

На правах рукописи



НОСИК Валерий Леонидович

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
С КРИСТАЛЛАМИ С ИСКАЖЕННОЙ РЕШЕТКОЙ**

Специальность 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2015

УДК 537.216.2: 539.231:535.016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Российской академии наук

Научный консультант: Ковальчук Михаил Валентинович,
доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН

Официальные оппоненты: Солдатов Александр Владимирович,
доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник кафедры физики наносистем и спектроскопии Южного федерального университета, г. Ростов на Дону

Бушуев Владимир Алексеевич,
доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики твердого тела, Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Бублик Владимир Тимофеевич,
доктор физико-математических наук, профессор Национального исследовательского технологического университета "МИСиС", г. Москва

Ведущая организация: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург

Защита диссертации состоится «21» апреля 2016 г. в 15 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 520.009.01 при Национальном Исследовательском Центре "Курчатовский институт" по адресу: 123182 Россия, Москва, пл. академика Курчатова, д. 1, Главное здание, конференц-зал (ауд. 231-236).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ "Курчатовский институт" и на сайте www.nrcki.ru

Автореферат разослан «___»_____2016 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 520.009.01 к.ф.-м.н.



А.В. Мерзляков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Исследования, связанные с динамическим рассеянием рентгеновских лучей (РЛ) на реальных кристаллах с дефектами разной природы, активно развиваются с момента открытия дифракции рентгеновских лучей. С вводом в строй источников Синхротронного Излучения (СИ) 3-го поколения, обладающих уникально высокой яркостью и малым эмиттансом, центр тяжести исследований смещается в сторону развития новых когерентных и голографических методов. В случае Рентгеновских Лазеров на Свободных Электронах (РЛСЭ) акцент делается не только на увеличении яркости источника в 10^9 раз по сравнению с СИ, но и на возможности проведения экспериментов с временным разрешением до 10 фс (в случае использования методов накачка-проба pump-probe) и исследованиях структуры отдельных наночастиц и биомолекул. Ввод в строй РЛСЭ повышает актуальность обсуждаемых в диссертации методов управления рентгеновскими пучками при дифракции на динамических сверхрешетках в колеблющихся кристаллах, и методов диффузно-динамической теории дифракции на реальных кристаллах, позволяющей установить концентрацию и тип дефектов в общем случае произвольных толщин кристаллов и индексов отражений.

Интерес к изучению дифракции и рассеяния рентгеновских лучей на искаженных ультразвуком (УЗ) кристаллах связан как с возможностью их использования в качестве рентгенооптических элементов (идеальные кристаллы), так и с исследованием структуры реальных кристаллов.

Характер влияния УЗ колебаний на динамическую дифракцию существенно меняется в зависимости от соотношения между волновым вектором фонона K_s и расщеплением дисперсионных поверхностей ΔK . Различают случаи: длинноволнового ультразвука, $K_s < \Delta K$ (длина волны УЗ, $l_s = 2\pi/K_s$, много больше, чем длина экстинкции $L_e = 2\pi/\Delta K$); рентгеноакустического резонанса, когда $K_s \approx \Delta K$ (длина волны УЗ примерно равна длине экстинкции); коротковолнового УЗ, когда $K_s > \Delta K$ (длина волны УЗ, много меньше, чем длина экстинкции). Так в случае коротковолнового УЗ при дифракции на кристалле со сверхрешеткой с периодом d помимо основного рефлекса с вектором дифракции \mathbf{h} , отвечающего межплоскостному расстоянию a , возникает серия из n «сателлитов» с

$$\mathbf{H} = \mathbf{h} + n\mathbf{K}_s, \quad h = 2\pi/a, \quad K_s = 2\pi/d, \quad (\text{B.1})$$

В связи с введением в строй в 2017 году Европейского Рентгеновского Лазера на Свободных Электронах (ЕРЛСЭ) особую актуальность приобретают эксперименты с УЗ с частотой 5 МГц, которая отвечает периоду генерации отдельных цугов волн ЕРЛСЭ в 200

нс. Длина волны УЗ, $l_s = 2\pi c_s/\omega_s$, отвечающая этой частоте, составляет несколько десятых миллиметра.

Известно, что возбуждение УЗ колебаний с частотой больше 10ГГц технически сложно осуществить. Одним из способов расширения частотного диапазона УЗ является применение в пьезопреобразователях новых материалов, таких как нанокompозитные структуры из углеродных нанотрубок (УНТ) и кремниевых нанопроволок (КНП), обладающих уникально высокой электронной мобильностью в электрических полях. В диссертации подробно рассмотрены механические и колебательные характеристики УНТ и КНП.

Одной из классических проблем рентгеновской дифракционной физики реальных кристаллов является анализ углового распределения интенсивности когерентной и диффузной составляющей вблизи рефлекса. Хорошо известны выражения для предельных случаев кинематической и динамической дифракции, однако в общем случае для реальных кристаллов с дефектами точных выражений до последнего времени получено не было. Разработанный в диссертации диффузно-динамический подход к описанию рефлексов позволяет эффективно выделить вклад от дефектов с разными полями смещений и концентрациями в рамках статистического описания.

Важным модельным случаем, рассмотренным в диссертации, является дифракция Мессбауэровского излучения на случайно распределенных изотопах Fe^{57} в кристаллах - гематита и боратов, когда дефект (Fe^{56}) не создает поле упругих напряжений и практически не меняет спектр колебаний отдельных атомов. Рассеянное Мессбауэровское излучение благодаря уникально малой ширине ядерных уровней (20 нэВ) обладает значительной длиной продольной когерентности l_c ($l_c = \lambda^2/\Delta\lambda$, λ - длина волны излучения), что позволяет исследовать относительно слабые дифракционные отражения и взаимные переходы из когерентного в диффузные каналы рассеяния.

Помимо этого в работе рассмотрены новые модификации схемы стоячих волн для случая дифракции в колеблющихся кристаллах нейтронов (вторичный процесс - гамма кванты) и рентгеновского излучения (вторичный процесс - тепловое диффузное рассеяние). При возбуждении коротковолнового УЗ возникает набор дополнительных рефлексов с разными длинами экстинкции, что существенно повышает точность эксперимента.

Основным результатом работы является выявление общих закономерностей, определяющих влияние периодических искажений и распределенных дефектов кристаллической решетки на дифракционное рентгеновское поле внутри и вне кристалла. Выявленные закономерности формирования волновых полей открывают возможности для

создания дифракционных элементов, основанных на динамическом управлении положением отражающих плоскостей кристалла в пространстве и во времени.

Созданная теоретическая база для описания динамической дифракции рентгеновских лучей на дефектных кристаллах с идеальной и искаженной решеткой будет востребована как при создании новых экспериментальных станций на источниках СИ и РЛСЭ, так и при решении конкретных материаловедческих и технологических задач в области нанотехнологий и микроэлектроники.

Объекты исследования:

Объектами исследований, наряду с такими модельными кристаллами как кварц, кремний и германий с разного рода дефектами, были кристаллы боратов железа и гематита, содержащие резонансные изотопы Fe-57 с разными концентрациями, а также новые нанокompозитные материалы с УНТ и КНП.

Цели и задачи работы:

Целью исследования является выявление новых закономерностей дифракции рентгеновских лучей (РЛ) на кристаллах с решеткой, искаженной ультразвуковыми колебаниями и/или структурными дефектами и разработка новых методов управления рентгеновскими пучками.

Для достижения поставленной цели были поставлены и решены следующие задачи:

- Определены зависимости характеристик рентгеновских пучков при фокусировке от параметров высокочастотного УЗ, возбужденного в кристалле. Установлены закономерности формирования пучков, позволяющие эффективно перестраивать э/м поле при изменении амплитуды и волнового вектора УЗ волны.
- Построена статистическая теория дифракции Мессбауэровского излучения с учетом влияния изотопического замещения.
- Выявлены особенности угловой зависимости выхода вторичных излучений при дифракции тепловых нейтронов и рентгеновского излучения на колеблющихся кристаллах.
- Проведено моделирование механических свойств и колебательных спектров УНТ и КНП и композитов на их основе в разных частотных диапазонах.
- Построена диффузно-динамическая теория дифракции на дефектных кристаллах в общем случае произвольной толщины кристалла с учетом интерференции когерентной и диффузной компонент. Показана возможность эффективного определения типа и концентрации распределенных дефектов.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Впервые произведены расчеты основных параметров сфокусированного рентгеновского пучка при дифракции на кристалле с возбужденными высокочастотными УЗ колебаниями. Показано, что э/м поле эффективно перестраивается под влиянием УЗ.

2. Впервые рассмотрено динамическое рассеяние Мессбауэровского излучения в рамках статистической теории дифракции с учетом влияния изотопического замещения.

3. Впервые рассмотрены особенности углового выхода вторичных излучений при дифракции тепловых нейтронов и рентгеновского излучения в колеблющихся кристаллах в рамках метода стоячих волн.

4. В рамках теории химической связи в материалах с пониженной размерностью рассмотрены механические свойства углеродных нанотрубок и кремниевых нанопроволок.

5. Построена обобщенная диффузно-динамическая теория дифракции, применимая при любых соотношениях между когерентной и диффузной компонентами волнового поля для широкого класса дефектов.

Практическая значимость работы:

1. Предложен новый способ управления параметрами сфокусированных рентгеновских пучков за счет изменения амплитуды ультразвуковых колебаний. Показано, что упругие деформации, возникающие при приклеивании пьезопреобразователей к непьезоэлектрическим кристаллам, можно определить по дифракционным данным.

2. Предложенные подходы к моделированию дифракционного рассеяния Мессбауэровского излучения в рамках статистической теории позволяют проверить основные положения статистической теории дифракции в случае дефектов без поля упругих искажений, а также эффективно оценить качество кристаллов – монохроматоров с высоким разрешением по энергии.

3. Предложены новые модификации методов стоячих нейтронных и рентгеновских волн при дифракции на колеблющихся кристаллах.

4. Установлены основные закономерности изменения механических и колебательных свойств УНТ и КНП в зависимости от их размеров и геометрии, которые могут стать основой для разработки новых нанокompозитных материалов и создания высокочастотных пьезопреобразователей.

5. Установленные в рамках диффузно-динамической теории дифракции закономерности рассеяния рентгеновских лучей на реальных кристаллах позволяют провести структурную характеристику кристаллов и определить тип и концентрацию распределенных дефектов.

Ценность научных работ соискателя косвенно подтверждается финансовой поддержкой в виде грантов РФФИ, Президиума РАН и Минобрнауки РФ в рамках проектов, руководителем или исполнителем которых он являлся:

Грант РФФИ 97-02-17966-а «Исследование взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллической решеткой в условиях распространения акустических колебаний».

Грант РФФИ 09-02-12239-офи_м «Рентгеноакустические методы и резонансное рассеяние в экспериментах с временным разрешением»

Грант РФФИ 09-02-12297 Офи-м «Развитие методов нанодиагностики для рентгеновских лазеров на свободных электронах, специализированных источников синхротронного и терагерцового излучений на основе когерентной рентгеновской оптики и экспериментов с временным разрешением»

Грантов Научного Совета программы фундаментальных исследований президиума РАН № 27 « Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов», Секция № 4 «Диагностика наноструктур»

Государственного контракта № 16.521.11.2235 между ИК РАН и Министерством образования и науки Российской Федерации (в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы»).

Положения, выносимые на защиту:

1. Теоретическое обоснование нового способа управления рентгеновскими пучками при фокусировке в колеблющемся кристалле путем изменения амплитуды ультразвуковых колебаний. Показано, что неоднородные упругие деформации, которые возникают при приклеивании пьезопреобразователей к непьезоэлектрическим кристаллам, могут быть определены рентгеновскими способами.

2. Предложены новые подходы к моделированию дифракционного рассеяния Мессбауэровского излучения в рамках статистической теории, позволившие описать наблюдаемые особенности кривых качания при дифракции на кристаллах гематита с различной концентрацией резонансного изотопа.

3. Показана эффективность применения метода стоячих нейтронных волн с регистрацией вторичных гамма квантов и стоячих рентгеновских волн в колеблющихся кристаллах - с модуляцией выхода теплового диффузного излучения для структурных исследований.

4. Разработаны теоретические подходы к описанию механических и колебательных свойств углеродных нанотрубок, кремниевых нанопроволок и нанокомпозитов в зависимости от их размеров, степени совершенства и хиральности.

5. Разработаны основы диффузно-динамической теории дифракции, позволяющей провести количественное сравнение с экспериментом в случае дифракции в кристаллах с протяженными дефектами разного рода при сильной интерференции когерентной и диффузной компонент излучения.

Личный вклад автора

В материалах, представленных в настоящей диссертационной работе, автору принадлежит выбор направлений исследований, постановка задач, выполнение расчетов, моделирование и интерпретация полученных результатов. Результаты теоретических исследований получены автором лично или при его определяющем участии, что нашло отражение в совместных публикациях с М.В. Ковальчуком, В.В. Молодкиным, С.А. Григоряном, А.Ю. Гаевским, Chang Q. Sun, M.X. Gu и др.

Апробация работы

Основные результаты работы доложены и обсуждены на XII, XIII, XIV Всесоюзных (Российских) симпозиумах по растровой микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел (Черноголовка, 2001, 2003, 2005),

XIX, XXI, XXII и XXIII Всесоюзных (Российских) конференциях по электронной микроскопии (Черноголовка, 2002, 2006, 2008, 2010),

5-м Всесоюзном совещании по когерентному взаимодействию излучения с веществом (Алушта, 1990),

III, VI, VII и VIII Национальных конференциях по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (Москва, 2001, 2007, 2009, 2011),

11th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (ХТОР 2012), Санкт-Петербург

Публикации

По теме диссертации представлены 33 публикации, из них: 24 статей в ведущих российских и зарубежных журналах, в том числе 24 - в журналах, входящих в Перечень ВАК, главы в 2-х коллективных монографиях.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 6 глав и заключения, в котором приведены основные результаты и выводы, а также списка цитируемой литературы и приложения.

Общий объем диссертации составляет 334 страницы и включает 310 страниц текста со 81 рисунком, 5 таблицами и 281 библиографическими ссылками.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертационной работы, формулируются цели и задачи исследований, пути решения поставленных задач, представлены научная новизна и практическая значимость работы.

Широкое применение СИ при решении задач структурного материаловедения привело к быстрому развитию рентгеновской оптики. Уникальная когерентность, малый эмиттанс и высокая пиковая яркость новых источников - рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ), позволяющих проводить эксперименты с временным разрешением до 10 фс и исследовать структуру отдельных молекул без их кристаллизации, ставят новые задачи перед рентгеновской оптикой.

Несмотря на активное использование оптики скользящего падения, составных рефракционных и френелевских линз, в элементах рентгеновской оптики в основном, по-прежнему, используются дифракционные элементы. Однако дискретный набор межплоскостных расстояний для конкретного кристалла налагает ограничения на возможность изменения геометрии дифракции. Одним из способов увеличения числа доступных векторов дифракции является использование кристаллов со сверхрешетками, создающими дополнительную пространственную модуляцию электронной плотности (см. (В.1)). Кроме того, возможность *in situ* менять положение дифракционных плоскостей с помощью ультразвуковых (УЗ) колебаний с частотами 1 МГц-10 ГГц, обсуждаемая в первой главе диссертации, становится практически важной при постановке экспериментов с временным разрешением.

Появление у интегральной интенсивности дифракции, I_h , (ИИД) локального минимума при увеличении амплитуды УЗ в кристаллах с постоянным градиентом деформации достаточно долго не находило объяснения. Считалось что, с ростом УЗ деформаций ИИД монотонно растет от динамического значения I_h^d к кинематическому пределу I_h^k . В Главе 2 диссертации показано, что уменьшение ИИД почти до $0.7 I_h^d$ при определенных значениях амплитуды УЗ связано с интерференцией возбуждений, относящихся к разным листам новой дисперсионной поверхности.

Одной из классических задач рентгеновской физики является анализ распределения интенсивности когерентно и диффузно рассеянных волны в угловой области вблизи рефлекса. Если в предельном случае «тонкого» (по сравнению с длиной экстинкции для данного рефлекса) кристалла для анализа диффузного рассеяния можно использовать

кинематическое приближение, то соответствующей теории для описания дифракции на «толстых» кристаллах с распределенными дефектами до последнего времени не было. Главы 3 и 6 диссертации посвящены статистической теории дифракции Мессбауэровского излучения и диффузно-динамической теории дифракции и рассеяния рентгеновских лучей на кристаллах с дефектами. Последовательное рассмотрение интерференционных эффектов при рассеянии диффузной и когерентной компонент излучения позволяет получить аналитические выражения для волнового поля в общем случае и определить тип и концентрацию дефектов.

Глава 1. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе.

В главе 1 рассматривается дифракционное рассеяние сферической рентгеновской волны на колеблющемся изогнутом кристалле в условиях резонанса для симметричного случая Лауэ.

В случае кристалла с постоянным градиентом деформации (ПГД) смещение точки из равновесного положения и состоит из двух частей, $\mathbf{u} = \mathbf{u}_s + \mathbf{u}_d$ - статической, \mathbf{u}_d ,

$$\mathbf{u}_d = 2(A s_0^2 + 2B s_0 s_h + C s_h^2) \quad (1.1)$$

и переменной,

$$\mathbf{u}_s = \mathbf{w} \cos(K_s z), \quad \mathbf{w} = \mathbf{w}_0 \cos(\omega t),$$

определяемой одномерным полем акустической деформации, где ω - частота ультразвуковой волны (УЗВ), t — время, \mathbf{w}_0 - вектор амплитуды смещения в УЗВ, K_s - волновой вектор УЗВ, направленный перпендикулярно поверхности кристалла и вектору смещения \mathbf{w}_0 , s_0, s_h - координаты вдоль прошедшего и дифрагированного пучка. Расстояния измеряются в единицах Λ/π , где Λ - длина экстинкции, $\Lambda = \lambda\gamma/(\chi_{hr}\chi_{-hr} - \chi_{hi}\chi_{-hi})^{1/2}C$, λ - длина волны, C - поляризационный множитель (1 и $\cos 2\theta_0$ для σ, π поляризаций), θ_0 - угол Брэгга, χ_h - Фурье компонента поляризуемости.

Используя для вектора электрической индукции выражение

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + \mathbf{E}_h(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

получим систему уравнений Такаги-Топена, [1],

$$i \partial E_h / \partial s_h = -\sigma_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) E_0; \quad i \partial E_0 / \partial s_0 = -\sigma_{\bar{h}} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}) E_h.$$

После замены переменных

$$E_0(\mathbf{r}) = \exp\{i(C - B)s_h^2 + 2iBz^2\} \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \exp(ip_0 x \operatorname{ctg} \theta_0) \widetilde{E}_0(p_0, z), \quad (1.3)$$

$$E_h(\mathbf{r}) = \exp\{-i\mathbf{h}\mathbf{u}_s - i(A - B)s_0^2 - 2iBz^2\} \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \exp(ip_0 x \operatorname{ctg} \theta_0) \widetilde{E}_h(p_0, z),$$

получим относительно $\widetilde{E}_{0,h}(p_0, z)$, систему уравнений, коэффициенты которой зависят только

от координаты z , $p = p_0 + 4Bz$, [2],

$$(-p + i\partial/\partial z)\widetilde{E}_0 + \sigma_{-h}\widetilde{E}_h = 0, \quad (1.4)$$

$$(-p + i\partial/\partial z)\widetilde{E}_h + \sigma_h\widetilde{E}_0 - \mathbf{hw} K_s \cos(K_s z) \widetilde{E}_h = 0.$$

Амплитуды $\widetilde{E}_{0,h}(p_0, z)$ описывают дифракционное распространение гармоники с отстройкой p_0 , связанной с отклонением от угла Брэгга $\delta\theta = \theta - \theta_0$, [2], соотношением

$$p_0 = 2\delta\theta \sin\theta_0 / (\chi_{hr}\chi_{-hr} - \chi_{hi}\chi_{-hi})^{1/2} C. \quad (1.5)$$

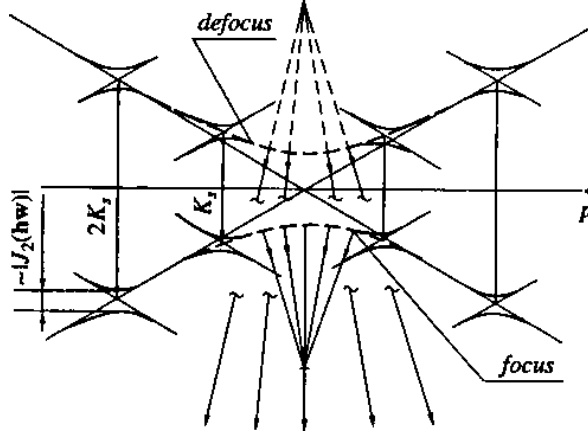


Рисунок 1. Дисперсионная поверхность (ДП) в колеблющемся кристалле. В местах, где между двумя листами исходной ДП можно вставить вектор $n\mathbf{K}_s$, возникают дополнительные рефлекссы.

Решение системы уравнений (1.4) ищется в виде суммы двух членов, описывающих распространение в кристалле двух блоховских волн с амплитудами φ_m , [1], [3],

$$\widetilde{E}_{0,h}(p, z) = \sum_{m=1}^2 \varphi_m E_{0m,hm}(p, z), \quad \begin{pmatrix} E_{0m} \\ E_{hm} \end{pmatrix} = \epsilon_m \begin{pmatrix} 1 \\ b_m \end{pmatrix} \exp(iQ_m z) \quad (1.6)$$

где $Q_m = (-1)^m Q$, $Q = \sqrt{p^2 + \sigma_{-h}\sigma_h}$. В колеблющемся кристалле ультразвуковое воздействие «перемешивает» волновые поля, отвечающие двум ветвям дисперсионной поверхности с $m = 1, 2$, [2],

$$\varphi_1 = \exp(i\tau_+ \cos K_s z) \sum_{j=1}^2 d_j \exp(i\mu_j z), \quad \varphi_2 = \exp(i\tau_- \cos K_s z) \sum_{j=3}^4 d_j \exp(i\mu_j z),$$

где

$$\tau_{\pm} = \alpha(Q \pm p_0)/K_s Q, \quad 2\mu_{1,2} = -K_s \pm \sqrt{f}, \quad 2\mu_{3,4} = +K_s \pm \sqrt{f}, \quad (1.7)$$

$$f = (2Q - K_s)^2 + \frac{\alpha}{Q^2}, \quad \alpha = K_s^2 J_1^2(\mathbf{hw}), \quad (1.8) \quad \text{где}$$

$J_n(\mathbf{hw})$ - функция Бесселя с индексом n . Тогда поле дифрагированной волны внутри кристалла можно представить в виде интеграла от суммы четырех членов

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=1}^4 f_m \exp(iS_m), \quad (1.9)$$

где эйкональные функции имеют вид

$$S_{1,3} = S + K_s z/2, S_{2,4} = S - K_s z/2, \kappa_0 = 2 k \Lambda^2 \sin^2 \theta_0 / \pi^2 \langle R_0 \rangle,$$

$$S = (p_0 - q)^2 / \kappa_0 \pm z \sqrt{f} + x p_0 \operatorname{ctg} \theta_0.$$

Пусть на кристалл падает сферическая рентгеновская волна из точечного источника, расположенного в плоскости дифракции под углом θ_0 к оси z и отстоящего от центра координат на расстоянии $R_0 \gg x, z$, тогда

$$\widetilde{E}_0(p_0, 0) \sim \gamma \exp\{i(p_0 - q)^2 / \kappa\}, q = (k \Lambda / \pi) \sin \theta_0 (\theta - \theta_0) \quad (1.10)$$

$$\kappa = \kappa_* + 4(B - C), \kappa_* = k \Lambda^2 \sin^2 \theta_0 / 2 \pi^2 R_0. \quad (1.11)$$

ДП в кристалле с УЗ имеет три экстремума (Рисунок 2), вблизи каждой точки экстремума (p_*) можно функцию f разложить в ряд Тейлора

$$f \sim \sigma_j + \delta_j (p - p_*)^2. \quad (1.12)$$

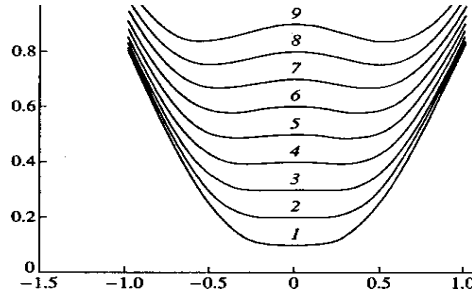


Рисунок 2. Форма ДП в случае резонанса ($K_s = 2$) при изменении амплитуды УЗВ, $hw = 0.1n$, $n = 1-9$.

Тогда траектории определяются условием $(dS_m/dp_0 = 0)$

$$x \operatorname{ctg} \theta_0 = 2(p_0 - q) / \kappa_0 \mp z(p - p_*) / \sqrt{\sigma_j + \delta_j (p - p_*)^2}, \quad (1.13)$$

каустики - совместно условиями $(d^2 S_m / dp_0^2 = 0)$ и (1.13)

$$2 / \kappa_0 \pm z \sigma_j \delta_j / (\sigma_j + \delta_j (p - p_*)^2)^{3/2} = 0, \quad (1.14)$$

а точка фокусировки совпадают с экстремумами $p_0 = p_*$ ($d^3 S_m / dp_0^3 = 0$, (1.13), (1.14)). Вблизи каждой точки экстремума ДП сводится к двум листам, отвечающих фокусирующей и дефокусирующей системе лучей (Рисунок 1). Из условия (1.14) следует, что точка фокуса расположена на глубине

$$z_f^{(j)} = 2 \sqrt{\sigma_j} / \kappa_0 \delta_j. \quad (1.15)$$

Таким образом, в условиях РАР существуют три точки фокусировки: помимо центральной, расположенной на глубине $z_f^{(0)}$, возникают две дополнительные точки на глубине $z_f^{(1)}$, симметрично расположенные относительно центральной.

Фокусировка в упруго изогнутом кристалле.

Пусть на двухосно изогнутый кристалл падает сферическая рентгеновская волна от

точечного источника (1.10). Когда отстройка от условия Брэгга падающей волны близка к точке экстремума (p_*), решение системы уравнений Такаги-Топена можно представить в виде комбинации функция параболического цилиндра $D_\gamma(Y)$ от аргумента

$$Y(z) = \sqrt{iB}(z - p_*/4B), \gamma = (i/4B)J_n^2(\mathbf{hw}).$$

Используя обобщенное квазиклассическое решение, [2], можно показать, что в изогнутом кристалле траектория представляет собой не прямую линию, а повторяет в прямом пространстве форму ДП из-за движения точки возбуждения (Рисунок 3)

$$2(p_0 - q)/\aleph + (1/2B)(\sqrt{f(p_* + 2Bz)} - \sqrt{f(p_*)}) + \cot \theta_0 x = 0, \quad (1.16)$$

где f - определена в (1.8). Координаты точек экстремума p_* определяются условием ренгеноакустического резонанса

$$\sqrt{p_{1,3}^2 + 1} = K_s/2, \quad (1.17)$$

или совпадают с точкой Лауэ ($p_2 = 0$). В предельном случае $K_s = 2$ все три точки сливаются в одну.

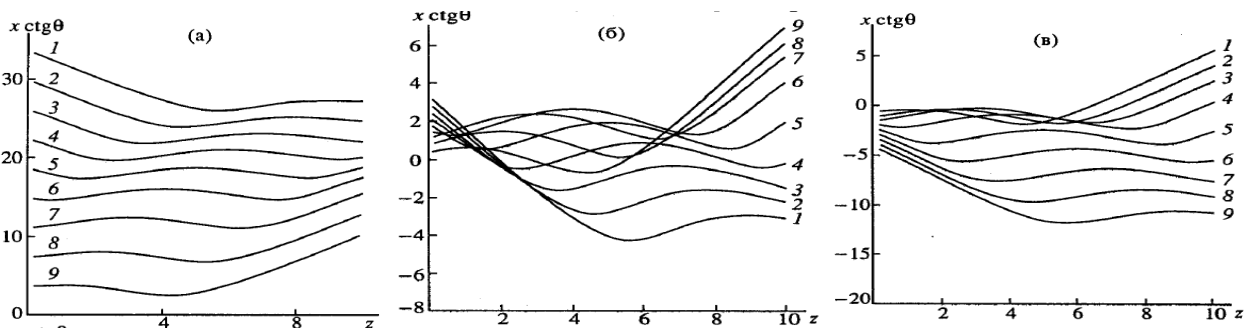


Рисунок 3. Траектории блоховских волн при $B = 0.1$, $\mathbf{hw} = 0.1$, $K_s = 2.4$. Номер кривой $n = 1 - 9$ отвечает начальной отстройке $p_0 = -2 + 0.2n$. На Рисунках 3а, 3б, 3в расстояние источник-кристалл равно $\aleph = \aleph_*, \aleph_* + 1, \aleph_* - 1$, соответственно.

Из анализа решения (1.17) следует, что в изогнутом колеблющемся кристалле каустики существуют только при определенном соотношении между расстоянием до кристалла и параметрами изгиба

$$2B/\aleph\sqrt{\delta_j} < 1. \quad (1.18)$$

Фокусировка в вакууме

В схеме Дю-Монда, [5], для того, чтобы при дифракционном отражении для всех точек на поверхности кристалла с радиусом изгиба R выполнялось условие Брэгга, изменение положения отражающих плоскостей $\Delta\Phi$ (Рисунок 4а), $\Delta\Phi = x/R$, должно равняться изменению угла, под которым луч падает на кристалл в точке x , $\Delta\Phi = \delta\varphi$. Точечный источник удовлетворяет этому условию, если он расположен на круге Роуленда с радиусом

$R/2$

$$(x_s, z_s) = (R/2)(\sin 2\theta, \cos 2\theta). \quad (1.19)$$

Рассмотрим схему фокусировки излучения точечного источника (Рисунок 4б) с координатами $R_0(-\sin \theta_0, \cos \theta_0)$ в точку фокуса с координатами $R_h(-\sin \theta_h, \cos \theta_h)$ при дифракции на кристалле толщиной T (фокусировка “точка-точка”).

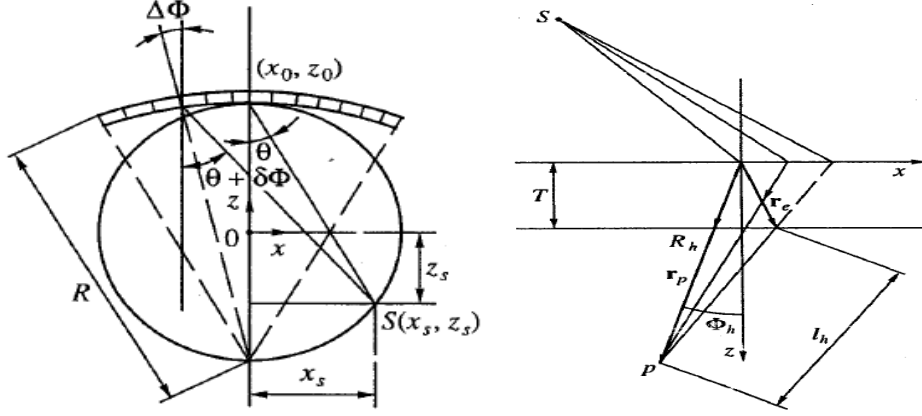


Рисунок 4. а) Геометрическая схема изогнутого фокусирующего кристалла. б) Геометрия дифракции в декартовой (x, z) и цилиндрической (R_h, φ_h) системах координат.

Используя принцип Гюйгенса-Френеля и выражение (1.9) для амплитуды дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла, получим для амплитуды волны в точке \mathbf{r}_p в вакууме (Рисунок 4б)

$$E_h(\mathbf{r}_p) \sim \exp(i \mathbf{k}_h \mathbf{r}_p) \left(\vartheta / \sqrt{\aleph_h} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=1}^4 f_m(T) \exp\{i L_m(p_0)\}, \quad (1.20)$$

$$L_m(p_0) = (p_0 - q)^2 / \aleph - (p_0 - q_h - 2(A - B)T)^2 / \aleph_h - (-1)^m \int_0^z dz' \sqrt{f(p_0 + 2Bz')} + p_0 x \operatorname{ctg} \theta_0, \quad \aleph_h = 4 \{ (\beta \sin \theta_0)^2 / k R_h - A + B \}. \quad (1.21)$$

Вблизи каждого экстремума ДП разложим функцию f в ряд и применим метод стационарной фазы. Траектории, каустики и точки фокуса определяются путем приравнивания к нулю соответствующих производных эйкональной функции ($\tau = p - p_*$)

$$L^{(I)}(p_0) = 2(p_0 - q) / \aleph_0 - 2(p_0 - q_h - 2(A - B)T) / \aleph_h \pm T \sqrt{\delta} \tau \gamma / (\gamma + \tau^2)^{\frac{1}{2}},$$

$$L^{(II)}(p_0) = 2\{1 / \aleph_0 - 1 / \aleph_h\} \pm T \sqrt{\delta} \gamma / (\gamma + \tau^2)^{3/2} \dots \quad (1.22)$$

Рассмотрим, например, случай кристалла с деформацией $B = 0$, тогда положение точки фокусировки определяется как

$$\left(1 - T/z_f\right) (a_0/R_h^f + \varepsilon b/R) + (\varepsilon b/R - a_0/R_0) = 0 \quad . \quad (1.23)$$

Когда на выпуклую сторону ($\varepsilon = -1$) тонкого кристалла падает плоская волна (удаленный источник, $R_0 \rightarrow \infty$), с точностью до поправок порядка T/z_f излучение будет фокусироваться в точке на круге Роуланда, $R \cos \theta_0 / 2 = R_h$. В диссертации обсуждены изменения в условия

фокусировки из-за УЗ (1.23) и случай $B \neq 0$.

Выводы к главе 1:

-при малых значениях амплитуды УЗ можно ограничиться рассмотрением трех точек фокусировки,

-положение точек фокусировки в кристалле существенно зависят от амплитуды ультразвуковой волны, что позволяет эффективно управлять их положением в вакууме и кристалле. В частности глубина расположения фокуса для спутников расходится при малых значениях амплитуды УЗ волны как $(hw)^{-1}$.

Глава 2 . Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в колеблющихся деформированных кристаллах. Случай высокочастотной УЗ волны.

В случае дифракции на кристалле с «высокочастотным» УЗ на ДП возникают дополнительные щели (Рисунок 6а), отвечающие дифракционным отражениям с поглощением или испусканием n фононов (спутники n -го порядка), а поляризуемость и напряженность электрического поля можно представить в виде ряда по векторам K_s

$$\sigma_h = \sigma_h^0 \exp\{i\mathbf{hw} \cos K_s z\} = \sigma_h^0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(\mathbf{hw}) \exp\{in K_s z\}, E_{0,h}(\mathbf{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Q_{(0,h)n} \exp\{in K_s z\}.$$

В кристалле без изгиба интегральная интенсивность дифракции, I_h^{int} , (ИИД) равна сумме интенсивностей рассеяния $I_{h,n}^{int}$ на всех спутниках и основном рефлексе, и с увеличением амплитуды УЗ растет от динамического значения при $hw = 0$ до кинематического предела при $hw \rightarrow \infty$, [6].

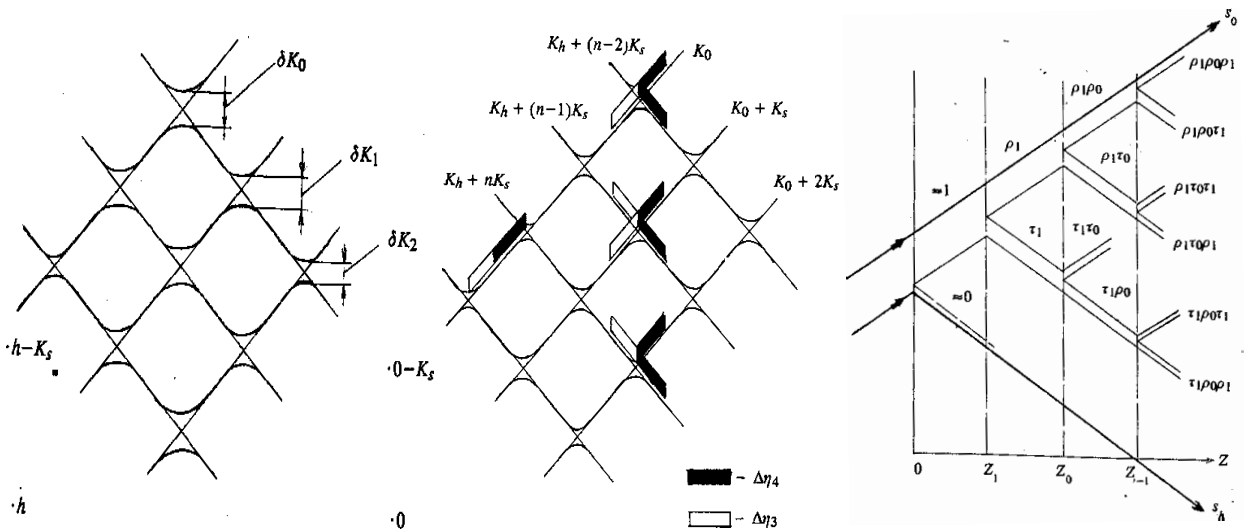


Рисунок 5. а) Обратное пространство: расщепление листов ДП, $\delta K_n = 2\pi |J_n(\mathbf{hw})|/\Lambda$, б) Распространение возбуждений по ДП в изогнутом кристалле. Точки возбуждения, прошедшие через три точки поворота, показаны черным цветом, через две точки поворота -

белым. в) Прямое пространство: волновое поле с учетом внутри- и меж-ветвевое рассеяния. При больших значениях \mathbf{hw} структурный фактор каждого сателлита ($\sim J_n(\mathbf{hw})$) уменьшается, и дифракционное рассеяние в его окрестности на кристалле конечной толщины T становится кинематическим

$$I_{h,kin}^{int} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_{h,n}^{int} \sim T |\sigma_h^0|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(\mathbf{hw}) = \alpha T |\sigma_h^0|^2.$$

Это согласуется с общим утверждением, [6-8], о том, что ИИД плавно растет с ростом деформации. Однако в [9, 10] было экспериментально установлено, что ИИД в случае симметричной Лауэ дифракции на изогнутом кристалле может иметь «аномальный» минимум на кривой зависимости от амплитуды УЗ волны.

2.1 Распространение волнового поля в кристалле. В Главе 1 было показано, что точки возбуждения движутся по ДП в кристалле с деформацией $B \neq 0$, сдвигаясь на угловое расстояние, которое может превышать расстояние между сателлитами. В этом случае из-за переброса возбуждений между различными ветвями ДП возможны сложные интерференционные явления (Рисунок 5б, 5в). В случае высокочастотного УЗ угловое расстояние между сателлитами много больше угловой ширины рефлексов, что позволяет рассматривать дифракцию рентгеновских лучей с поглощением n фононов, используя система уравнений Такаги-Топена в двухволновом приближении

$$\begin{aligned} (-2n\Delta K + i \partial / \partial s_h) Q_{h,n} &= \sigma_h \exp(-4Bis_0 s_h) J_n(\mathbf{hw}) Q_{0,0}, \\ i \partial Q_{0,0} / \partial s_0 &= i^n \sigma_{-h} \exp(4Bis_0 s_h) J_n(\mathbf{hw}) Q_{h,n}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Функция Грина системы (2.1) имеет вид интеграла Фурье по «парциальным» плоскотоволновые гармоники $P_{h,n}(\eta_0)$

$$\begin{aligned} G_{h,n}(r, r') &\sim (i^n \sqrt{\nu_n} / 2\pi) \exp(-i\pi\nu_n/2 - iB[\xi_h^2 + 2\xi_0(s'_h + s_0) - \xi_0^2]) \\ &\int_{-\infty}^{\infty} d\eta_0 P_{h,n}(\eta) \exp\{(i\eta_0/2)(\xi_h - \xi_0) + 2in\Delta K(x - x')\}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где

$$P_{h,n}(\eta_0) \sim \{M_n D_{-\nu_n-1}(-Y_n) - iN_n D_{-\nu_n-1}(-Y_n(\eta))\}, \quad (2.3)$$

$$\xi_0 = s_0 - s'_0, \xi_h = s_h - s'_h, \nu_n = iJ_n^2(\mathbf{hw})\sigma_h\sigma_{-h}/4B,$$

$$Y_n = \sqrt{i/B}(\eta + n\Delta K), \eta = \eta_0 + 2Bz, \quad (2.4)$$

а отстройка от условия Брэгга η является линейной функцией от z и определяет отклонение отражающих плоскостей по мере проникновения блоховской волны вглубь кристалла. При падении плоской волны почти под углом Брэгга ($\eta_0 \ll 1$), в приповерхностной области получаем

$$M_n = D_{-\nu_n}(iY_n(\eta_0)), iN_n = D_{-\nu_n}(iY_n(\eta_0)).$$

Обращение в нуль аргумента Y_n функции Вебера $D_{-\nu_n}$

$$\eta(Z_n) + n\Delta K = 0 \quad (2.5)$$

отвечает прохождению блоховской волны через точку поворота Z_n (точку локального выполнения условий Брэгга для n -го сателлита). По мере распространения волны вглубь кристалла точка возбуждения будет последовательно проходить через точки поворота $Z_1, Z_0, Z_{-1}, Z_{-2} \dots Z_n$, при

$$Z_n = -(n\Delta K + \eta_0)/2B \quad (2.6)$$

При небольших градиентах деформации, $\sqrt{B} \ll \Delta K/2$, можно использовать асимптотические «квазиклассические» выражения

$$M_0^{(1)} = [M_1 r_1 + N_1 t_1 \exp(i\varphi_1)] W_{1,0}, \quad N_0^{(1)} = [N_1 r_1 + M_1 t_1 \exp(i\varphi_1)] (W_{1,0})^{-1}, \quad (2.7)$$

где r_1 — амплитуда межветвевое рассеяния, t_1, φ_1 — модуль и фаза амплитуды внутриветвевое рассеяния

$$r_1 = \exp(-\pi|v_1|), \quad t_1^2 = 1 - r_1^2, \quad \varphi_1 = \text{Im} \{ \ln \Gamma(1 + i|v_1|) \} + |v_1|(1 - \ln|v_1|) + \pi/4.$$

$W_{1,0}$ - набег фазы блоховской рентгеновской волны, распространяющейся в кристалле между точками поворота Z_0, Z_1

$$W_{1,0} = \exp \left[-i \int_{Z_1}^{Z_0} dz K_{1,0}(z) + v_1 \ln(2\sqrt{|v_1|}) - v_0 \ln(2\sqrt{|v_0|}) \right], \quad (2.8)$$

$K_{1,0}(z)$ - квазиимпульс блоховской волны в четырехволновом приближении (см. [7]),

$$K_{1,0}(z) = -\Delta K + \left\{ [\Delta K - \sqrt{\eta^2 + (J_0(\mathbf{hw}))^2}] + [J_1(\mathbf{hw})]^2 \right\}^{1/2}. \quad (2.9)$$

Пусть после прохождения точки поворота Z_0 , блоховская волна подходит к точке Z_1 .

Применяя процедуру «сшивки» квазиклассических решений вблизи точки поворота Z_{-1} ,

можно найти соответствующие коэффициенты

$$M_{-1}^{(1)} = M_1 r_1 W_{1,0} r_0 W_{0,-1}, \quad N_{-1}^{(1)}, M_{-1}^{(3)} \sim 1/\Delta K \ll 1, \quad (2.10)$$

$$N_{-1}^{(2)} = M_1 r_1 t_0 \exp(-i\varphi_0) W_{1,0} (W_{0,-1})^{-1},$$

$$M_{-1}^{(2)} = M_1 t_1 \exp(-i\varphi_1) r_0 (W_{1,0})^{-1} W_{0,-1} \exp[2i\Delta K(Z_{-1} - Z_0)],$$

$$N_{-1}^{(3)} = M_1 t_0 \exp(-i\varphi_0) r_1 (W_{1,0})^{-1} (W_{0,-1})^{-1} \exp[2i\Delta K(Z_{-1} - Z_0)].$$

На Рисунке 5в приведены траектории блоховских волн в деформированном колеблющемся кристалле (“дерево распространения волн”) при падении (плоской) волны с определенной угловой отстройкой. В случае, когда блоховская волна проходит через три точки поворота $2\Delta K < 2BT < 3\Delta K$ (см. Рисунок 5б) ИИД равна

$$\widetilde{I}_h^{\text{int}} = 2\alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\begin{array}{c} \Delta\eta_4 (\rho_n \rho_{n+1} \tau_{n+2} + \tau_n \tau_{n+1} \tau_{n+2} + \rho_n \tau_{n+1} \rho_{n+2} + \tau_n \rho_{n+1} \rho_{n+2}) \\ + \Delta\eta_3 (\rho_{n+1} \tau_n + \rho_n \tau_{n+1}) \end{array} \right], \quad (2.11)$$

где $\Delta\eta_4 = 2BT - \Delta K$, $\Delta\eta_3 = 3\Delta K - 2BT$. При $\mathbf{hw}=0$ (2.11) переходит в соответствующее выражение для кристалла с постоянным градиентом деформации, а в пределе больших

деформаций ($|\mathbf{hw}| \gg 1$ или $|B| \gg 1$, но $2BT < \Delta K$) ИИД стремится к кинематическому пределу.

Оказалось, что минимум I_h^{int} образуется при малых значениях амплитуды УЗ ($\mathbf{hw} \approx 0,4$) и малых $B \ll \pi/2$, когда рассеяние на основном рефлексе носит внутриветвевой характер ($\rho_0 = \exp[-\pi J_0^2(\mathbf{hw})/2B] \rightarrow 0, \tau_0 \rightarrow 1$), а на сателлитах - межветвевой, $\rho_n = \exp[-\pi(\mathbf{hw}/2)^{2n}/2B] \sim 1$.

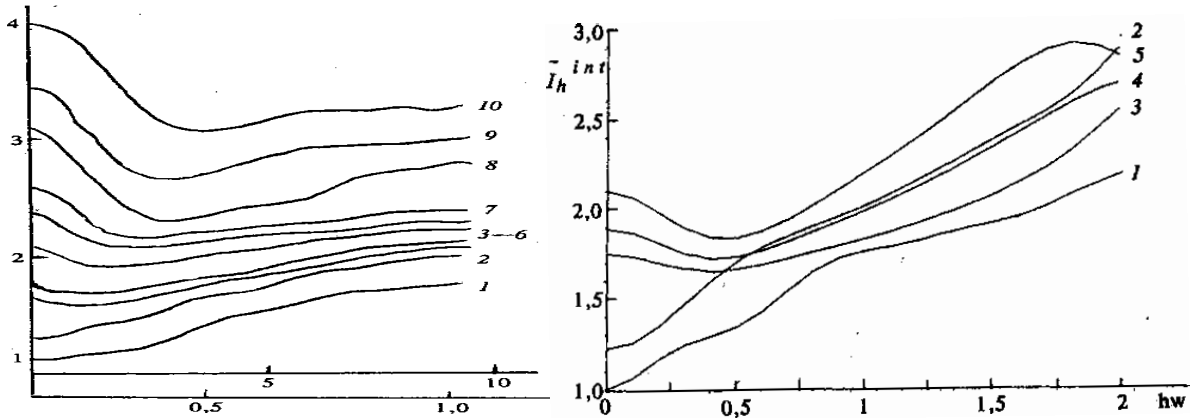


Рисунок 6. а) Экспериментальная зависимость I_h^{int} от амплитуды ультразвуковой волны, \mathbf{hw} , (подаваемого напряжения V); $t = 360$ мкм, $\Lambda = 88,8$ мкм, рефлекс (660), Si кристалл, Мо K_α излучение, численные значения B ($n = 1 - 10$) приведены в диссертации. б) Расчетные зависимости I_h^{int} .

Для ИИД на кристалле с точками возбуждения, прошедшими расстояние $2\Delta K < 2BT < 3\Delta K$, было получено выражение

$$\widetilde{I}_h^{int}(\rho_1) \approx 2\alpha[2\Delta K + 2(BT - \Delta K)(1 - 2\rho_1 + 2\rho_1^2)], \quad (2.12)$$

которое в кристалле без ультразвука также переходит в $\widetilde{I}_h^{int}(\rho_1 = 1) \approx 4\alpha BT$ и имеет минимум

$$\min \widetilde{I}_h^{int}(\rho_1^*) \approx 2\alpha[3\Delta K - 2BT] \quad (2.13)$$

при $\rho_1^* = 1/2$, когда

$$hw_* = [8B \ln(2)/\pi]^{1/2}. \quad (2.14)$$

2.2 Экспериментальное исследование упругих деформаций в колеблющихся кристаллах, приклеенных к кварцевому пьезопреобразователю

Большинство кристаллов являются непьезоэлектрическими, и для возбуждения в них ультразвуковых колебаний требуется, так или иначе, обеспечить механическую передачу возбуждений от пьезопреобразователя (ПП) к кристаллу. В работе были исследованы стационарные деформации в кристалле, возникшие из-за приклеивания

пьезопреобразователя, а также нестационарные - из-за возбуждения стоячей УЗ волны. Измерения были выполнены в двукристалльной Брэгг - Лауэ схеме с МоК α излучением, [11]. Кристалл кремния, отражение (220) использовался как монохроматор в геометрии Брэгга. Кристалл-образец - кремниевая пластина (отражение (220)) с диаметром 59 мм и толщиной 1.04 мм. Поверхности кристалла, от которых происходило отражение УЗ волн, были отполированы, ПП - прямоугольный кварцевый кристалл (8x13 мм) был приклеен к выходной поверхности (Рисунок 7).

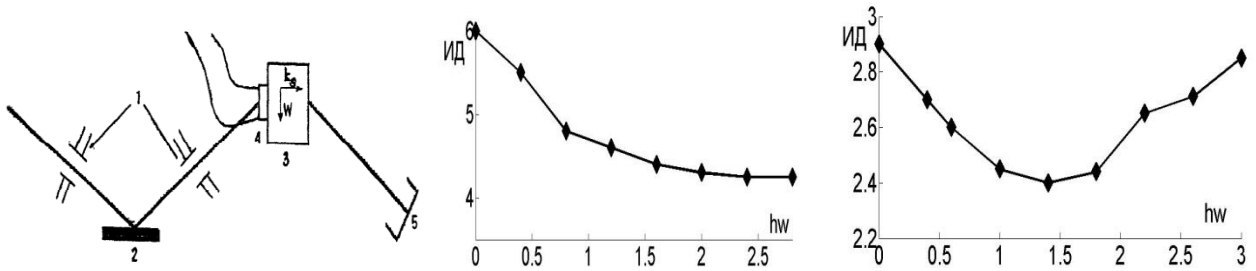


Рисунок 7. а) Схема эксперимента: (1) - система коллимирующих щелей, (2)- монохроматор, (3) – кристалл-образец, (4) пьезопреобразователь, (5) - детектор; б) Пиковая интенсивность дифракции как функция от hw при малых (б) и при больших деформациях (в).

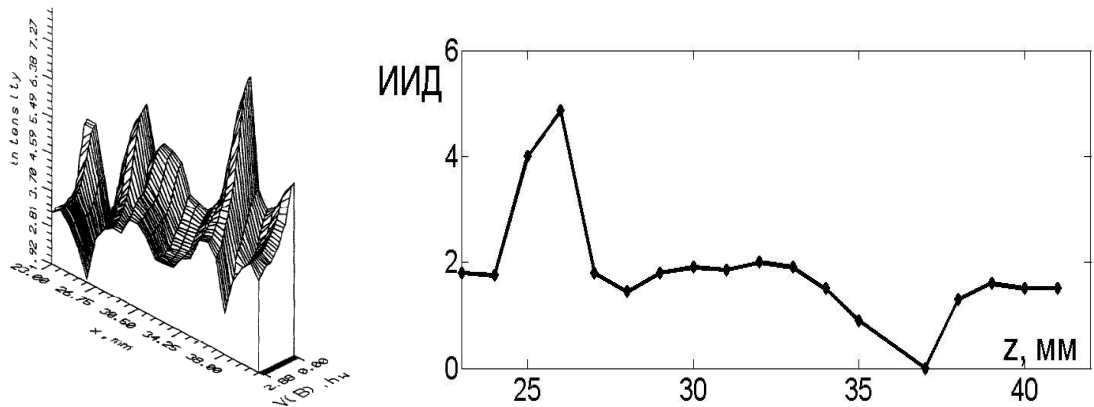


Рисунок 8. а) Интенсивность дифракции как функция от координаты вдоль поверхности кристалла и напряжения, б) Зависимость градиента деформации от координаты вдоль поверхности.

ПП возбуждал поперечные УЗ колебания на первой гармонике ($f=36$ МГц). Ширина резонанса нагруженного (с приклеенным кристаллом) пьезопреобразователя была 1-10 МГц. Рисунок 8 показывает зависимость пиковой интенсивности дифракции от напряжения, подаваемого на ПП, в двух точках $z=41$ мм (минимум деформаций), и $z=25$ мм (максимум деформаций). Края ПП были расположены в точках с координатами $z=25$ и $z=38$ мм. Значение амплитуды УЗ, при котором наблюдается минимум на Рисунке 11, совпадает в пределах погрешности с вычисленным по (2.13).

Глава 3. Статистическая теория динамической дифракции мессбауэровского излучения.

Глава 3 посвящена обсуждению влияния дефектов на форму кривой качания «чисто» ядерных рефлексов с вектором дифракции $\mathbf{g} = (h, h, h) \frac{2\pi}{a}$, (h – нечетное) в кристаллах гематита и боратах. Так как короткие импульсы (0.2 нс) синхротронного излучения (СИ) источника Photon Factory (Япония) разделены большими промежутками (1-2 мс), стало возможным отделить “быстрое” (упругое) электронное рассеяние от “задержанного” (резонансного) ядерного мессбауэровского излучения (МИ).

Обогащенные по Fe^{57} кристаллы гематита, использованные в экспериментах, были выращены из расплава [12], и вырезаны так, что ось c направлена нормально к поверхности. Их толщина составляла $T = 0.4$ мм, площадь поверхности - 5×10 мм². Изучение рентгеновскими методами [13-14] показало, что кристаллы являются слегка изогнутыми (радиус кривизны 8-64 м) с секторами роста (доменами). Как и в случае твердых растворов, замена Fe^{56} на изотоп Fe^{57} в кристалле гематита приводит к незначительным изменениям в положении соседних атомов и не изменяет симметрию кристаллической решетки.

Каждый вариант случайного расположения дефектов создает одну реализацию случайного процесса. Статистически полное описание такой системы возможно, если известны все моменты распределения. Если учитывается N моментов распределения, то последовательная статистическая теория дифракции рассматривает «зацепляющиеся» уравнения для N моментов поля $\langle E_g^i \dots E_{g'}^j \rangle$, ($g = 0, h$). В работе дифракционные характеристики описываются первыми моментами распределения: средней поляризуемостью

$$\langle \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \rangle = (c/2) \sum_{\mathbf{g}} \chi_{10}^{57} \delta(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta - \mathbf{g}), \quad (3.1)$$

и ее дисперсией Ω . Вклад в поляризуемость кристалла для σ - поляризации СИ дают четыре перехода с отстройкой по энергии ΔE_l (другие обозначения см. в диссертации)

$$\begin{aligned} \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) &= (1/N) \sum_{j=1}^N \hat{c}_{jk} \chi_{\alpha\beta}^k \exp(i(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \mathbf{x}_k) \\ \chi_{\alpha\beta}^k &= g_0 \sum_{l=1}^4 P_{\alpha\beta}^k \exp(-M_k) C_1^2(m_g, \Delta m_l) / (\Delta E_l + i), \end{aligned} \quad (3.2)$$

операторы \hat{c}_{jk} определены таким образом, что $\hat{c}_{jk} = 1$, если k -ая позиция в j -й элементарной ячейке занята изотопом Fe^{57} ; $\hat{c}_{jk} = 0$, если позиция занята Fe^{56} или ядро обладает другой проекцией магнитного момента. Здесь $\mathbf{x}_k = \mathbf{R}_j + \mathbf{r}_{jk}$, \mathbf{R}_j - положение j -й элементарной ячейки в кристалле, \mathbf{r}_{jk} - положение k -го атома в j -й элементарной ячейке.

Уравнения для когерентной части э/м поля и интенсивности диффузной компоненты.

Пусть ось z направлена по нормали (оси c) к поверхности кристалла гематита и вектору дифракции \mathbf{g} . В случае симметричной геометрии дифракции волновое поле в кристалле со случайным набором дефектов описывается системой уравнений ТТ

$$dE_0/dz = i\hat{\sigma}_{00} E_0 + i\hat{\sigma}_{01} E_g, dE_g/dz = i(\hat{\sigma}_{11} + \eta) E_g + i\hat{\sigma}_{10} E_0. \quad (3.3)$$

Поляризуемость кристалла и амплитуда прошедшей и дифрагированной волн равны сумме когерентной и диффузной компонент

$$\hat{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} + \delta\sigma_{ij}, E_{0,g} = E_{0,g}^c + \delta E_{0,g}. \quad (3.4)$$

После усреднения уравнений ТТ с учетом среднего значения и дисперсии Ω поляризуемости получим для когерентных амплитуд:

$$-i\sigma_{00}E_0^c + dE_0^c/dz = i\sigma_{01}E_g^c - \beta\sigma^2 L_0(z); -i\Delta_{11}E_g^c + dE_g^c/dz = i\sigma_{10}E_0^c - \beta\sigma^2 L_g(z), \quad (3.5)$$

где

$$L_0(z) = \int_0^z dz' \exp(i\Delta_{11}(z-z')) E_0^c(z'), L_g(z) = \int_0^z dz' \exp(-i\sigma_{00}(z-z')) E_g^c(z'),$$

$$\beta = \pi^2 \Omega / (\lambda \gamma_0 \sigma)^2, \sigma^2 = \sigma_{10} \sigma_{01}, \Delta_{11} = \eta + \sigma_{11}.$$

Приведенное в работе решение системы (3.5) дает для волнового поля внутри кристалла сумму из 4 блоховских волн с разными коэффициентами преломления и поглощения

$$\begin{pmatrix} E_0^c(z) \\ E_g^c(z) \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^4 \xi_k \exp(iq_k z) \begin{pmatrix} E_0(0) A_{gg}(s_k) + iE_g(0) \sigma_{10} \\ E_g(0) A_{00}(s_k) + iE_0(0) \sigma_{01} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

$$\xi_k = l(s_k)/D_k, \xi_{2,1} = \pm il_1/Q_1 L, \xi_{3,4} = \pm il_2/Q_2 L, Q_{1,2} = 2\sqrt{(\eta/2 - \sigma_{00})^2 - l_{1,2}},$$

$$L = l_1 - l_2 = |\sigma|^2 \sqrt{1 + 4\beta}.$$

Волновые вектора блоховских волн равны

$$q_{1,2}^s = \eta/2 \pm \sqrt{(\eta/2 - \sigma_{00})^2 - l_1^2}, q_{3,4}^s = \eta/2 \pm \sqrt{(\eta/2 - \sigma_{00})^2 - l_2^2}, \quad (3.7)$$

$$l_{1,2}^2 = \alpha_{1,2} \sigma^2, \alpha_{2,1} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + 2\beta \pm \sqrt{(1 + 2\beta)^2 - 4\beta^2} \right\}.$$

Диффузное волновое поле. Уравнения для определения интенсивности диффузных волн могут быть получены как разность уравнений для усредненных и когерентных волн

$$I_n^d = \langle I_n \rangle - I_n^c, I_n^c = \langle E_n^* \rangle \langle E_n \rangle, n = 0, g \quad (3.8)$$

Воспользовавшись известным приближением Като [15] и опуская следующие члены

$$\langle \delta E_{0,g}^* \sigma_{01,10} \rangle = \langle E_{0,g}^c \delta \sigma_{01,10} \rangle = \langle \delta E_{0,g}^* \delta \sigma_{01,10} \rangle = \langle \delta E_{0,g}^c \delta E_{0,g}^c \delta \sigma_{01,10} \rangle = 0, \quad (3.9)$$

Если вслед за Като определить корреляционную длину э/м поля в условиях динамической дифракции, Γ_c , выражениями

$$\text{Re} \{ i\delta\sigma_{01} \langle \delta E_{0,g}^* \delta E_g \rangle \} \approx -2\text{Re} \{ \sigma^2 \} \Gamma_c I_0^d + 2 |\sigma_{01}|^2 \Gamma_c I_g^d, \quad (3.10)$$

$$\text{Re} \{ i\delta\sigma_{10} \langle \delta E_g^* \delta E_0 \rangle \} \approx -2\text{Re} \{ \sigma^2 \} \Gamma_c I_g^d + 2 |\sigma_{10}|^2 \Gamma_c I_0^d,$$

то для определения интенсивности диффузных волн получаем систему уравнений

$$dI_0^d/dz = -\mu_0 I_0^d + \varphi_{01} I_g^d + G_0(z), \quad dI_g^d/dz = -\mu_g I_g^d + \varphi_{10} I_0^d + G_g(z), \quad (3.11)$$

где

$$G_{0,g}(z) = \text{Re} \{ \beta \sigma^2 L_{0,g} E_{0,g}^{c*} \}, \quad \mu_{0,g} = 2 \text{Im} (\sigma_{11,00}) + 2 \text{Re} \{ \sigma^2 \} \Gamma_c, \quad \varphi_{10,01} = 2 |\sigma_{11,00}|^2 \Gamma_c.$$

Особенности интегральной интенсивности. На Рисунке 9а представлены экспериментальные кривые качания ядерного магнитного рефлекса (777), в случае кристаллов с естественным содержанием изотопа ($c = 0.022$) и обогащенного ($c = 0.95$) [12,13]. При дифракции на кристалле с $c = 0.022$ наблюдается широкое “гало”, связанное, как показано ниже с диффузным рассеянием. Ширина кривой качания практически такая же, как и при дифракции на обогащенном кристалле, и появление этого относительно сильного диффузного рассеяния в почти совершенных кристаллах с кристаллографической точки зрения было загадкой.

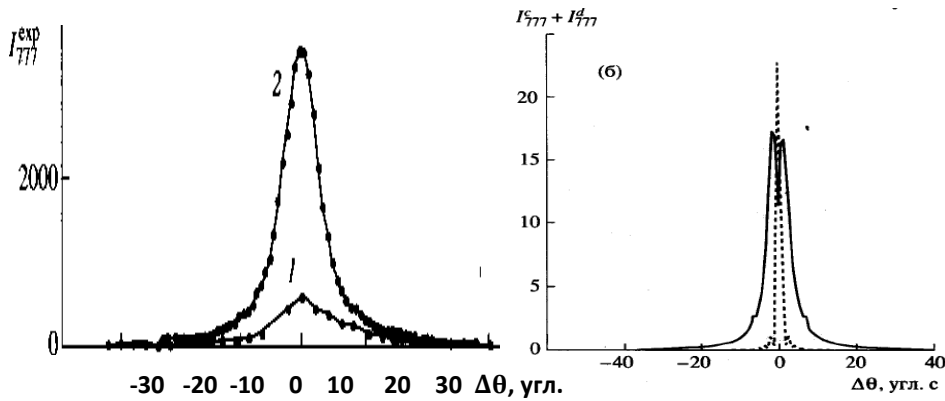


Рисунок 9. а) Экспериментальные кривые качания для ядерного рефлекса (777) с естественным содержанием изотопа $c = 0.022$ (кривая 1, $\times 40$ раз) и обогащенного кристалла ($c = 0.95$, кривая 2); б) Расчетные кривые качания, рефлекс (777), $\beta = 0.1$, толщина кристалла $T = 10\lambda/g_0$. Концентрация изотопа: $c = 0.022$ - пунктир ($\times 40$), $c = 0.95$ - сплошная линия.

На Рисунке 9б представлены рассчитанные в рамках статистической теории кривые распределения интенсивности когерентной компоненты и всего дифракционного поля, полученные в результате интегрирования по энергии вблизи резонанса. Для длины корреляции было подобрано значение $\Gamma_c = 0.1 \lambda \gamma_0 / \pi g_0$. В результате проведенного анализа особенность в виде “плато” на экспериментальной кривой было объяснено резким возрастанием диффузного рассеяния на изотопических дефектах при определенных значениях отстройки от угла Брэгга.

Глава 4. Рефлектометрические и спектрально чувствительные методы при рассеянии на кристаллах со сверхрешетками

4.1 Рассеяние рентгеновских лучей на неровной поверхности. Двухмасштабная модель.

Анализ рефлектометрических данных для шероховатых поверхностей чаще всего основывается на двух вариантах теории возмущений. Это или первое борновское приближение [15, 16] (кинематическая теория), или приближение искаженной волны (DWBA – Distorted Wave Born Approximation) [17 – 19].

Методы теории возмущений [15-16] нельзя применять для поверхностей, имеющих еще один, более крупный масштаб неровностей, тогда обычно используют квазиклассическое приближение Кирхгофа или приближение касательной плоскости (Tangent Plane Approximation) [20,21]. В работе использовалась двухмасштабная модель поверхности [22], являющаяся комбинацией двух методов: рассеяние на крупномасштабных плавных неровностях описывалось в приближении Кирхгофа, а на мелкомасштабных неровностях – учитывалось по теории возмущений. Если наклоны границы раздела малы, то задачу рассеяния можно решать в рамках единого подхода, вводя малый параметр – тангенс угла наклона границы (приближение малых наклонов – Small Slope Approximation), [23].

Пусть две среды 1 и 2, имеющие диэлектрические проницаемости ε_1 и ε_2 , разделены неровной поверхностью, и монохроматическое излучение частоты ω падает из среды 1 в среду 2 (Рисунок 10). Локальная высота неровностей относительно средней поверхности $z = 0$ описывается функцией $z = H(\mathbf{p})$, где $\mathbf{p} = (x, y)$ – радиус вектор проекции точки поверхности на плоскость $z = 0$

$$H(\mathbf{p}) = \zeta(\mathbf{p}) + h(\mathbf{p}), \quad (4.1)$$

где крупный масштаб $\zeta(\mathbf{p})$ связан, как правило, с целевым формированием поверхности (например, при травлении или эпитаксиальном напылении), а мелкий масштаб $h(\mathbf{p})$ – с несовершенством технологии, флуктуациями и т.п.

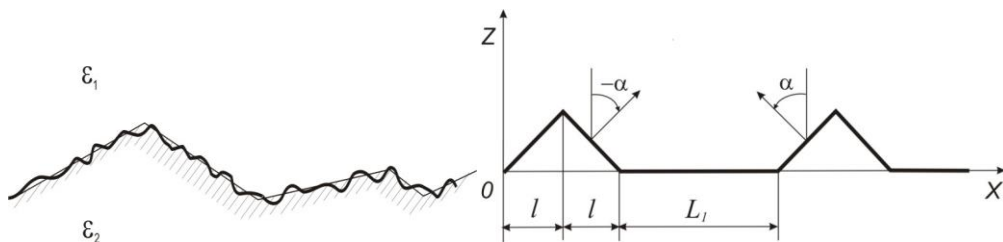


Рисунок 10. а) Одномерный рельеф крупномасштабных неровностей; б) Модельный крупномасштабный профиль поверхности.

Тогда диэлектрическая проницаемость при использовании ступенчатых функций Хэвисайда $\theta(z)$ равна

$$\varepsilon(\mathbf{p}, z) = \varepsilon_1 \theta(z - H(\mathbf{p})) + \varepsilon_2 \theta(H(\mathbf{p}) - z) = \varepsilon_1 + \Delta \theta(H(\mathbf{p}) - z), \quad (4.2)$$

где $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Решение скалярных уравнений Максвелла согласно теореме Грина относительно поля $E(\mathbf{r})$ имеет вид [26]:

$$E(\mathbf{r}) = \int d^3 r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') + \oint ds' \mathbf{n}' [E(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' E(\mathbf{r}')]. \quad (4.3)$$

Здесь в первом интеграле точка \mathbf{r}' находится внутри рассеивающей среды 2 (где $V(\mathbf{r}') \neq 0$), а во втором интеграле – на ограничивающей поверхности. Интеграл по объему описывает рассеяние на потенциале $V(\mathbf{r}')$, а интеграл по поверхности дает решение граничной задачи вне области рассеяния. Для идеальной гладкой границы раздела, т.е. для потенциала $V(\mathbf{p}, z) = \Delta \bar{\omega}^2 E(\mathbf{p}, z) \theta(-z)$ уравнение (4.3) имеет точное решение, содержащее коэффициенты Френеля отражения R и преломления T , [25]:

$$E(\mathbf{p}, z) = \begin{cases} E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{p} - i\nu_0 z) + R(\kappa_0) E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{p} + i\nu_0 z), & z > 0 \\ T(\kappa_0) E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{p} + i\nu_t z), & z < 0 \end{cases}. \quad (4.4)$$

где \mathbf{k}_0 - тангенциальная компонента волнового вектора падающей волны, ν_0 и ν_t - нормальные компоненты волновых векторов падающей и преломленной волн

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_0 - \nu_0 \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{k}_t = \mathbf{k}_0 - \nu_t \mathbf{e}_z, \quad \nu_0 = \sqrt{\varepsilon_1 \bar{\omega}^2 - \kappa_0^2}, \quad \nu_t = \sqrt{\varepsilon_2 \bar{\omega}^2 - \kappa_0^2}, \quad (4.5)$$

$$R(\kappa_0) = \frac{\nu_0 - \nu_t}{\nu_0 + \nu_t}, \quad T(\kappa_0) = \frac{2\nu_0}{\nu_0 + \nu_t}. \quad (4.6)$$

Учет крупномасштабных неровностей в задаче отражения.

Используя приближение касательной плоскости, разобьем рассеивающую поверхность на ячейки, внутри которых она - локально плоская и наклонена относительно средней плоскости раздела двух сред для точки наблюдения в зоне дифракции Фраунгофера. Тогда для рассеянной волны при длине волны $\lambda \ll l$, где l - характерный размер ячеек, получаем

$$E_r(\mathbf{r}) = \frac{ie^{ik_0 r}}{4\pi r} \sum_p \oint ds_p [R(\theta_0, \mathbf{n}_p) \mathbf{v} - \mathbf{w}] \mathbf{n}_p e^{i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_p}, \quad (4.7)$$

где $\mathbf{w} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_r$, $\mathbf{v} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_r$ - вектор рассеяния, $R(\theta_0, \mathbf{n}')$ - локальный коэффициент отражения, зависящий от нормали \mathbf{n}' к поверхности и угла скольжения θ_0 , отсчитываемого от средней плоскости, а суммирование ведется по поверхности, состоящей из локально плоских участков p с нормальными \mathbf{n}_p .

Для излучения с поляризацией вдоль оси y , $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_r(\mathbf{r})\mathbf{e}_y$, вектор напряженности магнитного поля равен

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \frac{i\sqrt{\varepsilon_1} e^{ik_0 r} E_0}{4\pi r} (\mathbf{n}_r \times \mathbf{e}_y) \sum_p I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p), \quad (4.8)$$

$$\text{где } \mathbf{n}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) = \oint ds_p [R(\theta_0, \mathbf{n}_p) \mathbf{v} - \mathbf{w}] \mathbf{n}_p e^{i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_p}, \quad (4.9)$$

θ_r – угол наклона вектора \mathbf{k}_r к средней плоскости $z = 0$, а дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2} \frac{\sin \theta_r}{\sin \theta_0} \left| \sum_p I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) \right|^2. \quad (4.10)$$

где θ_r – угол наклона элемента телесного угла $d\Omega$ к плоскости $z = 0$.

При вычислении сечения рассеяния (4.10) от крупномасштабного профиля поверхности в виде набор одинаковых одномерных бугорков, расстояние между которыми является случайной величиной (Рисунок 10), необходимо выполнить усреднение по мелкомасштабным шероховатостям

$$\langle e^{i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{h}(x_p, y) - i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{h}(x_p, y)} \rangle = \left| \langle e^{i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{h}(x_p, y)} \rangle \right|^2 + \langle e^{i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{h}(x_p, y) - i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{h}(x_p, y)} \rangle_c, \quad (4.11)$$

где первое слагаемое дает когерентную (относительно мелкого масштаба), второе – некогерентную компоненту. В дальнейшем для простоты будем опускать некогерентную компоненту в (4.11), считая, что корреляция между флуктуациями неровностей мелкого масштаба отсутствует. Если высоты точек поверхности распределены по Гауссу [15,18]:

$$f(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_h} \exp\left(-\frac{h^2}{2\sigma_h^2}\right), \quad \langle e^{i\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{h}(x_p)} \rangle = e^{-M_h}, \quad M_h = \frac{1}{2} v_z^2 \sigma_h^2, \quad (4.12)$$

где σ_h – дисперсия распределения высот мелких шероховатостей, то усреднение по крупномасштабным неровностям дает

$$\langle \sum_p I_p \rangle_{\zeta, h} = e^{-M_h} k_0 L_y \langle \sum_p \frac{C_p}{i\beta_p} e^{i\mathbf{v}_x \cdot \mathbf{X}_p} (e^{i\beta_p L_p} - 1) \rangle_{\zeta}, \quad (4.13)$$

где

$$\beta_p = \frac{k_0}{\cos \alpha_p} [\cos(\theta_0 + \alpha_p) - \cos(\theta_r - \alpha_p)], \quad (4.14)$$

$$C_p = \frac{1}{\cos \alpha_p} \left\{ \sin(\theta_0 + \alpha_p) - \sin(\theta_r - \alpha_p) - R [\sin(\theta_0 + \alpha_p) + \sin(\theta_r - \alpha_p)] \right\}. \quad (4.15)$$

В сумму по p в (4.13) дают вклад участки с наклонами α и $-\alpha$ и горизонтальные участки переменной длины. Назовем «ячейкой» совокупность трех участков: двух

наклонных длиной l и одного горизонтального длиной L_p . Поскольку длина горизонтального участка – величина переменная, представим ее в виде $L_p = \bar{L} + \Delta L_p$, где \bar{L} – средняя длина, а ΔL_p – отклонение от среднего, то координату начала p -го участка можно записать в виде:

$$X_p = 2l(p-1) + \sum_{s=1}^{p-1} L_s = (p-1)\Lambda + \sum_{s=1}^{p-1} \Delta L_s, \quad (4.16)$$

где $\Lambda = 2l + \bar{L}$ – длина «средней» ячейки вдоль оси x . В результате сечение когерентного рассеяния оказывается равным

$$\left| \langle \sum_p I_p \rangle_{\zeta, h} \right|^2 = L_y^2 k_0^2 |H(v_x \Lambda, M_L)|^2 \left| \sum_{j=1}^3 D_j \exp(i\beta_j \bar{X}_j) \right|^2, \quad (4.17)$$

$$\text{где } D_j = C_j \frac{\bar{l}_j}{\lambda} \text{sinc}\left(\frac{\beta_j \bar{l}_j}{2}\right), \text{ а } H(v_x \Lambda, M_L) = \sum_{t=1}^N \exp[iv_x \Lambda(t-1) - M_L(t-1)], \quad (4.18)$$

представляет собой сумму фазовых множителей волн, отраженных от «средних» ячеек, с периодом Λ . Нерегулярность рельефа, описываемая в данной модели через отклонения от периодичности ΔL_s , учитывается множителями $\exp[-M_L(t-1)]$, которые существенно отличаются от стандартных факторов Дебая-Валлера и подробно обсуждаются в диссертационной работе.

4.2 . Стоячие нейтронные волны при динамической дифракции тепловых нейтронов на монокристаллах. Несмотря на большую проникающую способность РЛ и нейтронов, методикам с их использованием трудно придать поверхностную чувствительность. Метод стоячих рентгеновских (нейтронных) волн (СРВ, СНВ) один из способов дать прямой ответ на вопрос в каком структурном положении находится конкретный атом на поверхности. Угловое сканирование области вблизи рефлекса приводит к смещению положения пучностей стоячей волны, а одновременная регистрации угловой зависимости выхода вторичного процесса от слоя атомов позволяет определить дисперсию и среднее расстояние от атомов до кристалла.

В [26] была рассмотрена схема образования СНВ при дифракционном рассеянии на кристаллах кальцита, когда в качестве вторичного процесса использовались гамма кванты, образовавшиеся в результате радиационного захвата нейтронов ядром $^{40}\text{Ca}(n, \gamma)^{41}\text{Ca}$. Глубина выхода гамма-квантов с характерной энергией 100 кэВ-2 МэВ составляла 1-5 см. В случае дифракции по Брэггу кривая качания представляет собой почти идеальный «столлик Дарвина». В угловой области полного отражения наблюдается «характерный» провал (Рисунок 11б), связанный с тем, что длина экстинкции для нейтронных рефлексов много

меньше глубины выхода и составляет порядка 50-100 мкм. При большой глубине выхода вторичного процесса в его формировании участвует весь кристалл, а так как глубина проникновения нейтронной волны в кристалл в условиях дифракции ограничена длиной экстинкции, то выход вторичных гамма квантов существенно уменьшается.

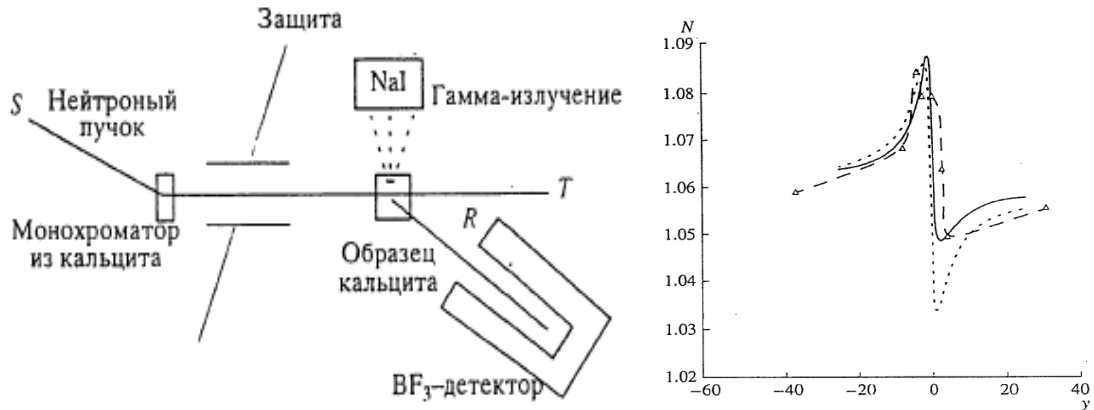


Рисунок 11. (а) Схема эксперимента СНВ. (б) Экспериментальная (штрих пунктир), расчетная (сплошная) и приближенная, [26], (пунктир) кривые выхода вторичных гамма-квантов в результате радиационного захвата нейтронов при дифракции по Лауэ в зависимости от угловой отстройки .

4.3. Тепловое диффузное рассеяние при условии существования стоячей рентгеновской волны в колеблющихся кристаллах.

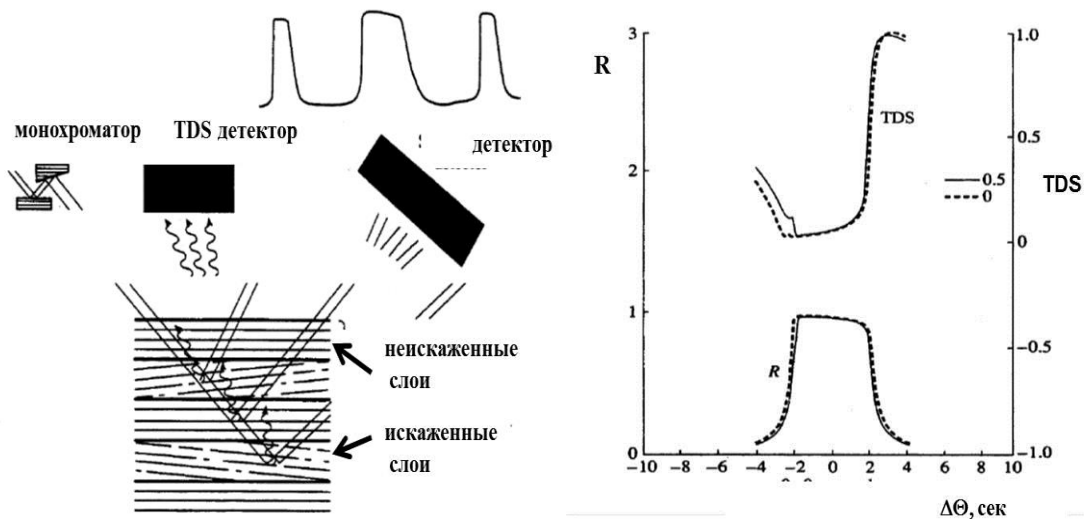


Рисунок 12. а) Схема образования СВР при дифракции на искаженных УЗ отражающих плоскостях; б) Кривая выхода ТДР (в у.е.) и кривая дифракционного отражения для основного рефлекса (911) для неискаженного кристалла (пунктир) и кристалла с УЗ при $hw=0.5$ (сплошная линия).

Использование дополнительной модуляции кристаллической решетки под

воздействием УЗ позволяет существенно расширить возможности стандартного метода СВБ благодаря одновременной регистрации дифракционных кривых и кривых выхода вторичного процесса (в данном случае теплового диффузного излучения (ТДР)) и от основного рефлекса, и от всего набора сателлитов (Рисунок 12). В условиях существования стоячей рентгеновской волны выход теплового диффузного излучения описывается выражением

$$\begin{aligned} \aleph(TDS) &= \int_0^L dz P_{TDS} \{ \text{Im} \chi_{00} |E_0(z)|^2 + \text{Im} \chi_{hh} |E_h(z)|^2 + 2 \text{Re} \{ \text{Im} \chi_{0h} E_0(z)^* E_h(z) \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) \} \} \\ &= \aleph_0 + \aleph_h + \aleph_{0h} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Мнимая часть поляризуемости кристалла, связанная с рассеянием фононов имеет вид

$$\begin{aligned} \text{Im} \chi^{ik}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_h) &= \frac{\pi r_0^2 k_B T}{k V_0 M} \ln \left(\frac{q_{max}}{q_{min}} \right) P^{ik}(\mathbf{k}_g) F^*(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_g) F(\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_g) \\ &\{ (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_g)(\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_g) / c_+^2 k^2 + [(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_g)\mathbf{k}_g][(\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_g)\mathbf{k}_g] / c_-^2 k^2 \}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

4.4 Кристаллы с длинноволновыми колебаниями как рентгенооптические элементы. В работе рассмотрены два случая, представляющие практический интерес:

- 1) стробоскопии с использованием временной структуры СИ, когда кристаллы с длинноволновыми колебаниями используются для дифракционной фокусировки по Брэггу. При синхронизации фазы УЗ волны и времени прихода импульса СИ пучок СИ рассеивается на дифракционных плоскостях с «постоянным» изгибом, $R(t)$, (Рисунок 13а).
- 2) оптики скользящего падения, когда модуляция электронной плотности под воздействием продольных УЗ колебаний приводит к возникновению особенностей коэффициента отражения R в области полного внешнего отражения, где наблюдается дополнительный рефлекс (Рисунок 13б).

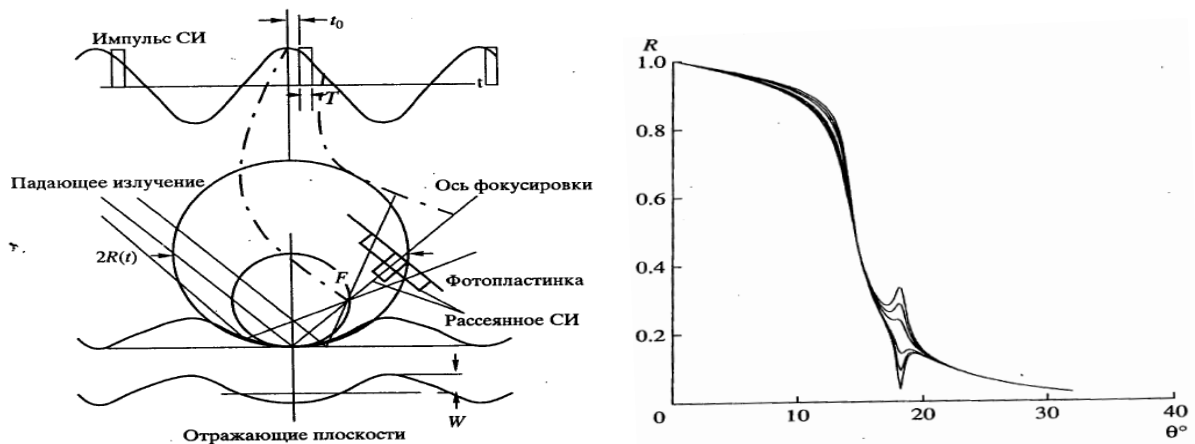


Рисунок 13. а) Схема стробоскопического эксперимента с колеблющимся кристаллом, фокусирующим излучение за счет изгиба отражающих плоскостей; б) расчетные

зависимости коэффициента отражения колеблющегося кристалла от угла скольжения для Ag K_α излучения.

Глава 5. Исследование колебательных свойств и другие физические характеристики наноструктур.

Традиционно такие «объемные» характеристики материалов как модуль Юнга Y , эластичность, коэффициенты теплового расширения, скорость звука, температура Дебая, теплоемкость и теплопроводность считаются слабо зависящими формы образца и температуры. Однако при переходе к одномерным и двумерным структурам и наночастицам число химических связей на атом уменьшается; появляются свободные электронные орбитали, которые существенно меняют механические свойства вещества.

5.1 Вклад размерных, температурных и химических аспектов в упругие характеристики, температуру Дебая, теплоемкость и другие параметры наноструктур.

Считается, что модуль Юнга растет с ростом температуры плавления вещества T_m . Между тем, для большинства неорганических наноматериалов T_m и модули Юнга увеличиваются с переходом в низкоразмерное состояние: это справедливо для Si наносфер [27], Ag нанопроволок [28], кварцевых кристаллов для генераторов [29], Si_3N_4 нанолент [30], поверхностей TiCrN и TiAlN, Al-Si нанолент, ZnO нанопроволок и нанолент. Наоборот, в (0001)-ориентированных ZnO нанолентах и проволоках, которые показывают более низкое значение модуля, варьирующееся от 29 ± 8 [31] до 38-100 ГПа [32], сравнимое со значением для объемного материала ZnO в 140 ГПа.

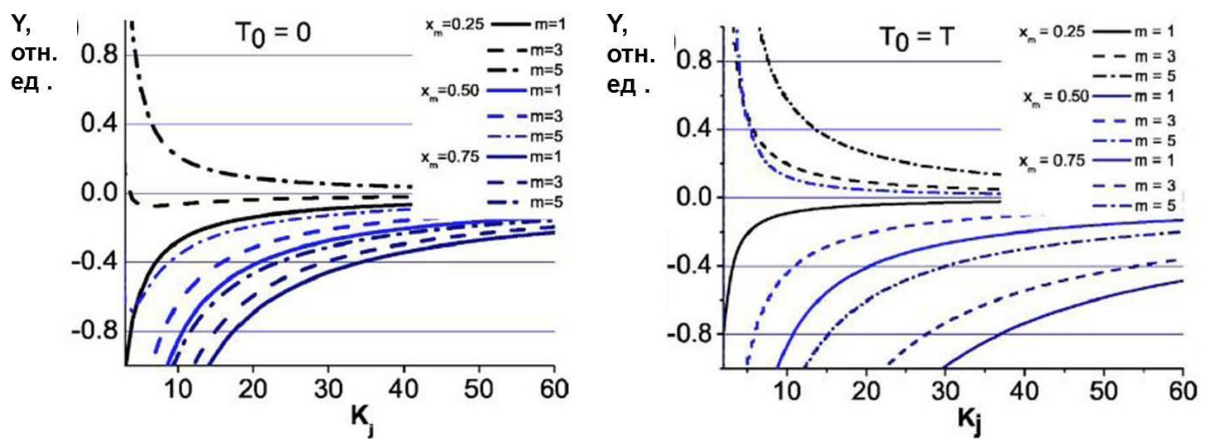


Рисунок 14. Расчетная размерная зависимость модуля Юнга от параметра K_j при а) $T_0=0$ и б) $T_0=T$ при различной природе связи и значениях параметра $x_m (T/T_m)$. Увеличение модуля Юнга происходит при $(x_m, m) = (< 0.25, >3)$ для $T_0=0$ и $(x_m, m) = (< 0.5, >3)$ для $T_0=T$. Постоянство Y может наблюдаться при пограничных $(T/T_m, m)$ комбинациях.

В работе было показано, что метод, основанный на анализе Связи- Порядка- Длины и Силы (СПДС) химических связей (bond-order-length-strength, BOLS) и компьютерном

моделировании, позволяет удовлетворительно описать характерные упругие, размерные, температурные изменения в наноматериалах (Рисунок 14). В качестве одного из ключевых параметров используется K_j - отношение числа атомов с нескомпенсированными химическими связями (например, относящихся к поверхности) к числу атомов с полностью заполненной координационной сферой (относящимися к объему).

5.2 Влияние потери поверхностных связей на дисперсию фотонов и теплопроводность в цилиндрических кремниевых нанотрубках. Особую роль в новых технологиях играют нанопроволоки из кремния как материала, полностью совместимого с современными микроэлектронными устройствами. Характерной особенностью кремниевых нанопроволок (КНП), является большое число атомов на поверхности, которые химически активны в отличие от случая УНТ, где связи атомов углерода скомпенсированы из-за sp^2 гибридизации. Для КНП достаточно хороших расчетных результатов при определении параметров колебательных мод (Рисунок 15) можно добиться при учете изменений параметров всего первых трех атомарных слоев с толщиной порядка $\delta a = 1.47$ нм.

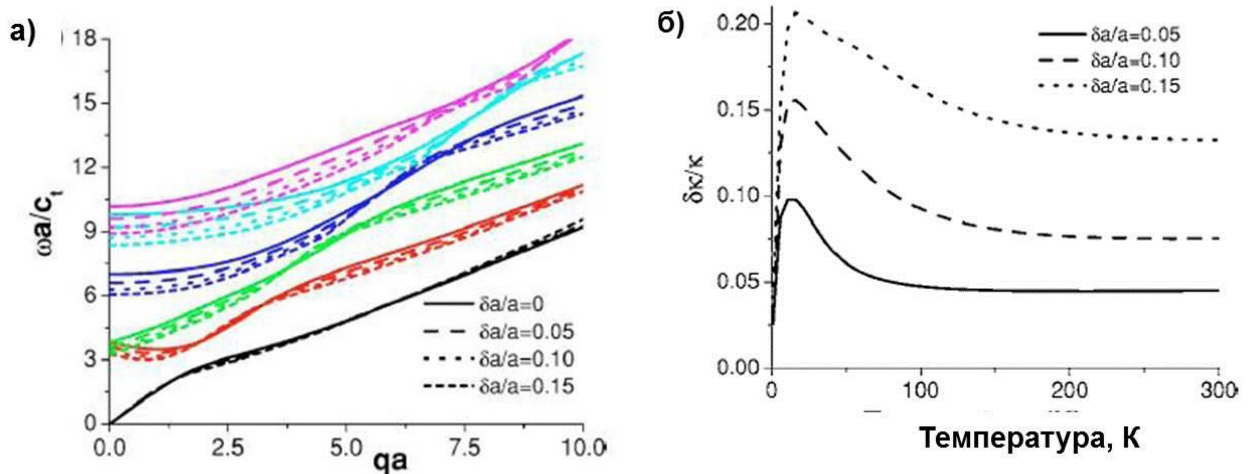


Рисунок 15. Продольная мода цилиндрической КНП: а) Дисперсия первых шести фононных ветвей; б) температурная зависимость относительного изменения теплопроводности при $\delta a/a=0, 0.05, 0.10$, и 0.15 .

Сравнение теории с опытными результатами показало, что равновесная теплопроводность кремниевой нанопроволоки обычно ниже, чем у объемного кремния [33,34] из-за увеличенного рассеяния тепловых фононов на границе нанотрубки. Применение методики оценки изменений СПДС позволило эффективно смоделировать параметры КНП. В результате исследований механических свойств нанокompозитных материалов, составленных из ориентированных наборов КНП и объемного заполнителя, оказалось, что именно КНП определяют значение модуля Юнга

$$Y = c\epsilon Y_{SiNW} + (1 - c)Y_v,$$

где ε - коэффициент усиления, c – коэффициент заполнения.

Глава 6. Диффузно-динамическая теория дифракции и рассеяния рентгеновских лучей на кристаллах с дефектами.

В данной главе изложена обобщенная динамическая теория упругого (брэгговского) и диффузного рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами нескольких типов как при дифракции на отражение, так и на прохождение. Построена теория, описывающая экстинкционные эффекты, возникающие из-за рассеяния на дефектах, без ограничений на их размеры, при когерентном и диффузном рассеянии, при малой и большой длине диффузной экстинкции. Изучено поведение дифференциального и интегральных коэффициентов и факторов экстинкции, связанных с многократностью рассеяния на флуктуациях.

На основе построенной теории интегральной диффузно-динамической комбинированной дифрактометрии (ИДДКД) были созданы новые рентгеновские методики, связанные с измерением скачков поглощения вблизи К-края, отклонения от закона Фриделя, деформационных и толщинных зависимостей, а также проведена их экспериментальная апробация.

6.1 Сравнительный анализ кинематической и динамической теории рассеяния.

Кинематическая теория дает для полной интегральной интенсивности (ПИИ) кристалла с дефектами (R_i), [35,36],

$$R_i = R_{iB} + R_{iD}, R_{iB} = R_{ip} \exp(-2L), R_{iD} = R_{ip} (1 - \exp(-2L)), \quad (6.1)$$

$$R_{ip} = 2CQt/\gamma_0, Q = (\pi|\chi_{Hr}|)^2/[\lambda \sin(2\theta_B)], \quad (6.2)$$

где R_{ip} – интегральная интенсивность рассеяния в идеальных кристаллах. В выражениях для брэгговской (R_{iB}) и диффузной (R_{iD}) составляющих полной интегральной интенсивности (ПИИ) от условий дифракции зависит только множитель R_{ip} , а от структуры дефектов зависит только статический фактор Кривоглаза-Дебая-Валлера ($E = \exp(-L)$). Такое упрощенное описание неприменимо, когда становятся существенными динамические эффекты, описанию которых посвящена данная глава.

Обобщенная динамическая теория рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов. В кристалле с дефектами поляризуемость $\chi(\vec{r})$ не является периодической функцией, поэтому вместо ряда Фурье нужно использовать интеграл Фурье:

$$\chi(\vec{r}) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \chi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \chi_{\vec{G}+\vec{q}} e^{-i(\vec{G}+\vec{q})\vec{r}}, \quad (6.3)$$

где \vec{G} - вектор обратной решетки, умноженный на 2π , \vec{q} - переданный импульс за счет рассеяния на искажениях, вызванных дефектами. Подставляя интеграла Фурье для индукции волны $D(\vec{r})$

$$\vec{D}(\vec{r}) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \vec{D}_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \vec{D}_{\vec{G}+\vec{q}} e^{-i(\vec{G}+\vec{q})\vec{r}}, \quad (6.4)$$

в уравнения Максвелла, для амплитуд волн в двухволновом случае динамической дифракции получим две связанные системы уравнений, одну для сильных брэгговских волн с волновыми векторами \vec{K}_0 и $\vec{K}_H = \vec{K}_0 + \vec{H}$ (\vec{H} - вектор обратной решетки)

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0)D_0 + CE\chi_{-H}D_H = -\sum_{\vec{q}} (\delta\chi_{\vec{q}}D_{-\vec{q}} + C\delta\chi_{-\vec{H}+\vec{q}}D_{\vec{H}-\vec{q}}), \quad (6.5)$$

$$CE\chi_H D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0)D_H = -\sum_{\vec{q}} (C\delta\chi_{\vec{H}+\vec{q}}D_{-\vec{q}} + \delta\chi_{\vec{q}}D_{\vec{H}-\vec{q}}),$$

и другую систему - для диффузных волн с волновыми векторами \vec{K}_{0q} и \vec{K}_{Hq} :

$$(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0)D_q + CE\chi_{-H}D_{H+q} = -(\delta\chi_{\vec{q}}D_0 + C\delta\chi_{-\vec{H}+\vec{q}}D_{\vec{H}}), \quad (6.6)$$

$$CE\chi_H D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0)D_{H+q} = -(C\delta\chi_{\vec{H}+\vec{q}}D_0 + \delta\chi_{\vec{q}}D_{\vec{H}}),$$

где ошибки возбуждения определены как:

$$\varepsilon_0 = \frac{K_0 - K}{K} \approx \frac{K_0^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_{Hq} = \frac{K_{Hq} - K}{K} \approx \frac{K_{Hq}^2 - K^2}{2K^2} \dots,$$

а флуктуационная часть Фурье компоненты восприимчивости кристалла задана выражением:

$$\delta\chi_{\vec{G}+\vec{q}} = \chi_{G+q} - \chi_G e^{-L_G} \delta_{0,q}, \quad \delta_{0,q} = \begin{cases} 1, & \text{при } \vec{q} = 0 \\ 0, & \text{при } \vec{q} \neq 0 \end{cases}. \quad (6.7)$$

Воспользовавшись модифицированной теорией возмущений [37-38], получим систему уравнений для сильных брэгговских волн:

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00})D_0 + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})D_H = 0, \quad (6.8)$$

$$(CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0 + \Delta\chi_{HH})D_H = 0,$$

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены дефектами, определяются выражениями

$$\Delta\chi_{00} = -\sum_{\vec{q}} (-2\varepsilon_{0\vec{q}} + \chi_0)V_{00}(\vec{q})/d(\vec{q}), \quad \Delta\chi_{HH} = -\sum_{\vec{q}} (-2\varepsilon_{H\vec{q}} + \chi_0)V_{HH}(\vec{q})/d(\vec{q}), \quad (6.9)$$

$$\Delta\chi_{0H} = C\sum_{\vec{q}} \chi_{-H}V_{0H}(\vec{q})/d(\vec{q}), \quad \Delta\chi_{H0} = C\sum_{\vec{q}} \chi_H V_{H0}(\vec{q})/d(\vec{q}), \quad (6.10)$$

$$d(\vec{q}) = (-2\varepsilon_{0\vec{q}} + \chi_0)(-2\varepsilon_{H\vec{q}} + \chi_0) - C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H} = 0, \quad V_{GG'}(\vec{q}) = C^2 \delta\chi_{-\vec{q}-\vec{H}+2\vec{G}} \delta\chi_{\vec{q}+\vec{H}-2\vec{G}},$$

где $\delta\chi_{-\vec{q}-\vec{H}+2\vec{G}}$, $\delta\chi_{\vec{q}+\vec{H}-2\vec{G}}$ -Фурье-компоненты флуктуационной части поляризуемости.

6.2 Геометрия Лауэ и геометрия Брэгга, тонкий и толстый кристаллы.

Геометрия Лауэ, толстый кристалл. В качестве приложения построенной теории был рассмотрен эффект аномального прохождения рентгеновских лучей. В случае толстого кристалла диффузные волны от дефектов небольших размеров из-за широкого углового распределения практически полностью поглощаются, за исключением небольшого слоя (толщина которого порядка длины абсорбции) на выходной стороне кристалла.

Для диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла при малых эффектах экстинкции и малых размерах дефектов были получены выражения

$$F_{ds}^{diff} = \frac{P_0(KCE|\chi_{Hr}|)^2(K\Lambda)^2}{16\pi^2 K \sin^2 \theta_B R_{iD}^{kin}} \sum_{\delta,\tau=1,2} I_{\delta\tau}, \quad (6.11)$$

$$I_{\delta\tau} = \iint yy' f_{\delta\tau}(y, y') \Pi_{\delta\tau}(y, y'), f_{\delta\tau}(y, y') = \frac{|\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_\delta - \chi_0|^2}{(y^2 + 1)(y'^2 + 1)} \int dk_y |\vec{H}_0 \vec{u}(\vec{q}_{\delta\tau})|^2,$$

$$\Pi_{\delta\tau} = e^{-\mu_0 l} \frac{e^{-m_\delta(y)} - e^{-m_\tau(y')}}{m_\tau(y') - m_\delta(y)}, m_\delta(y) = \mu_{ds}(y)l + (-1)^\delta \frac{\mu_H l C}{\sqrt{y^2 + 1}}.$$

Множитель $\Pi_{\delta\tau}$ в подинтегральном выражении (6.11) описывает эффект аномального прохождения диффузно рассеянных волн и является быстро убывающей функцией переменных y и y' . Для асимптотической оценки интеграла (6.11) при $\mu_H l \gg 1$ можно воспользоваться методом Лапласа, тогда для диффузного фактора экстинкции получим:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{\alpha CE |\chi_{Hr}| \mu_{ds}^0}{16 \sin^2 \theta_B \mu_H C \gamma_0^2 R_{iD}^{kin}} \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_H l C}} e^{-(\mu_0 - \mu_H C + \mu_{ds}^0)l}. \quad (6.12)$$

Случай Брэгга, тонкий и толстый кристаллы. В приближении тонкого кристалла выражение для когерентного фактора экстинкции в геометрии Брэгга имеет вид:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (6.13)$$

$$\text{где } r(z; t, g, \kappa) = \frac{chx_r - \cos x_i}{L_+ chx_r + \sqrt{L_+^2 - 1} shx_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i},$$

Для диффузного фактора экстинкции при учете эффектов экстинкции в геометрии Брэгга получаем

$$F_{ds}^{diff} = \frac{cV}{(2\pi)^3 L_H} \int d\vec{k} |\vec{H} \vec{u}_{\vec{k}}|^2 \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{2\mu_i t}. \quad (6.14)$$

Полагая, что $\mu_{ds}(0) \ll \mu_0$, и выполняя соответствующие разложения по малому параметру,

получим в приближении толстого кристалла:

$$F_{ds}^{diff} \approx \frac{\gamma/2}{(\mu_0 + \mu^*)t}, \quad \gamma = \frac{1}{1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|}. \quad (6.15)$$

В приближении тонкого кристалла для интегрального диффузного фактора экстинкции в геометрии Брэгга будем иметь:

$$F_{ds}^{diff} \approx \frac{1}{1 + (\mu_0 + \mu^*)t/\gamma}. \quad (6.16)$$

Как следует из выражений для факторов экстинкции в различных случаях дифракции, выражения для ПИИ в общем случае не являются аддитивными относительно вкладов в них дефектов разных типов. Это обусловлено нелинейным, как правило, характером зависимостей ПИИ от структурно-чувствительных параметров L_H , μ_{ds}^0 и μ^* .

6.3 Метод интегральной диффузно-динамической комбинированной дифрактометрии.

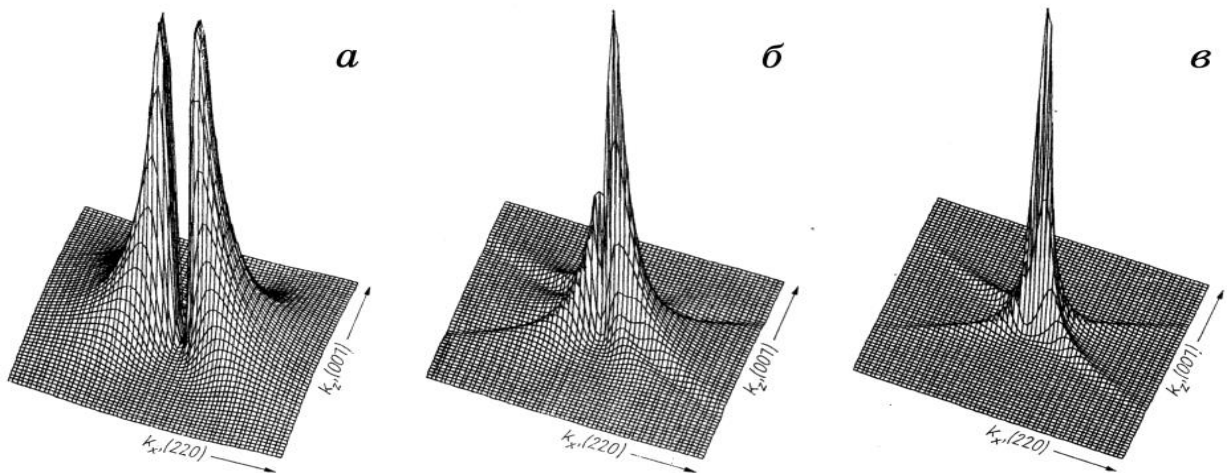


Рисунок 16. Изменение углового распределения диффузного рассеяния от кристалла с фиксированной дефектной структурой за счет увеличения толщины t кристалла или длины волны излучения для $\mu_0 t \sim 0,027$ (а), 1,34 (б) и 5,36 (в).

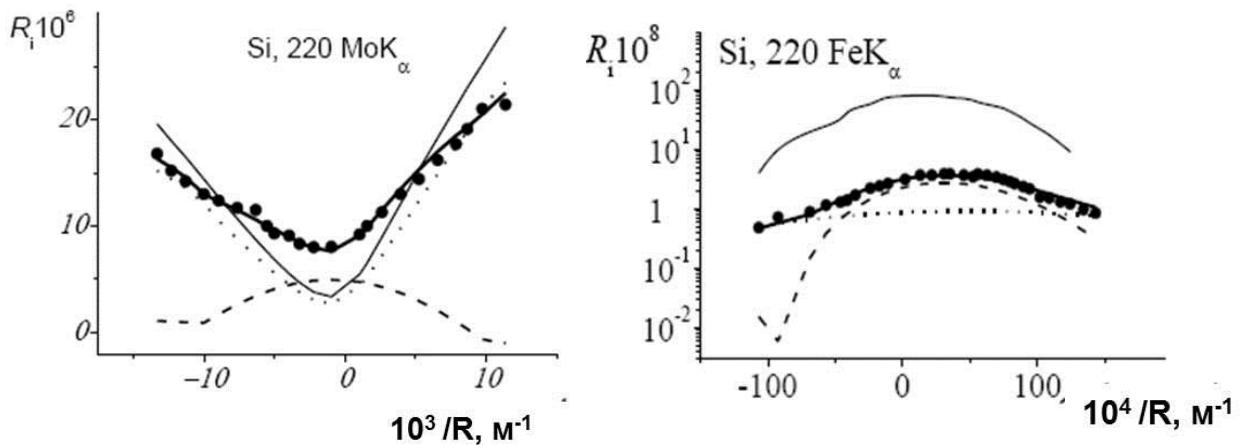


Рисунок 17. Теоретические (сплошные толстые линии) и экспериментальные (маркеры) зависимости ПИИ неидеального кристалла от радиуса изгиба. Пунктирные линии - расчёт когерентной компоненты ПИИ, штриховые — диффузной, а сплошные тонкие линии - ПИИ кристаллов без дефектов.

Полученные аналитические выражения и развитые методы моделирования диффузной и когерентной компонент дифрагированной волны позволяют существенно расширить границы применения стандартной кинематической теории в описании диффузного рассеяния. Рисунок 16 демонстрирует существенные изменения в распределении диффузной компоненты с изменением толщины кристалла, а рисунок 17 - вариацию диффузной компоненты при изгибе исследуемых дефектных кристаллов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложено теоретическое обоснование нового способа управления рентгеновскими пучками при фокусировке в колеблющемся кристалле путем изменения амплитуды ультразвуковых колебаний. Показано, что при приклеивании пьезопреобразователей к непьезоэлектрическим кристаллам возникают пространственно ограниченные упругие деформации. Разработана и апробирована методология определения деформационного поля рентгеновскими способами.

2. Предложены новые подходы к моделированию дифракционного рассеяния Мессбауэровского излучения в рамках статистической теории, позволившие описать особенности интерференции диффузного и когерентного излучения в кристаллах гематита с разной концентрацией резонансного изотопа.

3. Впервые рассмотрены модификации методов стоячих нейтронных волн с регистрацией вторичных гамма квантов и стоячих рентгеновских волн в колеблющихся кристаллах - с регистрацией теплового диффузного рассеяния.

4. Разработаны теоретические подходы к описанию механических и колебательных свойств углеродных нанотрубок (УНТ) и нанокompозитов в зависимости от их размеров, степени совершенства и хиральности УНТ.

5. Разработаны основы диффузно-динамической теории дифракции, позволяющей провести количественное сравнение с экспериментом в случае сильной интерференции когерентной и диффузной компонент излучения в кристаллах с протяженными дефектами разного рода. Показана эффективность данного подхода при определении рентгеновскими методами концентрации и типа дефектов в реальных кристаллах на примерах разного рода кластеров и дислокаций.

Список цитированной литературы

1. Инденбом, В.Л. / В.Л. Инденбом, Ф.Н. Чуховский // УФН. -1972. -Т. 107. -№ 2. -С. 229.
2. Инденбом, В.Л. / В.Л. Инденбом, В.М. Каганер// Металлофизика. -1979. Т. 1. -№ 1. -С. 17.
3. Афанасьев, А.М. / А.М. Афанасьев, В.Г. Кон // ФТТ. -1977. -Т. 19. -№ 6. -С. 1775.
4. Носик, В.Л./ В.Л. Носик // Кристаллография. -1991. -Т. 36. -С. 1091.
5. Du-Mond, J. / J. Du-Mond, H. Kirkpatrick // Phys. Rev. -1930. -V. 2. -P. 35.
6. Иолин, Е. М. / Е. М. Иолин, И.Р. Энтин // ЖЭТФ. -1983. -Т. 85. -С. 1692.
7. Entin, I.R./ I.R. Entin // Phys. Stat Sol. (b). -1985. -V. 132. -P. 355.
8. Entin, I.R./ I.R. Entin // Phys. Stat Sol. (a). -1988. -V. 106. -P. 25.
9. Иолин, Е.М. / Е.М. Иолин , Э.А. Райтман, Б.В. Кувалдин // ЖЭТФ. -1988. -Т. 94. -В. 5. -С. 218.
10. Zolotoyabko, E. / E. Zolotoyabko, V. Panov // Acta Cryst. A. -1992. -V. 48. -P. 225.
11. Aleshko-Ozhevskii, O.P. / O.P. Aleshko-Ozhevskii, A.S. Pogosyan, F.N. Chukhovskii //Soviet Kristallographia. -1991. -V. 39. -P. 159.
12. Suzuki, C.K. / C.K. Suzuki, H. Ohno, H.Takei // Rev. Sci. Instrum. -1992. -V. 63. -P. 1206.
13. Suzuki, C.K./ C.K. Suzuki, H.Takei, F. Sakai // Japan. J. Appl. Phys. -1993. -V. 32. -P. 3900.
14. Materlik, G. Resonant Anomalous X-Ray Scattering/ G. Materlik; ed. G. Materlik -Amsterdam: North Holland Publishing, 1994. - 408 с.
15. Stearns, D.G./ D.G. Stearns //J. Appl. Phys. -1989.-V. 65. -P. 491.
16. Rohrbach, A. / A. Rohrbach, W. Singer // J. Opt. Soc. Am. -1998. -V. A15. -P. 2651.
17. Nevot, L. / L. Nevot, R. Croce //Rev. Phys. Appl. -1980. -V. 15. -P. 761.
18. Sinha, S.K./ S.K. Sinha, E.B. Sirota, S. Garoff // Phys. Rev. -1988. --V. B38. -P. 2297.
19. de Boer, D.K.G./ D.K.G. de Boer //Phys. Rev. -1996. -V. B53. -P.6048.
20. Бреховских, Л.М./ Л.М. Бреховских // ЖЭТФ. -1952. -Т. 23. -С. 275.
21. Elfouhaily, Т.М. / Т.М. Elfouhaily, С.А. Guerin //Waves in Random and Complex Media. - 2004. -V. 14. -P. R1.
22. Басс, Ф.Г. Фукс, И.М. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности./ Ф.Г. Басс, И.М. Фукс.- М: Наука, 1972. -424 с.
23. Воронович, А.Г./ А.Г Воронович// ЖЭТФ. -1985. -Т. 89. -В. 1(7). -С. 116.
24. Visser, T.D. / T.D. Visser, P.S. Carney, E. Wolf //Phys. Lett. A. -1998. -V. 249. -P. 243.
25. Борн, М. Вольф, Э. Основы оптики. / М. Борн, Э. Вольф. - М.: Наука, 1973. -608 с.

26. Nosik, V. L./ V. L. Nosik, M.V. Kovalchuk // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. -1998. -V. A405. - P. 480.
27. Liang, H. / H. Liang, M. Upmanyu, H. Huang // Phys. Rev. B. -2005.-V. 71. -P. 241403.
28. Shim, H. W. / H. W. Shim // Appl. Phys. Lett. -2005. -V. 86. -P. 151912.
29. Cuenot, S. / S. Cuenot, C. Fretigny, S. Demoustier-Champagne // Phys. Rev. B. -2004. -V. 69. -P. 165410.
30. Shenoy, V. B. / V. B. Shenoy// Phys. Rev. B. -2005. -V. 71. -P. 094104.
31. Guo, J. G. / J. G. Guo, Y. P. Zhao // J. Appl. Phys. -2005. -V. 98. -P.074306.
32. Wu, H. A./ H. A. Wu // Mech. Res. Commun. -2006. -V.33. -P. 9.
33. Chen, C. Q. / C. Q. Chen, Y. Shi, Y. S. Zhang// Phys. Rev. Lett. -2006. -V. 96. -P. 075505.
34. Li, D. / D. Li, Y. Wu, P. Kim // Appl. Phys. Lett. -2003. -V. 83. -P. 2934.
35. Krivoglaz, M. A. X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals/ M. A. Krivoglaz.- Berlin: Springer, 1996. -466 p.
36. Даценко, Л. И. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами / Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осинковский. - Киев: Наукова думка, 1988. -200 с.
37. Молодкин, В. Б. / В. Б. Молодкин // Металлофизика. -1980. -В. 2. -№ 1. -С. 3.
38. Molodkin, V. B. / V. B. Molodkin // Phys. Metals. -1981. -V. 3. -P. 615.

Основные публикации автора по теме диссертации

1. Chukhovskii, F.N. Dynamical scattering of X-rays in vibrating deformed crystals./ F.N. Chukhovskii , V.L. Nosik, E.M. Iolin // JETPh. -1993. -V. 77. -N. 1. -P. 102.
2. Носик, В.Л. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе. 1. Фокусировка в идеальном кристалле/ В.Л. Носик//Кристаллография. -1994. -Т. 39. -№ 4. -С. 590.
3. Носик, В.Л. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе. 11. Фокусировка в упруго изогнутом кристалле/ В.Л. Носик// Кристаллография. - 1994. -Т. 39. - №6. -С. 973.
4. Носик, В.Л. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе. 111. Фокусировка в вакууме/ В.Л. Носик // Кристаллография. -1995. -Т. 40. -№ 5. - С. 789.
5. Nosik, V.L. X-ray acoustic resonance in real crystals/ V.L. Nosik// Journal de Physique IV. Colloque C2. Supplement au Journal de Physique III. -1994. -V. 4. -P. 2-225.
6. Kovalchuk, M.V. Investigation of Elastic Deformations in a Vibrating Crystals/ M.V. Kovalchuk, O.P. Aleshko-Ozhevskii, Yu.V. Pisarevskii, V.L. Nosik // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. -1998. -V. 405. -№ 2-3. -С. 449.

7. Nosik, V.L. On the Theory of X-rays Standing waves in Vibrating Crystals/ V.L. Nosik, M.V. Kovalchuk // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. -1998. -V. 405. -№ 2-3. -P. 480.
8. Nosik, V. L. Vibrating Crystals as Elements of the Soft X-ray Optics/ V.L. Nosik // Crystallography Reports. -1999. -V. 44. -N. 3. -P. 388.
9. Grigoryan, S. A. The Theory of Thermal Diffusion Scattering in Conditions of the Existence of a Standing X-Ray Wave in Oscillating Crystals/ S. A. Grigoryan, M.V. Kovalchuk, V.L. Nosik // Surface Investigation. -2000. -V. 15. -P. 1141.
10. Nosik, V.L. X-Ray Optical Elements Based on Vibrating Crystals / V.L. Nosik, M.V. Kovalchuk // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. -2001. -V. 16. -№ 1. -C. 137.
11. Nosik, V.L. Formation of Neutron Standing waves at Dynamical Diffraction of Thermal Neutrons on Single Crystals/ V.L. Nosik, M.V. Kovalchuk // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques . -2001. -V. 16. - № 1. -P. 189.
12. Nosik, V. L. Statistical Theory of Dynamical Diffraction of Mössbauer Radiation/ V.L. Nosik // Crystallography Reports. -2002. -V. 47. -N. 1. -P. 1.
13. Nosik, V.L. Determination of the parameters of rough surfaces from the dynamical X-ray diffraction data/ V.L. Nosik // Crystallography reports. -2002. -V.47. -N2. -P. 925.
14. Nosik, V.L. Formation of photoelectron holograms of crystals excited by synchrotron radiation/ V.L. Nosik // Crystallography Reports. -2002. -V.47. -N 2. -P.165.
15. Nosik, V.L. Statistical Theory of Diffraction of X-Ray and Light Waves in Periodic Substances/ V.L. Nosik // Crystallography Reports . -2004. -V. 49. - № 1. -P. 239.
16. Cerofolini, G.F. Strategies for nanoelectronics / G.F. Cerofolini, G. Arena, M. Camalleri, C. Galati, S. Reina, L. Renna, D. Mascolo ,V. Nosik // Microelectronic Engineering. -2005. -V. 81. -P. 405.
17. Au Yeung, T. C. Impact of surface bond-order loss on phonon dispersion relations and thermal conductivity of cylindrical Si nanowires/ T. C. Au Yeung, M. X. Gu, Q. Sun Chang, C. K. Chen George, D. W. Wong, V. Nosik // Phys. Rev. B.- 2006. -V. 74. -P. 155317.
18. Gu, M. X. Size, temperature, and bond nature dependence of elasticity and its derivatives on extensibility, Debye temperature, and heat capacity of nanostructures/ M. X. Gu, Q. Sun Chang, Z. Chen, T. C. Au Yeung, S. Li, C. M. Tan , V. Nosik // Phys. Rev. B. -2007. -V.75. -P. 125403.
19. Шпак, А.П. Интегральная многопараметрическая дифрактометрия наносистем на основе эффектов многократности диффузного рассеяния/ А.П. Шпак, М.В. Ковальчук, В.Б. Молодкин, В.Л. Носик// Успехи физики металлов. -2009. -Т. 10. -N 3. -С. 229.

20. Шпак, А.П. 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 // *Металлофизика. Новейшие технологии.* -2009. -Т. 31. -№ 8. -С. 1041.
21. Шпак, А.П. Новые диагностические возможности деформационных зависимостей интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для Лауэ-дифракции в области К-края поглощения/ А.П. Шпак, В.Б. Молодкин, М.В. Ковальчук, В.Л. Носик // *Металлофизика. Новейшие технологии.* -2009. -Т. 31. -№ 7. -С. 927.
22. Molodkin, V. B. Diffuse Dynamic Multiparameter Diffractometry: A Review/ V. B. Molodkin, A. P. Shpak, M. V. Kovalchuk, V.L. Nosik, V. F. Machulin // *Crystallography Reports.* -2010. -V. 55. -N. 7. -P. 1122.
23. Gaevskii, A. Yu. X ray Scattering from an Irregular Surface: Two Scale Model/ A. Yu. Gaevskii, V. B. Molodkin, V.L. Nosik // *Crystallography Reports .* -2010 .-V. 55. -N. 7. -P. 1135.
24. Молодкин, В. Б. Многопараметрическая кристаллография на основе многообразности картины многократного рассеяния брэгговских и диффузных волн (метод стоячих диффузных волн)/ В. Б. Молодкин, А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Ф. Мачулин, В. Л. Носик // *УФН .* -2011. - Т. -№ 7. -С. 681.
25. Носик, В.Л. Перспективы секвенирования биомолекул при транслокации через нанопоры. I. Обзор методов/ В. Л. Носик, Е. Б. Рудакова//*Кристаллография.* -2013. -Т. 58. - №. 6. –С. 804.
26. Bukreeva, I. Short Wavelength Laboratory Sources : Principles and Practices / I. Bukreeva, D. Pelliccia, A. Cedola, A. Sorrentino, F. Scarinci, M. Ilie, M. Fratini, V.E. Asadchikov, V.L. Nosik, S. Lagomarsino; Eds. Bleiner D., Costello J. -Oxford: Royal Society of Chemistry, 2014. - 452 P.