

05

Модифицированный закон Брэгга для дифракции рентгеновского излучения изогнутым кристаллом в обратном направлении

© Т. Чен

Московская государственная академия тонкой химической технологии
им. М.В. Ломоносова
E-mail: docent65@mtu-net.ru, ttchen@e-mail.ru

Поступило в Редакцию 10 октября 2002 г.

Показано, что в условиях обратного дифракционного отражения рентгеновской волны от изогнутого кристалла брэгговский угол в кристалле может быть смещен относительно соответствующего угла в вакууме на величину $\sim 10^{-2}$. Полученная величина превышает угловую ширину области полного обратного отражения $\text{CuK}\alpha$ -излучения от плоскостей (220) кристалла кремния. Закон Брэгга записан с учетом преломления и изгиба кристалла.

Закон Брэгга, определяющий условие максимумов при дифракции рентгеновского излучения в кристалле, может быть записан с учетом преломления (рефракции) следующим образом:

$$2d \sin(\theta_{B,vac} - \Delta\theta^{(refr)} \sin^2 \theta_{B,vac}) = \lambda_0(1 - \chi_{0r})^{1/2}, \quad (1)$$

где d — межплоскостное расстояние в кристалле, λ_0 — длина рентгеновской волны в вакууме, $\chi_{0r} < 0$ — вещественная часть фурье-компоненты χ_0 рентгеновской поляризуемости, $\Delta\theta^{(refr)}$ — рефракционное смещение брэгговского угла $\theta_{B,cryst}$ в идеальном неизогнутом кристалле относительно брэгговского угла $\theta_{B,vac}$ в вакууме.

Разложим левую часть уравнения (1) в ряд Тэйлора по степеням $\Delta\theta^{(refr)}$ вблизи $\theta_{B,vac}$ и ограничимся членами $\sim (\Delta\theta^{(refr)})^2$. В разложении правой части (1) по степеням χ_{0r} также отбросим члены со

степенью выше второй:

$$2d \left[\sin \theta_{B,vac} - \Delta\theta^{(refr)} \cos \theta_{B,vac} \sin^2 \theta_{B,vac} + (\Delta\theta^{(refr)})^2 \sin^2 \theta_{B,vac} \cos \theta_{B,vac} \sin 2\theta_{B,vac} - (\Delta\theta^{(refr)})^2 \sin^5 \theta_{B,vac}/2 \right] = \lambda_0 \{ 1 - \chi_{0r}/2 - (\chi_{0r})^2/8 \}. \quad (2)$$

Тогда, приравнивая друг к другу члены при одинаковых степенях $\Delta\theta^{(refr)}$ и χ_{0r} , получим из (2):

$$2d \sin \theta_{B,vac} = \lambda_0, \quad (3)$$

$$2d(-\Delta\theta^{(refr)} \cos \theta_{B,vac} \sin^2 \theta_{B,vac}) = -\lambda_0 \chi_{0r}/2, \quad (4)$$

$$2d \left[(\Delta\theta^{(refr)})^2 \sin^2 \theta_{B,vac} \cos \theta_{B,vac} \sin 2\theta_{B,vac} - (\Delta\theta^{(refr)})^2 \sin^5 \theta_{B,vac}/2 \right] = -\lambda_0 \chi_{0r}^2/8. \quad (5)$$

Уравнение (3) является законом Брэгга, не учитывающим эффекта преломления рентгеновской волны на границе вакуума с кристаллом.

Из уравнения (4) получаем величину рефракционного смещения $\Delta\theta^{(refr)}$:

$$\Delta\theta^{(refr)} = \chi_{0r} / \sin 2\theta_{B,vac}. \quad (6)$$

Формула (6) хорошо известна в теории [1] и справедлива при брэгговских углах $\theta_{B,vac} \neq \pi/2$.

Квадратичные по $\Delta\theta^{(refr)}$ и χ_{0r} члены необходимо учитывать лишь при брэгговской дифракции в обратном направлении ($\theta_{B,vac} \cong \pi/2$). Из уравнения (5) получаем:

$$\Delta\theta^{(refr)}(\theta_B = \pi/2) = \pm |\chi_{0r}|/2. \quad (7)$$

Физический смысл имеет знак „минус“ в правой части (7), что соответствует отрицательному смещению $\Delta\theta^{(refr)} = \theta_{B,crysl} - \pi/2 < 0$.

С другой стороны, в работе [2] было показано, что при упругом изгибе кристалла возникает линейное изменение Δd межплоскостного расстояния d : $\Delta d/d \cong -\text{ctg} \theta_B \Delta\theta^{(bent)}$, вызывающее дополнительное смещение $\Delta\theta^{(bent)}$ брэгговского угла. Причем величина смещения $\Delta\theta^{(bent)}$

зависит от глубины проникновения излучения в кристалл. В результате суммарный сдвиг брэгговского угла в кристалле вблизи его поверхности равен:

$$\Delta\theta = \Delta\theta^{(bent)} + \Delta\theta^{(refr)}, \quad (8)$$

где

$$\Delta\theta^{(bent)} = \text{tg } \theta_{B,vac} \Delta d/d, \quad \Delta d/d = (\partial u_z / \partial z)|_{z=0} = t/2R_z. \quad (9)$$

Здесь

$$u_z = -x^2/2R_x - y^2/2R_y + [z - (t/2)]^2/2R_z \quad (10)$$

— z -компонента вектора \mathbf{u} , описывающего смещение атомов кристаллической решетки при упругом изгибе кристалла, $R_{x,y}$ — радиусы изгиба кристалла в плоскости дифракционного рассеяния и в перпендикулярной плоскости, R_z определяется компонентами обратного тензора модулей упругости [2], (x, y, z) — координаты произвольного атома в неизогнутом кристалле, t — толщина кристалла.

В особом случае обратного рассеяния с учетом (9) вместо выражения (8) получаем:

$$(\Delta\theta)_{\theta \cong \pi/2} \cong \Delta\theta^{(refr)} + (\Delta d/d)^{1/2}. \quad (11)$$

Для достаточно сильно изогнутых пластин с $R_z \approx -0.3 \text{ м}$ и $t \sim 100 \mu\text{м}$ коэффициент $t/2R_z \sim 10^{-4}$. Величина поляризуемости $\chi_{0r} \sim 10^{-5} \div 10^{-6}$. Например, для отражения $\text{CuK}\alpha_1$ -излучения от Si-кристалла $\chi_{0r} \cong -1.5 \cdot 10^{-5}$. Видно, что на глубине $z \neq t/2$ при сильном изгибе доминирующим фактором, определяющим сдвиг брэгговского максимума, может быть именно изгиб, а не преломление. Более того, для дифракции назад $\Delta\theta \leq 10^{-2}$, что больше, чем угловая ширина области полного отражения $(\Delta\theta)_{total} \cong |\chi_{hr}|^{1/2} \cong 3 \cdot 10^{-3}$ для обратного отражения (220) $\text{CuK}\alpha_1$ -излучения.

Однако на половине толщины кристалла ($z = t/2$) влияние изгиба на сдвиг брэгговского угла ослабевает, и $\Delta\theta^{(bent)}$ может быть величиной порядка или меньше смещения $\Delta\theta^{(refr)}$, обусловленного преломлением. Кроме того, в изогнутом кристалле может возникнуть интересная ситуация, когда изгиб кристалла компенсирует рефракционное смещение $\Delta\theta^{(refr)}$, так что $(\Delta\theta)_{\theta \cong \pi/2} \ll \Delta\theta^{(refr)}$.

При увеличении радиуса изгиба R_z зависимость $\Delta\theta$ от R_z ослабевает и с наступлением условия $R_z \gg t/\chi_{0r}$ величина сдвига $\Delta\theta$ стремится к постоянному значению, обусловленному преломлением.

Таким образом, величина сдвига брэгговского угла в упругоизогнутом кристалле зависит от глубины проникновения рентгеновской волны как $\sim (z - t/2)^{1/2}$. Сдвиг, обусловленный лишь преломлением, зависит линейно от поляризуемости χ_0 .

Закон Брэгга, учитывающий и преломление, и изгиб кристалла, может быть записан в виде (1), где вместо $\Delta\theta^{(refr)}$ необходимо положить $\Delta\theta$ (8). Для обратной дифракции вместо (8) надо взять $\Delta\theta$ (11).

Список литературы

- [1] *Пинскер З.Г.* Рентгеновская оптика. М.: Наука, 1982. 390 с.
- [2] *Chukhovskii F.N., Chang W.Z., Förster E.* // J. Appl. Phys. 1995. V. 77 (5). P. 1843.