

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ

PACS number: 07.85.Jy, 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.Lk

Новые диагностические возможности деформационных зависимостей интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в условиях нарушения закона Фриделя

А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук*, В. Л. Носик*,
А. И. Низкова, В. Ф. Мачулин**, И. В. Прокопенко**, Е. Н. Кисловский,
В. П. Кладько**, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, Е. Г. Лень,
А. А. Белоцкая, Я. В. Василик, А. И. Гранкина, И. Н. Заболотный,
А. А. Катасонов, М. Т. Когут, О. С. Кононенко, А. В. Мельник,
В. В. Молодкин, Л. И. Ниничук, И. И. Рудницкая, Б. Ф. Журавлев

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

**Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН,
просп. Ленинский, 59,
119333 Москва, Россия*

***Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарева НАН Украины,
просп. Науки, 41,
03028 Киев, Украина*

Установлено влияние дефектов, хаотически распределенных в объеме кристалла, (ХРД) на величину отношения интегральных интенсивностей hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ лауэ-отражений $Y = I^{hkl}/I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$. Показана возможность проведения диагностики параметров ХРД по отклонению Y для кристалла с ХРД от Y_{perf} идеального кристалла и его изменению с толщиной кристалла, при использовании излучения с длинами волн как ниже, так и выше K -края поглощения. Аналогично, для кристалла с ХРД, вследствие вклада диффузной компоненты рассеяния, величина параметра Y_s для скачка интенсивностей вблизи K -края поглощения уменьшается, и именно по степени этого уменьшения и ее зависимости от толщины кристалла также можно определять характеристики ХРД.

Встановлено вплив дефектів, хаотично розподілених в об'ємі кристалу, (ХРД) на величину відношення інтенсивностей hkl та $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ Ляве-відбиттів $Y = I^{hkl}/I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$. Показано можливість виконання діагностики параметрів

ХРД за відхиленням Y для кристалу з ХРД від Y_{perf} ідеального кристалу та його зміною із товщиною кристалу, при використанні випромінення з довжинами хвиль як нижче, так і вище K -краю вбирання. Аналогічно, для кристалу з ХРД, внаслідок внеску дифузної компоненти розсіяння, величина параметра Y_s для стрибка інтенсивностей поблизу K -краю вбирання зменшується, і саме за ступенем цього зменшення та його залежністю від товщини кристалу також можна визначати характеристики ХРД.

An influence of the randomly distributed defects (RDD) in the bulk crystal on value of the intensities of hkl and $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ Laue-reflections' ratio, $Y = I^{hkl}/I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ is revealed. It has been shown the possibility to carry out the RDD-parameters diagnostics by deviation of Y for crystal with RDD from Y_{perf} for perfect crystal as well as by its variation with the crystal thickness, both for radiation wavelengths above and below the absorption K -edge. By analogy, for the crystal with RDD, due to the diffuse-scattering component contribution, the value of the parameter Y_s for the intensities jump near the absorption K -edge is decreased, and just by both this decreasing degree and its dependence on the crystal thickness, the RDD characteristics can be determined as well.

Ключевые слова: лауэ-дифракция, K -край, кристалл с хаотически распределенными дефектами, дефекты кристаллов, закон Фриделя.

(Получено 27 июля 2009 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно [1–3], что упругие искажения кристалла могут быть эффективно определены в терминах отклонений от закона Фриделя интегральных интенсивностей hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ лауэ-отражения (I^{hkl} , $I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$) или по параметру Y :

$$Y = I^{hkl}/I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}. \quad (1)$$

Отличие этого отношения от единицы связывается с кривизной решетки в кристаллах. При этом следует учесть, что изменение знака вектора дифракции H в кристалле с цилиндрической упругой деформацией эквивалентно изменению знака деформации при неизменном H , т.е. имеют место соотношения:

$$I^{hkl} = R_i(+), \quad I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}} = R_i(-), \quad (2)$$

где $R_i(+)$ и $R_i(-)$ — интегральные коэффициенты отражения от кристалла с различными знаками радиуса кривизны макроскопического изгиба.

Цель настоящей работы — изучение влияния дефектов, хаотически распределенных в объеме упруго изогнутого кристалла (ХРД), на величину параметра асимметрии Y и обоснование метода определения характеристик ХРД по величине параметра Y и по ходу его зависимости от толщины кристалла $Y(t)$.

2. МОДЕЛЬ ПАРАМЕТРА АСИММЕТРИИ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ

На основе полуфеноменологической модели ИИР изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами, полученной в работе [4] и выражений (1) и (2), в настоящей работе построена модель параметра асимметрии ДЗ ИИР:

$$Y = \frac{R_i(+)}{R_i(-)}, \quad (3)$$

$$R_i(+)=R_{\text{icoh}}[1+(BT\mu_0l)0,074]\exp[-(BT\mu_0l)^2 0,00604]+R_{\text{idif}}[1+(BT\mu_0l)0,0157]\exp[-(BT\mu_0l)^2 0,00044],$$

$$R_i(-)=R_{\text{icoh}}[1-(BT\mu_0l)0,074]\exp[-(BT\mu_0l)^2 0,00604]+R_{\text{idif}}[1-(BT\mu_0l)0,0157]\exp[-(BT\mu_0l)^2 0,00044],$$

где

$$R_{\text{icoh}}=\exp(-\mu_0l)B_0EI_0(h_s)\exp(-\mu_{ds}^0l), B_0=\frac{C\pi|\chi_{\bar{H}r}|}{2\sin 2\theta_B}, \quad (4)$$

$$R_{\text{idif}}=\exp(-\mu_0l)2LR_p\exp(-\mu^*l), \quad (5)$$

μ^* — интегральный коэффициент эффективного поглощения диффузной составляющей ИИР из-за диффузного рассеяния когерентных волн и перерассеяния диффузных волн на флуктуациях статических смещений атомов, вызванных дефектами,

$$B=\frac{\lambda^2\sin\psi[1+\gamma_0\gamma_1(1+\nu)]}{2\pi|\chi_{\bar{H}r}|^2rd} [5], T=\frac{\pi t|\chi_{\bar{H}r}|}{\lambda\sqrt{\gamma_0\gamma_1}} [5], \lambda — \text{длина волны}$$

используемого излучения, ψ — угол между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности кристалла, $\gamma_0=\cos(\theta_B+\psi)$, $\gamma_1=\cos(\theta_B-\psi)$, ν — коэффициент Пуассона, $\chi_{\bar{H}r}$ — действительная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла, r — ра-

диус кривизны цилиндрического изгиба кристалла, $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, a — постоянная решетки, h, k, l — индексы Миллера, t — толщина кристалла, μ_0 — коэффициент фотоэлектрического поглощения.

Для оценки влияния толщины кристалла на величину параметра асимметрии Y в настоящем разделе по выражениям (1)–(5) рассчитаны представленные на рис. 1 зависимости Y от толщины идеального кристалла t . Расчеты Y для слабоасимметричных 220 лауэ-рефлексов излучений с разными длинами волн проводились для упругоизогнутого монокристалла Ge при радиусе цилиндрического изгиба $r = \pm 2,4$ м. Рассмотрены случаи близких к K -краю поглощения излучений непрерывного спектра с длинами волн 0,1139 нм (слабо поглощающееся) и 0,1094 нм (сильно поглощающееся), а также характеристических FeK_α - и MoK_β -излучений.

Интегральная интенсивность рассеяния для идеального кристалла определяется его отражательной и поглощательной способностями. Обе они растут с увеличением длины волны используемого рентгеновского излучения. Увеличение отражательной способности вызывает рост ИИР, а увеличение поглощательной способности — уменьшение ИИР. Однако согласно предложенной модели влияние изгиба на отражательную способность пропорционально отношению мнимой части фурье-поляризуемости кристалла (описывающей поглощение излучения) к действительной части (описывающей отражение излучения). Влияние изгиба на отражательную способность зависит от его знака тем больше, чем больше отноше-

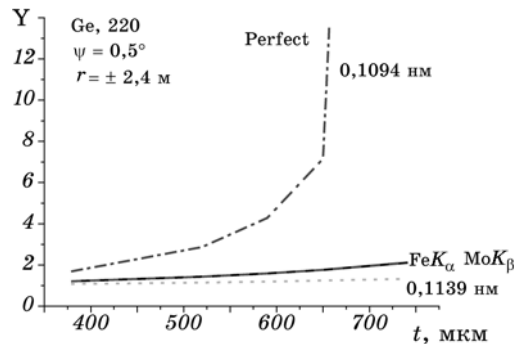


Рис. 1. Рассчитанные зависимости параметра асимметрии ИИР Y от толщины идеального кристалла. Расчеты проведены для FeK_α -излучения ($\chi_{i\bar{H}}(\chi_{r\bar{H}})^{-1} = 0,062$), MoK_β -излучения ($\chi_{i\bar{H}}(\chi_{r\bar{H}})^{-1} = 0,070$), для излучения с длинами волн 0,1139 нм ($\chi_{i\bar{H}}(\chi_{r\bar{H}})^{-1} = 0,026$) и 0,1094 нм ($\chi_{i\bar{H}}(\chi_{r\bar{H}})^{-1} = 0,185$).

ние $\chi_{i\bar{H}}(\chi_{r\bar{H}})^{-1}$, т.е. с ростом поглощения растет влияние изгиба на отражательную способность и становится более резким рост коэффициента асимметрии.

Из рисунка 1 видно, что при отсутствии ХРД в кристалле для заданной степени упругого изгиба параметр асимметрии Y тем больше отличается от единицы, чем больше толщина кристалла. При этом видно, что зависимости Y от толщины при резко различных коэффициентах поглощения для характеристических излучений сливаются. В то же время для излучений непрерывного спектра вблизи K -края поглощения при таком же различии поглощательных способностей — заметно расходятся. Дело в том, что увеличение поглощательной способности при переходе от MoK_{β} - к FeK_{α} -излучению сопровождается ростом отражательной способности, а по разные стороны K -края отражательные способности для излучений с близкими длинами волн 0,1094 и 0,1139 нм практически одинаковы, при таком же кардинальном различии поглощательных способностей, как и для MoK_{β} - и FeK_{α} -излучений. Следствием существенного различия толщинных зависимостей $Y(t)$ для вышеуказанных длин волн является еще более резкая зависимость от толщины кристалла скачка параметра асимметрии при переходе через K -край поглощения:

$$S_Y = \frac{Y_{0,1139\text{нм}}}{Y_{0,1094\text{нм}}}. \quad (6)$$

При этом легко показать, что величина скачка параметра асимметрии (6) в точности равна отношению скачков интегральной интенсивности (S) при переходе через K -край для случаев дифракции от кристаллических плоскостей hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ или, согласно (2), от кристаллов с противоположными знаками радиуса кривизны r , т.е. величине параметра асимметрии самих скачков (Y_S):

$$S_Y = Y_S = \frac{S(+)}{S(-)}, \quad (7)$$

где

$$S(+)=\frac{I^{hkl}_{0,1139\text{нм}}}{I^{hkl}_{0,1094\text{нм}}}=\frac{R_1(+)}{R_1(+)}_{0,1139\text{нм}}, S(-)=\frac{I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}_{0,1139\text{нм}}}{I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}_{0,1094\text{нм}}}=\frac{R_1(-)}{R_1(-)}_{0,1139\text{нм}}.$$

В работе [6] в основу метода разделения вкладов в ИИР от линейных дислокаций и упругих деформаций положено предположение, что равенство $Y=1$ свидетельствует об отсутствии макроскопического изгиба атомных плоскостей. Однако расчеты, результаты которых представлены на рис. 2, показывают, что фактор асимметрии

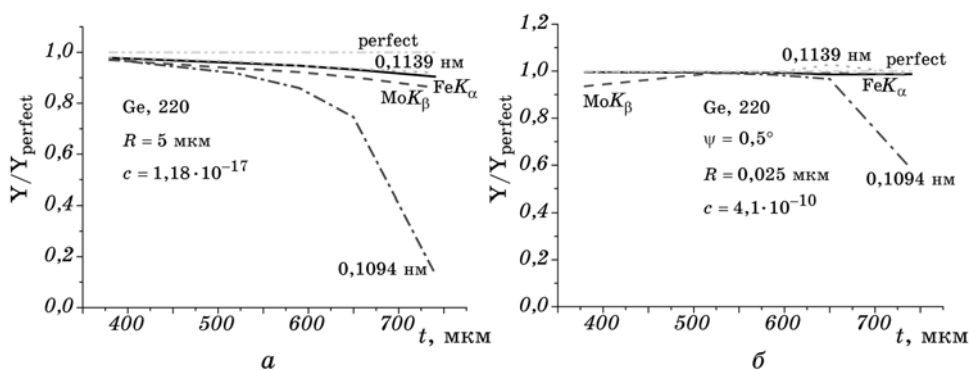


Рис. 2. Рассчитанные зависимости от толщины нормированного параметра асимметрии ИИР Y/Y_{perf} кристалла с хаотически распределенными в его объеме дислокационными петлями: *a* — средний радиус $R = 5$ мкм и концентрация $c = 1,18 \cdot 10^{-17}$; *б* — средний радиус $R = 0,025$ мкм и концентрация $c = 4,1 \cdot 10^{-10}$. Расчеты проведены при $r = \pm 2,4$ м для разных длин волн, а также для идеального кристалла.

может существенно зависеть от ХРД.

Для отыскания условий дифракции с избирательным влиянием ХРД на величину этого параметра в настоящей работе проведены расчеты зависимостей отношения Y/Y_{perfect} от толщины кристалла (Y_{perfect} — параметр асимметрии ИИР для идеального кристалла). Расчеты проводились для величин параметров дислокационных петель, таких, чтобы рассчитанное значение скачка ИИР на K -крае поглощения совпадало с его значением, полученным экспериментально авторами работы [7] для кристалла Ge с толщиной $t = 740$ мкм (см. рис. 3). Значения среднего радиуса $R = 5$ мкм и концентрации $c = 1,69 \cdot 10^{-17}$ близки к значениям параметров дислокационных петель, полученных в работе [4] путем фитирования вышеуказанных экспериментальных деформационных зависимостей скачка ИИР вблизи K -края поглощения. Результаты расчетов представлены на рис. 2.

Из рисунка 2 видно, что для излучения с длиной волны 0,1094 нм присутствие дефектов вызывает заметное уменьшение нормированного коэффициента асимметрии. При этом изменение с увеличением толщины кристалла нормированного коэффициента асимметрии намного чувствительнее к крупным дефектам, чем к мелким.

Более чувствительным к крупным дефектам оказывается и величина Y_s скачка на K -крае поглощения параметра асимметрии (рис. 3). Как видно из рис. 3, для кристалла с дефектами, вследствие вклада диффузной компоненты, толщинная зависимость величины Y_s кардинально отличается от аналогичной зависимости для иде-

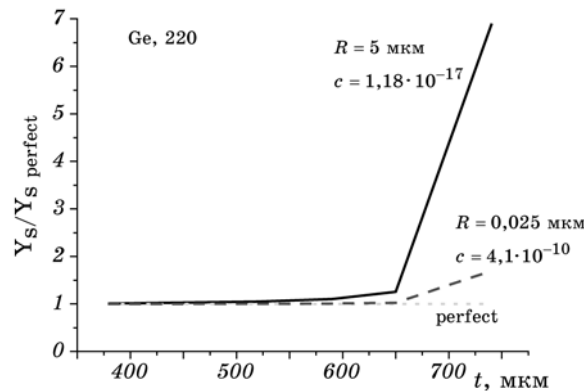


Рис. 3. Рассчитанные зависимости от толщины отношения скачка параметра асимметрии Y реального кристалла (параметры дефектов указаны на рисунке) к скачку параметра асимметрии идеального кристалла $Y_{S\text{ perfect}}$. Расчеты проведены при $r = \pm 2,4$ м.

ального кристалла, и именно по степени этого отличия можно определять характеристики ХРД. Аналогично можно проводить диагностику и по отклонениям самого параметра асимметрии Y для ИИР кристалла с дефектами от Y_{perf} для ИИР идеального кристалла и их изменениям с толщиной, как ниже, так и выше K -края поглощения.

Для объяснения причины различного влияния ХРД на толщинную зависимость параметра асимметрии при использовании излучений с разными длинами волн в настоящей работе проведены расчеты зависимостей Y от толщины кристалла когерентной и диффузной составляющих фактора асимметрии. Результаты расчетов представлены на рис. 4.

Из рисунка 4 видно, что толщинные зависимости коэффициентов асимметрии когерентной составляющей ИИР и ИИР для идеального кристалла практически совпадают, а степень расхождения толщинных зависимостей коэффициентов асимметрии ИИР для реального и идеального кристаллов определяется величиной относительного вклада диффузной компоненты ИИР. Для нее параметр асимметрии Y увеличивается с толщиной значительно слабее, чем в случае когерентной составляющей, оставаясь близким к единице. Поэтому чем больше вклад в ИИР диффузной составляющей, тем больше изменяется с толщиной отношение Y/Y_{perfect} .

Из рисунка 4, з видно, что для идеального кристалла Y резко возрастает с толщиной для интенсивности сильно поглощающейся длины волны вблизи K -края поглощения. Следовательно, скачок параметра асимметрии Y_S резко уменьшается с толщиной, причем указанное уменьшение тем больше, чем больше степень упругого

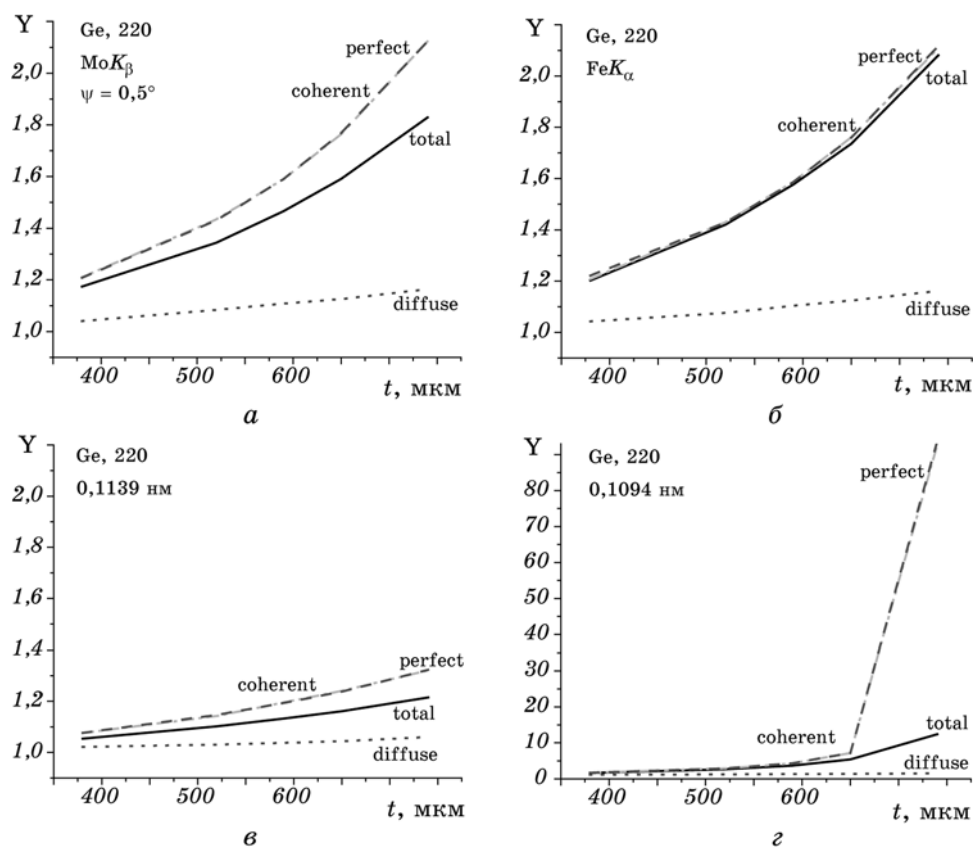


Рис. 4. Рассчитанные зависимости параметра асимметрии Y от толщины кристалла (параметры дефектов как и на рис. 2, *а*) при $r = \pm 2,4$ м для MoK_β - (*а*) и FeK_α -излучений (*б*), а также слабо- (*в*) и сильно- (*г*) поглощающегося излучения с длинами волн вблизи K -края поглощения.

изгиба образца.

3. ВЫВОДЫ

Отличие за счет вклада диффузной составляющей зависимостей от условий динамической дифракции как параметров асимметрии деформационной зависимости интегральной интенсивности Y , так и их скачков на K -крае поглощения Y_S для реального кристалла от соответствующих величин для идеального кристалла, демонстрирует чувствительность метода к дефектам и позволяет проводить их диагностику, например, по толщинным зависимостям указанных параметров.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. L. I. Datsenko and I. V. Prokopenko, *Proc. of the IV Conf. on 'Dynamical Scattering of X-Rays and Electrons'* (Leningrad: 1977).
2. R. Bubacova and L. Troustil, *Z. Naturforsch. B*, **28a**: 1199 (1973).
3. L. I. Datsenko, E. N. Kislovsky, and I. V. Prokopenko, *Ukr. Fiz. Zh.*, **22**: 513 (1977) (in Russian).
4. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1189 (2008).
5. П. В. Петрашень, Ф. Н. Чуховский, *Кристаллография*, **21**: 283 (1976).
6. I. V. Prokopenko, T. G. Kryshstab, and P. M. Lytvyn, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**: 237 (1998).
7. Л. И. Даценко, Е. Н. Кисловский, *УФЖ*, **20**, № 5: 810 (1975).