

## ЯВИЩЕ МАЯТНИКОВОЇ ОСЦИЛЯЦІЇ X-ХВИЛЬ У РЕАЛЬНИХ МОНОКРИСТАЛАХ

До 50-річчя експериментального відкриття явища "Pendellösung" і 60-річчя кафедри фізики твердого тіла ЧНУ.

Up to 50 years of experimental discovery of "Pendellösung" and the 60th anniversary of the Department of Solid State Physics Chernovtsy National University.

### Вступ

Успіхи у розвитку динамічної теорії дифракції X-хвиль стали однією з основних передумов розробки унікальних методів дослідження структури реальних кристалів. Уже у перших працях Дарвіна [1] врахована інтерференційна взаємодія розсіяних кристалом X-хвиль і введено поняття "первинної екстинкції" – послаблення заломлених хвиль внаслідок багатократного розсіяння атомними площинами при проникненні їх всередину кристала. Пізніше Евальд [2] при розгляді розповсюдження і заломлення короткохвильового випромінювання в кристалах врахував динамічну взаємодію X-хвиль і передбачив явище осциляції хвильових полів в кристалі, назване ним "Pendellösung" – маятниковий розв'язок інтерференції X-хвиль. Водночас Евальд вважав, що "навіть не уявляється можливим коли-небудь виявити експериментально явище осциляції" X-хвиль внаслідок структурної недосконалості реальних кристалів.

Вперше маятникові осциляції X-хвиль були виявлені при дифракції електронів [3], а в діапазоні довжин X-хвиль – Н.Като і А.Р.Лангом в 1959 році [4]. Пропорційність періодів маятникових смуг структурній амплітуді дозволили авторам праці [4] запропонувати принципово новий прецизійний метод визначення структурних амплітуд  $F_{hkl}$ , а відповідно і атомних амплітуд  $f_a$  без вимірювання енергетичних параметрів розсіяння. У СРСР маятникові осциляції X-хвиль були вперше отримані на кафедрі ФТТ ЧНУ в 1967 році [5,6]. Маятникові осциляції X-хвиль, виявлені Н.Като [4] зосередженні у вузькій області кристалу (~10 мкм), мають форму гіпербол і виникають при розсіянні сферичних хвиль у

геометрії, так званої, секційної топографії. Маятникові осциляції, виявлені нами [5,6], отримані в широкому фронті падаючих монохроматичних X-хвиль (~1 см), мають форму паралельних смуг і формуються у наближенні розсіяння плоских хвиль у геометрії проекційної топографії.

Вивчення явища осциляції електромагнітного поля в кристалі само по собі є фундаментальною проблемою фізики твердого тіла. Висока чутливість маятникових смуг до деформацій, механічних і температурних градієнтів дозволила запропонувати низку оригінальних методів дослідження фізичних властивостей кристалів.

Дана праця не претендує на всеохоплююче висвітлення всіх наукових досягнень у цій галузі, а зосереджена на поданні основних досягнень кафедри ФТТ і присвячена 50-річчю відкриття явища і 60-річчю кафедри ФТТ.

Подальший розвиток на кафедрі ФТТ метода маятникових смуг дозволив провести систематичні дослідження впливу поглинання, температури, поляризації і дисперсійних ефектів на періоди маятникових смуг, їх місцеположення і видність. Запропоновано новий прецизійний метод визначення періодів маятникових осциляцій, структурних і атомних амплітуд розсіяння – метод циліндричного зразка [7]; визначені структурні амплітуди  $F_{hkl}$ , атомні амплітуди розсіяння і екстинкційні товщини для монокристалів Si, Ge, GaAs, GaP, CaF<sub>2</sub>, LiF, NaCl, KCl в широкому інтервалі кутів дифракції [8]. У двоххвильовому наближенні вперше отримано співвідношення для періодів маятникових смуг в околі краю поглинання і запропоновано новий метод визначення показників заломлення  $n$  і дисперсійних поправок  $\Delta f'$  [9]. На кафедрі ФТТ роз-

роблена оригінальна експериментальна методика отримання маятникових смуг в широкому інтервалі температур і тисків. Вперше отримані співвідношення для періодів маятникових осциляцій в залежності від температури і тиску  $\Lambda(P, T)$ . Вперше запропоновано і розроблено принципово новий метод дослідження ангармонійності коливань атомів у кристалічній ґратці, визначені характеристичні температури  $\theta_D$ , їх залежності від температури і тиску  $\theta(P, T)$  і параметри Грюнайзена  $\gamma$  для вказаних вище монокристалів [8,10-14]. На основі термодинамічного аналізу залежності  $\theta(P, V, T)$  оцінена ангармонійність коливань атомів досліджуваних монокристалів і запропоновано розміщення їх в певній послідовності – ряд ангармонійності кристалів. Були проведені також систематичні дослідження поведінки маятникових смуг при термічному і механічному вигині кристалів, проведено математичне моделювання дифракційного контрасту пружних полів деформацій у реальних монокристалах [15-18]. При теоретичному та експериментальному вивченні багатохвильової дифракції [17-25] було вперше виявлено новий інтерференційний ефект – повертання площини поляризації X-хвиль в залежності від товщини кристалу [20]. Показано, що в діапазоні довжин X-хвиль всі кристали є оптично активними, а ефект гіротропії зумовлений не тензором діелектричної проникливості, а динамічним характером взаємодії хвиль у кристалі. Пізніше ефект гіротропії був виявлений експериментально при двохвильовому розсіянні X-хвиль [26].

На кафедрі ФТТ були вперше отримані маятникові смуги при багатохвильовому розсіянні X-хвиль [19,23]. Ефект розщеплення маятникових смуг в області просвітлення дозволив відтворити вигляд дисперсійних поверхонь і визначити екстинкційні віддалі при багатохвильовому розсіянні. Переважна більшість теоретичних і експериментальних робіт по динамічному розсіянню виконана в наближенні падаючих плоских X-хвиль. Водночас перша праця Н. Като і Р. Ланга [4] виявила, що в більшості випадків експериментально реалізується наближення падаючих сферичних хвиль. Тому Н. Като розробив динамічну теорію розсіяння в наближенні сферичних хвиль [27, 28]. Пізніше Афанасьєв О.М. і Кон В.Г. побудували узагальнену теорію дифракції сферичних хвиль [29], в якій теорія Н. Като є частковим випадком. Особлива увага в даних працях зосереджувалася на динамічні ефекти фокусування X-хвиль і оригінальну форму маят-

никових смуг. Експериментально ефект фокусування сферичних X-хвиль був виявлений незалежно В.В. Аристовим [30] і В.Д. Козьмиком [31,32]. Особливості формування маятникових смуг в наближенні сферичних хвиль описані в [33].

### Визначення структурних і атомних амплітуд розсіяння

Експериментальне визначення величин структурних  $F_{hkl}$  і атомних  $f_a$  амплітуд має особливо важливе значення для вивчення структури реальних кристалів, а також для перевірки основних положень теорії розсіяння випромінювань речовиною. Великі зусилля у цьому напрямку були вжиті багатьма авторами як в рамках кінематичної, так і динамічної теорій розсіяння. Традиційні методи визначення  $F_{hkl}$  і  $f_a$ , ґрунтуються на вимірюванні інтегральної інтенсивності розсіяння, залежать від цілого ряду факторів, потребують достатньо складної апаратури і мають низьку точність вимірювання ( $\sim 5\div 7\%$ ). Числові методи розрахунку атомних амплітуд розсіяння із застосуванням сучасних комп'ютерних систем дозволяють розрахувати  $f_a$  з достатньою точністю. Із множини методів розрахунку  $f_a$  найбільш надійним вважається метод Хартрі-Фока, водночас він не враховує релятивістських ефектів. Навіть найбільш сучасні методи розрахунків, які враховують релятивістські хвильові функції [39] не володіють високою точністю і надійністю при розрахунку дисперсійних поправок  $\Delta f$  поблизу країв поглинання і можуть бути використані лише для легких елементів. З появою метода маятникових смуг [4-6] і його широким застосуванням для різних кристалів з'явилася надія на успішне розв'язання цієї проблеми. Вимірюючи періоди маятникових осциляцій  $\Lambda$  можна з високою точністю ( $\sim 0,1\%$ ) визначити величини структурних і атомних амплітуд без виміру енергетичних параметрів розсіяння:

$$\Lambda = \frac{(\gamma_0 \gamma_m)^{1/2}}{c \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda}{\pi v} F_{hkl}}. \quad (1)$$

На рис. 1, для прикладу, наведена система маятникових смуг, отримана від атомних площин (220) в  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінюванні від монокристала Ge, вирощеного методом Чохральського. Тут використане монохроматичне поляризоване випромінювання, тому поляризаційне затухання в зображенні маятникових смуг не спостерігається.

Запропонований нами новий метод спостереження маятникових осциляцій від циліндричних зразків [7] дозволяє вдвоє збільшити кількість маятникових смуг, що значно підвищує точність визначення атомних амплітуд розсіяння X-хвиль.

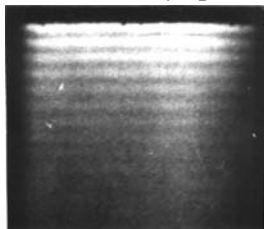


Рис. 1. Система маятникових смуг в Ge, (220) CuK<sub>α1</sub>-випромінювання

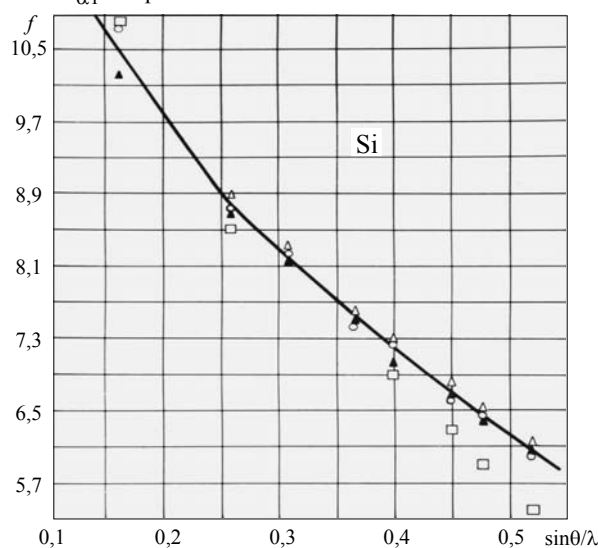


Рис. 2а. Атомні амплітуди розсіяння для Si визначені: □ – методом виміру інтегральних інтенсивностей [40] і методом маятникових кривих [41]; ▲ – методом Хартрі-Фока з врахуванням дисперсійних поправок [42]; Δ – методом маятникових кривих; ○ – методом маятникових смуг [6-10]

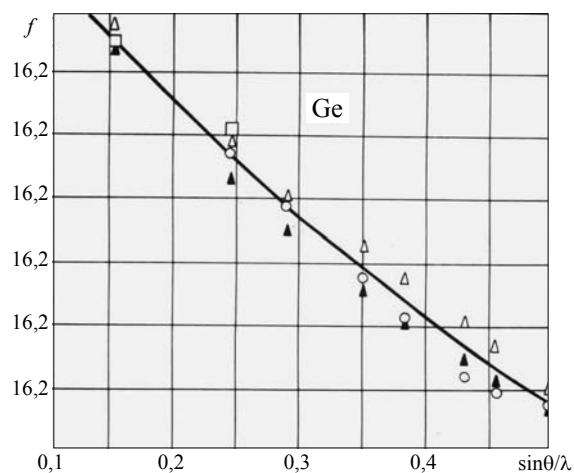


Рис. 2б. Атомні амплітуди розсіяння для Ge визначені: ▲ – методом маятникових кривих [42]; Δ – розраховані теоретично методом Хартрі-Фока [38]; □ – методом маятникових кривих [43]; ○ – методом маятникових смуг [6-10]

Уже перші роботи [4-7, 10, 34, 35,41-43] показали, що при розрахунку  $f_a$  необхідно врахувати дисперсію, поляризацію і поглинання X-хвиль, а також вплив температури (фактор Дебая-Валлера) на розташування маятникових смуг. На рис. 2 наведені залежності розрахованих теоретично  $f_T$  і експериментально виміряних  $f_e$  величин атомних амплітуд від  $\sin\theta/\lambda$  для монокристалів Si і Ge. Суцільна крива ілюструє теоретично розраховану залежність  $f_T(\sin\theta/\lambda)$ , проведену авторами [36-38] методом Хартрі-Фока-Слетера із врахуванням релятивістської хвильової функції [39]. Величини  $f_T$  порівнюються з експериментальними  $f_e$ , які отримані різними авторами.

Розбіжність теоретичних і експериментальних величин  $f_a$  пояснюється точністю визначення періодів маятникових осциляцій та інтегральних інтенсивностей, поляризацією і поглинанням X-хвиль та несферичністю атомних хвильових функцій, яка виникає внаслідок перерозподілу валентних електронів у кристалах. Детальний аналіз наведено у праці [8].

Для прецизійного визначення величин  $f_a$  необхідно особливу увагу звернути на вплив дисперсійних ефектів, які виникають при розсіянні у широкому діапазоні довжин X-хвиль  $\lambda$ . Величини дисперсійних поправок  $\Delta f'$  до атомних амплітуд поблизу країв поглинання становлять  $\sim 2-5\%$ . Класичні експериментальні методи визначення величин  $\Delta f'$  мають низьку точність (30÷50%). Запропонований нами новий метод визначення коефіцієнтів заломлення  $n$  і дисперсійних поправок  $\Delta f'$  [9] дозволяє вимірювати вказані величини з точністю 0,1–0,5%. Метод ґрунтується на визначенні періодів маятникових осциляцій у широкому діапазоні довжин хвиль. Проведені систематичні дослідження дисперсійних ефектів для монокристалів Si, Ge, CaF<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub> та ін. Отримані співвідношення, які описують поведінку маятникових осциляцій поблизу країв поглинання:

$$\Lambda(\omega) = \Lambda_0 \frac{\cos\theta_0}{\cos\theta} \frac{\lambda}{\lambda_0} \left( \frac{F_{hkl} + \Delta F_{hkl}}{F_{hkl}} \right), \quad (2)$$

де  $\omega$  – частота падаючого випромінювання,  $\Lambda_0$  – еталонне значення періоду маятникових смуг при визначеній довжині хвилі  $\lambda_0$  і куту дифракції  $\theta_0$ .

На рис. 3, для прикладу, наведена залежність величин  $\Delta f'$  від  $\lambda/\lambda_K$  для германію, де  $\lambda_K$  – довжина хвилі К-краю поглинання. Експерименталь-

ні результати добре узгоджуються з теорією Кромера [45]. Зауважимо також, що запропонований нами метод знайшов широке застосування. Наприклад, значно пізніше Като і Такеда [46] використали даний метод маятникових осциляцій для визначення дійсної частини структурної амплітуди ( $F_{hkl} + \Delta F_{hkl}$ ) монокристалів Si у діапазоні довжин хвиль Cu–Ag $\alpha$ -випромінювань.

Співробітниками кафедри ФТТ були визначені дисперсійні поправки  $\Delta f'$  і одиничні декременти показника заломлення  $\delta$  ( $n=1-\delta$ ) для Si, Ge, GaAs, Ni, Cu, NaCl, KCl методом X-хвильової дифракційної інтерферометрії [47-49]. Як зазначено в роботі У. Бонзе [50] величини  $\Delta f'$ , отримані нами в роботі [48] є "напевне найбільш вірогідними" і краще всього узгоджуються з релятивістською теорією Кромера [45].

Оскільки величини одиничного декременту показника заломлення  $\delta$  однозначно пов'язані з коефіцієнтом поглинання, густиною речовини і електронною структурою атомів, слід очікувати періодичну залежність величини  $\delta$  від порядкового номера елементів  $Z$  у таблиці Д.І. Менделєєва. Нами вперше експериментально і теоретично підтверджена така періодична залежність  $\delta(Z)$  [51]. Оригінальною є також праця співробітників кафедри ФТТ [25], в якій вперше проведено аналіз дисперсійних ефектів при багатохвильовому розсіянні X-хвиль. Експериментальні і теоретичні результати, пов'язані з дисперсійними ефектами при динамічному розсіянні X-хвиль детально обговорюються в праці [8].

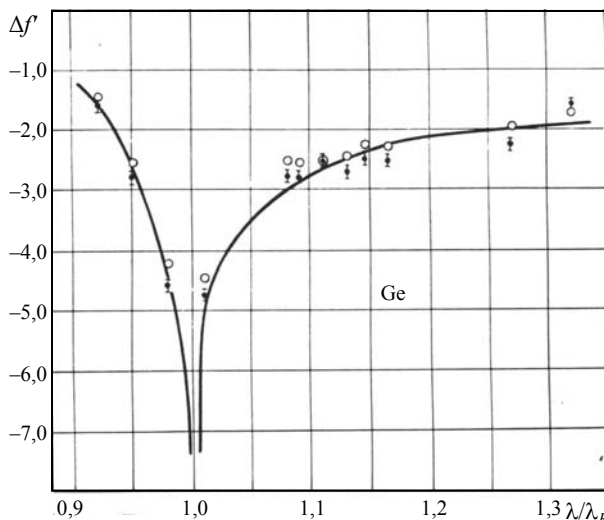


Рис.3. Залежність величин дисперсійних поправок  $\Delta f'$  від  $\lambda/\lambda_K$  для Ge. Суцільна крива – значення теоретично розрахованих величин  $\Delta f'$  з врахуванням релятивістських ефектів розсіяння [45],  $\circ$  – розраховані методом Хенля [44],  $\times$  – експериментальні величини, отримані нами

### Маятникові смуги в недосконалих монокристалах

У реальних кристалах при утворенні різноманітних дефектів або при дії на кристал зовнішніх сил виникають як статичні, так і динамічні зміщення атомів із вузлів ґратки. Відомо, що ефекти теплових коливань або статичних зміщень не руйнують дифракційну картину в цілому, а приводять тільки до зменшення інтегральної інтенсивності на множники  $\exp(-M)$ ,  $\exp(-L)$  і появи дифузного розсіяння. Для протяжних дефектів (дислокації, дефекти пакування, механічні і температурні градієнти і т.п.) хвильове поле в кристалі виявляється просторово модульованим не тільки за амплітудою, а й за фазою. Більшість експериментальних досліджень спрямовані на визначення інтегральних інтенсивностей основних і дифузних максимумів, побудові карт розподілу інтенсивності поблизу вузлів оберненої ґратки. Не применшуючи успіхів у розробці алгоритмів і програм числових методів моделювання дифракційних зображень різного типу дефектів, все ж таки неоднозначність у виборі теоретичних параметрів, фазова проблема та похибки у визначенні інтегральних інтенсивностей приводять, як правило, до констатації тільки якісного узгодження теорії з експериментом. Метод маятникових смуг дає можливість отримувати надійні кількісні результати і з високою точністю визначити наступні важливі фізичні параметри недосконалих кристалів: поля пружних деформацій і напружень, середньоквадратичні зміщення атомів з вузлів у кристалічній ґратці, характеристичні температури Дебая, параметри Грюнайзена тощо.

На кафедрі ФТТ ЧНУ розроблена оригінальна методика отримання маятникових смуг у широкому інтервалі температур (100–700°K) і тисків (0–50 кбар) [10, 23, 14]. Вперше отримані співвідношення для періодів маятникових смуг у залежності від температури  $\Lambda(T)$  [10]:

$$\Lambda_T = \Lambda_0 \exp(\Delta M) \times \exp\left\{\beta \Delta T \left[1 + \Delta M \left(\gamma - \frac{1}{3}\right)\right]\right\}, \quad (3)$$

де  $M$  – показник у множнику Дебая-Валлера,  $\Delta M = (M_{T2} - M_{T1})$ , причому  $T_2 > T_1$ ,  $\Lambda_0$  – період маятникових смуг при низьких температурах,  $\beta$  – коефіцієнт об'ємного розширення.

Дослідження температурної залежності  $\Lambda(T)$  проведено для монокристалів Si, Ge, GaAs, SiO<sub>2</sub>, CaF<sub>2</sub>, LiF, NaCl і KCl.

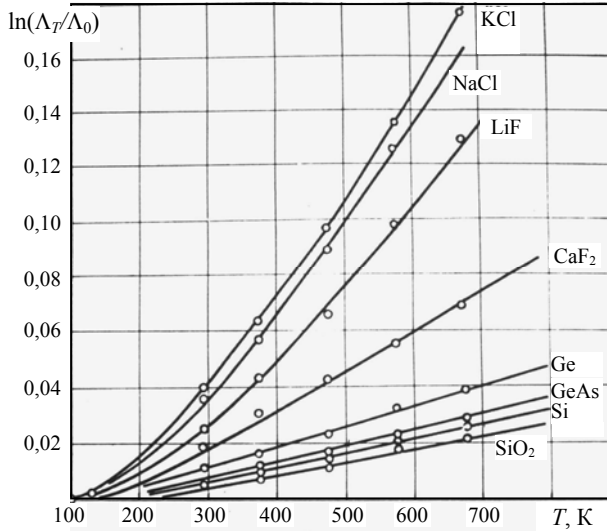


Рис.4. Температурна залежність  $\ln(\Lambda_T/\Lambda_0)$  для маятникових смуг для різних монокристалів

На рис. 4 наведена температурна залежність  $\ln(\Lambda_T/\Lambda_0)$  для різних монокристалів. Характерно, що  $\ln(\Lambda_T/\Lambda_0)$  складається з двох доданків

$$\ln(\Lambda_T/\Lambda_0) = \Delta M + \beta \Delta T \left[ 1 + \Delta M \left( \gamma - \frac{1}{3} \right) \right]. \quad (4)$$

Величина  $\left[ 1 + \Delta M \left( \gamma - \frac{1}{3} \right) \right] \approx 1$  для більшості досліджуваних монокристалів. Перший фононний доданок залежить від характеристичної температури і параметра Грюнайзена, другий потенціальний – в основному від коефіцієнта термічного розширення. Внесок кожного із них може виявитись визначальним і суттєво залежить від пружних і термічних властивостей кристалів, ангармонічності коливань атомів, фононного спектру тощо. Наприклад, нехтування множника  $\exp\left\{ \beta \Delta T \left[ 1 + \Delta M \left( \gamma - \frac{1}{3} \right) \right] \right\}$  в роботі Н. Като [52] привело до похибки 1,5–2% у визначенні  $\Lambda(T)$ .

На основі проведених досліджень запропоновано принципово новий метод дослідження ангармонічності коливань атомів у кристалічній ґратці. Використовуючи отримані співвідношення (3), (4) з високою точністю ( $\pm 5\%$ ) визначені характеристичні температури  $\theta$ , їх температурні залежності  $\theta(T)$  і параметри Грюнайзена для вказаних вище кристалів та інтервалів температур. На основі термодинамічного аналізу  $\theta(V, T, P)$  проведена оцінка ангармонічності коливань атомів монокристалів. Показано, що досліджувані кристали можна розмістити в "ряд ангармонічності" у наступній зростаючій послідовності: Si, Ge, GaAs, SiO<sub>2</sub>, CaF<sub>2</sub>, LiF, NaCl, KCl.

Вперше отримано співвідношення, яке описує в наближенні Дебая–Грюнайзена

$$\left( \frac{d\theta}{dP} \right)_T = \left( \frac{d\theta}{dV} \right)_T \cdot \left( \frac{dV}{dP} \right)_T$$

залежність періодів маятникових осциляцій від тиску  $\Lambda(P)$  [13,14]:

$$\Lambda(P) = \Lambda_0 \exp \left\{ -\chi P \left[ 1 + 2M \left( \gamma - \frac{1}{3} \right) \right] \right\}, \quad (5)$$

де  $\chi$  – ізотермічна стисливість.

Була виготовлена апаратура, яка дозволяє проводити X-променеві дифракційні дослідження при високих тисках  $\sim 50 \div 100$  кбар. Показано, що основний внесок у залежність  $\Lambda(P)$  вносить потенційний множник  $\exp(-\chi P)$ . Водночас для високих тисків ( $P > 20$  кбар) необхідно враховувати  $\gamma(P)$ , а також нелінійність у залежності періоду ґратки  $a(P)$ .

Групою авторів кафедри [15,16] проведено систематичне дослідження впливу термічних і механічних градієнтів та зосереджених сил на маятникові смуги у монокристалах Si, Ge, GaAs, SiO<sub>2</sub> і CaF<sub>2</sub>. Виявлено зміну періодів  $\Lambda$  і зсув маятникових осциляцій у тонку частину клиновидних кристалів, а також появу маятникових смуг в областях поляризаційного затухання, що пояснюється фазово-екстинкційним механізмом формування дифракційного контрасту. Комп'ютерне моделювання дифракційних зображень проведено на основі геометричної теорії Пенінга–Полдера–Като і рівнянь Такаґі. Аналіз дифракційних зображень дозволяє отримати кількісну інформацію про величину деформації, амплітуди і фази хвиль та отримати функцію локальних розорієнтацій  $\alpha(x, y, z)$  атомних площин [61].

#### Маятникові смуги при багатохвильовому розсіянні X-хвиль

Динамічна теорія Евальда-Лауе описує багатохвильову дифракцію X-хвиль у кристалі. Ще на початку XX століття були відкриті оригінальні багатохвильові ефекти: підсилення і просвітлення дифракційних максимумів (Майер, 1923 р.), обхідне збудження заборонених відбивань (Ренінгер, 1937 р.), поява косселівських ліній (див. бібліографію в [54]). Інтерес до багатохвильової дифракції значно зріс після експериментального відкриття ефекту підсилення аномального проходження хвиль (багатохвильовий ефект Бормана), ефектів зменшення екстинкційних довжин і звуження багатохвильових областей розсіяння та дифракційної гіротропії X-хвиль. Аналіз вказаних вище ефектів показує, що багатохвильова

дифракція повинна бути чутливішою до деформацій кристалічної ґратки у порівнянні з двохвильовою. Зі всіх ефектів динамічного розсіяння X-хвиль маятникові осциляції містять в собі найбільш повну інформацію про поведінку хвильових полів у кристалі і надають можливість отримати кількісну інформацію про реальну структуру кристалів.

Перші дослідження багатохвильових маятникових смуг були проведені у працях [19-23]. Розроблені алгоритми і проведено комп'ютерне моделювання розподілу маятникових осциляцій в залежності від геометрії багатохвильової дифракції, виду дисперсійної поверхні і співвідношення між структурними амплітудами. Отримані аналітичні вирази для амплітуд  $D_n$  та розраховані залежності коефіцієнтів відбивання  $K_n$  дифрагованих хвиль всередині кристалу від глибини [20]. Проведено порівняння відстаней між маятниковими смугами  $\Lambda$  у багатохвильовому і двохвильовому випадках для різних трихвильових конфігурацій: рівнобедрений, рівносторонній і різносторонній трикутники. Виявлено новий інтерференційний ефект, пов'язаний із специфічною поведінкою площин поляризації дифрагованих хвиль у кристалі. Показано, що площини поляризації векторів  $D_n$  обертаються в залежності від глибини кристалу. Кут повороту площини поляризації залежить від поляризованості кристалу, періоду ґратки та довжини хвилі. Отже, в області довжин X-хвиль всі кристали повинні бути оптично активними. Характерно, що на відміну від гіротропії в області довжин хвиль видимого світла, яка пов'язана з просторовою дисперсією діелектричної проникливості, виявлений нами ефект має суто дифракційний динамічний характер. Аналогічні результати були підтверджені експериментально у двохвильовому випадку [26]. Виявлено, що ефект дифракційного повороту площин поляризації X-хвиль обумовлений просторовою модуляцією когерентних  $\sigma$ - і  $\pi$ -компонент вектора електричної індукції всередині кристалу.

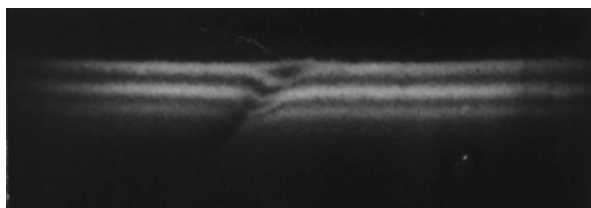


Рис. 5. Багатохвильові маятникові смуги в монокристалі Ge в  $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінюванні, трихвильова дифракція  $(000, 111, \bar{1}11)$

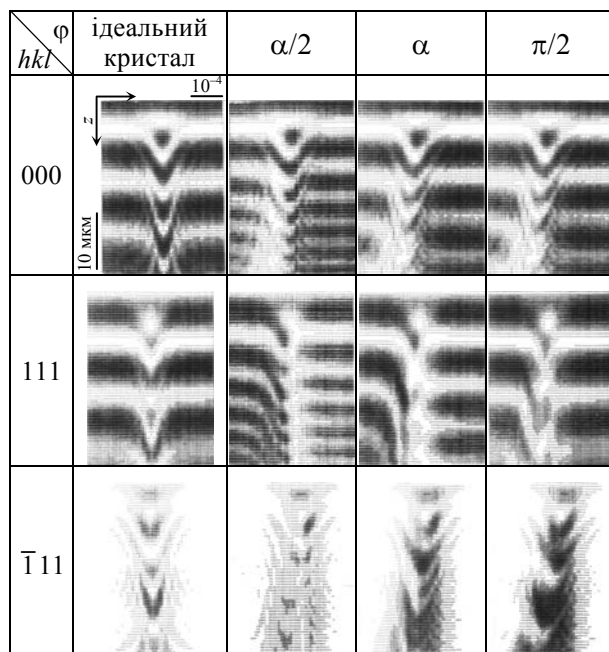


Рис. 6. Багатохвильові маятникові смуги в Ge при еквідистантній деформації атомних площин

Вперше маятникові смуги при багатохвильовій дифракції були експериментально виявлені нами на кафедрі ФТТ [23]. На рис.5 наведено маятникові смуги в монокристалі Ge в  $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінюванні, отримані у випадку трихвильової дифракції  $(000, 111, \bar{1}11)$ . На топограмі спостерігається трихвильова область просвітлення, яка перетинається двохвильовими маятниковими смугами. На границях області просвітлення двохвильові маятникові смуги розщеплюються на дві. Розщеплення маятникових смуг у багатохвильовій області якісно і кількісно підкреслює геометрію дисперсійної поверхні у трихвильовому випадку [56]. Багатохвильові маятникові смуги були отримані також для конфігурацій  $(000, 111, 200)$ ,  $(000, 111, \bar{1}11)$ ,  $(000, 220, 202)$ ,  $(000, 220, 400, 2\bar{2}0)$ . Детальний аналіз особливостей багатохвильових маятникових смуг проведений у праці [55].

Багатохвильова дифракція X-хвиль в кристалах з акустичним полем зміщень вперше розглянута у праці [57], а з еквідистантно зігнутими атомними площинами у [58]. Співробітниками кафедри [17, 58-60] проведено дослідження впливу періодичного поля зміщень та еквідистантної деформації атомних площин на багатохвильові маятникові смуги. На рис.6 наведено комп'ютерне моделювання дифракційних топограм  $R_n(\alpha, z)$  для випадку еквідистантної деформації атомних площин у трихвильовому випадку  $(000, 111, \bar{1}11)$

в широкій області кутів  $\alpha$  при постійній деформації  $P/\chi_{111}=10^{-5}$ . Зі збільшенням товщини кристалу  $z$  багатохвильова область зміщується ліворуч, збільшується кількість маятникових смуг. Виявлено, що форма, період і місцеположення маятникових смуг суттєво залежить від деформації  $P$  і орієнтації вектора зміщень  $\vec{U}(r)$  по відношенню до векторів дифракції. Проведений аналіз багатохвильової дифракції Х-хвиль у недосконалих кристалах наочно демонструє перспективу практичного застосування багатохвильових маятникових смуг для отримання кількісних параметрів деформації досліджуваних кристалів.

На закінчення зауважимо, що наведені вище дослідження проведені у наближенні падаючої плоскої монохроматичної хвилі. У більшості випадків експериментально реалізується наближення падаючої сферичної хвилі [4, 27-33] і маятникові смуги Евальда, які розташовані паралельно вхідній поверхні кристалу (рис. 1), реалізовані експериментально нами для монохроматичних плоских хвиль [5-10] суттєво змінюють свою форму і вироджуються у гіперболи – маятникові смуги Като. Критерії застосування наближення сферичної або плоскої хвилі введені Н. Като у праці [27]:  $\Omega \geq \Delta\theta$  – для сферичної хвилі і  $\Omega < \Delta\theta$  – для плоскої хвилі, де  $\Omega$  – кутова ширина первинного пучка хвиль, а  $\Delta\theta$  – кутова ширина на половині дифракційного максимуму. Маятникові осциляції для випадку сферичних хвиль у наближенні Н. Като [4] спостерігаються

при падінні на кристал вузьких пучків  $\sim 10-15$  мкм і мають вид гіпербол (рис.7).

Узагальнена динамічна теорія Афанасьєва [29] відрізняється від теорії Като наявністю у фазі

$$X\text{-хвиль множиника } t_s = \frac{\lambda L}{2\Lambda_s \sin^2 \theta}, \text{ де } L - \text{від-}$$

даль між джерелом випромінювання і щілиною,  $\Lambda_s$  – період маятникових осциляцій,  $t$  – товщина кристала. У даній теорії при  $t \ll t_s$  задовольняється наближення падаючої плоскої хвилі і маятникові смуги мають вигляд гіпербол, вершини яких направлені до товстої частини кристалу – аномальний пендельозунг-ефект, який вперше виявлений експериментально у праці [30]. Характерно, що ступінь вигину маятникових смуг залежить від  $L$  і при збільшенні цієї віддалі маятникові смуги перетворюються у прямі лінії. При  $t < t_s$  спостерігається звуження пучка – дифракційне фокусування, яке спостерігалось одночасно і незалежно авторами праць [30-32]. При досягненні товщини кристалу  $t \gg t_s$  маятникові осциляції спостерігаються у вигляді гіпербол, вершини яких орієнтовані в тонку частину клиновидного кристалу (рис.7). Залежність форми маятникових смуг від віддалі між зразком і фотоплівкою розглянуто у праці [33]. Секційна топографія знаходить широке застосування для дослідження дефектів структури (дислокацій, дефектів пакування тощо), а також для удосконалення динамічної теорії розсіяння Х-хвиль у реальних монокристалах.

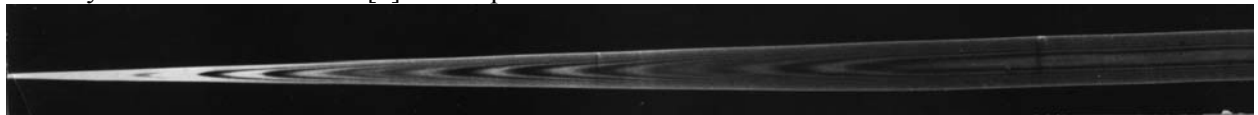


Рис. 7. Маятникові смуги в монокристалі Si. Секційна топограма.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Darwin C.G. The theory of X-ray reflection // Phil. Mag. – 1914. – 27, No.158. – P. 315-333.
2. Ewald P.P. Zur Begründung der Kristalloptik. Teil II. Theorie der Reflexion und Brechung // Ann. Phys. – 1916. – 49, No.4. – S. 117-143.
3. Хайденрайх Р. Основы просвечивающей электронной микроскопии. – М.: Мир. – 1966. – 471с.
4. Kato N., Lang A.R. A study of Pendellösung fringes in X-ray diffraction. // Acta Cryst. – 1959. – 12, No.4. – P. 787-793.
5. Бояджян Г.С., Кушта Г.П., Михайлюк И.П., Раранский Н.Д. Определение структурных амплитуд Ge и Si при помощи полос маятникового решения рентгеновских интерференций // IX научно-техническое совещание по применению рентгенов-
6. Михайлюк И.П., Раранский Н.Д. Некоторые результаты экспериментального изучения маятниковых полос рентгеновских интерференций // УФЖ. – 1968. – 12, вып.5. – С. 856-859.
7. Михайлюк И.П., Раранский Н.Д., Кивецкий С.А. Получение маятниковых полос рентгеновских интерференций от монокристаллов с цилиндрической выходной поверхностью // УФЖ. – 1970. – 15, №10. – С. 1742-1744.
8. Раранский Н.Д. Маятниковые и муаровые полосы в реальных монокристаллах: Дис. ... докт. физ.-мат. наук. – Черновцы, 1987.
9. Дроздовский В.Б., Кивецкая М.Л., Михайлюк И.П., Раранский Н.Д. Исследование аномального рассеяния рентгеновских лучей вблизи К-края по-

- глошення методом маятникових полос // УФЖ. – 1970. – **15**, №9. – С. 1562-1565.
10. Раранський Н.Д. Рентгенографическое исследование совершенных монокристаллов методом маятниковых полос: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Черновцы, 1970.
  11. Бояджян Г.С., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Температурна залежність періодів маятникових смуг монокристалів GaAs // УФЖ. – 1973. – **18**, вып.2. – С. 327-329.
  12. Михайлюк І.П., Михальченко В.П., Раранський Н.Д. Определение констант тензора Грюнаизена  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> методом маятниковых полос // Тез. докл. Выездной сессии научного Совета АН СССР по проблеме "Образование и структура кристаллов". – Ереван, 1974. – С.43.
  13. Бояджян Г.С., Раранський Н.Д. Влияние давления и температуры на период маятниковых полос // Тез. докл. XIII Всесоюзного совещания по применению рентгеновских лучей... – Черногловка, 1982. – С.181.
  14. Раранський Н.Д., Бояджян Г.С. Влияние давления на период маятниковых полос // ФТТ. – 1983. – **25**, вып.1. – С.298-300.
  15. Бояджян Г.С., Раранський Н.Д. Влияние термоупругих деформаций на маятниковые полосы // Тез. докл. II Всесоюзного совещания по методам и аппаратуре для исследований когерентного взаимодействия излучения с веществом. – Ереван, 1982. – С.21-22.
  16. Раранський Н.Д., Фодчук І.М., Бояджян Г.С. Маятниковые полосы в упруго-деформированных монокристаллах. – Рукопись № 1458 Ук – 85 Деп. в ВИНТИ 1985, № 12(170) № 997.
  17. Остапович М.В., Тихонова Е.А., Михайлюк І.П., Остапович В.Н. Рассеяние плоских рентгеновских волн при трехволновой дифракции в кристаллах с эквидистантно изогнутыми отражающими плоскостями // Металлофизика. – 1985. – **7**, №5. – С.17-24.
  18. Раранський Н.Д., Остапович М.В., Фодчук І.М., Остапович В.Н. Трехволновые маятниковые осцилляции в кристаллах с эквидистантно изогнутыми отражающими плоскостями // УФЖ. – 1986. – **31**, №7. – С.1080-1088.
  19. Кшевецький С.А., Кшевецька М.Л., Михайлюк І.П., Раранський Н.Д. Маятниковые полосы рентгеновских интерференций в трехволновом случае // X совещание по применению рентгеновских лучей к исследованию материалов. – М., 1971. – С.134.
  20. Кшевецька М.Л., Кшевецький С.А., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Дифракція рентгенівських променів у випадку трьох сильних хвиль // УФЖ. – 1973. – **18**, №4. – С.578-587.
  21. Кшевецька М.Л., Кшевецький С.А., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Дифракція Лауе-Брегга у випадку трьох сильних хвиль // УФЖ. – 1973. – **18**, №7. – С.1171-1177.
  22. Козьмик В.Д., Кшевецька М.Л., Кшевецький С.А., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Компланарна трьохвильова дифракція рентгенівських променів // УФЖ. – 1974. – **19**, №10. – С.1640-1644.
  23. Кшевецький С.А., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Вивчення трихвильових ефектів дифракції методом маятникових смуг // УФЖ. – 1975. – **20**, №3. – С.497-498.
  24. Козьмик В.Д., Кшевецька М.Л., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Рентгенівська інтерферометрія в багатохвильовому випадку // УФЖ. – 1976. – **21**, №10. – С.1628-1632.
  25. Кшевецька М.Л., Раранський М.Д., Фодчук І.М., Шафранюк В.П. Дисперсійні ефекти при багатохвильовому розсіянні рентгенівських променів // УФЖ. – 1983. – **28**, №12. – С.1846-1850.
  26. Михайлюк І.П., Кшевецький С.А., Остапович М.В., Шафранюк В.П. Дифракційне обертання площини поляризації рентгенівських променів // УФЖ. – 1977. – **22**, №1. – С.60-64.
  27. Kato N. A theoretical study of pendellösung fringes. I. General consideration // Acta Cryst. – 1961. – **14**, No.5. – P.526-533.
  28. Kato N. A theoretical study of pendellösung fringes. II. Detailed discussion based upon a spherical wave theory // Acta Cryst. – 1961. – **14**, No.6. – P.627-636.
  29. Афанасьев А.М., Кон В.Г. Динамическая теория дифракции сферической рентгеновской волны. Общий формализм // ФТТ. – 1977. – **19**, вып.6. – С.1775-1783.
  30. Аристов В.В., Половинкина В.И., Шмытько И.М., Шулаков Е.В. Обнаружение фокусировки дифрагированных совершенным кристаллом рентгеновских лучей // Письма в ЖЭТФ. – 1978. – **28**, вып.1. – С.6-9.
  31. Козьмик В.Д., Михайлюк І.П. Дифракционная фокусировка сферической рентгеновской волны // УФЖ. – 1978. – **23**, №9. – С.1570-1571.
  32. Козьмик В.Д., Михайлюк І.П. Экспериментальное обнаружения эффекта дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны // Письма в ЖЭТФ. – 1978. – **28**, в.11. – С.673-674.
  33. Козьмик В.Д., Раранський Н.Д., Фодчук І.М. Зависимость формы маятниковых полос от расстояния между образцом и пленкой // УФЖ. – 1980. – **25**, №5. – С.852-853.
  34. Hart M., Lang A.K. The influence of X-ray polarisation of the visibility of pendellösung fringes // Acta Cryst. – 1965. – **9**, No.1. – P.73-77.
  35. Tahemura S., Kato N. Absolute Measurement of Structure Factor of Si by using X-Ray Pendellösung and Interferometry fringes // Acta Cryst. – 1972. – **A28**, No.1. – P.69-80.
  36. Clementi E. Ab initio computations in atoms and molecules // IBM.J.Res. and developm. – 1965. – **9**, No.1. – P.2-19.
  37. Dewson B. The covalent bond in Silicon // Proc. Roy. Soc. – 1967. – **A298**, No.1455. – P.379-394.
  38. Heuson H.K., Hewman P., Lea J.D., Shillman S.



- HPS atomic scattering factors // *Acta Cryst.* – 1964. – 17. – P.1040-1044.
39. Doyle P.A., Turner P.S. Relativistic Hartree-Fock X-ray and electron scattering factors... // *Acta Cryst.* – 1968. – A24. – P.390-393.
40. Götlicher S., Kupkal K., Nagoresen G., Wölfel E. Röntgenographische Bestimmung der Elektronendichteferteilung in Kristallen. VI. Die Elektronen Verteilung in Silicium // *J. Phys. Chem. (BRD).* – 1969. – 21, No.1-2. – S.133-145.
41. Kato N. Pendellösung fringes in X-ray diffraction // *Acta Geol. Et Geogr., Bratislava.* – 1969. – No.14. – P.43-74.
42. Aldred J.E., Hart M. The electron distribution in Silicon. I. Experiment // *Proc. Roy. Soc., London.* – 1973. – A332, No.1589. – P.223-238.
43. Batterman B.W., Pattel J.K. Pendellösung measurement of the atomic Scattering factor of Ge. // *J. Appl. Phys.* – 1968. – 39, No.3. – P.1882-1887.
44. International tables for X-ray crystallography / General Editor Lonsdale K. – Birmingham, England: Kynoch Press, 1972. – V.1-3.
45. Cromer D.T. Anomalous dispersion corrections computed from Self-consistent field relativistic Dirac-Slater Wave functions // *Acta Cryst.* – 1965. – 18, No.1. – P.17-23.
46. Kato N., Takeda T. The real part of the anomalous dispersion of Si // *J. Cryst. Soc. Japan.* – 1977. – No.2. – P.95-98.
47. Дроздовський В.Б., Михайлюк І.П., Раранський Н.Д. Определение показателей преломления методом рентгеновской интерферометрии // *УФЖ.* – 1972. – 17, №7. – С.1212-1214.
48. Дроздовський В.Б., Михайлюк І.П., Раранський М.Д. Дослідження аномального розсіяння рентгеновських променів поблизу К-краю поглинання // *УФЖ.* – 1974. – 19, №7. – С.1215-1216.
49. Раранський Н.Д., Дроздовський В.Б. Исследование дисперсии рентгеновских лучей методом рентгеновской интерферометрии // *Материалы Выездной сессии Научного Совета АН СССР по проблеме "Образование и структура кристаллов".* – Ереван. – 1975. – С.96-100.
50. Bonse U., Materlik G. Precise interferometric measurement of the Ni K-edge for x-ray scattering amplitude with synchrotron X-ray // *Z. Phys.* – 1976. – 24, No.191. – P.189-191.
51. Раранський Н.Д., Шафранюк В.П., Фодчук І.М., Михайлов В.А. О периодическом изменении единичного декремента показателя преломления // *Субструктурное упрочнение металлов и дифракционные методы исследования.* – Киев: Наукова думка, 1985. – С.216-217.
52. Hattori H., Kuriyama H., Katagawa T., Kato N. Absolute measurement of structure factor of Si single crystal by means of X-ray pendellösung fringes // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1965. – 20, No.6. – P.988-996.
53. Бояджян Г.С., Раранський Н.Д. Влияние термоупругой деформации на маятниковые полосы в Ge // *Материалы юбилейной конференции молодых ученых Буковины.* – Черновцы, 1970. – С.132-133.
54. Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах // *Пер. с англ. под ред. Афанасьева А.М.* – М.: Мир. – 1987. – 334с.
55. Кишевецкий С.А. Многоволновая рентгенография кристаллов. Дис... доктора физ.-мат. наук. – Черновцы. – 1987.
56. Кишевецкая М.Л. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллами в трехволновом приближении: Дис... канд. физ.-мат. наук. – Черновцы. – 1974.
57. Энтин И.Р. О динамической дифракции рентгеновских лучей на кристалле с периодическим полем смещений // *ЖЭТФ.* – 1979. – 77, вып.1. – С.214-222.
58. Остапович М.В., Михайлюк І.П., Остапович В.Н. Многоволновая дифракция плоских волн в кристаллах с эквидистантно изогнутыми атомными плоскостями // *Тез. докл. II Всесоюзного совещания по методам и аппаратуре для исследований когерентного взаимодействия излучения с веществом.* – Ереван, 1982. – С.25-26.
59. Раранський Н.Д., Остапович М.В., Фодчук І.М. Многоволновые маятниковые осцилляции в кристаллах с эквидистантно изогнутыми опережающими плоскостями / *Черновицкий госуниверситет.* – 1984. – 30с. – Деп. В Укр. НИИНТИ 10.10.84 №1691 Ук-84. Деп.
60. Раранський Н.Д., Фодчук І.М. Многоволновое рассеяние рентгеновских лучей в кристалле с периодическим полем смещений // *Тез. докл. Всесоюзного совещания "Проблемы рентгеновской диагностики несовершенства кристаллов".* – Ереван, 1985. – С.60-61.
61. Струк Я.М., Бобровник С.В. Товщинні осциляції інтенсивності у деформованих кристалах Si // *Науковий вісник ЧНУ. Вип. 52: Фізика. Електроніка.* – Чернівці: ЧНУ, 1999. – С.41-44.