрупа В.И.* Рентгеновская диагностика структурного совершенства слабоискаженных кристаллов. - Киев, Наукова думка, 1995.
5. *Хрупа В.И., Энтин И.Р.* Влияние ультразвуковых колебаний на пространственную структуру отраженного рентгеновского пучка // Металлофизика. - 1991. - **13**, №1. - С.120-124.