

①  
①

УДК 548.571+539.26

*И. В. Мельничук, А. Л. Манакина-Жук,  
В. П. Кладько, Л. П. Королева, И. М. Раренко*

## РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ВБЛИЗИ $K$ -КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ $CdSb$

Динамическое рассеяние рентгеновских лучей очень чувствительно к незначительным деформациям кристаллической решетки. Исследование его в случае монокристаллов  $CdSb$  дало возможность определить дислокационную структуру [1] и основные характеристики рассеяния  $MoK_{\alpha}$ -излучения [2]. Современная технология позволяет выращивать бездислокационные кристаллы. Однако такие кристаллы обладают рядом других дефектов, которые влияют на интенсивность рассеяния рентгеновских лучей вблизи  $K$ -края поглощения [3, 4].

Целью настоящей работы является исследование рассеяния рентгеновских лучей совершенными монокристаллами  $CdSb$  вблизи  $K$ -края поглощения его компонентов и сравнение полученных результатов с расчетными. Решетка этого кристалла относится к ромбической сингонии и принадлежит к пространственной группе  $D_{2h}^{15}$ .

### Методика эксперимента и расчета

Исследования проводились в непрерывном спектре излучения рентгеновской трубки БСВ-6 с молибденовым анодом на рентгеновской установке ДРОН-0,5 при напряжении 40 кВ и анодном токе 10 мА. В таком режиме предотвращалось возбуждение излучения с длиной волны  $\lambda_{K}/2$  для обоих компонентов кристалла. Ширина спектрального окна однокристалльного спектрометра составляла 0,02 Å. Измерения проводились при  $\lambda_1^{Sb}=0,395$  Å,  $\lambda_2^{Sb}=0,416$  Å вблизи  $K$ -края поглощения атомов Sb и  $\lambda_1^{Cd}=0,454$  Å,  $\lambda_2^{Cd}=0,457$  Å вблизи  $K$ -края поглощения атомов Cd для лауэ-отражения (004) от  $CdSb$  различной толщины  $t$ . Ввиду малости длины волны  $K$ -края поглощения ( $\lambda_{K}^{Cd}=0,4641$  Å,  $\lambda_{K}^{Sb}=0,4069$  Å) оказалось невозможным обеспечение оптимальных условий, при которых изменением интенсивности падающей волны в исследуемых интервалах длин волн можно было бы пренебречь. Поэтому скачки интенсивностей  $S$  отражения от атомов Sb и Cd определялись с учетом поправки на различие интенсивностей падающих волн. Поправка находилась по спектральной зависимости интенсивности излучения трубки, полученной для тонкого кремниевого кристалла при лауэ-дифракции (рис. 1). Результаты обрабатывались методом наименьших квадратов. Ошибка измерения интенсивности не превышала 5 %.

Образцы вырезались из монокристаллического слитка, полученного методом зонной перекристаллизации, в виде плоскопараллельных пластин с входной поверхностью, близкой к (100). Толщина образцов изменялась в результате шлифовки и полировки, а затем последовательного стравливания в полирующем травителе. Степень структурного

совершенства этих же образцов определялась методом рентгеновской топографии с помощью двухкристального спектрометра в положении Брэгга—Лауэ [1] и методом травления [5].

В основу теоретических расчетов была положена известная формула [6] для коэффициента интегрального отражения в приближении толстого кристалла

$$R_t = 0,627 \frac{C\chi_{rh}}{\sin 2\Theta} \sqrt{\cos \Theta} \frac{\exp[-\mu t (1 - C\varepsilon)/\cos \Theta]}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \left( 1 + \frac{0,125}{h} + \frac{0,0703}{h^2} + \dots \right), \quad h = \frac{\mu C\varepsilon}{\cos \Theta} \quad (1)$$

и аналогичная ей в приближении тонкого кристалла. Зная величины, входящие в эту формулу, можно рассчитать значение  $S$ , которое при

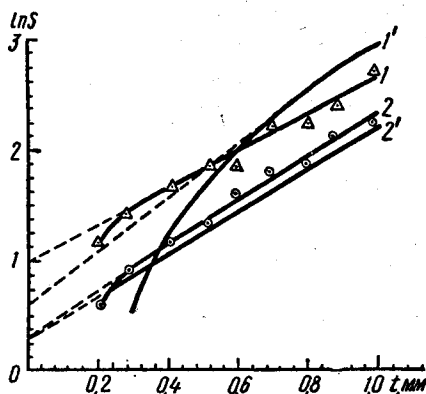
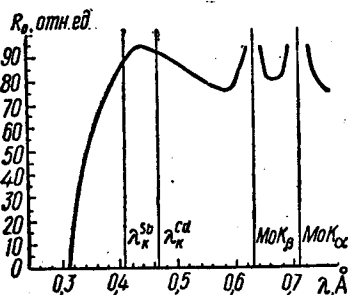


Рис. 1. Спектральное распределение интенсивности падающей волны вблизи  $\lambda_k^{\text{Sb}}$  и  $\lambda_k^{\text{Cd}}$ .

Рис. 2. Экспериментальные (1, 2) и теоретические (1', 2') зависимости  $\ln S(t)$  для лауэ-отражения (004) от атомов Sb (1, 1') и Cd (2, 2').

определенной толщине кристалла зависит в основном от нормального коэффициента фотоэлектрического поглощения  $\mu$ , мнимой части коэффициента Фурье поляризуемости  $\chi_{ih}$  и от фактора поляризации  $C$ .

Согласно [7]

$$\mu = \rho \cdot 0,0165 Z^{2,65} \lambda^{2,78} \quad (2)$$

с учетом скачка поглощения при  $\lambda > \lambda_k$ . Значение  $\chi_{ih}$  рассчитывалось по экспериментально найденному значению  $\varepsilon = \chi_{ih}/\chi_{i0} = 0,82$  [8], где  $\chi_{i0} = -\mu/2\pi k$ ,  $k = 1/\lambda$ . Расчет  $S$  проводился с учетом вклада перпендикулярной ( $C = 1$ ) и параллельной ( $C = \cos 2\Theta$ ) поляризации регистрируемого излучения по формуле

$$S = \frac{R_{i2}}{R_{i1}} = \frac{R_2^\perp + R_2^\parallel}{R_1^\perp + R_1^\parallel}, \quad (3)$$

Атом	$\lambda, \text{ \AA}$	$\mu, \text{ см}^{-1}$	$\mu_i, \text{ см}^{-1}$		теория
			теория	эксперимент	
Cd	0,454	208	46,41	$66,58 \pm 0,21$	24,49
	0,475	68	21,83	$50,06 \pm 0,58$	
Sb	0,395	268	89,21	$88,58 \pm 0,34$	19,46
	0,416	163	71,79	$67,88 \pm 0,27$	

где  $R_{i1}$  и  $R_{i2}$  — интенсивности (1) излучения в коротковолновой и длинноволновой областях спектра соответственно.

Влияние действительной части компонента Фурье поляризуемости  $\chi_{rh}$  и угла Вульфа—Брэгга  $\Theta$  на значение  $S$ , как показал анализ, пренебрежимо мало. Зависимость  $\ln S = f(t)$  приведена на рис. 2. Если одновременно выполняется условие приближения толстого кристалла по обе стороны  $K$ -края поглощения, то эта зависимость сводится к виду

$$\ln S = At + B, \quad (4)$$

где тангенс угла наклона при  $C = 1$

$$A = \mu_{i1} - \mu_{i2} = \mu_1 - 2\pi k_1 |\chi_{ih1}| - \mu_2 + 2\pi k_2 |\chi_{ih2}|, \quad e^{-M} \approx 1, \quad (5)$$

$\mu_{i1}$ ,  $\mu_{i2}$  — коэффициенты интерференционного поглощения при  $\lambda < \lambda_k$  и  $\lambda > \lambda_k$  соответственно,

$$B = \frac{1}{2} \ln \frac{\chi_{ih1}}{\chi_{ih2}}. \quad (6)$$

Если приближение толстого кристалла выполняется только в коротковолновой области спектра, то зависимость  $\ln S = f(t)$  более сложная, чем (4).

Таким образом, зная экспериментальные значения  $A$  и  $B$ , из (5) и (6) можно найти  $\chi_{ih1}$ ,  $\chi_{ih2}$ ,  $\mu_{i1}$  и  $\mu_{i2}$ .

### Результаты эксперимента и их обсуждение

Экспериментальная и теоретическая зависимости  $\ln S = f(t)$  для атомов  $Cd$  и  $Sb$  приведены на рис. 2. Видно, что для атомов  $Sb$  теоретические и экспериментальные значения  $A$  и  $B$  хорошо согласуются между собой. Это свидетельствует о том, что небольшое число дислокаций (порядка  $10^2 \text{ см}^{-2}$ ) и другие дефекты, неизбежно имеющиеся в исследуемом кристалле, не оказывают существенного влияния на скачки интенсивностей. Из таблицы видно, что значения коэффициентов  $\mu$  по обе стороны  $K$ -края поглощения атомов  $Sb$  такие, что обеспечивают условия аномального прохождения рентгеновских лучей практически во всем интервале исследуемых толщин кристалла. Это позволяет предположить, что дефекты кристаллической решетки одинаково влияют как на  $R_{i1}^{Sb}$ , так и на  $R_{i2}^{Sb}$ . Поэтому значение  $\ln S_{\text{эксп}} = R_{i2}^{Sb}/R_{i1}^{Sb}$  очень близко к расчетному во всем исследуемом интервале толщин.

Расхождение теоретических и экспериментальных данных для атомов  $Cd$  объясняется различием механизмов рассеяния рентгеновских лучей в коротковолновой и длинноволновой областях спектра. В коротковолновой области выполняется условие аномального прохождения лучей, в длинноволновой — преобладают экстинкционные эффекты. Как показано в работе [1], дислокации в монокристалле  $CdSb$  имеют

A	B		$ \chi_{ih}  \cdot 10^8$	
	теория	эксперимент	теория	эксперимент
$16,44 \pm 0,69$	0,60	$1,00 \pm 0,039$	11,71 3,53	$10,25 \pm 0,015$ $1,387 \pm 0,044$
$20,64 \pm 0,08$	0,31	$0,29 \pm 0,0025$	11,29 5,94	$11,33 \pm 0,021$ $6,33 \pm 0,018$

экстинкционный контраст при  $\mu t \leq 4$ . Поэтому следует ожидать, что при  $t \leq 0,6$  мм в длинноволновой области спектра дефекты кристаллической решетки приведут к увеличению интенсивности лауэ-дифракции, а при  $t \geq 0,6$  мм — к уменьшению ее. В коротковолновой области дефекты приводят к некоторому уменьшению интенсивности. Таким влиянием дефектов на интенсивность по обе стороны  $K$ -края поглощения объясняется отличие значения  $\ln S_{\text{эксп}} = R_{i2}^{\text{Cd}}/R_{i1}^{\text{Cd}}$  от расчетного.

Естественно, что достаточно малая плотность дефектов может существенно повлиять на интенсивность только при минимальном значении  $\mu_i$ . Как видно из таблицы, значение  $\mu_i$  минимально при  $\lambda_2^{\text{Cd}} = 0,475 \text{ \AA}$ , причем его экспериментальное значение почти в 2,5 раза больше, чем расчетное. В коротковолновой области ( $\lambda_1^{\text{Cd}} = 0,454 \text{ \AA}$ ) это отличие значительно меньше (примерно 40 %). Отсюда следует, что влияние дефектов на скачки интенсивности обеспечивается в основном изменением  $R_{i2}^{\text{Cd}}$ . К такому же выводу можно прийти, анализируя значения  $\chi_{ih}$  (таблица).

Результаты исследований позволяют сделать вывод, что рассеяние рентгеновских лучей монокристаллами со сложной кристаллической решеткой, состоящей из атомов двух сортов, находящихся в середине периодической системы элементов, вблизи  $K$ -краев поглощения компонентов этих кристаллов описывается динамической теорией достаточно хорошо. Наиболее чувствительно к дефектам структуры  $\text{CdSb}$  рассеяние рентгеновских лучей вблизи  $K$ -края поглощения атомов  $\text{Cd}$ , что дает возможность успешно применять метод скачков интенсивностей для оценки общей степени структурного совершенства исследуемых кристаллов.

#### SUMMARY

Intensity jumps near  $K$ -absorption edges of nearly perfect  $\text{CdSb}$  crystal components are investigated, using a one-crystal spectrometer, for a case of a Laue-diffraction for different sample thickness. The comparison of experimental and calculated results shows that crystal lattice defects mostly affect the intensity jumps for  $\text{Cd}$  atoms. This is explained by different X-ray scattering mechanisms on both sides of  $K$ -absorption edges.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мельничук И. В., Раранский Н. Д., Раренко И. М. Исследование дефектов структуры монокристаллов  $\text{CdSb}$ .—УФЖ, 1979, 18, № 9, с. 1544—1545.
2. Melnichouk I. V., Nikulitsa V. G., Rarenko I. M. Anomalous transmission of X-rays in  $\text{CdSb}$  single crystals.—Phys. status solidi. A, 1974, 25, N 2, p. K173—K176.
3. Даценко Л. И., Скороход М. Я., Васильковский А. С. Интерференционное прохождение рентгеновских лучей вблизи  $K$ -края поглощения  $\text{Ge}$ .—УФЖ, 1967, 12, № 11, с. 1921—1924.
4. Даценко Л. И. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей и структурное совершенство реальных кристаллов.—УФЖ, 1979, 24, № 5, с. 577—590.
5. Вплив дислокацій в  $\text{CdSb}$  на поглинання поляризованого випромінювання / Гертович Т. С., Гриньова С. І., Грицюк Б. М., Раренко І. М.—Фізична електроніка, Львів, 1970, вип. 2, с. 30—36.
6. Пинскер Э. Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М.: Наука, 1974. 367 с.
7. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей. М.: ГИТТЛ, 1953. 455 с.
8. Определение структурных амплитуд для монокристаллов  $\text{CdSb}$ /Манакина-Жук А. Л., Мельничук И. В., Раренко И. М.—В кн.: Физика твердого тела. Киев—Донецк, 1978, с. 20—21.