

УДК 539.2

ВЛИЯНИЕ ИЗГИБА ОТРАЖАЮЩИХ ПЛОСКОСТЕЙ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ВОЛНЫ ПРИ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

© 2024 г. И. А. Смирнова^а, Э. В. Суворов^{а, *}

^аИнститут физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН,
Черноголовка, Московская область, 142432 Россия

*e-mail: suvorov@issp.ac.ru

Поступила в редакцию 26.04.2023 г.

После доработки 20.06.2023 г.

Принята к публикации 20.06.2023 г.

Методами численного моделирования изучено влияние изгиба отражающих плоскостей на распространение аномальной волны при дифракции рентгеновского излучения в кристаллах. Установлено, что знак изгиба отражающих плоскостей кардинальным образом влияет на распространение рентгеновского волнового поля в кристалле. Показано, что при определенных параметрах изгиба подавляется эффект Бормана.

Ключевые слова: дифракция, интерференция, рентгеновские лучи, кристаллическая решетка, монокристаллы, интерференционные полосы, дефекты кристаллической решетки, локальные деформации, изгиб отражающих плоскостей, знак изгиба.

DOI: 10.31857/S1028096024010153, **EDN:** DFTJBY

ВВЕДЕНИЕ

Получение дифракционного изображения дефектов кристаллической решетки в рентгеновской топографии – многоступенчатый и сложный процесс. От его расшифровки, с одной стороны, зависит точность сведений, получаемых экспериментатором о дефектах. С другой стороны, процессы формирования рентгеновского волнового поля при дифракции на локальных искажениях кристаллической решетки представляют самостоятельный интерес для физики рассеяния рентгеновских лучей.

В [1–4] отмечено влияние знака изгиба отражающих плоскостей на интенсивность регистрируемой дифракционной картины. Особый интерес представляет поведение аномальной волны, так как именно в этом случае эффект становится наиболее заметным.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В [2] исследовано секционное дифракционное изображение краевой дислокации в

толстом (1810 мкм) монокристалле кремния, расположенной перпендикулярно его поверхности (бормановский контраст). На рис. 1а [4] показано локальное деформационное поле такой дислокации. Из рисунка видно, что деформационное поле краевой дислокации симме-

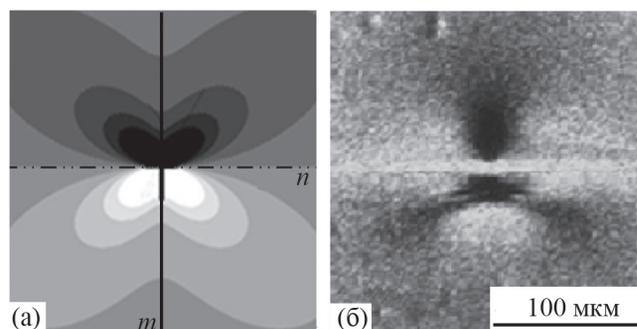


Рис. 1. Краевая дислокация: а – плоское изображение поля локальной разориентации [5] (m – плоскость зеркальной симметрии, n – плоскость цветной симметрии); б – наблюдаемое в эксперименте дифракционное изображение [2] (монокристалл Si толщиной 1810 мкм, поверхность кристалла (111), отражение $\bar{2}20$, излучение CuK_α).

трично относительно вертикальной плоскости (m) и имеет цветную симметрию относительно горизонтальной плоскости (n). Именно относительно горизонтальной плоскости наблюдается яркая асимметрия регистрируемого дифракционного изображения на секционной топограмме (рис. 1б). Понятно, что эта особенность структуры изображения связана с деформацией отражающих плоскостей. В [2] методами численного моделирования волнового поля в треугольнике рассеяния установлено, что это связано с фокусировкой и дефокусировкой аномальной волны в сложном поле локальной разориентации. Однако структура поля локальной разориентации краевой дислокации сложна, поэтому в [2] не удалось разобраться в деталях этого явления.

Необычность наблюдаемой на рентгеновской топограмме (рис. 1б) асимметрии изображения краевой дислокации становится особенно наглядной при рассмотрении трехмерного изображения поля ее локальной разориентации. На рис. 2 приведено трехмерное изображение поля локальной разориентации краевой дислокации и три его сечения [5].

Похожее явление наблюдалось и в [3, 4] при исследовании поведения интерференционных деформационных полос, образующиеся в геометрии Брэгга при изгибе отражающих плоскостей. Установлено, что при изменении знака изгиба заметно меняется интенсивность деформационных полос. В работе отмечается, что это связано с фокусировкой волнового поля — при одном знаке изгиба плоскостей волновое поле фокусируется, а при другом дефокусируется. В случае упругого поля дислокации трудно

разобраться в асимметрии дифракционного изображения из-за сложного вида поля локальной разориентации краевой дислокации.

Для понимания физических механизмов этого явления, по-видимому, необходимо исследовать более простой случай — лауэвскую и бормановскую дифракцию на изогнутых отражающих плоскостях, перпендикулярных вектору дифракции. В представленной работе методами численного интегрирования уравнений Такаги [6–9] изучено влияние изгибной деформации таких плоскостей кристаллической решетки на формирование дифракционного волнового поля в треугольнике рассеяния. Все расчеты выполнены для монокристалла кремния толщиной 1500 мкм, излучение CuK_α (аномальное прохождение рентгеновских лучей), поверхность (110), отражающие плоскости ($\bar{2}20$), расстояние от источника до кристалла 10 см. Используемые в работе обозначения знаков изгиба плоскостей показаны на рис. 3.

Результаты численного моделирования интенсивности в центре треугольника рассеяния на выходной поверхности кристалла в зависимости от радиуса изгиба отражающих плоскостей приведены на рис. 4. Анализ приведенной зависимости позволяет сделать некоторые выводы: при больших радиусах изгиба отражающих плоскостей интенсивность стремится к интенсивности идеального кристалла; при малых радиусах наблюдается подавление эффекта Бормана; поведение интенсивности существенно зависит от знака радиуса изгиба — при уменьшении положительного значения радиуса изгиба наблюдается рост интенсивности аномальной волны

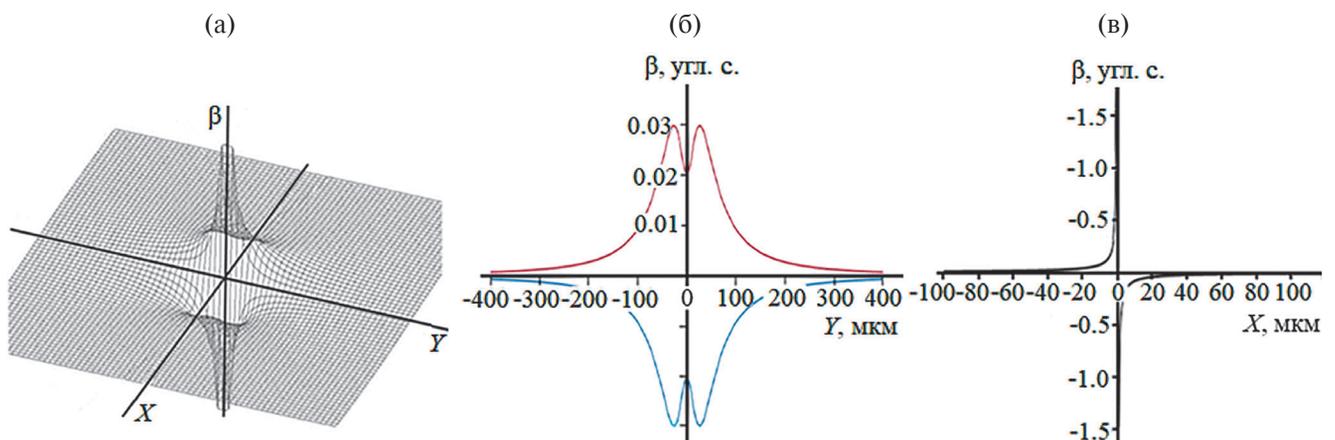


Рис. 2. Трехмерное изображение поля локальной разориентации β краевой дислокации (а); двумерные сечения, параллельные плоскости $Y\beta$, на расстояниях от начала координат $x_1 = 35$, $x_2 = -35$ мкм; в — сечение, параллельное плоскости $X\beta$, при $x = 0$.

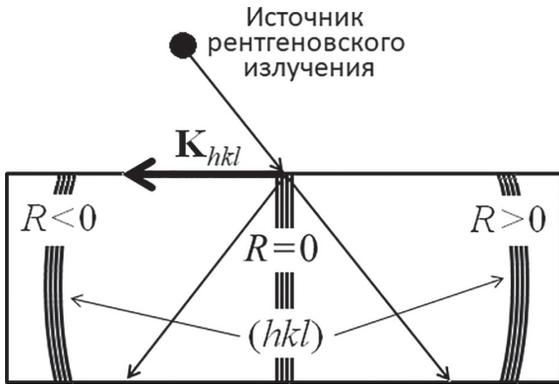


Рис. 3. Схема обозначения знаков изгиба отражающих плоскостей, использованных в работе: hkl – индексы отражающих плоскостей; R – радиус изгиба отражающих плоскостей; K_{hkl} – вектор дифракции.

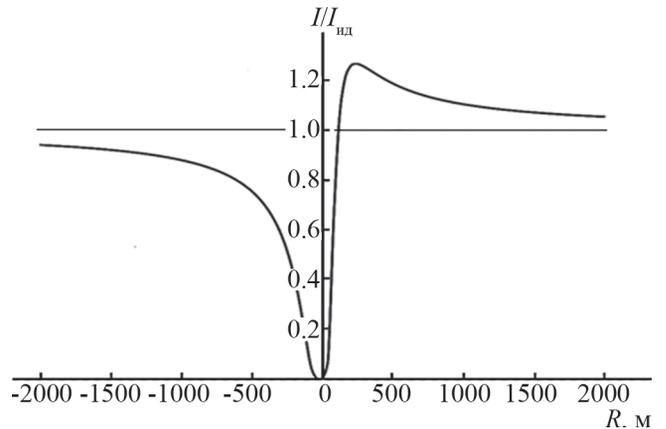


Рис. 4. Относительная интенсивность $I/I_{ид}$ аномального (бормановского) волнового поля в центре треугольника рассеяния в зависимости от радиуса изгиба R отражающих плоскостей (нормирована на интенсивность идеального кристалла $I_{ид}$).

(≈ 300 м – максимум), а при дальнейшем уменьшении радиуса и изменении его знака – падение. Следует также обратить внимание на то, что даже при радиусе изгиба 2 км пока еще нельзя достичь предела идеального кристалла. Это может быть связано с ошибками метода численного интегрирования, накапливающимися при большой толщине кристалла.

Численное моделирование волнового поля в треугольнике рассеяния приведено на рис. 5. Из рисунка хорошо видно, что при радиусе изгиба отражающих плоскостей -300 м аномальное волновое поле практически не доходит до выходной поверхности кристалла, в то время как при радиусе изгиба $+300$ м амплитуда поля наблюдается.



Рис. 5. Численное моделирование волнового поля в треугольнике рассеяния в случае толстого кристалла при разных знаках изгиба отражающих плоскостей.

В верхней области треугольника рассеяния (в тонкой части кристалла), где распространяются обе волны – нормальная и аномальная, не наблюдаются заметные изменения в интерференционной картине при изгибе отражающих плоскостей. На рис. 6 приведена часть волнового поля в треугольнике рассеяния (тонкий кристалл, толщина 150 мкм, шаг интегрирования по оси z 0.01 мкм) для идеального и изогнутого кристалла. Видно, что изгиб отражающих плоскостей (± 300 м) не оказывает заметного влияния на поведение интерференционных полос. Однако более тонкий анализ показывает, что отличия имеются и составляют около 4.5%.

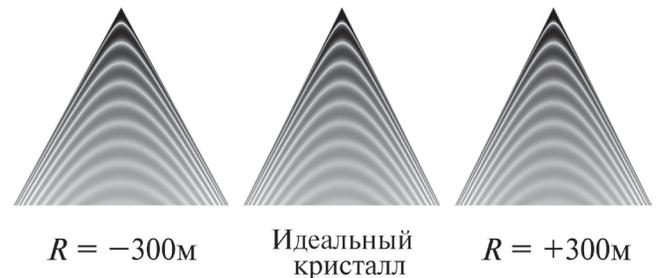


Рис. 6. Фрагменты волнового поля в треугольниках рассеяния тонкого кристалла (150 мкм), где присутствуют нормальная и аномальная волны (численное моделирование).

При увеличении толщины кристалла, когда в результате поглощения остается в основном аномально проходящая волна, ситуация существенно меняется [6–8]. На рис. 7 приведены

графики относительной интенсивности. Нижний график – интенсивность волны в идеальном кристалле за вычетом интенсивности волны в изогнутом кристалле с радиусом изгиба $R = +300$ м. То есть интенсивность волны в кристалле с изгибом ($+300$ м) выше, чем в идеальном кристалле. Верхний график – интенсивность волны в идеальном кристалле за вычетом интенсивности волны в изогнутом кристалле с радиусом изгиба $R = -300$ м. В этом случае интенсивность волны в кристалле с изгибом ниже, чем в идеальном кристалле.

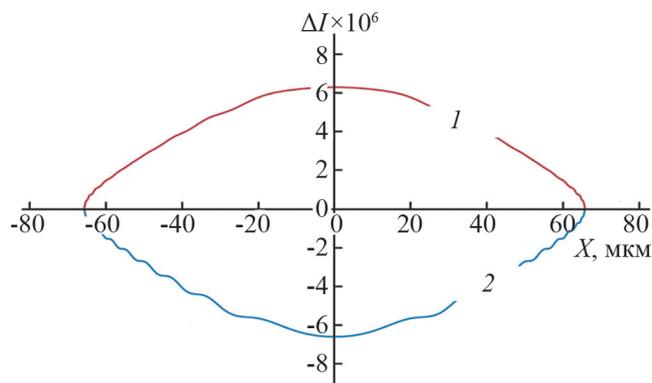


Рис. 7. Графики относительной интенсивности $\Delta I = I_{\text{ик}} - I_R$, R : +300 (1); -300 м (2).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, результаты численного моделирования волнового поля дифракции рентгеновской волны на изогнутых отражающих плоскостях кристаллической решетки показывают, что структура волнового поля аномальной волны существенно зависит от величины и знака изгиба плоскостей. При определенных параметрах изгиба плоскостей наблюдается подавление эффекта Бормана. В тонком кристалле слабопоглощаемые и сильнопоглощаемые волны имеют почти одинаковую амплитуду по модулю, но, видимо, есть небольшие отличия (около 4.5%) в коэффициентах поглощения. И поэтому эффект от изгиба есть. Полученные результаты позволяют понять, что в случае сложной структуры полей локальной разориентации, связанной с дефектами кристаллической решетки (напри-

мер, краевыми дислокациями), возможна асимметрия дифракционного изображения дефектов, наблюдаемая в [2].

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН.

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грушко Ю.С., Лапин Е.Г., Сумбаев О.И., Тюнис А.В. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. Вып. 6. С. 2280.
2. Суворов Э.В., Смирнова И.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. № 10. С. 7.
3. Смирнова И.А., Суворов Э.В., Шулаков Е.В. // ФТТ. 2007. Т. 49. Вып. 6. С. 1050.
4. Суворов Э.В. Смирнова И.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 12. С. 23.
<https://doi.org/10.31857/S1028096021120232>
5. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
6. Takagi S.J. // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. V. 26. № 5. P. 1239.
7. Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. // Кристаллография. 1971. Т. 16. № 6. С. 1101.
8. Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. // УФН. 1972. Т. 107. № 2. С. 229.
9. Authier A. Dynamical Theory of X-ray Diffraction. Oxford: Oxford University Press, 2002. 674 p.

Effect of the Bending of Reflecting Planes in Crystals on the Propagation of an Anomalous Wave in X-ray Diffraction

I. A. Smirnova¹, E. V. Suvorov^{1, *}

¹*Osipyan Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka, Moscow Region, 142432 Russia*

**e-mail: suvorov@issp.ac.ru*

The effect of bending of reflection planes in crystals on the propagation of an anomalous wave in X-ray diffraction has been studied by numerical simulation methods. The bending sign of the reflection planes was found to affect radically the propagation of the X-ray wave field in the crystal. The Borrmann effect was shown to be suppressed at certain bending parameters.

Keywords: diffraction, interference, X-rays, crystal lattice, single crystals, interference fringes, crystal lattice defects, local deformations, bending of reflecting planes, bending sign.