

01; 05

© 1992

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЛАУЭ-ДИФРАКЦИИ В ТОНКОМ КРИСТАЛЛЕ

В.И. П у н е г о в, К.М. П а в л о в

Статистическая динамическая теория дифракции [1] находит все более широкое применение для описания процессов рентгеновского рассеяния в различных кристаллических объектах [2-5]. Теоретические исследования дифракции рентгеновских лучей в кристаллах со статистически распределенными дефектами в геометрии Лауэ преимущественно проводятся для толстых кристаллов [2]. Влияние дефектов структуры на кривые отражения и прохождения рентгеновских волн в тонких кристаллах с учетом диффузного рассеяния не исследовано.

Для теоретического анализа процесса дифракции и численного эксперимента примем простую, вместе с тем наглядную модель дефектов в виде сферических аморфных кластеров радиуса r_0 и концентрации C . Пренебрегая слагаемыми в угловой переменной y порядка $|\chi_g^{im}|/|\chi_g^r| \ll 1$ и считая интенсивность падающего излучения $I_0 = 1$, получаем для коэффициента отражения $R_c = I_g^c(z_0)$ и прохождения $T_c = I_0^c(z_0)$ следующие решения:

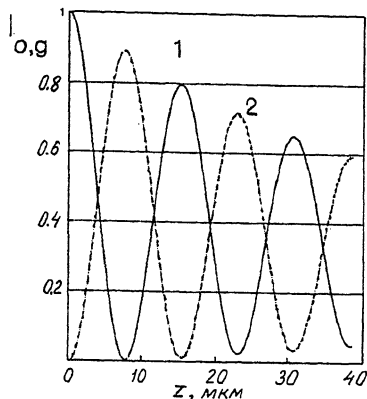
$$R_c = \exp(-\mu_e z_0 / \gamma_0) |\chi_g / \chi_{-g}| \sin^2 \left(\frac{\pi \sqrt{1+y^2} z_0}{l_E} \right) / (1+y^2), \quad (1)$$

$$T_c = \exp(-\mu_e z_0 / \gamma_0') \left\{ y^2 + \cos^2 \left(\frac{\pi \sqrt{1+y^2} z_0}{l_E} \right) \right\} / (1+y^2), \quad (2)$$

где z_0 - толщина кристалла, $l_E = l/E$ - период маятниковых биений кристалла с дефектами, $l = \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_g} / (C |\chi_g|)$ - период маятниковых биений совершенного кристалла [6], $E = \exp\{-4\pi r_0^3 C / 3\}$ - статфактор; γ_0, γ_g - направляющие косинусы [6].

Коэффициент $\mu_e = \pi \chi_0^{im} / \lambda + \gamma_0 \pi^2 (1-E^2) \tau_T / l^2$ определяется фотоэлектрическим и диффузным поглощением [2]. Угловая переменная y имеет вид

$$y = \frac{l_E}{\lambda \gamma_0} \Delta \nu^2 \sin(2\nu) + 1 - E^2 \frac{\pi \tau_i}{l_E}.$$



$$E = 1$$

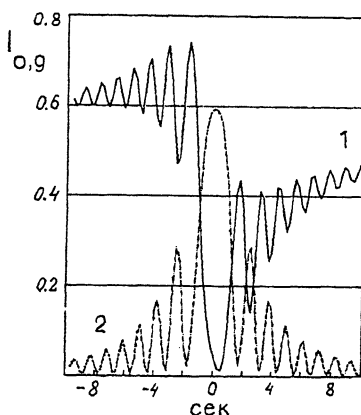
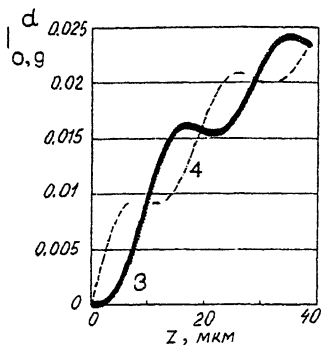
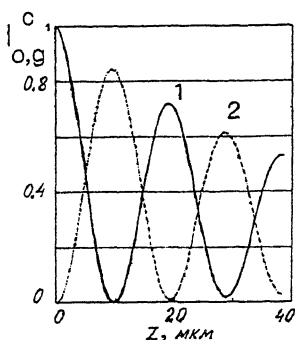


Рис. 1. Маятниковый эффект и угловое распределение интенсивностей идеального кристалла.

1 - интенсивность проходящего пучка I_o ; 2 - интенсивность отраженного пучка I_g .

В выражении для μ_e и y присутствуют действительная τ_z и мнимая τ_z' части комплексной корреляционной длины [2]. Остальные обозначения в решениях (1) и (2) являются общепринятыми [6].

Нетрудно видеть, что период маятниковых колебаний зависит от концентрации и размеров дефектов. С ростом этих величин, то есть с уменьшением статфактора E , увеличивается l_E . Предположим, что толщина кристалла z_0 равна $(m + 1/2)l$, где $m = 1, 2 \dots$ - целое число. Тогда при $y = 0$ и величине статфактора $E = 1$, интенсивность отраженной волны I_g^e имеет максимальное значение, а



$$E = 0.8$$

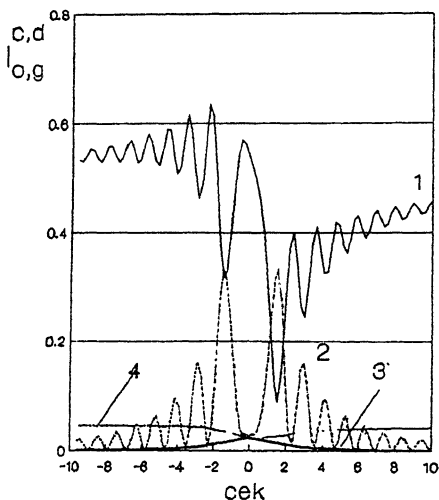


Рис. 2. Распределение интенсивностей по толщине кристалла и по углам на поверхности выхода для кристалла с дефектами.

Интенсивности: 1 - когерентная проходящая I_o^c , 2 - когерентная отраженная I_g^c , 3 - диффузная проходящая I_o^d , 4 - диффузная отраженная I_g^d .

проходящей I_o^c близка к нулю. Это означает, что на выходе из-за маятникового эффекта практически вся энергия проходящей волны перекачивается в дифракционный пучок.

Однако при той же толщине кристалла z_o возможен обратный эффект, поскольку при наличии дефектов, согласно (1) и (2), увеличивается период маятниковых биений. Например, если $z_o/l_E = m$, то коэффициент отражения имеет минимальное значение. Отсюда можно найти значения стратифакторов:

$$E = (1 + 1/2m)^{-1},$$

(3)

при которых будут наблюдаться минимальные значения отраженной интенсивности I_g^c , а вся энергия будет сосредоточена в проходящем пучке I_0^c .

Сделанные выводы наглядно иллюстрируются численным экспериментом. В расчетах использованы параметры, соответствующие симметричной (220) Лауэ-дифракции $SiK\alpha_1$ излучения на Si . Так как аналитические решения (1) и (2) являются приближенными (с точностью до членов порядка $|\chi_g^{im}|/|\chi_g^r|$), в алгоритме численных расчетов лежали дифференциальные уравнения статистической динамической теории дифракции.

На рисунках показаны кривые изменения когерентной $I_{0,g}^c$ и диффузной $I_{0,g}^d$ интенсивностей по толщине кристалла (для $y=0$), а также угловые распределения этих интенсивностей на поверхности выхода. Толщина кристалла составляла 38.5 мкм. Для идеального кристалла $l=15.4$ мкм [6], следовательно, на выходе имеем максимум отраженной интенсивности (рис. 1). Согласно (3), минимум $R_c(y=0)$ достигается при значении статфактора $E=0.8$ (число $m=2$). Это проиллюстрировано на рис. 2.

Таким образом, зная толщину образца и период маятниковых биений идеального кристалла, а также, сопоставляя T_c и R_c , можно определить величину статфактора E . Угловая зависимость некогерентно рассеянной интенсивности определяется размерами дефектов r_0 [2-5]. Если угловое распределение диффузного фона позволяет оценить размеры дефектов в кристалле, то из $C = -3 \ln(E)/(4\pi r_0^3)$ можно найти их концентрацию.

Источниками интенсивности некогерентных (диффузных) волн $I_{0,g}^d$ являются когерентные компоненты $I_{0,g}^c$. Совершенно очевидно, что из-за маятникового эффекта интенсивности $I_{0,g}^d$ должны осциллировать по мере проникновения вглубь кристалла. В положении брэгговского отражения осцилляционное поведение интенсивностей диффузных волн показано на рис. 2.

Таким образом, наличие дефектов в кристалле приводит не только к ослаблению когерентных компонент проходящего и дифракционного пучков, появлению углового распределения диффузных интенсивностей, но и существенным образом влияет на маятниковый эффект, который в значительной степени определяет коэффициенты отражения и прохождения тонких кристаллов в геометрии Лауэ.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] К а т о N // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. N 5. P. 763-778.
- [2] Б у ш у е в В.А. // ФТТ. 1989. Т. 31. В. 11. С. 70-78.
- [3] П у н е г о в В.И. // Кристаллография. 1990. Т. 35. В. 3. С. 576-583.

- [4] П у н е г о в В.И. // ЖТФ. 1990. Т. 60. В. 10. С. 82-87.
[5] П у н е г о в В.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. В. 1. С. 234-242
[6] П и н с к е р З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука,
1982. 391 с.

Сыктывкарский государственный
университет

Поступило в Редакцию
28 апреля 1992 г.