

УДК 537.216.2: 539.231:535.016

На правах рукописи



НОСИК ВАЛЕРИЙ ЛЕОНИДОВИЧ

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

Специальность 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния»

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Научный консультант:

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

Москва, 2015

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ГЛАВА 1. ДИНАМИЧЕСКАЯ ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ПРИ РЕНТГЕНОАКУСТИЧЕСКОМ РЕЗОНАНСЕ.....	14
1.1 Фокусировка в идеальном кристалле	14
1.2 Фокусировка в упруго изогнутом кристалле	39
Приложение 1.2.....	57
1.3 Фокусировка в вакууме.....	59
ГЛАВА 2. ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КОЛЕБЛЮЩИХСЯ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ	85
2.1 Распространение волнового поля в кристалле.....	85
2.2 Экспериментальное исследование упругих деформаций в колеблющихся кристаллах, приклеенных к кварцевому пьезопреобразователю.....	110
ГЛАВА 3. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ МЕССБАУЭРОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.....	116
3.1 Источники диффузного рассеяния, учет статических и динамических возбуждений.....	121
3.2 Уравнения для амплитуды когерентной части э/м поля и интенсивности диффузной компоненты.....	133
3.3. Особенности углового распределения интегральной интенсивности мессбауэровского излучения.....	136
Приложение 3.1. Мессбауэровская поляризуемость кристалла гематита...	145
Приложение 3.2. Когерентное волновое поле. Точные решения.....	151

ГЛАВА 4. РЕФЛЕКТОМЕТРИЧЕСКИЕ И СПЕКТРАЛЬНО ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ПРИ РАССЕЯНИИ НА КРИСТАЛЛАХ СО СВЕРХРЕШЕТКАМИ155

4.1 Рассеяние рентгеновских лучей на неровной поверхности. Двухмасштабная модель.....	156
4.2 Стоячие нейтронные волны при динамической дифракции тепловых нейтронов на монокристаллах	176
4.3 Тепловое диффузное рассеяние при условии существования стоячей рентгеновской волны в колеблющихся кристаллах.....	193
4.4 Пьезопреобразователи с возбужденными колебаниями как элементы для рентгеновской оптики скользящего падения.....	201

ГЛАВА 5. НАНОТРУБКИ : КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА И ДРУГИЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОСТРУКТУР.....213

5.1 Вклад размерных, температурных и химических аспектов в упругие характеристики, температуру Дебая, теплоемкость и другие параметры наноструктур.....	213
5.2 Влияние потери поверхностных связей на дисперсию фотонов и теплопроводность в цилиндрических кремниевых нанотрубках	235

ГЛАВА 6. ДИФФУЗНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ И РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ. ИНТЕГРАЛЬНАЯ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ НАНОСИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТОВ МНОГОКРАТНОСТИ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ.....255

6.1 Сравнительный анализ кинематической и динамической теории рассеяния.....	258
6.2 Геометрия Лауэ и геометрия Брэгга, тонкий и толстый кристаллы.....	261
6.3 Метод интегральной диффузно-динамической комбинированной дифрактометрии.....	290
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.....	312
СПИСОК РАБОТ.....	313
СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	317

ВВЕДЕНИЕ

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 (PETRA III, Германия; ESRF, Франция и др.), обладающих уникально высокой яркостью и эмитансом, центр тяжести исследований смещается в сторону развития новых когерентных и голографических методов. В случае Рентгеновских Лазеров на Свободных Электронах (РЛСЭ) (LCLS, США; EXFEL, FLASH I и II, Германия) яркость источника увеличивается еще больше до 10^9 раз по сравнению с источниками СИ. Поэтому акцент делается на возможности проведения экспериментов с временным разрешением до 10 фс (в случае использования методов pump & probe) и исследованиях структуры не только кристаллов, но и отдельных наночастиц и биомолекул. С учетом экспериментов с временным разрешением повышается актуальность обсуждаемых в диссертации методов управления рентгеновскими пучками при дифракции на динамических сверхрешетках в колеблющихся кристаллах. Большая яркость РЛСЭ позволяет исследовать слабое диффузное рассеяние и применить развитую диффузно-динамическую теорию дифракции для реальных кристаллов. Например, для того, чтобы 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 с характеристиками, управляемыми электрическим способом (идеальные кристаллы), так и с исследованием структуры и распределения дефектов (реальные кристаллы).

Характер влияния ультразвуковых колебаний на динамическую дифракцию существенно меняется в зависимости от соотношения между волновым вектором фонона K_s и расщеплением дисперсионных поверхностей ΔK . Обычно различают случаи:

- длинноволнового ультразвука, когда $K_s < \Delta K$ (длина волны УЗ, $l_s = 2\pi/K_s$, много, 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 L_e).

Ниже в основном рассматриваются случаи коротковолнового УЗ, когда при дифракции на кристалле со сверхрешеткой с периодом d помимо основного рефлекса, отвечающего межплоскостному расстоянию a , возникает серия «сателлитов» с вектором дифракции

$$\mathbf{H} = \mathbf{h} + n\mathbf{K}_s, \quad h = \frac{2\pi}{a}, \quad K_s = 2\pi/d,$$

С введением в строй в 2017 году Европейского Рентгеновского Лазера на Свободных Электронах (ЕРЛСЭ) особую актуальность приобретают эксперименты с УЗ частотой около 5 МГц (и кратные ей), которая отвечает частоте отдельных цугов волн в излучении РЛСЭ и частоте, на которой будут работать все специализированные детекторы. Одной из возможностей для изучения структуры образцов с временным разрешением (около 200 нс) является создание рентгенооптических элементов, в которых положение дифракционных плоскостей изменяется во времени и пространстве на длине волны УЗ ($l_s = 2\pi \frac{c_s}{\omega_s}$), которая будет составлять десятых мм (скорость УЗ волн в кристалле

кремния хотя и зависит от кристаллографического направления, но колеблется около значения $c_s = 5 \cdot 10^5 \frac{\text{м}}{\text{с}}$. Отметим, что первые работы с использованием УЗ в рентгеновских экспериментах по стробоскопии на пучках СИ были связаны с синхронизацией фазы УЗ колебаний и времени прихода импульса СИ. Сейчас такие эксперименты (особенно в части согласования импульсов) можно рассматривать как предтечу экспериментов проба-накачка (pump & probe) с излучением РЛСЭ и оптических лазеров, позволяющих добиться разрешения в десятки фс.

Известно, что возбуждение УЗ колебаний с частотой больше 10 ГГц технически сложно осуществить, поэтому характерное время изменения динамической сверхрешетки при использовании традиционных методов возбуждения УЗ будет больше 0.1 нс. Одним из способов расширения частотного диапазона УЗ является применение в пьезопреобразователях таких новых материалов 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. Развитый 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 альфа-гематита и боратов, когда дефект (нерезонансное ядро Fe-56) не создает поле упругих напряжений и практически не меняет спектр колебаний отдельных атомов. При этом жесткое рентгеновское излучение ($E = 14$ кэВ) из-за уникально малой ширины спектральной линии (50-100 нэВ) обладает значительной длиной когерентности $l_c \sim 50-100$ м ($l_c = \frac{l^2}{\Delta l}$, l - длина волны излучения). Это позволяет исследовать вклад от относительно слабых отражений и взаимные переходы между когерентными и диффузными волнами, которые происходят на расстояниях, много больших длины экстинкции.

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). В случае коротковолнового УЗ возникает набор дополнительных кривых качания, отвечающих рефлексам с разными длинами экстинкции, что существенно повышает точность эксперимента.

Основным результатом выполнения 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 целенаправленного дизайна дифракционных элементов, работа которых основана на принципе динамического управления положением отражающих плоскостей в пространстве и во времени. Диффузно – динамическое описание дифракции на реальных кристаллах позволяет учесть взаимное влияние диффузного и когерентного рассеяния в случаях, когда кинематическое приближение больше не применимо.

Созданная теоретическая база для описания дифракции рентгеновских лучей на реальных 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.

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:

- Определение зависимости характеристик рентгеновских пучков при фокусировке от параметров высокочастотного УЗ, возбужденного в кристалле. Установление закономерностей, позволяющих эффективно перестраивать э/м поле при изменении амплитуды и волнового вектора УЗ волны.
- Рассмотрение и моделирование динамического рассеяния Мессбауэровского излучения в рамках статистической теории дифракции с учетом влияния изотопического замещения. Анализ источников диффузного рассеяния.
- Установление угловой зависимости выхода вторичных излучения при дифракции тепловых нейтронов и рентгеновского излучения на колеблющихся кристаллах.
- Моделирование механических свойств и колебательных спектров УНТ и КНП и композитов на их основе в разных частотных диапазонах, анализ возможности их использования в высокочастотных пьезопреобразователях.

- Рассмотрение динамического рассеяния в рамках диффузно-динамической теории дифракции в дефектных кристаллах в общем случае с учетом интерференции когерентной и диффузной компонент с целью 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. Описаны особенности углового выхода вторичных излучений при дифракции тепловых нейтронов и рентгеновского излучения в колеблющихся кристаллах в рамках метода стоячих волн.

4. В рамках обобщенной теории химической связи в материалах с пониженной размерностью рассмотрены механические свойства и спектры возбуждений углеродных нанотрубок и кремниевых нанопроволок в разных частотных диапазонах.

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

Теоретическая и практическая значимость работы:

1. Предложен новый способ управления параметрами сфокусированных рентгеновских пучков за счет изменения амплитуды ультразвуковых колебаний. Показано, что упругие деформации в ограниченном объеме около места приклеивания пьезопреобразователя к непьезоэлектрическим кристаллам можно характеризовать по дифракционным данным.

2. Предложенный вариант статистической теории дифракции Мессбауэровского излучения позволил проверить основные положения теории в случае кристаллов с изотопическим замещением. Разработанные подходы к моделированию дифракционного рассеяния позволят эффективно тестировать качество кристаллов – монохроматоров со спектральной шириной около 100 нЭВ, востребованных на современных источниках СИ и РЛСЭ.

3. Предложены новые модификации метода стоячих нейтронных и рентгеновских волн при дифракции на колеблющихся кристаллах. Метод стоячих нейтронных волн будет использоваться для структурных исследований с детектированием различных видов вторичного излучения на полнопоточных нейтронных реакторах.

4. Установленные основные механизмы изменения механических и колебательных свойств УНТ и КНП в зависимости от их размеров и геометрии, которые являются основой для разработки и создания новых нанокompозитных материалов, в том числе и для высокочастотных пьезопреобразователей.

5. Установленные в рамках диффузно-динамической теории дифракции закономерности рассеяния рентгеновских лучей на кристаллах с распределенными дефектами разной природы позволяют существенно расширить

возможности структурной характеристики кристаллов неразрушающими рентгеновскими методами с целью определения типа и концентрации дефектов.

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, возникающие при приклеивании пьезопреобразователей к непьезоэлектрическим кристаллам, могут быть определены рентгеновскими способами. Разработана и апробирована соответствующая методика.

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 различной концентрацией резонансного изотопа.

3. Показана эффективность модификаций метода стоячих нейтронных волн с регистрацией вторичных гамма квантов и стоячих рентгеновских волн в колеблющихся кристаллах - с модулированным выходом 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.

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 веществами (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 опубликованы 34 публикации, из них: 25 статей в ведущих российских и зарубежных журналах, в том числе 25 - в журналах, входящих в Перечень ВАК, главы в 2-х коллективных монографиях, 6 статей в рецензируемых сборниках трудов российских и международных конференций.

ГЛАВА 1. ДИНАМИЧЕСКАЯ ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ПРИ РЕНТГЕНОАКУСТИЧЕСКОМ РЕЗОНАНСЕ.

Структурно данная глава состоит из нескольких частей. В первой части дана общая постановка задачи в случае упруго деформированного кристалла и рассмотрена динамическая фокусировка рентгеновских лучей в идеальном кристалле в условиях РАР. Вторая часть главы посвящена фокусировке поля внутри изогнутого кристалла и фокусировке поля в вакууме. Основное внимание уделяется принципиальным отличиям фокусировки в колеблющихся кристаллах от фокусировки в кристаллах без УЗВ.

1.1 ФОКУСИРОВКА В ИДЕАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ

Известны экспериментальные и теоретические работы, в которых описываются динамические эффекты фокусировки коротковолновых излучений идеальными и изогнутыми дифрагирующими кристаллами. Среди предложенных различных схем дифракционных фокусирующих систем некоторые представляли чисто теоретический интерес, в то время как другие успешно применяются до сих пор. Например, в [1] была впервые высказана идея рентгеновской дифракционной линзы Френеля, которая затем была плодотворно использована и развита в [2-4]. В [5] предложена “дислокационная” линза в виде чечевицеобразной недифрагирующей (аморфной) линзы внутри идеального кристалла. В [6,7] рассмотрена и реализована фокусировка сферической волны идеальным кристаллом в вакууме. Двухкристальный П-образный интерферометр [8] был использован для динамической фокусировки в [9].

Динамическая фокусировка рентгеновских лучей изогнутыми и идеальными дифрагирующими кристаллами широко используется, например, в гамма спектроскопии [10], рентгеновском спектральном анализе [11]. Однако работы, посвященные динамической фокусировке с использованием колеблющегося

кристалла, в литературе единичны. Практически все экспериментальные исследования дифракции на колеблющихся кристаллах не выходят за рамки изучения двух дифракционных характеристик: кривой качания при локальном исследовании структуры (или топограммы при исследовании большой поверхности кристалла) и кривой зависимости интегральной интенсивности дифракции от амплитуды ультразвуковой волны (УЗВ).

В литературе рассматриваются три области динамической дифракции на колеблющемся кристалле, классифицирующиеся по отношению длины экстинкции Λ к длине волны ультразвука λ_s . Случай $\Lambda/\lambda_s \gg 1$ – отвечает дифракции на высокочастотной УЗВ, $\Lambda/\lambda_s \ll 1$ – на низкочастотной УЗВ, $\Lambda \sim \lambda_s$ – случаю рентгеноакустического резонанса (РАР). Дифракция на кристалле с низкочастотной УЗВ здесь не рассматривается. В случае высокочастотной УЗВ и РАР теоретические подходы во многом схожи. И в том, и в другом случае на кривой качания образуются дополнительные сателлиты, отвечающие дифракции с участием n фононов. Угловое положение сателлитов определяется из условия $\Delta K = nK_s$, где ΔK – расстояние между двумя листами дисперсионной поверхности (ДП) вдоль волнового вектора фонона, K_s – величина волнового вектора фонона. При больших значениях отношения Λ/λ_s при описании дифракции на сателлите хорошие результаты дает двухволновое приближение [12]. На Рисунке 1 показана ДП в случае симметричной дифракции на колеблющемся кристалле. Существенные отличия теоретического описания РАР от случая высокочастотной УЗВ возникают из-за того, что угловое положение основного рефлекса, отвечающего дифракции без участия фононов, и первого сателлита, отвечающего дифракции с участием одного фонона ($n = 1$), при РАР совпадают.

Известно, что в реальных кристаллах расщепление дисперсионных поверхностей пропорционально фактору Дебая-Валлера. В кристаллах с сильным поглощением ($\mu t \geq 1$), используя подавление эффекта Бормана при

РАР, можно определить форму ДП с точностью до 10^{-5} [13, 15]. В отличие от предложенного в [13] описания РАР по теории возмущений, применимой при малых значениях амплитуды УЗВ, в [16] была предложена динамическая теория РАР, справедливая при произвольных значениях амплитуды УЗВ. На основе этой теории удастся точно определить форму ДП в окрестности основного рефлекса, что оказывается существенным при исследовании структуры дефектных кристаллов (изменение фактора Дебая-Валлера $\exp(-L)$) и определения условий фокусировки рентгеновских лучей.

ОБЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим 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 , которая имеет вид

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

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 .

Ниже будут использованы косоугольная система координат (s_0, s_h) , где s_0, s_h - координаты вдоль прошедшего и дифрагированного пучка, соответственно, и декартова система (x, z) с осью x , направленной вдоль поверхности кристалла. В

случае симметричного дифракционного рассеяния рентгеновских лучей с углом Брэгга θ координаты s_0, s_h связаны с координатами в декартовой системе координат (x, z) соотношениями

$$\begin{aligned} x &= (s_0 - s_h)/\operatorname{tg} \theta, & z &= s_0 + s_h, \\ \mathbf{r} &= (s_0 \mathbf{e}_0 + s_h \mathbf{e}_h)/\gamma, \end{aligned} \quad (1.1)$$

где $\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_h$ - орты осей косоугольной системы координат, $\gamma = \cos \theta$, λ - длина волны, C - поляризационный множитель, равный единице и $\cos 2\theta$ для σ, π поляризаций соответственно. Таким образом, $s_{0,h} = \pi \langle s_{0,h} \rangle / \Lambda$, где $s_{0,h}, \langle s_{0,h} \rangle$ - безразмерные и размерные координаты соответственно, Λ - длина волны падающего излучения, C - поляризационный фактор, θ - угол Брэгга,

Подставляя в уравнения Такаги-Топена [10], (1.2)

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial s_h} E_h &= -\sigma_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) E_0 \\ i \frac{\partial}{\partial s_0} E_0 &= -\sigma_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) E_0 \end{aligned}$$

следующее выражение для Фурье-компонент вектора электрической индукции

$$E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + E_h(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}) \quad (1.3)$$

$$E_0(\mathbf{r}) = \exp\{i(C - B)s_h^2 + 2iBz^2\} \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \exp(ip_0 x \cot \theta_0) \widetilde{E}_0(p_0, z) dp_0 \quad (1.4)$$

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

получим относительно $\widetilde{E}_{0,h}(p_0, z)$, систему уравнений, коэффициенты которой зависят только от координаты z . Отметим также, что эта система

совпадает с использованной в [16] для описания рентгено-акустического резонанса в идеальных кристаллах с точностью до замены p_0 на $p = p_0 + 4B$

$$\left(-p + i \frac{\partial}{\partial z}\right) \widetilde{E}_0 + \sigma_{-h} \widetilde{E}_h = 0, \tag{1.5}$$

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

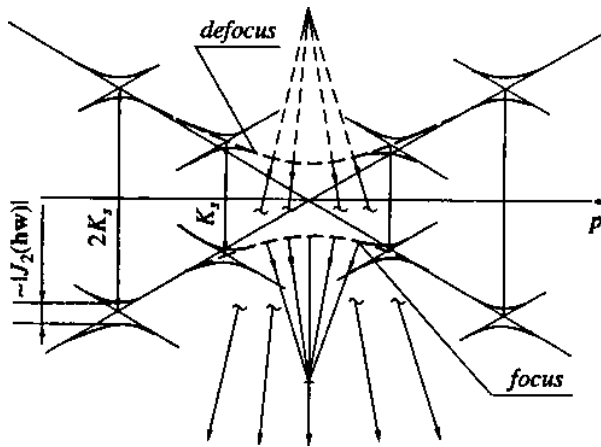


Рисунок 1.1. Дисперсионная поверхность (ДП) в колеблющемся кристалле. Пунктиром показана исходная ДП. В месте, где между ее двумя листами можно вставить вектор nK_s , возникают дополнительные расщепления. Стрелками показаны направления векторов Пойнтинга, относящихся к фокусирующейся (*focus*) и дефокусирующейся (*defocus*) компонентам.

При переходе к случаю дифракции на кристалле без статических деформаций в уравнениях (1.4, 1.5) следует положить $\mathbf{u}_d = 0$, ($A=B=C=0$). Следует отметить, что уравнения (1.5) для случая деформированного кристалла с $B=0$ такие же, как и в случае недеформированного кристалла. Этот факт выделяет в особый класс деформации с квадратичной формой поля смещений в системе координат (s_0, s_h)

$$\mathbf{h}u_d = 2 (A s_0^2 + C s_h^2). \quad (1.6)$$

Величины $\widetilde{E}_{0,h}(p_0, z)$, описывают дифракцию гармоники, отвечающей плоской волне с отстройкой p , связанной с отклонением от угла Брэгга $\delta\theta = \theta - \theta_0$, [16], соотношением

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

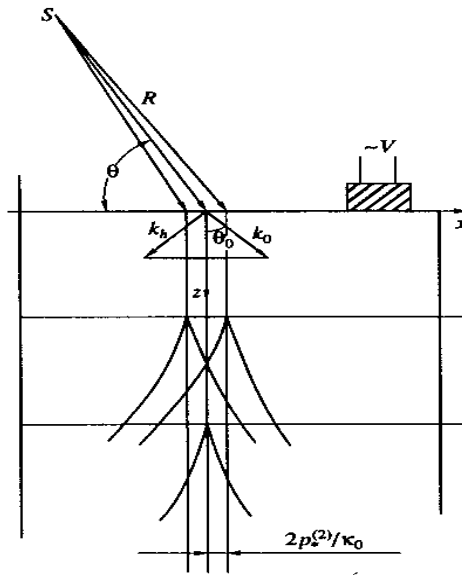


Рисунок 1.2. Геометрия дифракционного рассеяния сферической волны, испущенной источником S . Показаны положения каустик при $K_s = 2$, $\mathbf{h}\mathbf{w} = 1$, расщепление ДП $\delta|\mathbf{K}_0| = 2$.

Пусть на кристалл падает сферическая рентгеновская волна, распространяющаяся из точечного источника, расположенного в плоскости дифракции под углом θ к оси z и отстоящего от центра координат на расстоянии R_0 (Рисунок 1.2)

$$E_0^{in}(x, z) = \frac{C}{r} \exp(ik\Lambda r/\pi), \quad r = \sqrt{(z + R_0 \cos \theta)^2 + (x + R_0 \sin \theta)^2}. \quad (1.7)$$

При $R_0 \gg x, z$ расстояние от источника до поверхности кристалла можно представить в виде

$$r = R_0 + x \cos \theta + z \sin \theta + (x^2 \cos^2 \theta + z^2 \sin^2 \theta)/2R_0,$$

и с точностью до несущественного фазового множителя граничные значения для $\widetilde{E}_{0,h}(p_0, 0)$, принимают вид

$$\begin{aligned} \widetilde{E}_{0,h}(p_0, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left\{ ix \left(\left[\frac{k\Lambda}{\pi} \right] (\sin \theta - \sin \theta_0) - p_0 \cot \theta_0 \right) \right\} \\ \exp \{ -ix^2 (C - B)(\cot \theta_0)^2 \} \sim \gamma \exp \{ i(p_0 - q)^2 / \aleph \}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

где
$$q = \left[\frac{k\Lambda}{\pi} \right] \sin \theta_0 (\theta - \theta_0)$$

отвечает отстройке в среднем падающей на кристалл волны от условия Брэгга, а \aleph ,

$$\aleph = 4 \left(\frac{k\Lambda^2 \sin^2 \theta_0}{2\pi^2 R_0} - C + B \right)$$

- определяет ширину углового распределения падающего на кристалл излучения относительно «среднего» значения.

Решение системы уравнений (1.5) ищется в виде суммы двух членов, описывающих распространение в кристалле двух блоховских волн с амплитудой

$$\widetilde{E}_{0,h}(p, z) = \sum_{m=1}^2 \varphi_m \widetilde{E}_{0m,hm}(p, z), \quad (1.9)$$

где \widetilde{E}_{0m} , \widetilde{E}_{hm} - решение системы уравнений (1.5), отвечающее дифракции на неколеблющемся кристалле ($\mathbf{hw} = 0$), для которого $\varphi_m = 1$. В колеблющемся кристалле ультразвуковое воздействие «перемешивает» волновые поля,

отвечающие двум ветвям дисперсионной поверхности $m = 1, 2$. В случае идеального кристалла и кристалла с постоянным градиентом деформации \widetilde{E}_{0m} , \widetilde{E}_{hm} хорошо известны и приведены в [1], [7] соответственно.

ФОКУСИРОВКА В ОКРЕСТНОСТИ ОСНОВНОГО РЕФЛЕКСА ПРИ РАР

В случае идеального кристалла без УЗВ ($\mathbf{hw} = 0$) компоненты прошедшей и дифрагированной волн имеют вид

$$\begin{pmatrix} \widetilde{E}_{0m} \\ \widetilde{E}_{hm} \end{pmatrix} = \epsilon_m \begin{pmatrix} 1 \\ b_m \end{pmatrix} \exp(iQ_m z) \quad (1.10)$$

Где из граничных условий определяются постоянные коэффициенты

$$\widetilde{E}_h(p, 0) = \epsilon_1 b_1 + \epsilon_2 b_1 = 0, \quad \widetilde{E}_0(p, 0) = \epsilon_1 + \epsilon_2 = 1 \quad (1.11)$$

$$Q_m = (-1)^m Q, \quad Q = \sqrt{p^2 + 1}, \quad b_m = -p_0 + Q_m, \quad m = 1, 2$$

Для $\varphi_m(z)$ в [16] были получены следующие аналитические выражения

$$\varphi_{1,2} = \exp\left(\frac{i\alpha(Q + p_0) \cos K_s z}{K_s Q}\right) \sum_{j=1}^2 d_j \exp(i\mu_j z), \quad (1.12)$$

$$\varphi_{3,4} = \exp(i\alpha(Q - p_0) \cos K_s z / K_s Q) \sum_{j=3}^4 d_j \exp(i\mu_j z),$$

где эйкональные функции равны

$$2\mu_{1,2} = -K_s \pm \sqrt{f}, \quad 2\mu_{3,4} = K_s \pm \sqrt{f},$$

$$f = (2Q - K_s)^2 + \frac{\alpha}{Q^2}, \alpha = K_s^2 J_1^2(\mathbf{hw}), \quad (1.13)$$

а предэкспоненциальные множители определены выражениями

$$d_{1,2} = \mp \left\{ \sqrt{\alpha} \frac{Q + p_0}{2Q} + \mu_{2,1} \right\} \frac{1}{\mu_2 - \mu_1}, d_{3,4} = \mp \left\{ \sqrt{\alpha} \frac{Q - p_0}{2Q} - \mu_{4,3} \right\} \frac{1}{\mu_4 - \mu_3}.$$

Здесь $J_1(\mathbf{hw})$ - функция Бесселя с индексом 1. Множитель перед знаком суммы в (1.12) быстро осциллирует с изменением z . Используя известное разложение Гегенбауэра, этот множитель можно представить в виде

$$\exp\{i \tau_{\pm} \cos K_s z\} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(\tau_{\pm}) \exp\{in K_s z\}$$

$$\tau_{\pm} = \alpha(Q \pm p_0)/K_s Q. \quad (1.14)$$

Отметим, что максимальное значение функции $J_1(\mathbf{hw})$ достигается при $\mathbf{hw} = 1.9$ и составляет ~ 0.33 , поэтому при резонансе ($K_s = 2$) максимальное значение α и аргумента τ_{\pm} у функции Бесселя в (13) при $p_0 \rightarrow \pm\infty$ составляет 1.2. При этом в разложении (13) существенны только несколько первых членов. Ниже ограничимся рассмотрением только члена $J_0(\tau_{\pm})$. Рассмотрение оставшихся членов проводится аналогично.

В результате поле дифрагированной волны внутри кристалла можно представить в виде интеграла от суммы четырех членов

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

$$f_1 = \gamma b_1 d_1 J_0(\tau_+) \exp\{iK_s z/2\}, f_2 = \gamma b_1 d_2 J_0(\tau_+) \exp\{iK_s z/2\},$$

$$f_3 = \gamma b_2 d_3 J_0(\tau_-) \exp\{-iK_s z/2\}, f_4 = \gamma b_2 d_4 J_0(\tau_-) \exp\{-iK_s z/2\}, \quad (1.15)$$

а эйкональные функции имеют вид (f определено в (1.12))

$$S_{1,3} = \frac{(p_0 - q)^2}{\kappa_0} + z\sqrt{f} + x p_0 \operatorname{ctg} \theta_0, \quad (1.16)$$

где (см. (1.9))

$$\kappa_0 = 2 \frac{k\Lambda^2 \sin^2 \theta_0}{\pi^2 \langle R_0 \rangle}.$$

Отметим, что для характерных значений параметров $\Lambda = 100$ мкм, $\lambda = 1$ А, $\langle R_0 \rangle = 0.1$ м, $\theta_0 = 30^\circ$, имеем $\kappa_0 = 3.5$.

Отметим также, что пределы интегрирования в (1.15) были расширены до $\pm\infty$, в то время как в реальности они ограничены, так как формулы (1.11,1.12) справедливы лишь в окрестности основного рефлекса.

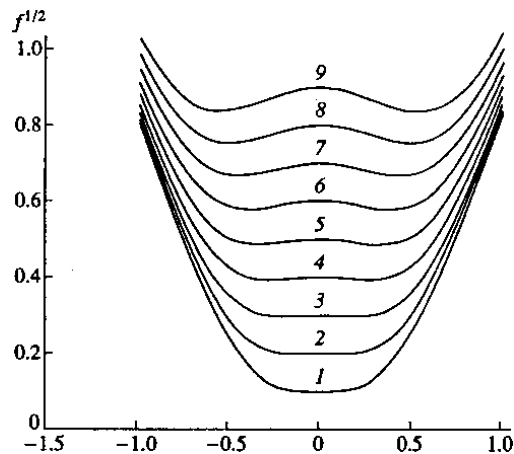


Рисунок 1.3. ДП в случае резонанса ($K_s = 2$) значениях амплитуды УЗВ (см. текст).

Для вычисления интеграла в (1.15) применим метод стационарной фазы. Тогда точки стационарной фазы

$$\frac{dS_m}{dp_0} = 0 \quad (1.17)$$

определяют траектории распространения двух систем лучей, каждая из которых представляет собой веер пересекающихся траекторий. Совместно условия (1.17) и

$$\frac{d^2S_m}{dp_0^2} = 0 \quad (1.18)$$

определяют положение каустик (огибающих систем лучей), а условия (1.17), (1.18) и

$$\frac{d^3S_m}{dp_0^3} = 0 \quad (1.19)$$

совместно определяют положение точек фокусировки рентгеновского волнового поля в кристалле.

Очевидно, что траектории распространения лучей, как и в случае кристалла без УЗВ, представляют собой прямые линии, направление которых совпадает с нормалью к дисперсионной поверхности (ДП) [1]. Поэтому особое внимание следует уделить форме ДП.

На рисунке 1.3 представлены ДП в случае резонанса ($K_s = 2$) при разных значениях функции $J_1(\mathbf{hw}) = 0.05n$, $n = 1-9$, фактически являющиеся графиками зависимости функции \sqrt{f} . Как легко показать [16], расщепление ДП в центре кривой (p_0) составляет $2|J_1(\mathbf{hw})|$. Однако с ростом \mathbf{hw} увеличение этой щели приводит к дополнительному изгибу ДП и образованию двух минимумов, положение которых определяется условием $\frac{df}{dp_0} = 0$.

На рисунке 1.4 показаны ДП в случае достаточно большой отстройки от

резонанса $K_s = 2.2$ при $J_1(\mathbf{hw}) = 0.05 n$, $n = 1 - 9$. В данном случае положение двух минимумов определяется не только дополнительным изгибом, но и тем, что положение точки резонанса смещается из центра ($p_0 = 0$).

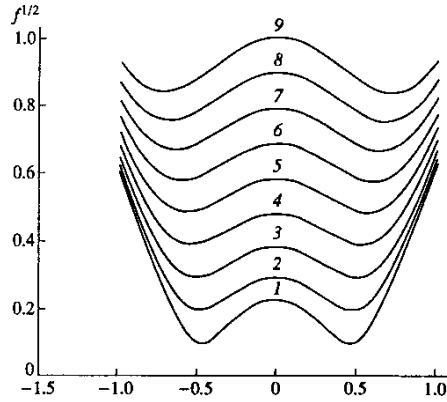


Рисунок 1.4. ДП при $K_s = 2.2$ при разных значениях амплитуды УЗВ (см. текст).

Таким образом, каждый из четырех листов ДП имеет три экстремума, расстояние между которыми достаточно велико для того, чтобы рассматривать каждый из них по отдельности.

Вблизи каждой j -й точки экстремума ДП функцию f разложим в ряд Тейлора вблизи точки p_*

$$f \sim \sigma_j + \delta_j (p - p_*)^2, \quad (1.19)$$

где введены обозначения $Q_* = \sqrt{p_*^2 + 1}$,

$$\sigma_j = f(p_*), \delta_j = \frac{1}{2} \left[\left(8 + 6\alpha \frac{1}{Q_*^4} \right) \frac{p_*^2}{Q_*^2} + \left\{ 4(2Q_* - K_s) - 2 \frac{\alpha}{Q_*^3} \right\} \frac{1}{Q_*^3} \right].$$

Соответственно фаза принимает вид

$$S_j \sim \frac{(p_0 - q)^2}{\kappa_0} \pm z \sqrt{\sigma_j + \delta_j (p - p_*)^2} + x p_0 \operatorname{ctg} \theta_0, \quad (1.20)$$

прямолинейные траектории определяются условием

$$x \operatorname{ctg} \theta_0 = 2 \frac{p_0 - q}{\kappa_0} \mp \frac{z(p - p_*)}{\sqrt{\sigma_j + \delta_j (p - p_*)^2}}, \quad (1.21)$$

каустики - условиями (1.21) и

$$\frac{2}{\kappa_0} \pm \frac{z\sigma_j\delta_j}{(\sigma_j + \delta_j(p - p_*)^2)^{3/2}} = 0, \quad (1.22)$$

а точки фокусировки - условиями (1.21), (1.22) и $p_* = p_0$. Полученный результат имеет простой физический смысл: вблизи каждой точки экстремума имеется два листа ДП, отвечающих фокусирующей и дефокусирующей системе лучей (Рисунок 1.1). Известно (см. [1] и список литературы там), что каждой точке возбуждения на ДП отвечает плоская волна, направление распространения (и вектор Пойнтинга) которой совпадает с нормалью к ДП. В нашем случае точка фокусировки лежит на луче с $p_* = p_0$, отвечающем точке возбуждения, расположенной в экстремуме ДП. Из условия (1.22) следует, что точка фокуса расположена на глубине

$$z_f^{(j)} = \frac{2\sqrt{\sigma_j}}{\kappa_0\delta_j}. \quad (1.23)$$

Причем $z_f^{(j)}$ зависит как от параметров падающей сферической волны (через κ_0), так и от амплитуды УЗВ (через δ_j, σ_j) и величины волнового вектора K_s (через δ_j).

Прежде чем переходить к вычислению положения линий каустик в кристалле, определим положение точек экстремумов ДП (p_*). Условие $df/dp_0 = 0$ или

$$\left\{ 2(2Q - K_s) - 2\frac{\alpha}{Q^3} \right\} \frac{p_0}{Q} = 0 \quad (1.24)$$

дает три решения: одно совпадает с точкой $p_* = 0$, а две других

$$p_*^{(2,3)} = \pm \sqrt{Q_*^2 - 1} \quad (1.25)$$

определяются единственным решением уравнения четвертой степени

$$Q_* - \frac{K_s}{2} - \frac{\alpha}{4Q_*^3} = 0 \quad (1.26)$$

Так как параметр α - можно считать малым, мы будем искать решение

уравнения (1.26) методом последовательных приближений, используя разложение с точностью до линейных членов от функции $\frac{\alpha}{4Q_*^3}$ вблизи предполагаемого корня g_n , $Q = \lim_{n \rightarrow \infty} g_n$. В первом приближении $g_1 = K_s/2$, а во втором и последующих приближениях g_n определяется решением уравнения

$$(g_n - K_s/2) - \frac{\alpha}{4g_{n-1}^3} + \frac{3\alpha}{4g_{n-1}^4} (g_n - g_{n-1}) = 0.$$

Тогда

$$g_2 = \frac{K_s}{2} + \frac{\alpha}{4+3\alpha},$$

$$g_3 = g_2 + \frac{K_s}{2} + \alpha \frac{\frac{1}{4g_2^3} - 1/(4+3\alpha)}{1 + \frac{3\alpha}{4g_2^4}} \dots \quad (1.27)$$

Уже на третьем шаге после подстановки решения g_3 при $K_s = 2$ в исходное уравнение (1.26) даже при $\alpha = 1$ получаем достаточно малую величину

$$\tau_3 = g_3 - 1 - \frac{\alpha}{4g_3^3} = 2 \cdot 10^{-4}$$

что позволяет рассматривать g_3 как практически точное решение уравнения (1.26).

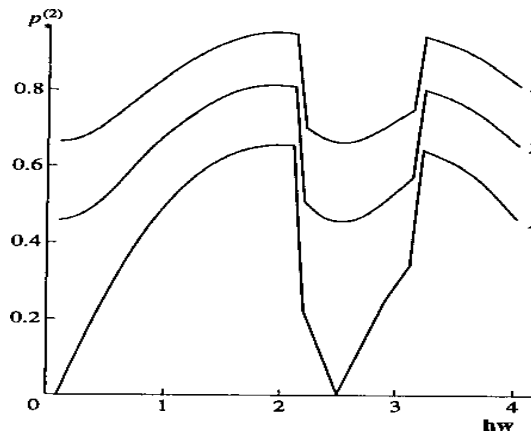


Рисунок 1.5. Расчетная зависимость углового положения бокового экстремума от амплитуды УЗВ при разных значениях K_s (см. текст).

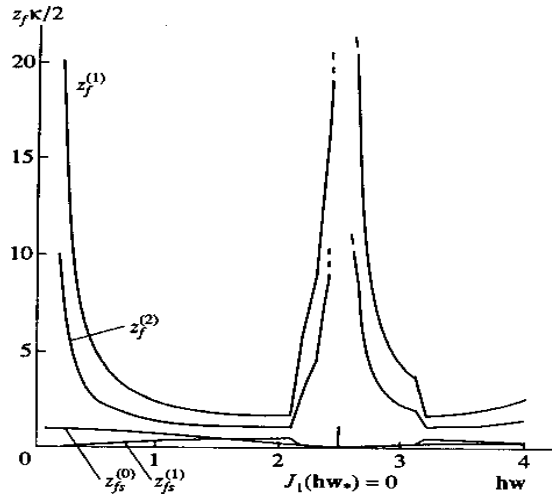


Рисунок 1.6. Расчетная зависимость положения точек фокусировки от амплитуды УЗВ при резонансе ($K_s = 2$) (см. текст).

На рисунке 1.5 показана расчетная зависимость p_*^2 от амплитуды УЗВ при разных значениях K_s . кривая 1 - точный резонанс ($K_s = 2$), кривая 2 - $K_s = 2.2$, кривая 3 - $K_s = 2.4$. Очевидно, что при $\alpha = 0$ (т.е. при $hw = 0$ и при $J_1(hw^*) = 0$, $hw^* \sim 2.5$) положение экстремумов определяется геометрическим условием (18). Однако с ростом амплитуды УЗВ изгиб ДП вблизи центрального экстремума влияет на положение дополнительных экстремумов.

На рисунке 1.6 показаны кривые зависимости положения точки фокуса центрального $z_f^{(0)}$ и дополнительных $z_f^{(1)}$ экстремумов, а именно функции $\aleph_0 z_f^{(0,1)}/2$ от hw . Отметим, что эти две кривые ведут себя примерно одинаково, что объясняется, по-видимому, близостью точек экстремумов $p_*^{(1)}, p_*^{(2)}$. Для сравнения показаны зависимости положения точек фокуса при дифракции на основном рефлексе $\aleph_0 z_f^{(0)} = 2J_0(hw)$ и первом сателлите $\aleph_0 z_f^{(1)} = 2J_1(hw)$ от амплитуды УЗВ при дифракции на высокочастотной УЗВ.

Зависимость $z_f^{(1)}$ от амплитуды УЗВ кардинально меняется с ростом K_s . На рисунках 7, 8 показаны зависимости $z_f^{(0)}, z_f^{(1)}$ от hw при разных значениях K_s . кривая 1 - точный резонанс ($K_s = 2$), кривая 2 - $K_s = 2.2$, кривая 3 - $K_s = 2.4$.

Таким образом, лучи, отвечающие точкам возбуждения, лежащим в окрестности каждого из трех экстремумов ДП, либо собираются в точку (реальный фокус, фокусирующаяся компонента), либо рассеиваются (мнимый фокус, дефокусирующаяся компонента). Используя разложение (1.20), аппроксимирующее форму ДП вблизи каждого экстремума, можно, как показано ниже, получить аналитические выражения не только для положения точек фокуса, но и определить положения каустик.

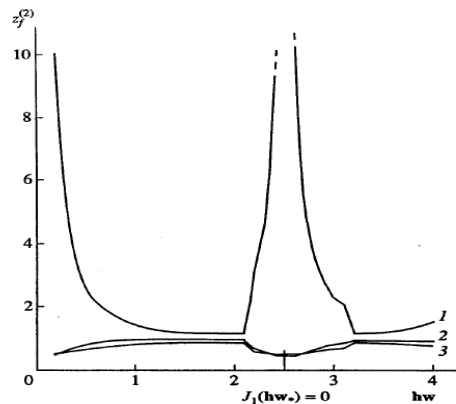


Рисунок 1.7. Расчетная зависимость положения точки фокусировки на боковом экстремуме $z_f^{(1)}$ от амплитуды УЗВ при разных значениях K_s (см. текст).

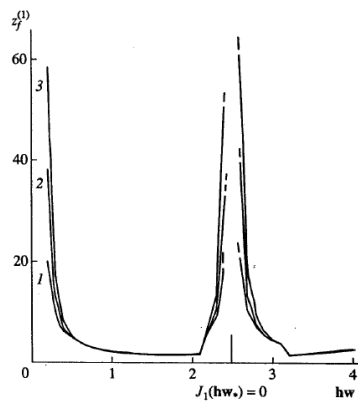


Рисунок 1.8. Расчетная зависимость положения точки фокусировки на центральном экстремуме от амплитуды УЗВ при разных значениях K_s (см. текст).

На рисунке 1.9 дано графическое решение уравнения (1.26), определяющее стационарные точки p_* . В случае дефокусированной компоненты (пунктирная

кривая) это уравнение имеет единственное решение p_a .

Для фокусирующейся компоненты волнового поля возможны четыре варианта:

1. Точка наблюдения находится в области тени (кривая 1), $z < z_f^{(j)}$.
Решение уравнения (1.26), p_a - единственное.

2. Точка наблюдения находится в области света под каустикой (кривая 2), $z > z_f^{(j)}$. Уравнение (1.26) имеет три действительных решения. В точку наблюдения приходят три луча, два из которых приходят, пересекая каустическую кривую (p_1, p_2) а третий - касается каустики, p_3 .

3. Точка наблюдения лежит на каустике или вблизи нее. При этом уравнение (21) имеет два близких корня ($p_1 \sim p_2$), совпадающих при p_c (кривая 3). Уравнение (22) позволяет определить зависимость отстройки p_c от глубины залегания каустики (Z_c) ($n=1,2$)

$$p_c - p_* = (-1)^n \sqrt{\frac{\sigma}{\delta}} \sqrt{\left\{ \frac{z_c}{z_f} \right\}^{2/3} - 1}. \quad (1.29)$$

Подставляя последнее выражение в (1.26), получим уравнение для определения положения каустики (Рисунок 1.2)

$$x_c \cot \theta_0 = x_c^{(0)} - (-1)^n z_f \sqrt{\delta_j} \sqrt{\left\{ \frac{z_c}{z_f} \right\}^{2/3} - 1}, x_c^{(0)} = 2 \frac{q-p_*}{\kappa_0} \quad (1.30)$$

где z_f - глубина фокусировки, определяемая выражением (1.23).

Член $x^{(0)} = 2 \frac{p-q_*}{\kappa_0}$ в уравнениях (1.26) и (1.30) определяет положение точки на поверхности, из которой наиболее вероятно приходит прямолинейный луч в точку x, z внутри кристалла.

Очевидно, что существование каустик возможно лишь при $z_c > z_f^{(j)}$.

4. Острые или точка фокуса, где сходится две каустики с разными n , имеет координаты $(x_c^{(0)}, z_f^{(j)})$. Причем положение точки фокуса $x_c^{(0)}$ не зависит от амплитуды УЗВ только для центрального экстремума ДП. Глубина залегания точки фокуса $z_f^{(j)}$ сильно зависит от амплитуды УЗВ для всех экстремумов. Для пояснения на рис.1.2 показаны три расчетные системы каустик, отвечающие трем экстремумам ДП, при амплитуде УЗВ $hw = 1$, $\varkappa_0 = 2$, $K_s = 2$.

Важной характеристикой являются поперечные размеры пятна фокусировки по ширине $\Delta x_c^{(0)}$ и по глубине $\delta z_f^{(j)}$.

$\Delta x_c^{(0)}$ можно оценить характерным расстоянием, связанным с длиной экстинкции, тогда $\Delta x_c^{(0)} = 1$. Отметим, что такая простая оценка ширины дифракционного пятна $\Delta x_c^{(0)}$ в принципе не противоречит строгим вычислениям, согласно которым в случае кристалла без УЗВ при типичных значениях $z_f^{(0)} \sim \Lambda \sim 10^{-4} \text{ м}$, [17],

$$\Delta x_c^{(0)} = \frac{\Lambda}{\pi} \sqrt[4]{\frac{\pi z_f^{(0)}}{\Lambda}}. \quad (1.31)$$

Определить $\delta z_f^{(j)}$ можно, исходя из условия расхождения двух каустик на это характерное расстояние, $\Delta x_c^{(0)} = 1$

$$\delta z_f^{(j)} = z_f^{(j)} \left((\Delta x_c^{(0)})^{2/3} + (z_f^2 \delta)^{1/3} \right)^{3/2}.$$

Таким образом, $\delta z_f^{(j)}$ определяется кривизной ДП в точке экстремума, δ , и сильно зависит от амплитуды УЗВ. В частности для центрального экстремума в случае резонанса и малой амплитуды УЗВ, $hw \ll 1$, $\delta = \alpha = \sigma = (hw/2)^2$, и протяженность фокуса по глубине гораздо больше, чем по ширине

$$z_f = \frac{2}{\kappa_0 \sqrt{\alpha}}, \delta z_f = \frac{4G^{(1)}}{\kappa_0 h w}, G^{(1)} = \left(1 + \left(\frac{\kappa_0}{2}\right)^{2/3}\right)^{3/2} \quad (1.32)$$

Как известно, физический интерес представляют зависимости положения точки фокуса от длины волны падающего излучения, положения и размера источника (через расстояние R_0 и разброс по отстройкам от угла Брэгга).

Если предположить, что все источники расположены на одном и том же расстоянии R_0 , изменение угла падения приводит к изменению отклонения от условия Брэгга q в (1.8), и к линейному смещению точки фокуса, не зависящему от амплитуды УЗВ

$$\delta x_c^{(0)} = \frac{2\delta q}{\pi \kappa_0} = \frac{2k\lambda}{\pi \kappa_0} \sin \theta_0 \Delta \theta_0 . \quad (1.33)$$

При перемещении источника (или с учетом размера источника) меняется расстояние от источника до поверхности ΔR_0 и положение глубины фокуса (1.23),

$$z_f = \frac{2\beta}{\kappa_0}, \Delta\{z_f\}_r = \frac{2\beta\Delta\kappa_0}{\kappa_0^2} = z_f \frac{\Delta R_0}{R_0}, \beta = \frac{\sqrt{\sigma_j}}{\delta_j} \quad (1.34)$$

Аналогично, при изменении длины волны имеем

$$\Delta\{z_f\}_\lambda = z_f \frac{\Delta\lambda}{\lambda} . \quad (1.35)$$

Очевидно, что фокусные пятна, отвечающие двум плоским волнам с относительными изменениями $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ длин волн и расстояний $z_f \frac{\Delta R_0}{R_0}$, будут различимы при условии

$$\Delta\{z_f\}_{\lambda,r} > \delta z_f .$$

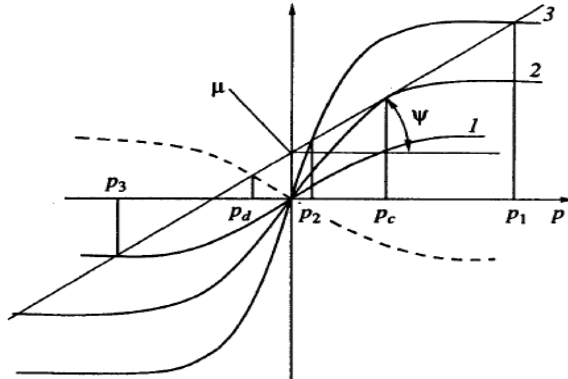


Рисунок 1.9. Графическое решение системы уравнений (1.21) для разных значений толщины кристалла z (см. текст), $\mu = x_c \cot \theta_0 + \frac{2q}{\kappa_0}$, $\tan \varphi = \frac{2}{\kappa_0}$

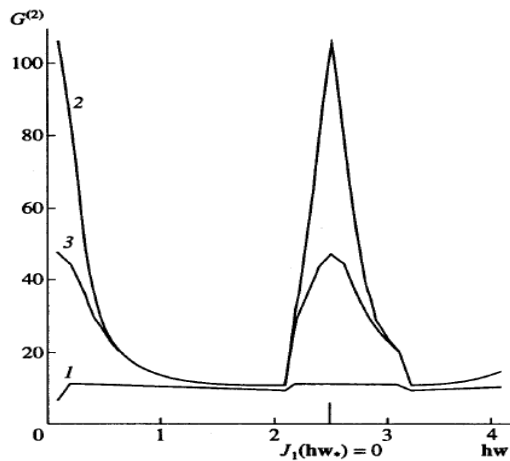


Рисунок 1.10. График зависимости функции $G^{(1)}$, определяющей спектральную разрешимость при фокусировке на дополнительном экстремуме ДП от амплитуды УЗВ, hw . $K_s = 2, 2.2, 2.4$ (кривые 1, 2, 3 - соответственно), $\kappa_0 = 2$.

Критическим условием различимости в этом случае является

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} > \frac{\delta z_f}{z_f} = G^{(j)}, G^{(j)} = \left(1 + \left[\frac{\delta_j \kappa_0^2}{4\sigma_j} \right]^{1/3} \right)^{3/2}$$

В случае центрального экстремума $\frac{\delta_j}{\sigma_j} = 1$ и спектральное, и пространственное разрешение, по крайней мере, не ухудшается по сравнению с неколеблущимся кристаллом. На рисунке 1.10 показаны графики зависимости $G^{(1)}$ от hw для боковых экстремумов. Очевидно, что в этом случае разрешение практически при любых значениях амплитуды УЗВ заметно ухудшается.

В заключение отметим, что, так как в представлении (1.14) поля дифрагированной волны сразу два члена имеют одинаковые эйконалы (f_1 и f_3 , f_2 и f_4), то интенсивность фокусирующейся компоненты, вычисление которой основано на применении метода стационарной фазы в (1.14), пропорциональна

$$I_h \sim 4\gamma^2 [\alpha(p_*) - \beta(p_*) \sin^2(K_s z/2)]$$

$$\alpha = \{b_1 d_1 J_0(\tau_+)\}^2 + \{b_2 d_3 J_0(\tau_-)\}^2, \beta = 4b_1 d_1 J_0(\tau_+) b_2 d_3 J_0(\tau_-)$$

Таким образом, в общем случае интенсивность дифракции осциллирует с тем же периодом, что и УЗВ.

ДИФРАКЦИОННАЯ ФОКУСИРОВКА НА САТЕЛЛИТЕ

В случае кристалла, в котором возбуждена высокочастотная УЗВ ($K_s \gg 1$), формулы, описывающие дифракционное рассеяние с участием n -фононов (окрестности сателлита), [12], совпадают с обычными формулами динамической дифракции, [1], с точностью до замены длины экстинкции Λ на $\Lambda_n = \Lambda/|J_n(hw)|$ (ср. с (1.11))

$$E = E_{00} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + E_{hn} \exp(i[\mathbf{k}_h + n\mathbf{K}_s] \mathbf{r}). \quad (1.36)$$

$$E_{hn} = \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=1}^2 \epsilon_m b_m \exp(iQ_m z + ip_0 x \cot \theta_0)$$

где

$$E_{hn}(p_0, 0) = \epsilon_1 + \epsilon_2, b_1 \epsilon_1 = -b_2 \epsilon_2, \quad Q_m = (-1)^m Q,$$

$$Q = \sqrt{(p_0 + nK_s)^2 + |J_n(\mathbf{hw})|^2}$$

$$b_m = \frac{Q_m - (p_0 + nK_s)}{i^n |J_n(\mathbf{hw})|}, m = 1, 2$$

В подынтегральном выражении (1.36) можно выделить быстро меняющийся экспоненциальный множитель с эйконалом

$$S = Q_m z + ip_0 x \cot \theta_0 + \frac{(p_0 - q)^2}{\kappa_0}$$

В результате аналогичных вычислений для глубины положения точки фокуса получим (сравни с (1.23))

$$z_{fs}^{(n)} = \frac{2}{\kappa_0} |J_n(\mathbf{hw})|. \quad (1.37)$$

При малых значениях амплитуды УЗВ $z_{fs}^{(n)}$ растет $\sim (\mathbf{hw})^n$. Для любого из сателлитов глубина фокусировки меньше или равна глубине фокусировки в неколеблющемся кристалле

В отличие от известного описания дифракционной фокусировки РЛ с помощью функций Грина в координатном представлении [1,17], использованный здесь формализм связан с представлением падающего волнового пакета в виде когерентной суперпозиции квазиплоских гармоник, дифрагирующих независимо друг от друга. Использование этого формализма связано с тем, что первоначально

аналитическое решение в [16] было получено в случае падающей на кристалл плоской волны.

В результате применения простого подхода, основанного на анализе формы ДП в условиях РАР, оказалось, что при дифракции на колеблющемся кристалле возможны три точки фокусировки. Помимо центральной точки фокусировки, расположенной на глубине $z_f^{(0)}$, возникают две дополнительные на глубине $z_f^{(1)}$, симметрично расположенные относительно центральной. При этом $z_f^{(1)}$ не совпадает с $z_f^{(0)}$, а глубина расположения всех точек фокусировки сильно зависит от амплитуды УЗВ.

Замечательным является тот факт, что меняя напряжение на пьезопреобразователе, и тем самым меняя амплитуду УЗВ, можно менять длину фокусировки в десятки раз. В результате появляется принципиально новая возможность управления волновым полем, распространяющимся в кристалле в условиях дифракции, которая может быть успешно применена для создания рентгенооптических устройств с управляемыми параметрами.

Например, меняя амплитуду УЗВ, можно приблизить точку фокуса к выходной поверхности кристалла, получив тем самым ограниченный пучок волн с высокой когерентностью и интенсивностью. В то же время, меняя положение точки фокуса по глубине, можно провести послойный анализ совершенства исследуемого кристалла, детектируя вторичные излучения или влияние внутренних искажений на фокусное пятно.

Интересной кажется и возможность трансформации сферической волны в квази-плоскую при дифракционном отражении от кристалла в условиях РАР. Математически этот факт следует из расходимости при малых значениях

амплитуды УЗВ глубины фокуса $z_f^{(1)}$ при рассеянии на сателлите, $z_f^{(1)} \sim (\mathbf{hw})^{-1}$. Физически это иллюстрируется практически плоской формой ДП при малых значениях \mathbf{hw} в условиях резонанса, $K_s = 2$ (Рисунок 1.3). Отметим, что угловая область, в которой происходит указанная трансформация, по порядку величины совпадает с угловой областью динамической дифракции, $(\delta\theta \sim \chi_{hr} \sim 10^{-6})$. Именно поэтому выше используется термин квазиплоская волна.

Учитывая уникальные фокусирующие свойства колеблющихся кристаллов, можно предложить новый способ определения длины экстинкции, а в перспективе и формы ДП. Расстояние между двумя симметричными относительно центра кривой отражения, точками фокуса сильно зависит от величины $K_s = 2 \Lambda/\lambda_s$. Например, при малых значениях \mathbf{hw} это расстояние определяется чисто геометрическими условиями

$$\langle \Delta x_c \rangle = 2 \frac{\Lambda}{\pi n_0} \sqrt{\frac{K_s^2}{4} - 1}. \quad (1.38)$$

и обычно составляет несколько микрон. Измеряя $\langle \Delta x_c \rangle$ для разных значений длины волны УЗВ (в окрестности механического резонанса), можно с высокой точностью определить Λ (или фактор Дебая –Валлера и тип и концентрацию распределенных дефектов см. следующие главы) в реальных кристаллах.

Таким образом, колеблющиеся кристаллы могут быть эффективно использованы как рентгенооптические фокусирующие устройства с параметрами, регулируемые в широком диапазоне.

1.2. ФОКУСИРОВКА В УПРУГО ИЗОГНУТОМ КРИСТАЛЛЕ

Большой практический интерес представляет изучение полей деформации, возникающих в кристаллах, например, благодаря условиям роста, сложной дислокационной структуре и т.д. [18].

Известно, что рентгеновское волновое поле вообще весьма чувствительно даже к относительно небольшим деформациям. Однако оказывается, что структура рентгеновского волнового поля в условиях рентгеноакустического резонанса обладает рядом дополнительных уникальных особенностей. В частности, деформации оказывают существенное влияние как на характер кривых качания [19], так и на фокусирующие свойства кристалла, что позволяет использовать этот эффект как основу методики определения деформаций в реальных кристаллах.

В последнее время динамическая фокусировка рентгеновского излучения изогнутыми кристаллами перестала быть предметом единичных экспериментов и широко используется в рентгеновской оптике [20]. Как изогнутые [21], так и колеблющиеся кристаллы [22] успешно применяются, например, для создания рентгеновских спектрометров и коллимирующих монохроматоров. Использование дифракции на колеблющихся и деформированных кристаллах объясняется тем, что, не нарушая идеальности кристалла, можно в широких пределах изменять упругие деформации, искусственным образом создаваемые в нем. Сочетание деформаций, создаваемых упругим изгибом и акустическими колебаниями, в рентгенооптических устройствах открывает возможности для создания приборов с качественно новыми конструктивными характеристиками.

Кроме того, представляет определенный научный интерес установление сложной структуры поля ультразвуковой волны в реальных кристаллах [23] методами рентгеновской дифрактометрии.

В настоящее время интерес к колеблющимся деформированным кристаллам связан не только с решением прикладных задач, но и с выяснением принципиально новых особенностей дифракционного рассеяния в таких кристаллах. Например, в [24, 25] представлены экспериментальные результаты по аномальной зависимости интегральной интенсивности дифракции рентгеновских лучей (РЛ) от амплитуды ультразвуковой волны, возбужденной в кристалле, и дано их качественное объяснение.

Выше (см. [26]) было дано теоретическое рассмотрение динамической фокусировки рентгеновского излучения, основанное на анализе формы дисперсионной поверхности (ДП) в кристалле в условиях рентгеноакустического резонанса (РАР). Было показано, что в общем случае на каждой ветви ДП возникают три изгиба (три точки локального экстремума), каждый из которых может при определенных условиях либо фокусировать, либо дефокусировать падающее излучение сферической волны.

Определим распределение излучения в кристалле при дифракционном рассеянии по Лауэ сферической рентгеновской волны в колеблющемся упруго изогнутом кристалле в условиях резонанса. Для этого ограничимся случаем кристалла с постоянным градиентом деформации (ПГД), когда смещение точки из равновесного положения состоит из двух частей, $\mathbf{u} = \mathbf{u}_s + \mathbf{u}_d$, где

$$\mathbf{h}\mathbf{u}_d = 2(As_0^2 + 2Bs_0s_h + Cs_h^2) \quad (1.39)$$

- статическая и

$$\mathbf{u}_s = \mathbf{w} \cos K_s z, \mathbf{w} = \mathbf{w}_0 \cos \omega t \quad (1.40)$$

- акустическая части деформации.

Традиционным методом создания деформации с ПГД является использование изгибных устройств. В качестве примера упомянем устройства оригинальной конструкции, предложенные И.Б. Боровским [27] и А.Б. Гильваргом [28] (см. также [29 - 33]), в которых деформация происходит за счет приложения двух

противоположно направленных изгибающих моментов. При этом за счет анизотропии кристаллической пластинки изгиб может происходить не только в плоскости приложения моментов, но и в перпендикулярной к ней плоскости (Рисунок 1.11).

В случае произвольной ориентации отражающих плоскостей в кристаллической пластинке относительно выбранной системы координат (Рисунок 1.11) смещения вдоль осей (x, y, z) имеют вид [34]

$$\begin{aligned} \langle u_1 \rangle &= \left\{ \frac{6M}{L^3} \right\} z^2 [a_{15}z^2 + a_{16}yz + 2a_{11}xz], \langle u_2 \rangle = \left\{ \frac{6M}{L^3} \right\} [a_{14}z^2 + a_{12}yz + 2a_{16}xz] \\ \langle u_3 \rangle &= \left\{ \frac{6M}{L^3} \right\} [-a_{11}x^2 - a_{12}y^2 + a_{13}z^2 - 2a_{16}xy] \end{aligned} \quad (1.41)$$

L - толщина пластинки, M - изгибающий момент. Напомним, что символом $\langle \dots \rangle$ обозначаются размерные величины.

В отечественной литературе коэффициенты a_{ij} именуются коэффициентами деформации [34], в то время как в иностранной общепринято название модуль упругости [35]. Отметим также, что степень изгиба кристаллической пластинки характеризуют радиусами ее изгиба в сагитальной $\langle R \rangle$ и меридиональной $\langle R_y \rangle$ плоскостях брэгговского рассеяния

$$\langle R \rangle^{-1} = \left\{ \frac{12M}{L^3} \right\} a_{11}, \langle R_y \rangle^{-1} = \left\{ \frac{12M}{L^3} \right\} a_{12} \quad (1.42)$$

Таким образом, в общем случае исходная плоская поверхность кристалла $z=0$ становится поверхностью второго порядка, задаваемой параметрически зависимостью смещения u_3 от координат x, y .

Используя выражения (1.41), (1.42) и опуская члены, пропорциональные y , для безразмерных коэффициентов в (1.39) получаем следующие выражения

$$\begin{aligned} A &= [\Lambda/\pi]^2 \left\{ \frac{a_{15}}{a_{11}} + 2 \tan \theta \right\} \frac{h}{2\langle R \rangle}, B = [\Lambda/\pi]^2 \left\{ \frac{a_{15}}{a_{11}} \right\} \frac{h}{\langle R \rangle} \\ C &= [\Lambda/\pi]^2 \left\{ \frac{a_{15}}{a_{11}} - 2 \tan \theta \right\} \frac{h}{2\langle R \rangle} \end{aligned} \quad (1.43)$$

где h - модуль вектора дифракции, Λ - длина экстинкции.

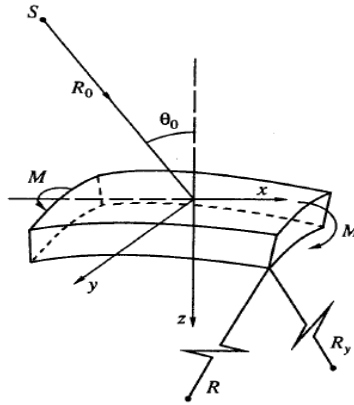


Рисунок 1.11. Схема фокусировки излучения точечного источника двухосно изогнутым кристаллом с радиусами изгиба R, R_x

В частном случае, когда оси выбранной системы координат совпадают с кристаллографическими направлениями (см. Приложение 1.2), для кристаллов Ge, Si коэффициент $B = 0$ ($a_{15} = 0$). Соответственно рассмотрение фокусировки проводится так же, как и в случае идеального кристалла с точностью до переопределения коэффициента \aleph_0 .

Выше было показано, что после подстановки в уравнения Такаги-Топена фурье-компоненты вектора электрической индукции

$$E = E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + E_h \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}) , \quad (1.44)$$

где

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

относительно $E_g(p, z)$, $g = 0, h$ получается система уравнений ($p = p_0 + 4Bz$)

$$\left(-p + i \frac{\partial}{\partial z}\right) \bar{E}_0(p_0, z) + \bar{E}_h(p_0, z) = 0,$$

(1.45)

$$\left(p + i \frac{\partial}{\partial z}\right) \bar{E}_h(p_0, z) - \mathbf{hw}K_s \sin(K_s z) + \bar{E}_0(p_0, z) = 0.$$

Пусть на кристалл падает сферическая рентгеновская волна, испущенная точечным источником, расположенным в плоскости дифракции (x, z) на расстоянии R_0 от центра координат, под углом θ к оси $-z$ (Рисунок 1.11). В этом случае граничное значение для $\bar{E}_0(p_0, 0)$ имеет вид (с точностью до несущественного фазового множителя)

$$\bar{E}_0(p_0, 0) = \gamma \exp\{i(p_0 - q)^2 / \aleph\}, q = k\Lambda/\pi \sin \theta_0 (\theta - \theta_0) \quad (1.46)$$

отвечает отстройке “в среднем” падающей на кристалл волны от условия Брэгга, а \aleph ,

$$\aleph = \aleph_0 + 4(B - C) = 4(\Lambda/\pi)^2 \left\{ k \frac{\sin \theta_0}{\langle R_0 \rangle} + h \left\{ \frac{a_{15}}{a_{11}} + 2 \tan \theta \right\} \frac{1}{\langle R \rangle} \right\} \quad (1.47)$$

- определяет ширину углового распределения падающего на кристалл излучения относительно этого “среднего” значения.

Решение системы уравнений (1.45) ищется в виде суммы двух членов, описывающих распространение в кристалле двух блоховских волн с амплитудами $\varphi_m(z)$

$$\bar{E}_0(p_0, z) = \sum_{m=1}^2 \varphi_m(z) \bar{E}_{0m}(p_0, z) \quad (1.48)$$

где $\bar{E}(p_0, z), \bar{E}_{hm}(p_0, z)$ - решение системы уравнений (1.45), отвечающее дифракции на неколеблющемся кристалле ($\mathbf{hw} = 0$), для которого $\varphi_{1,2}(z) = 1$. В случае кристалла с ПГД общее решение дифракционной задачи в изогнутом кристалле имеет вид [33]

$$\bar{E}_0(p_0, z) = \exp\left(-\frac{i\pi\gamma}{2}\right) \{D_\gamma(iY_0)D_{-\gamma}(Y) + i\gamma D_{-1-\gamma}(Y_0)D_{1-\gamma}(iY)\}, \quad (1.49)$$

$$\bar{E}_h(p_0, z) = \sqrt{\gamma} \exp\left(-\frac{i\pi(1+\gamma)}{2}\right) \{D_\gamma(-iY_0)D_{-1-\gamma}(-Y) - D_{-1-\gamma}(-Y_0)D_\gamma(-iY)\},$$

где $D_\gamma(Y)$ - функция параболического цилиндра (функция Вебера) от

аргумента

$$Y = \sqrt{iB}(z - p_0/4B), Y_0 = -\frac{\sqrt{iB}}{4B}, \gamma = \frac{i}{4B} \quad (1.50)$$

Известно, что выражение (1.49) описывает распространение в кристалле двух волновых полей, точки возбуждения которых лежат на двух ветвях ДП.

В колеблющемся кристалле ультразвук сильно “перемешивает” волновые поля, отвечающие двум ветвям ДП, только в том случае, когда разность фаз двух волновых полей равна $K_s z$ (см., например, [36]). Проблема состоит в том, что для построения аналитического решения необходимо выделить в (1.49) части, отвечающие двум ветвям ДП.

В случае колеблющегося кристалла такое выделение накладывает определенные ограничения на величину градиента деформации B . Например, если использовать обобщенное квази-классическое решение, [33], справедливое при

$$|Y^2 + 4\gamma| \gg 1,$$

то в случае больших значений градиента деформации $|\gamma| \ll 1$ не удастся разделить вклад от двух ветвей ДП, и рассеяние в этом случае носит кинематический характер.

Ограничиваясь случаем малых значений градиента деформации, из (1.49) можно получить первый (и основной) член квазиклассического ряда [36]. Однако, имея в виду дальнейшее рассмотрение, имеет смысл построить квазиклассическое решение, используя более общую процедуру [37].

Амплитуды $E_g(p, z)$, $g = 0, h$, описывающие распространение плосковолновой гармоники в деформированном кристалле (см. (7), $\mathbf{hw} = 0$), удовлетворяют следующей системе уравнений ($p = p_0 + 4Bz$)

$$\left(-p + i \frac{\partial}{\partial z}\right) \dot{E}_0 + \dot{E}_h = 0, \quad (1.51)$$

$$\left(p + i \frac{\partial}{\partial z}\right) \dot{E}_h + \dot{E}_0 = 0.$$

Решение (1.51) ищется в вид (1.52)

$$\{\dot{E}_0, \dot{E}_h\} = \sum_{m=1}^2 \exp(iP_m(z)) \bar{E}_{0m}(z) \{1, b_m\}$$

где фаза блоховской волны равна

$$P_m(z) = (-1)^{m+1} \int_0^z dz' Q(z'), \quad Q(z') = \sqrt{p^2 + 1}, \quad b_m = p + (-1)^m Q.$$

Тогда из условия разрешимости алгебраической системы уравнений (1.53)

$$\begin{aligned} \left(-p - \frac{\partial}{\partial z} P_m(z)\right) \dot{E}_{0m} + \dot{E}_{hm} &= 0, \\ \left(p - \frac{\partial}{\partial z} P_m(z)\right) \dot{E}_{hm} + \dot{E}_{0m} &= 0. \end{aligned}$$

Амплитуды прошедшей (\dot{E}_{0m}) и дифрагированной (\dot{E}_{hm}) волн, определяемые из так называемого уравнения переноса, [37], равны

$$\{\dot{E}_{0m}, \dot{E}_{hm}\} = \mu_m G_m(z) \{1, b_m\}$$

Здесь μ_m - начальные амплитуды возбуждения двух блоховских волн, определяемые из граничных условий на входной поверхности кристалла

$$\dot{E}_0(0) = 1, \quad \dot{E}_h(0) = 0. \tag{1.54}$$

При таком описании $G_m(z)$ определяется через левый \mathbf{l} и правый \mathbf{r} собственные векторы системы (18), отвечающие m -му собственному значению

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} = \{1, b_m\}, \quad \mathbf{l} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} G_m(z) \mathbf{r} = 0 \tag{1.55}$$

Решение уравнения переноса (1.55) дает для функции $G_m(z)$ следующее выражение (постоянная C далее полагается равной 1):

$$G_m(z) = C / \sqrt{1 + b_m^2(z)}. \tag{1.56}$$

Используя граничные условия (1.54), легко получить для начальных амплитуд возбуждения блоховских волн значения

$$\mu_1 = \frac{b_1(0)\sqrt{1+b_1^2(0)}}{b_1(0)-b_2(0)}, \mu_2 = \frac{b_2(0)\sqrt{1+b_2^2(0)}}{b_2(0)-b_1(0)}. \quad (1.57)$$

Таким образом, определены все функции, входящие в (1.49) и необходимые для построения решения системы уравнений (1.45). Из (1.45) относительно функций $\varphi_m(z), m = 1, 2$ (амплитуд возбуждения) получаем систему дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} v \frac{\partial}{\partial z} \varphi_1(z) &= i\hbar\omega K_s \sin K_s z [\exp\{-i\Delta P\}\varphi_2(z) + \rho\varphi_1(z)] \\ u \frac{\partial}{\partial z} \varphi_2(z) &= i\hbar\omega K_s \sin K_s z [\exp\{i\Delta P\}\varphi_1(z) + \varphi_2(z)/\rho] \end{aligned}$$

$$\text{Где } \Delta P = P_1 - P_2, \quad (1.58)$$

$$\begin{aligned} v &= \frac{E_{h1}E_{02} - E_{01}E_{h2}}{E_{02}E_{h2}} = 2Q(z) \frac{\mu_1}{\mu_2}, u = \frac{E_{h2}E_{01} - E_{02}E_{h1}}{E_{01}E_{h1}} = 2Q(z) \frac{\mu_2}{\mu_1} \\ \rho &= \frac{E_{h1}}{E_{h2}} = \sqrt{\frac{b_2(z)}{b_1(z)}} \frac{\mu_1}{\mu_2} \end{aligned} \quad (1.59)$$

Отметим, что в отличие от случая колеблющегося кристалла без ПГД (или с $B = 0$), когда $\rho = -1$, в деформированном кристалле ρ является сложной функцией от координат.

Для простоты ограничимся случаем малых значений амплитуды УЗВ, когда можно пренебречь членами $\rho\varphi_1(z)$, и $\varphi_2(z)/\rho$ в первом и втором уравнениях системы (1.58) соответственно.

Кроме того, пренебрежем в (1.58) нерезонансными, быстро осциллирующими членами, пропорциональными $\exp\{-i(\Delta P + K_s z)\}$. В результате (1.58) принимает вид

$$\begin{aligned} v \frac{\partial}{\partial z} \varphi_1(z) &= \varepsilon [\exp\{i(K_s z - \Delta P)\}\varphi_2(z)] \\ u \frac{\partial}{\partial z} \varphi_2(z) &= \varepsilon [\exp\{-i(K_s z - \Delta P)\}\varphi_1(z)] \end{aligned}$$

где

$$(1.60)$$

$$\varepsilon = \mathbf{hw}K_s/2.$$

Отстройка, при которой выполнено условие РАР, определяется теперь точкой стационарной фазы экспоненты

$$\exp\{i(K_s z - \Delta P)\}$$

и зависит от глубины проникновения волны в кристалл

$$K_s = 2Q(z_*). \quad (1.61)$$

В общем случае решение системы (1.60) представляет собой сложную задачу. Ограничимся поэтому квазиклассическим приближением, аналогичным построенному выше, для описания дифракции на деформированном кристалле.

После подстановки

$$\begin{aligned} \varphi'_1(z) &= \exp\{i(K_s z - \Delta P)/2\} \varphi_1(z) \\ \varphi'_2(z) &= \exp\{-i(K_s z - \Delta P)/2\} \varphi_2(z) \end{aligned}$$

система уравнений (1.60) принимает вид (1.62)

$$\begin{aligned} v \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \varphi'_1(z) + i(K_s/2 - Q(z)) \varphi'_1(z) \right\} &= \varepsilon \varphi'_2(z) \\ u \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \varphi'_2(z) - i(K_s/2 - Q(z)) \varphi'_2(z) \right\} &= \varepsilon \varphi'_1(z) \end{aligned}$$

Решение последней системы уравнений ищется в виде (1.63)

$$\{\varphi'_1(z), \varphi'_2(z)\} = \sum_{m=1}^2 C_m \exp(iS_m(z)) W_m(z) \{1, \sigma_m(z)\}$$

где C_m - постоянные, определяемые из граничных условий на входной поверхности кристалла,

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) = 1 \quad (1.64)$$

Фаза блоховской волны

$$S_m(z) = (-1)^{m+1} \int_0^z dz' \sqrt{f(z')}$$

$$f = (2Q - K_s)^2 + \alpha/Q^2 \quad (1.65)$$

определяется из условия разрешимости алгебраической системы уравнений

$$iv \left\{ \frac{\partial}{\partial z} S(z) + (K_s/2 - Q(z)) \right\} \varphi_1'(z) = \varepsilon \varphi_2'(z),$$

$$iu \left\{ \frac{\partial}{\partial z} S(z) - (K_s/2 - Q(z)) \right\} \varphi_2'(z) = \varepsilon \varphi_1'(z).$$

Амплитуды $W_m(z)$, $W_m(z)\sigma_m(z)$ могут быть рассчитаны из уравнения переноса (1.57), определяющего $W_m(z)$ через левый \mathbf{l} и правый \mathbf{r} собственные векторы системы, отвечающие m -му собственному значению

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} = \{1, \sigma_m(z)\}, W_m(z) = \frac{C}{\sqrt{1 + \sigma_m^2(z)}} \quad (1.66)$$

Используя граничные условия (1.54), легко получить для постоянных C_m следующие значения:

$$C_1 = \frac{\{1 - \sigma_1(0)\}\sqrt{1 + \sigma_1^2(0)}}{\sigma_1(0) - \sigma_2(0)}, C_2 = \frac{\{1 - \sigma_2(0)\}\sqrt{1 + \sigma_2^2(0)}}{\sigma_1(0) - \sigma_2(0)}. \quad (1.67)$$

В результате поле дифрагированной волны внутри кристалла можно представить в виде интеграла от суммы четырех членов

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=1}^2 f_m \exp(iS_m(z)), \quad (1.68)$$

где эйкональные функции имеют вид (f_m определены в (1.65))

$$S_{1,3} = \frac{(p_0 - q)^2}{\aleph} + \int_0^z dz' \sqrt{f(z')} + p_0 \cot \theta_0 x, S_{2,4}$$

$$= \frac{(p_0 - q)^2}{\aleph} - \int_0^z dz' \sqrt{f(z')} + p_0 \cot \theta_0 x.$$

Как и в случае идеального кристалла, для определения траекторий, положения каустик и точек фокусировки будем использовать метод стационарной фазы.

Благодаря тому, что подынтегральное выражение в (1.68) является функцией от аргумента $p = p_0 + 2Bz$, для траекторий удается получить аналитическое выражение

$$\frac{2(p_0 - q)}{\kappa} + \frac{1}{2B} (\sqrt{f(p_0 + 2Bz)} - \sqrt{f(p_0)}) + \cot \theta_0 x = 0. \quad (1.69)$$

Таким образом, в данном случае траектория представляет собой не прямую линию, а фактически повторяет в прямом пространстве форму ДП (с точностью до коэффициента $1/2B$).

На Рисунке 1.12 представлены траектории девяти блоховских волн, рассчитанные по формуле (1.69) при $K_s = 2.4$, $hw=1, B= 0.1, p_0 = -2 + 0.2N, N = 1 - 9$ и разных значениях расстояния до кристалла. Представленные на Рисунке 1.12а траектории с номерами 4 - 7 претерпевают три изгиба (случай С, см. ниже), в то время как все остальные только два (случай В). Очевидно, что количество изгибов траектории определяется начальным положением точки возбуждения на ДП.

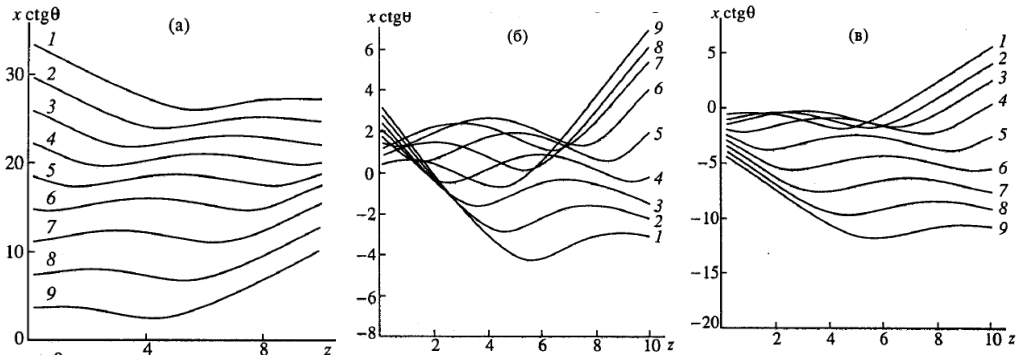


Рисунок 1.12. Траектории блоховских волн, рассчитанные по точным формулам (1.69), при $B = 0.1, hw = 0.1, K_s = 2.4$. Номер кривой $N = 1, \dots, 9$ отвечает начальной отстройке $p_0 = -2 + 0.2N, N = 1 - 9$. На Рисунке а) расстояние источник-кристалл выбрано так, что $\kappa = \kappa_*$ на рис. б) $-\kappa = \kappa_* + 1$, на рис. в) $\kappa = \kappa_* - 1$. Координаты x, z измеряются в единицах Λ/π (безразмерные величины), где Λ - длина

экстинкции ($\mathfrak{N}_* = 2B/\sqrt{\delta_*}$)

Напомним, что ДП имеет три точки экстремума. Две из которых определяются условием рентгеноакустического резонанса

$$\sqrt{p_{1,3}^2 + 1} = K_s/2, \quad (1.70)$$

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

Отметим, что при выводе выражения (1.69) не использовалось разложение функции f в ряд вблизи ее экстремумов. Тем не менее, использование этого разложения для определения формы ДП вблизи точек экстремума оказывается полезным и в этом случае. В зависимости от соотношения между расстоянием, проходимым точкой возбуждения в обратном пространстве и расстоянием между соседними экстремумами, меняется число изгибов траектории.

В случае кристалла с толщиной T , такой, что $2BT < |p_1|$ (случай А), траектории блоховской волны с любым значением отстройки p_0 обладают одним изгибом. При условии $|p_1| < 2BT < 2|p_2|$ максимальное число изгибов траектории равно двум (случай В), а при $2BT > 2|p_1|$ число изгибов не больше трех (случай С).

Важно отметить, что при приближении к следующему сателлиту, отвечающему двухфононному резонансу ($\sqrt{p^2 + 1} = K_s$), $2Bz > 2K_s$, траектории блоховской волны, как и сама ДП, претерпевают еще один изгиб. Достаточно полно этот вопрос изложен в статье [38], посвященной дифракции РЛ на деформированном кристалле с высокочастотной УЗВ. Теоретическое описание в этом случае основано на так называемом двухволновом приближении, при использовании которого каждый изгиб ДП рассматривается по отдельности. Ниже ограничимся случаем, когда $2Bz < 2K_s$.

Очевидно, что на каждой траектории можно выделить участок только с одним

изгибом траектории, поэтому наиболее важным оказывается случай *A*. Кроме того, этот случай ($2BT < |p_1|$) - более важен при достаточно малых значениях градиента деформации, когда точка возбуждения может пройти только через одну точку поворота.

Случай А. При $2BT < |p_1|$ каждая точка возбуждения проходит только через одну точку поворота (точку, где локально выполнены условия Брэгга для дифракции).

Используя примененное выше разложение для функции f (1.19), получаем гиперболическое уравнение для траектории (зависимость x от z) (1.71)

$$\frac{2(p_0 - q)}{\kappa} \pm \frac{1}{2B} \left(\sqrt{\sigma_j + \delta_j(p_0 + 2Bz - p_*)^2} - \sqrt{\sigma_j + \delta_j(p_0 - p_*)^2} \right) = \cot \theta_0 x$$

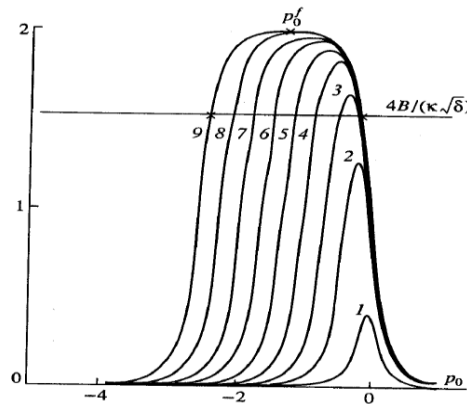


Рисунок 1.13. Графическое решение уравнения (39) при точном резонансе ($K_s = 2$), $B = 0.1$, $hw = 0.1$. Номер кривой $N = 1, 9$ отвечает толщине кристалла $T = (1.5N - 1) \Lambda / \pi$. Видно, что построенная функция изменяется в пределах $[0, 2]$.

Уравнение для определения положения каустик (огибающих систем лучей) в пространстве имеет вид

$$\mp \frac{4B}{\kappa\sqrt{\delta_j}} = \frac{p_0 + 2Bz - p_*}{\sqrt{\tau_j + (p_0 + 2Bz - p_*)^2}} - \frac{p_0 - p_*}{\sqrt{\tau_j + (p_0 - p_*)^2}}, \tau_j = \sigma_j / \delta_j. \quad (1.72)$$

На Рисунке 1.13 показано графическое решение уравнения (1.72) для разных значений толщины кристалла z . Очевидно, что правая часть (1.72) есть разность двух смещенных ступенчатых функций. Причем резкость перехода в области “ступеньки” определяется величиной τ_j .

Из Рисунка 1.13 следует, что для существования в изогнутом колеблющемся кристалле каустики необходимо выполнение условия

$$\varepsilon_j = \frac{2B}{\varkappa\sqrt{\delta_j}} < 1 \quad (1.73)$$

Как известно [33], принципиальное отличие между дифракционной фокусировкой рентгеновских лучей в деформированном и идеальном кристаллах состоит в том, что само образование каустик возможно только при определенном соотношении между расстоянием до кристалла (\varkappa_0) и параметрами изгиба ($2B/(\varkappa_0 - B + C) < 1$). В колеблющемся кристалле возникает также дополнительная зависимость для параметров (δ_j): от амплитуды УЗВ и отстройки от условия резонанса.

Предположим, что изгиб кристалла и расстояние до источника фиксированы, тогда, как следует из (1.73), существование точки фокуса возможно только при условии $\delta_j > 4B/\varkappa^2$.

На Рисунке 1.14 представлены графики зависимости δ_j от амплитуды УЗВ и отстройки.

Используя (1.17), находим, что глубина залегания точки фокусировки рентгеновского волнового поля в кристалле равна

$$Z_f = -(p_0^f - p_*)/B \quad (1.74)$$

Подставив в (1.73) значение $p_0^f - p_* = BZ_f$, получим для определения точки фокуса следующее уравнение

$$\mp \frac{2B}{\varkappa\sqrt{\delta_j}} = \frac{BZ_f}{\sqrt{\tau_j + (2Bz)^2}}, \quad (1.75)$$

из которого следует (Рисунок 1.15), что

$$Z_f = \frac{z_f}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \quad (1.76)$$

где z_f - глубина положения точки фокусировки в идеальном кристалле

$$z_f = \frac{2\sqrt{\sigma_j}}{\varkappa}. \quad (1.77)$$

Легко получить также выражение для положения точки фокусировки в декартовой системе (x_f, Z_f) координат, которое имеет вид $(2(BZ_f - q) \tan \theta_0 / \varkappa, Z_f)$.

Из (1.76) видно, что в случае малых значений ε положение точки фокуса Z_f совпадает с выражением, полученным для идеального кристалла. Малость ε возможна в следующих случаях: 1) мал градиент деформации $B \ll 1$; 2) велика величина \varkappa ($\varkappa = \varkappa_0 - C + B$). В случае, когда выпуклая поверхность кристалла обращена к источнику, величина \varkappa может быть много больше единицы, если источник расположен очень близко от кристалла $R_0 \rightarrow 0$, либо кристалл сильно изогнут $R \rightarrow 0$ (см. Приложение 1.2)

$$\varkappa \sim 4k \sin \theta \left\{ \frac{\sin \theta}{R_0} + \frac{1}{2R} \left(2 \tan \theta + \frac{a_{15}}{a_{11}} \right) \right\}. \quad (1.77)$$

Аналогично точка фокуса стремится к бесконечности в случаях, когда:

1) вогнутая поверхность кристалла обращена к источнику. Положение точки источника определяется уравнением

$$\frac{\sin \theta}{R_0} - \frac{1}{2R} \left(2 \tan \theta + \frac{a_{15}}{a_{11}} \right) = 0 \quad (1.78)$$

2) величина δ стремится к нулю, что возможно в случае РАР при малой амплитуде УЗ, [26].

Отметим также, что в отличие от случая идеального кристалла, когда фокусирующаяся система лучей относится к слабо поглощающейся ветви ДП, а дефокусирующаяся - к сильно поглощающейся, в деформированном кристалле ситуация может измениться. В частности, фокусирующаяся система лучей

является слабо поглощающей, если

$$4B > 0, \kappa > 0, \text{ или } 4B < 0, \kappa_0 < 0. \quad (1.79)$$

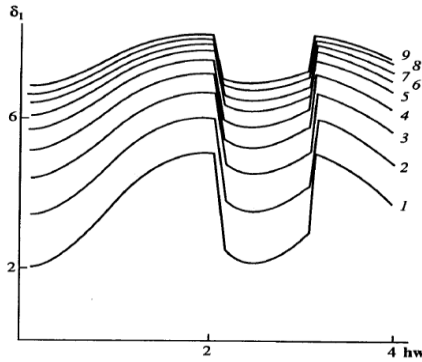


Рисунок 1.14. Кривая зависимости параметра δ , определяющего возможность фокусировки, от амплитуды ультразвуковой волны hw для сателлита при $hw = 0.1$, $B = 0.1$. Номер кривой $N=1, \dots, 9$ отвечает волновому вектору УЗВ $K_s = 1 + 0.1N$.

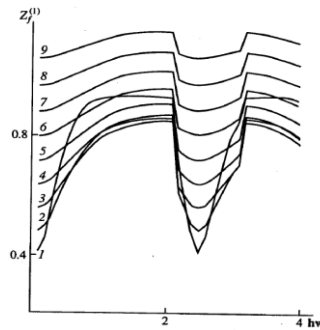


Рисунок 1.15. График зависимости положения точки фокуса от амплитуды УЗВ при дифракции на сателлите $B = 0.1$. Номер кривой $N=1-9$ отвечает волновому вектору УЗВ $K_s = 1 + 0.1N$.

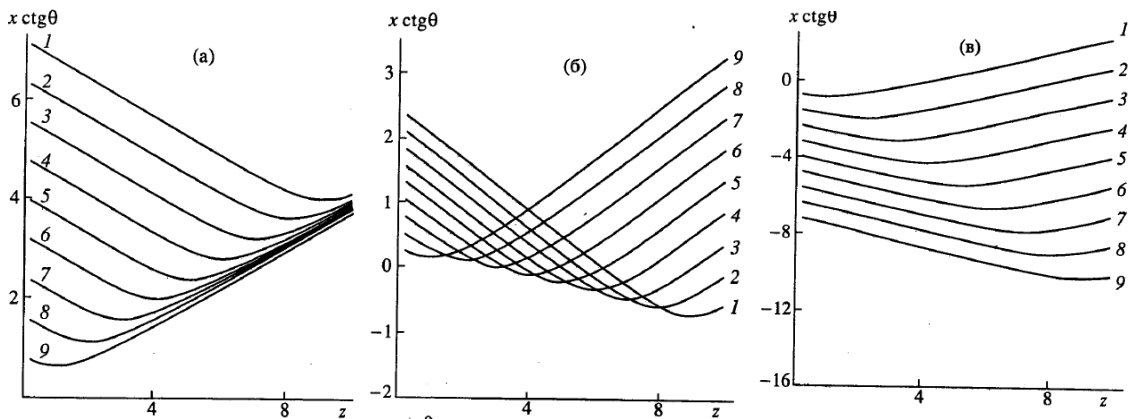


Рисунок 1.16. Траектории блоховских волн, рассчитанные по приближенным

формулам (1.72). Параметры те же, что и на Рисунке 1.12.

Используя известные формулы для коэффициентов изгиба, легко увидеть, что неравенство $\aleph > 0$ выполняется почти всегда, так как обычно используемые кристаллы являются слабо изогнутыми (радиус изгиба R больше расстояния от кристалла до источника R_0).

Фокусирующаяся система лучей является сильно поглощающейся, если

$$4B < 0, \aleph > 0, \text{ или } 4B > 0, \aleph_0 < 0 \quad (1.80)$$

Таким образом, при использовании слабоизогнутых кристаллов поглощение фокусирующейся системы лучей зависит от знака градиента деформации B .

В случае, когда $2BT \ll 1$, распространение дифракционного волнового поля описывается формулами, приведенными в [26], с точностью до замены $\aleph_0 \rightarrow \aleph = \aleph_0 - B + C$.

Остановимся более подробно на физическом смысле уравнения (1.76) для определения положения точки фокуса и неравенства (1.73), накладывающего ограничения на условие существования точки фокусировки. На Рисунке 1.16 показаны гиперболические траектории лучей, рассчитанные при тех же параметрах, что и на Рисунке 1.12. Положение точки на входной поверхности кристалла, из которой исходит траектория волны, от отстройки p_0 определяется членом $2(p_0 - q)/\aleph$ в (1.71).

Случай, когда расстояние кристалл-источник и радиус изгиба кристалла подобраны так, что

$$\varepsilon_j = 1 \text{ или } \frac{2B}{\sqrt{\delta_j}} = \aleph_*$$

показан на Рисунке 1.16а. В результате того, что траектории, исходящие из всех точек на поверхности, асимптотически стремятся к линиям $s_0 = \text{const}$, фокусировка РЛ возможна только в бесконечно удаленной от кристалла точке. На Рисунке 1.16 б, 1.16 в показаны траектории, отвечающие значениям $\aleph_* = \aleph \pm 1$

соответственно. На Рисунке 1.16б хорошо видна каустика, а в случае, изображенном на Рисунке 1.16в, фокусировка вообще невозможна.

Случай В. В этом случае вычисления схожи с приведенными выше для случая А. Однако они достаточно громоздки, и поэтому здесь не приводятся. Например, уравнение для определения траектории (зависимость x от z) теперь оказывается составленным из двух частей с разными коэффициентами (ср. с (1.71))

$$\frac{2(p_0 - q)}{8} \pm \frac{1}{2B} \left(\sqrt{\sigma_1 + \delta_1(p_0 + 2Bz - p_*)^2} - \sqrt{\sigma_2 + \delta_2(p_0 - p_*)^2} \right) = \cot \theta_0 x, \quad (1.81)$$

а уравнение для определения отстройки волны, входящей в точку фокуса p_0 , становится квадратичным

$$\left(\frac{\sigma_2 \delta_2}{\sigma_1 \delta_1} \right)^{\frac{2}{3}} \sqrt{\sigma_1 + \delta_1(p_0^f + 2Bz - p_*)^2} = \sqrt{\sigma_1 + \delta_1(p_0^f - p_*)^2}. \quad (1.82)$$

Случай С. Рассмотрение в этом случае практически не отличается от случая А, так как траектории, получаемые в результате разложения (1.79), в окрестности точки $p_*^{(2)}$ совпадают с (1.71).

Таким образом, рассмотрение в случаях В, С принципиально не отличается от подробно рассмотренного случая А, и потому здесь не приводится.

Проведенный анализ показывает, что динамическая фокусировка РЛ в упруго изогнутом колеблющемся кристалле $B \neq 0$ принципиально отлична по своим физическим свойствам от фокусировки в идеальном колеблющемся кристалле. В связи с тем, что точки возбуждения квазиклассически движутся по дисперсионной поверхности, траектории блоховских волн в кристалле становятся сложно изогнутыми и с точностью до постоянного коэффициента повторяют форму ДП. Однако, как было показано в [26], форма ДП кардинально меняется с ростом амплитуды УЗВ и отстройки от условия рентгеноакустического резонанса.

Таким образом, изгиб траекторий а, следовательно, и фокусирующие свойства кристалла существенно зависят не только от величины градиента деформации, но

и от характеристик ультразвуковой волны, распространяющейся в кристалле.

В принципе, использование изогнутого кристалла в качестве фокусирующего элемента может иметь своей целью увеличение объема кристалла, участвующего в дифракционном отражении, за счет изгиба отражающих плоскостей. С этой точки зрения бесполезным является деформационное поле с $B = 0$, если не учитывать сагиттальный изгиб. Кроме того, УЗ волны существенно влияют на динамическое рассеяние РЛ в угловом диапазоне, который мал даже по сравнению с угловой шириной отражения идеального кристалла. Упругие поля с ПГД ($B \neq 0$) позволяют существенно увеличить эту угловую область за счет движения точек возбуждения.

В этом случае возникают дополнительные возможности для контроля над параметрами волнового поля в точке фокуса путем изменения УЗ параметров. Например, для обращения в нуль линейной поперечной дисперсии D_x , определяющей смещение точки фокуса в зависимости от изменения длины волны, [39].

Таким образом, эффективно управлять положением точки фокуса и ее параметрами можно не только изгибом кристалла, но и изменением параметров ультразвуковой волны, возбужденной в нем, а также сочетанием двух этих воздействий.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1.2

При выводе выражений (1.41) было сделано несколько важных допущений.

1. Предполагалось, что внешние усилия, прилагаемые к пластинке, меняются по толщине пластинки линейно

$$\sigma_x = \left\{ \frac{12M}{L^3} \right\} z, \sigma_y = 0, \tau_{xy} = \left\{ \frac{12H}{L^3} \right\} z, \quad \sigma_z = \tau_{yz} = \tau_{xz} = 0 \quad (1.83)$$

Таким образом, кристаллическая пластинка рассматривалась как тонкая плита со всеми вытекающими ограничениями на область применимости полученных формул.

2. Не учитывалось возможное скручивание пластинки (толщина $H = 0$ в приближении в (1.83)).

3. Предполагалось, что закреплен элемент срединной поверхности в центре пластинки $x = y = z = 0$

$$u_1 = u_2 = u_3 = 0, \quad (1.84)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} u_3 = \frac{\partial}{\partial y} u_3 = \frac{\partial}{\partial x} u_2 - \frac{\partial}{\partial y} u_1 = 0.$$

Представляется важным вопрос о величине коэффициентов σ_{ij} в формулах (1.41). В силу обобщенного закона Гука составляющие тензора деформации ($\varepsilon_i = \gamma_{ii}$)

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} u_i - \frac{\partial}{\partial x_i} u_j \right\}, \quad (1.85)$$

действующие на единичную площадку в направлении оси x , связаны с напряжениями ($\sigma_i = \tau_{ii}$) линейными соотношениями

$$\gamma_{ij} = a_{ijkl} \tau_{kl}, \quad (1.86)$$

где суммирование ведется по повторяющимся индексам. Решая тензорное уравнение (1.86), можно записать следующее выражение:

$$\tau_{ij} = A_{ijkl} \gamma_{kl}. \quad (1.87)$$

Отметим, что при использовании обобщенного закона Гука (1.86)

предполагалось, «что деформации являются малыми» (строго говоря, бесконечно малыми). Случай произвольных деформаций разобран в [23].

Вследствие симметрии кристалла на определенные компоненты тензоров a_{ijkl}, A_{ijkl} накладываются дополнительные ограничения.

Наиболее часто в рентгенодифракционных экспериментах используются кристаллы Ge и Si, относящиеся к кубической сингонии, а также SiO₂, относящиеся к тригональной сингонии

В случае кристалла кубической сингонии имеем (используется представление Фойгта)

$$\begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \end{pmatrix}, \quad (1.88)$$

$$\tau_{yz} = c_{44}\gamma_{yz}, \tau_{xz} = c_{44}\gamma_{xz}, \tau_{xy} = c_{44}\gamma_{xy},$$

где, согласно [35], постоянные для германия (в скобках для кремния) равны (в единицах 10¹² дин/см)

$$c_{44} = 0.668 (0.796), c_{12} = 0.483 (0.639), c_{11} = 1.285 (1.658).$$

Решая систему уравнений (1.88), можно легко убедиться, что матрица A имеет такой же вид как матрица \hat{a} , а искомые коэффициенты в формуле (1.41) равны

$$a_{11} = a_{22} = a_{33} = \left[\frac{1}{3(2c_{12} + c_{11})} + \frac{1}{3(c_{11} - c_{12})} \right], a_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{c_{44}}, i \geq 4. \quad (1.89)$$

Подставляя полученные значения в общее выражение (1.41), в косоугольной системе координат (s_0, s_h) получаем

$$\mathbf{hu} = hu_1 = \left\{ \frac{12M}{L^3} \right\} \left(\frac{\Lambda}{\pi} \right)^2 ha_{11} \tan \theta (s_0^2 - s_h^2). \quad (1.90)$$

Приведенные выше значения элементов матрицы a_{ij} относятся к прямоугольной системе координат, определенным образом связанной с элементами группы симметрии кристалла. Однако в экспериментах часто используются

кристаллы или вырезанные по другим плоскостям, или изгибаемые в других направлениях, поэтому для расчетов обычно используются элементы a_{ij} в преобразованной системе координат [29,30, 34].

1.3 ФОКУСИРОВКА В ВАКУУМЕ

Дифракционные спектрометры, предназначенные для исследования спектра гамма-излучения, впервые были предложены в работах Резерфорда, Андраде [41] и Фриле [42].

В последующих работах Дю-Монда и Киркпатрика [43-44] схема спектрометра была усовершенствована для повышения светосилы и улучшения разрешающей способности.

Схема Дю-Монда. Первоначальная идея состояла в том, чтобы использовать вместо идеального плоского кристалла (спектрограф Зеемана) набор идеальных кристаллов, определенным образом ориентированных в пространстве. В принципе такой набор кристаллов эквивалентен одному деформированному кристаллу с изогнутыми отражающими плоскостями. В качестве анализатора в [43] использовалось устройство, состоявшее из 50 плоских, слегка повернутых друг относительно друга кристалликов кварца, расположенных так, чтобы продолжения отражающих плоскостей пересекались в одной точке на расстоянии R от центрального кристалла (Рисунок 1.17).

Изменение положения кристаллов (и их отражающих плоскостей) должно быть таковым, чтобы условия Брэгга выполнялись для возможно большего конуса лучей, испущенного точечным источником из точки с координатами (x_s, z_s) (Рисунок 1.18). Траектория луча, падающего на кристалл под углом $\Theta + \delta\varphi$, в параметрической форме имеет вид

$$z - z_s = -\tan(\Theta + \delta\varphi)(x - x_s) \quad (1.92)$$

где Θ - угол Брэгга, под которым излучение попадает в середину устройства

(x_0, z_0) так, что

$$z_0 - z_s = -\tan \theta (x_0 - x_s). \quad (1.93)$$

Дифференцируя уравнение (1.92), с учетом (1.93) легко получить зависимость отстройки от точного условия Брэгга $\delta\varphi$ и координаты вдоль поверхности x :

$$\delta\varphi = -\cos^2 \theta (x - x_0)/(x - x_s), \quad (1.94)$$

которое при условии $x \ll x_0, x_s$ принимает вид

$$\delta\varphi \approx \sin \theta \cos \theta (x/x_s). \quad (1.95)$$

Для того чтобы при дифракционном отражении для всех точек на поверхности кристалла выполнялось условие Брэгга, изменение положения отражающих плоскостей $\Delta \Phi$

$$\Delta \Phi = x/R \quad (1.96)$$

должно равняться изменению угла, под которым луч падает на кристалл в точке x , $\Delta\Phi = \delta\varphi$. В этом случае

$$x_s = R \sin \theta \cos \theta. \quad (1.97)$$

Именно в этом положении и находится источник, если он лежит на круге с радиусом $R/2$ (круг Роуланда)

$$(x_s, z_s) = \frac{R}{2} (\sin 2\theta, \cos 2\theta). \quad (1.98)$$

Позднее были предложены устройства, в которых аналогичное расположение отражающих плоскостей было получено за счет изгиба монокристалла. Так, Иоганн [45] использовал эту схему для создания спектрометра на отражение, Кошуа [46] - для создания спектрометра на прохождение, а Хамош [47] использовал двухосно изогнутый кристалл для двумерной фокусировки рентгеновского излучения.

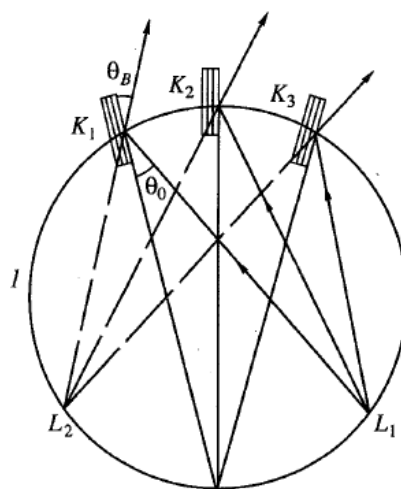


Рисунок 1.17. Схема мультикристального спектрометра (схема Дю-Монда).
 $K_1, K_2 \dots$ - идеальные кристаллы, L_1 - фокус прибора, l - круг Роуланда.

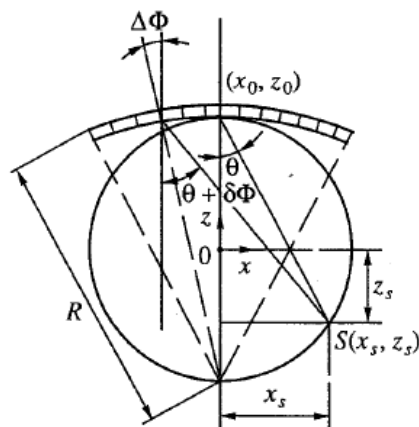


Рисунок 1.18. Геометрическая схема изогнутого фокусирующего кристалла.

Следует отметить, что использованные кристаллы были мозаичными, и при изгибе в кристалле образовывалась серия блоков, повернутых друг относительно друга на небольшие углы вокруг направления, параллельного оси изгиба. В результате в фокусе прибора образовывалась сложная структура расщепленного пятна лауэграммы, так как из-за блочной структуры для определенных направлений не находилось достаточного числа отражающих плоскостей.

Хотя в современных спектрометрах и фокусирующих устройствах и используются совершенные монокристаллы, первоначальная схема Дю-Монда

нашла себе применение. Дело в том, что при изгибе кристалла в одной плоскости отражающие плоскости кристалла начинают изгибаться в перпендикулярной плоскости за счет антикластического эффекта. Для уменьшения этого нежелательного эффекта с одной стороны кристалла делается серия пропилов, как бы разделяющая верхнюю половину кристалла на серию отдельных кристалликов при единой нижней части кристалла.

Ниже мы подробно остановимся на анализе схемы Кошуа для упруго изогнутого колеблющегося кристалла, которая является обратной к схеме Дю-Монда, так как источник и точка фокуса как бы “меняются местами”.

Причем в отличие от классической схемы Кошуа рассмотрим условия фокусировки для суперпозиции плоских волн, испущенных точечным источником и сфокусированных в точку фокуса (фокусировка “точка-точка”). Перейти к случаю фокусировки волн, испущенных протяженным источником (фокусировка “линия-точка”), не представляет труда. Однако этот случай малоинтересен и принципиально не отличается от случая фокусировки “точка-точка”.

Схема Кошуа. Рассмотрим для простоты случай однократного дифракционного отражения рентгеновских лучей (РЛ) от изогнутого кристалла (кинематическое приближение). На Рисунке 1.19 представлена схема фокусировки излучения точечного источника 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 . Для простоты положим также, что проекция смещения отражающих плоскостей в кристалле вдоль оси x имеет вид

$$u_x = xz/R, \quad (1.99)$$

где R - радиус изгиба кристалла в сагиттальной плоскости.

Особо отметим, что входная и выходная поверхности кристалла будут рассматриваться как плоские. Это приближение накладывает определенные ограничения на площадь поверхности кристалла, эффективно участвующую в

образовании дифракционного волнового поля внутри кристалла (см. подробнее [41]). С учетом этого допущения фокусирующие свойства спектрометра с изогнутым кристаллом определяются лишь положением отражающих плоскостей. Отметим, что свойства оптических фокусирующих устройств могут сильно зависеть формы входной (отражение) или входной и выходной (прохождение) поверхностей образца [52].

Из-за того, что поверхность изогнутого кристалла представляет собой круг с радиусом R , а источник лежит на окружности с радиусом $R/2$ (Рисунок 1.18), возникают так называемые aberrации приближенности фокусировки [48]. Для исключения влияния этих aberrаций поверхность кристалла обычно шлифуют определенным образом [45], [52].

В зависимости от координаты вдоль поверхности кристалла x угол φ , под которым волна из источника падает на кристалл, меняется следующим образом

$$\varphi = \theta_0 + \delta\varphi \approx \theta_0 + x \cos \theta_0 / R_0. \quad (1.100)$$

Изменение угла отражающих плоскостей вдоль поверхности $\Delta\varphi$ (Рисунок 1.18, $\Delta\varphi \ll 1$) имеет вид

$$\Delta\varphi = -x/R. \quad (1.101)$$

Как следует из простых геометрических построений (Рисунок 1.19), угол Брэгга Θ , под которым излучение падает на кристалл в точке x , равен

$$\Theta = \varphi + \Delta\varphi = \theta_0 + x \left(\frac{\cos \theta_0}{R_0} - \frac{1}{R} \right) \quad (1.102)$$

Преобразование падающего излучения в плоскую волну. В этом случае угол Брэгга остается одинаковым при дифракционном отражении для любой точки на поверхности кристалла. Используя (1.102), легко получить, что это возможно при условии

$$\frac{\cos \theta_0}{R_0} - \frac{1}{R} = 0 \quad (1.103)$$

Последнее условие означает, что, благодаря изгибу кристалла с радиусом R ,

все отражающие плоскости кристалла находятся в отражающем положении. Таким образом, угловой сектор лучей, дифракционно отраженных от кристалла, $\delta\varphi = L/R_0$ определяется только длиной кристалла L и может быть существенно больше собственной ширины кривой качания идеального кристалла.

Фокусировка “точка-точка”. Рассмотрим условие, при котором дифрагированные лучи соберутся в точку фокуса. При фокусировке излучения в точке F с координатами $(x_s, z_s) = R_h(-\sin \Theta, \cos \Theta)$ траектория любого луча, исходящего из точки на поверхности кристалла $(x, 0)$, должна проходить через точку F (Рисунок 1.19)

$$x_s - x = -tg(\Theta + \Delta\varphi) R_h \cos \Theta.$$

Простое сравнение треугольников FOM и $FO'M$ на Рисунке 1.19 дает

$$tg(\Theta + \Delta\varphi) \approx tg\Theta_0 + x/R_h \cos \Theta. \quad (1.104)$$

В тоже время угол между осью z и направлением распространения волны, дифрагировавшей в точке x вдоль поверхности, равен (см. (9), (10))

$$\begin{aligned} \Theta + \Delta\varphi &= 2\varphi + \Delta\varphi = \Theta_0 + \delta\varphi + \Theta + 2\Delta\varphi \\ &\approx \Theta_0 + \cos \Theta_0 x/R_0 - 2x/R \end{aligned} \quad (1.105)$$

Сравнивая выражения (1.104) и (1.105), получим следующее условие фокусировки “точка-точка”:

$$\cos \Theta_0 [1/R_h - 1/R_0] + 2/R = 0. \quad (1.106)$$

Ясно, что такое простое рассмотрение справедливо лишь в случае достаточно тонких кристаллов, когда $T < \Lambda$, где T - толщина кристалла, Λ - длина экстинкции данного отражения. Выражение для измененного условия фокусировки (1.106) с учетом эффектов динамической дифракции в колеблющемся кристалле будет дано ниже. Отметим, что в предельном случае тонкого кристалла это выражение должно переходить в (1.106).

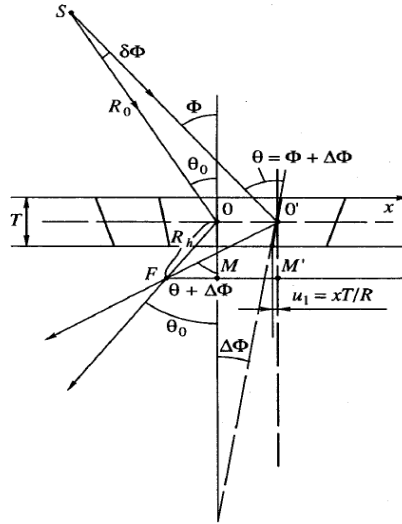


Рисунок 1.19. Схема фокусировки “точка-точка”. S - источник, F - точка фокуса, Θ_0 - угол Брэгга, $\Delta\varphi$ - угол наклона отражающих плоскостей к оси z .

Основное преимущество при использовании изогнутого кристалла состоит в том, что угловой конус лучей, испущенных источником и участвующих в формировании изображения, становится пропорционален площади освещенной поверхности кристалла. При этом увеличивается число фотонов, участвующих в дифракции, повышается и светосила приборов.

Рассмотрим основные уравнения, описывающие фокусировку излучения сферической волны “точка-точка”.

В вакууме позади кристалла распространяется волна, образовавшаяся в результате дифракции на колеблющемся изогнутом кристалле. Будем предполагать, что для данного отражения и длины волны выполнено условие точного рентгеноакустического резонанса, т.е. длина волны ультразвука близка к длине экстинкции.

Согласно принципу Гюйгенса-Френеля дифрагированная волна в точке \mathbf{r}_p в вакууме пропорциональна свертке амплитуды дифрагированной волны по выходной поверхности кристалла \mathbf{r}_e с функцией Грина в вакууме $G_0(|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|)$

$$E_h(\mathbf{r}_p) \exp(i \mathbf{k}_h \mathbf{r}_p) = \iint d \mathbf{r}_e E_h(\mathbf{r}_e) \exp(i \mathbf{k}_h \mathbf{r}_e) G_0(|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|),$$

где

$$G_0(|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|) = \exp(ik|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|)/(|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|), \quad (1.107)$$

k - волновой вектор фонона.

В [53], [54] для амплитуды дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла толщиной T получено выражение

$$E_h(\mathbf{r}_p) = \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}_s - (A - B)s_0^2 - 2iBT^2) \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=1}^4 g_m \exp(iS_m), \quad (1.108)$$

где g_m, S_m - функции от отстройки p_0 и T .

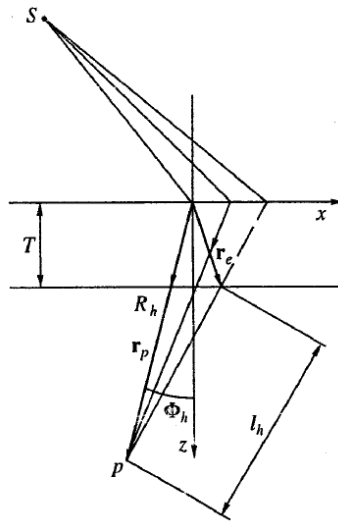


Рисунок 1.20. Геометрия дифракции в декартовой (x, z) и цилиндрической (R_h, φ_h) системах координат.

В системе координат с центром в середине входной поверхности кристаллической пластинки (Рисунок 1.20) имеем

$$\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e = (z_p - T, x_p - x_e). \quad (1.109)$$

Удобно описывать положение точки наблюдения в цилиндрической системе координат

$$z_p = R_h \cos \varphi_h, x_p = R_h \sin \varphi_h, \quad (1.110)$$

где R_h - расстояние от входной поверхности кристалла до точки наблюдения, φ_h - угол.

Будем предполагать, что область кристалла, дающая значительный вклад в интеграл, существенно меньше расстояния до точки наблюдения, $|\mathbf{r}_p| \gg |\mathbf{r}_e|$, [51]. Кроме того, предполагается, что толщина T мала по сравнению с R_h . Тогда с точностью до квадратичных по x_e членов имеем

$$|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e| \approx kR_h - kx_e \sin \varphi_h - k(x_e \cos \varphi_h)^2 / 2R_h, \quad (1.111)$$

и интеграл (1.107) принимает вид

$$\vartheta \int_{-\infty}^{\infty} dx_e \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=-1}^4 g_m(T) \exp\{iN_m(p_0, x_e)\}, \quad (1.112)$$

где фаза равна

$$N_m(p_0, x_e) = S_m(x_e, T) - (A - B)\{(x_e \operatorname{ctg} \theta)^2 - 2x_e T \operatorname{ctg} \theta\} - \frac{k(x_e \cos \theta)^2}{2R_h} + kx_e(\sin \theta_0 - \sin \varphi_h), \quad (1.113)$$

а несущественный для дальнейших вычислений множитель ϑ равен

$$\vartheta = \frac{1}{R_h} \exp\{-i \mathbf{h} \mathbf{u}_s(T) - iBT^2 - i(A - B)T^2 + ikR_h\}.$$

Эйконалиные функции в (1.112) имеют существенно различный вид в случае идеального кристалла или кристалла с $B = 0$

$$S_m(x, z) = \frac{(p_0 - q)^2}{\varkappa_0} - (-1)^m z \sqrt{f(p_0)} + p_0 x \operatorname{ctg} \theta_0, \quad (1.114)$$

и в случае кристалла с постоянным градиентом деформации (ПГД) общего вида

$$S_m(x, z) = \frac{(p_0 - q)^2}{\varkappa} - (-1)^m \int_0^z dz' \sqrt{f(p_0 + 2Bz')} + p_0 x \operatorname{ctg} \theta_0, \quad (1.115)$$

где $f, \varkappa, \varkappa_0$ - определены выше.

В результате интегрирования по dx_e в (1.112) получим следующее выражение для поля дифрагированной волны в вакууме:

$$\vartheta \frac{1}{\sqrt{\kappa_h}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \sum_{m=-1}^4 f_m(T) \exp\{iL_m(p_0)\}, \quad (1.116)$$

$$L_m(p_0) = \frac{(p_0 - q)^2}{\kappa} - \frac{(p_0 - q_h - 2(A - B)T)^2}{\kappa_h} - (-1)^m \int_0^z dz' \sqrt{f(p_0 + 2Bz')} + p_0 x \operatorname{ctg} \theta_0.$$

Здесь $q_h - 2(A - B)T$ определяет отстройку от положения Брэгга “в среднем” волны при падении на поверхность кристалла, $p_0 + 2Bz$ – ее изменение при распространении волны в кристалле, а

$$\kappa_h = 4 \{(\beta \sin \theta_0)^2 / kR_h - A + B\} \quad (1.117)$$

определяет угловую ширину дифракционно отраженного от кристалла излучения относительно этого “среднего” значения. Множитель $\beta = \frac{kL}{\pi}$ возник за счет использования безразмерной системы координат в [53,54].

ОСОБЫЙ СЛУЧАЙ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛА

Ниже будут рассмотрены два случая: идеального кристалла без деформаций и кристалла с деформацией особого типа, когда коэффициент B в разложении статической части поля смещений равен нулю.

Идеальный кристалл. Дифракция происходит на недеформированном кристалле ($A = B = C = 0$), основные параметры задачи равны

$$\kappa_{h,0} = a/R_{h,0}, \quad a = 4(\beta \sin \theta_0)^2 / k, \quad (1.118)$$

где $R_{h,0}$ - расстояния от кристалла до точки наблюдения и точки источника соответственно, θ_0 - точный угол Брэгга.

Особая деформация. В этом случае кристалл деформирован так, что $B = 0$. Возможны два варианта взаимного расположения кристалла и источника: кристалл обращен к источнику своей выпуклой поверхностью ($\epsilon = -1$) или вогнутой ($\epsilon = 1$). Как показано в [54], коэффициенты в разложении поля статической деформации принимают вид

$$A = -C = \frac{\epsilon b}{R}, b = \frac{L\beta_h \tan \theta_0}{\pi k} = \sigma / \cos \theta_0. \quad (1.119)$$

Тогда

$$\aleph = \frac{a}{R_0} - \frac{\epsilon b}{R} = \sigma \left[\frac{1}{R_0} - \frac{\epsilon}{R \cos \theta_0} \right],$$

$$\aleph_h = \frac{a}{R_h} + \frac{\epsilon b}{R} = \sigma \left[\frac{1}{R_0} + \epsilon / R \cos \theta_0 \right],$$

где R - радиус изгиба кристалла и введено обозначение -

$$\sigma = \frac{2(\beta \sin \theta_0)^2}{k}.$$

Случай особой деформации физически соответствует ситуации, когда отстройка от точного условия Брэгга для дифрагированной волны θ_h является линейной функцией от координат

$$\theta_h - \theta_h^{(0)} = \frac{1}{\cos \theta} \frac{\partial}{\partial s_h} \mathbf{h} \mathbf{u}_d = \frac{2c}{\cos \theta_0}, \quad (1.120)$$

причем градиент угла равен нулю

$$\frac{\partial}{\partial s_0} (\theta_h - \theta_h^{(0)}) = 0 \quad (1.121)$$

вдоль траектории прошедшей волны в кристалле ($s_0 = \text{const}$).

Интеграл (1.116) определяет суммарный вклад в дифрагированную волну от всего спектра плоских волн, испущенных точечным источником и дифрагировавших на кристалле при разных значениях отстройки от точного условия Брэгга.

Несмотря на сложность подынтегрального выражения в (1.116), его анализ не представляет труда. Если длина волны излучения мала по сравнению с расстояниями кристалл-источник R_0 или кристалл-точка наблюдения R_h , можно использовать обычное приближение геометрической оптики. Зафиксируем расстояния R_0, R_h , тогда точка наблюдения может оказаться достижимой для пакета плоских волн, если в (1.116) найдется такой пакет гармоник, для которых фазы $L_m(p_0, R_0, R_h)$ меняются очень слабо (точка стационарной фазы). В

противном случае точка наблюдения лежит в области тени, в которую гармоники, составляющие пакет, приходят с хаотическими фазами.

Иногда бывает физически более наглядно наоборот рассматривать точки в пространстве, достижимые для рентгеновской волны с фиксированным значением отстройки от точного условия Брэгга (траектории). В этом представлении уравнение траектории в неявном виде задается условием стационарности фазы

$$\frac{\partial}{\partial p_0} L_m(p_0, R_0, R_h) = 0.$$

В случае, когда точка наблюдения лежит на границе области тени (каустики) или иными словами, когда данная точка лежит на огибающей системы лучей, требуется специальное рассмотрение.

Как было показано выше, [53], дисперсионная поверхность (ДП) в колеблющемся кристалле в общем случае имеет три точки экстремума $j=1-3$. Ниже индексы j для простоты будут опущены, и каждый раз будет оговариваться, какой экстремум дисперсионной поверхности имеется в виду.

Вблизи каждого экстремума ДП (значение отстройки p^*) функцию f можно разложить в ряд Тейлора

$$f = \sigma + \delta(p - p^*)^2 = \sigma(1 + \gamma(p - p^*)^2), \quad (1.122)$$

где выражения для коэффициентов $\sigma, \delta, \gamma = \delta/\sigma$ приведены в [53] и выше в тексте. Из (1.122) следует, что нормальная проекция волнового вектора блоховской волны k_z зависит от тангенциальной p (отстройки от точного условия Брэгга) в окрестности дифракционного отражения как $k_z = \sqrt{f}$.

Для вычисления интеграла (1.116) применим метод стационарной фазы. Для дальнейших расчетов нам понадобятся выражения для производных эйкональной функции, определенных в (1.116)

$$L^{(l)}(p_0) = 2 \frac{(p_0 - q)}{\kappa_0} - 2 \frac{(p_0 - q_h - 2(A - B)T)}{\kappa_h} \pm T\sqrt{\delta} \frac{\tau\gamma}{(\gamma + \tau^2)^{\frac{1}{2}}},$$

$$L^{(II)}(p_0) = 2 \left\{ \frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_h} \right\} \pm T\sqrt{\delta} \frac{\gamma}{(\gamma + \tau^2)^{3/2}},$$

$$L^{(III)}(p_0) = \mp T\sqrt{\delta} \frac{\gamma\tau}{(\gamma + \tau^2)^{3/2}},$$

$$L^{(IV)}(p_0) = \pm 3T\sqrt{\delta} \frac{(\gamma - 4\tau^2)}{(\gamma + \tau^2)^{7/2}}.$$

где $\tau = p - p^*$.

Траектория распространения луча с фиксированной отстройкой p_0 определяется зависимостью угловой отстройки q_h от радиуса R_h , следующей из уравнения на точки стационарной фазы

$$L^{(I)}(p_0) = 0. \quad (1.123)$$

В общем случае уравнение (1.123) имеет множество решений, определяющих целый веер пересекающихся траекторий. При их пересечении образуются каустики, определяемые в неявной форме условием

$$L^{(II)}(p_0) = 0. \quad (1.124)$$

Точка пересечения каустик, называемая также точкой фокуса, определяется условием

$$L^{(III)}(p_0) = 0. \quad (1.125)$$

Найдем аналитические выражения для положения каустики в пространстве. Используя в качестве параметра глубину фокусировки излучения в кристалле

$$z_f = 2\sqrt{\sigma}/\delta\kappa_0,$$

сведем уравнение (1.124) к виду

$$\left(\frac{1}{\kappa_0} \right) \left(1 \pm \frac{T}{z_f} \right) \frac{1}{(1 + \gamma(p_0^c - p_*)^2)^{3/2}} - \frac{1}{\kappa_h} = 0. \quad (1.126)$$

В пределе очень тонкого кристалла $\frac{T}{z_f} \ll 1$ (кинематическое приближение) фаза, набранная рентгеновской волной при прохождении через кристалл, пренебрежимо мала по сравнению с расстояниями кристалл-точка

наблюдения, и (1.126) сводится к

$$\frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_h} = 0 \quad (1.127)$$

Из (1.127) легко получить выражение для отстройки p_0^c отвечающей волне, распространяющейся вдоль каустики

$$p_0^c - p_* = \sqrt{\gamma} \sqrt{\left(\frac{\kappa_h}{\kappa_0 - \kappa_h}\right)^{2/3} - 1}. \quad (1.128)$$

В предельном случае, когда точка наблюдения R_h находится внутри кристалла ($R_h, 1/\kappa_h \rightarrow 0$), уравнение (1.128) совпадает с уравнением для определения углового положения каустик в кристалле ([53]).

Подставляя (1.128) в уравнение для определения траекторий (1.123), получаем для линии каустики выражение

$$\frac{2q_h^c}{\kappa_h} = -\frac{q}{\kappa_0} + \frac{2(A-B)T}{\kappa_h} - \left(\frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_h}\right) \left[p_* + \sqrt{\gamma} \left(\frac{T}{z_f}\right)^{2/3} \left(\left(\frac{\kappa_h}{\kappa_0 - \kappa_h}\right)^{2/3} - 1 \right)^{3/2} \right]. \quad (1.129)$$

Используя уравнение для определения точки фокуса (1.125), (1.122), легко убедиться, что в точку фокуса приходит плоская волна с отстройкой $p^f = p^*$. Подставляя это значение отстройки в (1.128), получим уравнение для определения фокусного расстояния R_h^f

$$\frac{T}{z_f} \frac{\kappa_h}{\kappa_0 - \kappa_h} = 1, \quad (1.130)$$

которое удобно переписать в виде

$$\frac{1}{\kappa_0} \left(1 - \frac{T}{z_f}\right) - \frac{1}{\kappa_h} = 0. \quad (1.131)$$

Из (1.126) следует, что область пространства, в которой возможно существование каустики (и точки фокусировки, как ее начала), определяется из неравенства

$$\frac{T}{z_f} \frac{\aleph_h}{\aleph_0 - \aleph_h} > 1 \quad (1.132)$$

Проанализируем условия определения положения точек фокуса и каустики для случаев идеального кристалла и кристалла с особой деформацией.

В случае идеального кристалла статическая деформация отсутствует. Параметры \aleph_0, \aleph_h определены в (1.117). Тогда из (1.132) получим, что образование каустик возможно только, если расстояние кристалл-точка наблюдения превышает фокусное

$$R_h > R_h^f, R_h^f = R_0 \left(1 - \frac{T}{z_f}\right) \quad (1.133)$$

Если толщина кристалла T равна глубине образования точки фокуса z_f в кристалле, то расстояние кристалл—точка фокуса равно нулю ($R_h^f = 0$). При $z_f < T$ точка фокусировки расположена внутри кристалла. Если $z_f > T$, т.е. излучение не успело сфокусироваться внутри кристалла, то точка фокусировки будет расположена вне кристалла.

В предельном случае тонкого кристалла $z_f > T$ из (1.131) следует известное утверждение, что расстояние фокусировки при дифракции на идеальном кристалле совпадает с расстоянием кристалл-источник. В колеблющихся кристаллах параметр z_f может меняться в широких пределах с изменением параметров ультразвуковой волны [53]. Таким образом, качественное отличие дифракционной фокусировки с использованием колеблющихся кристаллов состоит в возможности управления параметрами сфокусированного поля через ультразвук.

Рассмотрим случай кристалла с особой деформацией ($B = 0$). Подставляя параметры \aleph_0, \aleph_h из (1.128) в уравнение (1.130), получаем

$$\left(1 - \frac{T}{z_f}\right) \left(\frac{a_0}{R_h^f} + \varepsilon b/R\right) + \left(\frac{\varepsilon b}{R} - a_0/R_0\right) = 0. \quad (1.134)$$

В предельном случае тонкого кристалла ($T < z_f$) условие (1.134) совпадает с полученным ранее из геометрических соображений условием (1.103). Отметим, что в случае, когда тонкий кристалл обращен своей вогнутой частью к источнику ($\varepsilon = 1$), расположенному на таком расстоянии R_0 , то

$$2 \frac{\varepsilon b}{R} - \frac{a_0}{R_0} = 0$$

или

$$(1.135)$$

$$R \cos \theta_0 / 2 = R_0 .$$

В последнем случае источник расположен на так называемом круге Роуланда, радиус которого равен половине радиуса изгиба кристалла. При этом радиус фокусировки, как следует из (1.134), стремится к бесконечности, т.е. от кристалла дифракционно отражается плоская волна.

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, определяемой условием

$$2 \frac{\varepsilon b}{R} + \frac{a_0}{R_h} = 0$$

или

$$R \cos \theta_0 / 2 = R_h . \quad (1.136)$$

В качестве иллюстрации полученных выше результатов приведем результаты численных расчетов интенсивности поля вблизи круга Роуланда по формуле (1.134) при падении на выпуклую поверхность изогнутого кристалла почти плоской волны.

На Рисунке 1.21 показаны результаты расчета интенсивности рентгеновской волны при дифракции на кристалле с толщиной в 1 экстинкционную длину (Рисунок 1.21а, 1.21б) излучения, испущенного точечным источником,

находящимся в точном брэгговском положении ($\theta = 60^\circ$) относительно центра кристалла. Расстояние кристалл-источник равнялось 20 м. Излучение $\text{Cu } K_\alpha, \sigma$ -поляризация. Длина ультразвуковой волны равна длине экстинкции ($l_s = \Lambda$), амплитуда ультразвуковой волны $hw = 0.01$ (Рисунок 1.21а, б), $hw = 0.5$ (Рисунок 1.21б). Кривые с номерами n отвечают изменению расстояния кристалл-точка наблюдения $R_n = R_h^{(0)}(1 + 0.002(n - 1))$.

Видно, что в случае достаточно тонкого кристалла пик в точке фокусировки на круге Роуланда достаточно узкий. В толстом кристалле пик значительно уширяется (Рисунок 1.21б), на некотором расстоянии от точки фокуса появляется так называемый «ласточкин хвост» .

Сравнение графиков на Рисунках 1.21а и б показывает, что, несмотря на малость пути, проходимого волной в кристалле по сравнению с расстояниями до кристалла, увеличение толщины кристалла существенно влияет на фокусирующие свойства. В случае тонкого кристалла увеличение амплитуды ультразвуковой волны оказывает малое влияние на общую форму фокусного пика.

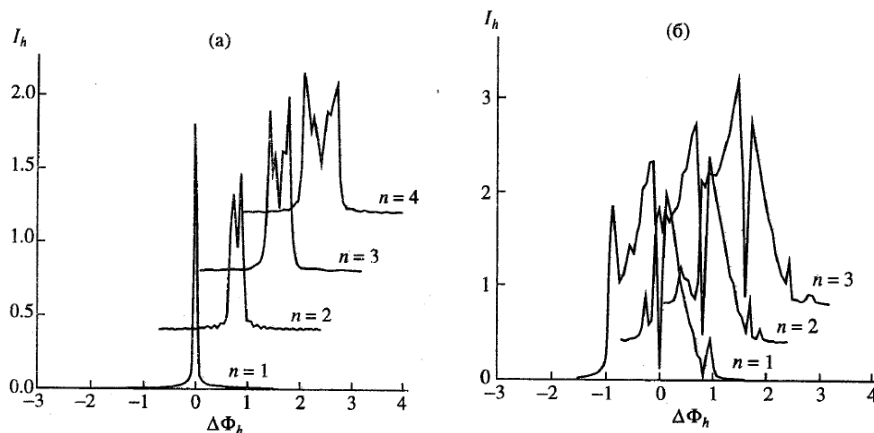


Рисунок 1.21. Кривые зависимости интенсивности поля в фокальной плоскости от угла $\Delta\varphi_f$ при разных расстояниях кристалл-точка наблюдения вблизи круга Роуланда.

Ширина фокального пятна. Выше было установлено, что положение

точки фокусировки зависит от отношения толщины кристалла к глубине фокусировки T/z_f .

При рассмотрении структуры поля вблизи точки фокуса (R_h^f) в вакууме будем использовать угловую переменную Δq_h

$$\Delta q_h = p_0 - q_h^c \approx \beta \sin \theta_0 (\theta_h - \theta_h^c), \quad (1.136)$$

где θ_h^c - угловая отстройка от точного положения каустики.

Если расстояние кристалл-точка наблюдения совпадает с фокусным расстоянием R_h^f , то соответствующие производные эйкональной функции в (1.122) для плоских волн, попадающих в точку фокуса, равны нулю

$$L^{(II)}(p_0^*) = L^{(III)}(p_0^*) = 0. \quad (1.137)$$

Вклад в амплитуду дифрагированной волны за счет возбуждения каждой из четырех ветвей дисперсионной поверхности оказывается пропорциональным ($p_0^* = q_h^c$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \exp \left\{ iL_*^{(I)}(p_0 - p_0^*) + iL_*^{(IV)}(p_0 - p_0^*)^4/24 \right\}, \quad (1.138)$$

где $L_*^{(n)}$ - производная от эйкональной функции (1.118), взятая при отстройке p^* .

Раскладывая подынтегральное выражение в (1.138) в ряд Тейлора и ограничиваясь первыми членами этого разложения, получим

$$\begin{aligned} & 2 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \exp \{-V(p_0 - p_0^*)^4\} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(iL_*^{(I)}(p_0 - p_0^*) \right)^{2n}}{(2n)!} \\ & \approx 2 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 \exp \{-V(p_0 - p_0^*)^4\} \left(1 - \left(L_*^{(I)}(p_0 - p_0^*) \right)^2 / 2 \right), \end{aligned}$$

где

$$-V^4 = \frac{iL_*^{(IV)}}{24}, L_*^{(IV)} = 3T \sqrt{\frac{\delta}{\gamma^5}}, L_*^{(I)} = 4 \frac{AT}{8h} = 4\varepsilon \frac{bT}{R8h}. \quad (1.139)$$

Используя табличный интеграл

$$\int_0^{\infty} d\tau \tau^n \exp\{-(V\tau)^m\} = \frac{1}{mV^{n+1}} \Gamma\left\{\frac{n+1}{m}\right\},$$

где $\Gamma\{x\}$ - гамма функция, выражение (1.139) можно представить в виде

$$E_h(q_h) = E_h(q_h^c)\{1 - b(\Delta q_h)^2\}, E_h(q_h^c) = \Gamma\left\{\frac{1}{4}\right\}/2V, \quad (1.140)$$

где комплексная величина равна

$$b = \left(\frac{L_*^{(I)}}{2V}\right)^2 \Gamma\left\{\frac{3}{4}\right\} \Gamma\left\{\frac{1}{4}\right\}. \quad (1.141)$$

Отсюда для интенсивности поля дифрагированной волны в окрестности точки фокуса с точностью до членов $(\Delta q_h)^4$ получаем оценку

$$I_h(q_h) = I_h(q_h^c)\{1 - 2 \operatorname{Re}(b)(\Delta q_h)^2\}. \quad (1.142)$$

Значение q_h^* , при котором интенсивность поля спадает в два раза, определим как угловую полуширину фокального пятна Δq_h^*

$$I_h(\Delta q_h^*) = 0.5I_h(q_h^c), (\Delta q_h^*) = 0.5\sqrt{\operatorname{Re}(b)} = \mu \frac{Rq_h}{bT} \left(T \sqrt{\frac{\delta}{\gamma^5}}\right)^{1/4}, \quad (1.143)$$

где численный коэффициент

$$\mu = 0.5 \left(\frac{\Gamma\left\{\frac{1}{4}\right\}}{\sqrt{8\Gamma\left\{\frac{3}{4}\right\}}} \right) \approx 0.3.$$

Полуширина Δq_h^* зависит как от параметров ультразвуковой волны, определяющих форму дисперсионной поверхности σ, γ , через функцию

$$Y(\mathbf{hw}, K_s) = \left(\sqrt{\frac{\delta}{\gamma^5}} \right)^{1/4}, \quad (1.144)$$

так и от расстояния кристалл-источник R_h и радиуса изгиба кристалла R (через \aleph_h).

Следует отметить, что ширина фокального пятна падает с толщиной кристалла как $(T^{-3/4})$, в то время как положение точки фокуса является линейной функцией от толщины кристалла (1.130), (1.134).

На Рисунке 1.22 представлен график зависимости ширины фокального пятна от амплитуды УЗВ (функции $Y(\mathbf{hw}, K_s)$) при $K_s = 2, 2.1, 2.5$.

КРИСТАЛЛ С ДЕФОРМАЦИЕЙ ОБЩЕГО ВИДА

В этом случае кристалл деформирован так, что коэффициент B в разложении статической части поля смещений отличен от нуля. Как и в случае кристалла с особой деформацией, возможны два варианта взаимного расположения кристалла и источника: кристалл обращен к источнику своей выпуклой поверхностью ($\varepsilon = -1$) или вогнутой ($\varepsilon = 1$). При произвольной статической деформации с постоянным градиентом для параметров ширины дифрагированного и падающего пучков \aleph_{ht}, \aleph_t , имеем, [54],

$$\aleph_t = \frac{a_0}{R_0} - \frac{\varepsilon b_0^t}{R} = a_0 \left\{ \frac{1}{R_0} - \frac{(1 + \cot \theta \frac{a_{15}}{2a_{11}})}{R \cos \theta} \right\}, \quad \aleph_{ht} = \frac{a_0}{R_0} + \frac{\varepsilon b_h^t}{R}, \quad (1.145)$$

где R - радиус изгиба кристалла,

$$a_0 = \frac{2(\beta \sin \theta)^2}{k}, \quad b_{0,h}^t = \frac{A\beta \left[2\text{tg } \theta \pm \frac{a_{15}}{a_{11}} \right]}{\pi k}.$$

В общем случае отстройка от точного условия Брэгга для дифрагированной волны θ_h является функцией как от координаты вдоль прошедшего, так и дифрагированного пучков

$$\theta_h - \theta_h^0 = \frac{1}{\cos \theta} \frac{\partial}{\partial s_h} \mathbf{h} \mathbf{u}_d = \frac{2(2Bs_0 + Cs_h)}{\cos \theta}. \quad (1.146)$$

Причем градиент

$$\frac{\partial(\theta_h - \theta_h^0)}{\partial s_h} = \frac{4B}{\cos \theta} \quad (1.147)$$

остаётся постоянным вдоль траектории прошедшей волны в кристалле ($s_0 = \text{const}$).

Для простоты ограничимся случаем, когда каждая точка возбуждения проходит ($2BT < |p|$), [54], только через одну точку поворота, где локально выполнены условия Брэгга для дифракции с/без участия фононов.

Подставим в (1.113) разложение (1.121), аппроксимирующее форму дисперсионной поверхности, и выпишем производные от L в этом приближении

$$L^{(I)} = \frac{2(p_0 - q)}{\kappa_0} - \frac{2(p_0 - q_h - 2(A-B)T)}{\kappa_h} \pm \frac{\sqrt{\delta}}{2B} \left\{ \sqrt{\gamma + (\mu + 2BT)^2} - \sqrt{\gamma + \mu^2} \right\}, \quad (1.148)$$

$$L^{(II)} = 2 \left(\frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_h} \right) \pm \frac{\sqrt{\delta}}{2B} \left\{ \frac{\mu + 2BT}{\sqrt{\gamma + (\mu + 2BT)^2}} - \frac{\mu}{\sqrt{\gamma + \mu^2}} \right\},$$

$$L^{(III)} = \pm \frac{\gamma \sqrt{\delta}}{2B} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma + (\mu + 2BT)^2}} - \frac{1}{\sqrt{\gamma + \mu^2}} \right\},$$

$$L^{(IV)} = \pm 3 \frac{\gamma \sqrt{\delta}}{2B} \left\{ \frac{\mu + 2BT}{(\gamma + (\mu + 2BT)^2)^{5/2}} - \frac{\mu}{(\gamma + \mu^2)^{5/2}} \right\}.$$

Используя (1.122) как уравнение для траектории, определяющее зависимость угловой отстройки q_h от расстояния кристалл-точка наблюдения R_h (через κ_h) получим

$$\frac{2q_h}{\kappa_h} = \frac{2(p_0 - q)}{\kappa_0} - \frac{2(p_0 - 2(A-B)T)}{\kappa_h} \pm \frac{\sqrt{\delta}}{2B} \left\{ \sqrt{\gamma + (\mu + 2BT)^2} - \sqrt{\gamma + \mu^2} \right\}. \quad (1.149)$$

Уравнение для каустик (1.124), определяющее положение огибающих системы лучей, даёт

$$2 \left(\frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_h} \right) = \pm \frac{\sqrt{\delta}}{2B} \left\{ \frac{\mu + 2BT}{\sqrt{\gamma + (\mu + 2BT)^2}} - \frac{\mu}{\sqrt{\gamma + \mu^2}} \right\}. \quad (1.150)$$

Графическое решение уравнения (1.150) ищется аналогично случаю фокусировки в [54].

Для того чтобы уравнение (1.150) имело бы решение, т.е. чтобы в области позади изогнутого колеблющегося кристалла существовали каустики, с необходимостью должно быть выполнено условие

$$\left(\frac{1}{\kappa_0} - \frac{1}{\kappa_h}\right) \frac{4B}{\sqrt{\delta}} < 1. \quad (1.151)$$

Используя условие образования точки фокуса (1.123) и (1.144), находим, что точка фокусировки рентгеновского волнового поля в вакууме лежит на траектории волны с отстройкой

$$p_0^f - p_* = -BT. \quad (1.152)$$

Отметим, что при дифракции в кристалле с особой деформацией или на идеальном кристалле $p_0^f = p_*$.

Подставив в уравнение (1.124) выражение (1.152), получим следующее неявное уравнение для определения расстояния от точки фокуса до поверхности кристалла R_h (через κ_h)

$$\frac{1}{\kappa_h} = \frac{1}{\kappa_0} \pm N, N = \frac{T\sqrt{\delta}}{2\sqrt{\gamma + (2BT)^2}}. \quad (1.153)$$

По аналогии с обычной оптикой выражение (1.153) можно назвать “формулой линзы”, описывающей положение точки фокуса в общем случае деформированного и колеблющегося кристалла

В случае, когда изменение угла Брэгга $\theta_h - \theta_h^0$ на толщине кристалла (1.146) достаточно мало $\gamma \gg (BT)^2$, формула (1.153) переходит в выражение (1.131), полученное для идеального кристалла, когда

$$N_i = \frac{1}{\kappa_0} \frac{T}{z_f}. \quad (1.154)$$

Однако в обратном предельном случае параметр N не зависит от толщины кристалла

$$N = \frac{\sqrt{\delta}}{2|B|} = -\sqrt{\delta} \cos \theta R \quad (1.155)$$

и определяется только величиной градиента деформации B (радиусом изгиба кристалла) и кривизной дисперсионной поверхности.

Отметим, что обычно используемые кристаллы кварца или германия можно изогнуть до минимального радиуса R_{min} , примерно в 1000 раз превосходящего толщину кристалла $R > 1000T$, поэтому величина BT может принимать довольно большие значения

$$BT \approx T \cos \theta / R > 10^{-3} \cos \theta.$$

Используя (1.141), из формулы “линзы” (1.153) можно получить аналитическое выражение для зависимости расстояния точка фокуса R_h^f кристалл от расстояния кристалл-источник (R_0) и радиуса изгиба кристалла (R).

Ширина фокальной точки. Вопрос о зависимости угловой ширины фокального пятна Δq_h от параметров изогнутого колеблющегося кристалла в случае общей деформации рассматривается аналогично случаю идеального кристалла. В результате вычислений на основе формул (1.148) получим $\mu = -BT, p_0 = q_h^* - BT, q = q_h^*$

$$\Delta q_h^* = \approx \frac{\kappa_h R}{T b_0^t} \left\{ \frac{\gamma T \sqrt{\delta}}{(\gamma + (2BT)^2)^{5/2}} \right\}^{1/4}. \quad (1.156)$$

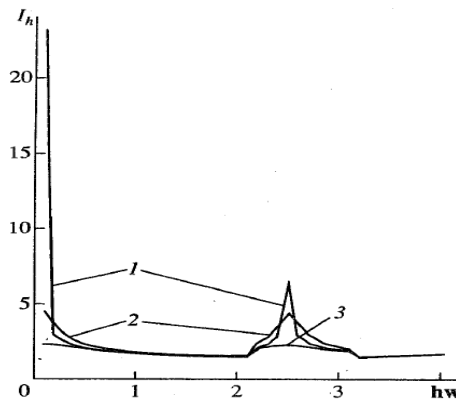


Рис. 1.22 Зависимость ширины фокального пятна от амплитуды ультразвуковой волны в сильно деформированном кристалле при $K_s = 2,2.1,2.5$.

Очевидно, что в случае, когда $BT \ll \sqrt{\gamma}$, последняя формула переходит в полученное ранее выражение для неизогнутого кристалла. В предельном случае больших деформаций $BT \gg \sqrt{\gamma}$ для ширины получим

$$\Delta q_h^* \approx \varpi \frac{\kappa_{hR}}{T^2 b_0^t} \left\{ \frac{\gamma \sqrt{\delta}}{B^5} \right\}^{1/4}, \quad (1.157)$$

т.е. полуширина обратно пропорциональна квадрату толщины и градиенту деформации в отличие от случая идеального колеблющегося кристалла.

Таким образом, в сильно деформированном кристалле фокусное пятно может оказаться довольно узким, если функция

$$f(\mathbf{hw}, K_s) = \left\{ \frac{\delta^{3/2}}{\sigma} \right\}^{1/4} \quad (1.158)$$

также окажется достаточно малой.

На Рисунке 1.22 представлен график зависимости ширины фокального пятна от амплитуды ультразвуковой волны (функции $f(\mathbf{hw}, K_s)$) при $K_s = 2, 2.1, 2.5$.

Таким образом, в данном разделе было показано, что условие фокусировки рентгеновского дифракционного поля в вакууме является “продолжением” условий фокусировки в кристалле [53,54].

Естественно, что в случае достаточно тонкого кристалла условия фокусировки в вакууме слабо зависят от структуры волнового поля в кристалле. В этом случае положение точки фокуса в вакууме определяется из простых геометрических соображений. Дифракционное рассеяние рассматривается как однократное (кинематическое), и нет принципиальных различий между фокусирующими свойствами колеблющегося и неколеблющегося кристаллов.

По этой причине при дифракции в геометрии Брэгга возможность управления дифрагированным пучком за счет изменения положения отражающих плоскостей весьма ограничена, так как характерная глубина образования дифракционного поля в этом случае равна малой длине экстинкции.

Совсем иная ситуация возникает в геометрии Лауэ, если кристалл достаточно толстый. Выше (см. [53, 54]) было показано, что при рентгеноакустическом резонансе образуются три точки фокусировки - центральная и две дополнительные. Форма дисперсионной поверхности и положение точек фокусировки в кристалле существенно зависят от амплитуды ультразвуковой волны, что позволяет эффективно управлять и положением точки фокусировки в вакууме. Изменяя напряжение на пьезопреобразователе, можно варьировать амплитуду ультразвуковой волны и, следовательно, все параметры фокусирующего кристалла.

В случае идеального кристалла и кристалла с особым полем деформации основным параметром, учитывающим влияние дифракции в кристалле на фокусирующие свойства, является отношение толщины кристалла к глубине фокусировки в нем.

Отметим, например, что глубина расположения фокуса расходится при малых значениях амплитуды ультразвуковой волны пропорционально $(hw)^{-1}$, т.е. любой кристалл в этом случае может рассматриваться как тонкий. В этом случае точка фокуса всегда будет расположена вне кристалла, а ширина фокусного пятна будет достаточно малой.

Таким образом, колеблющийся кристалл может рассматриваться как рентгенооптический элемент с электрически управляемыми параметрами. Теория дифракции в упруго изогнутом колеблющемся кристалле с деформацией общего вида представляет собой достаточно сложную задачу, [54]. В пределе больших значений градиента деформации (B) динамическое рассеяние переходит в кинематическое, так как поле деформаций изменяется настолько быстро на длине экстинкции, что рентгеновское дифракционное поле не успевает перестроиться. При этом угловая ширина дифракционного отражения увеличивается пропорционально BT при одновременном уменьшении за счет процессов переброса

интенсивности пика, пропорционального теперь $r = 1 - \exp\left(\frac{\pi}{2B}\right)$.

Механизм увеличения ширины кривой отражения в этом случае принципиально отличен от механизма увеличения светосилы в классических схемах Дю-Монда и Кошуа. Дело в том, что в классических схемах отражающие плоскости расположены так, чтобы излучение точечного источника в любой точке на поверхности кристалла попадало бы в условия дифракции. В случае же дифракции на кристалле с ПГД таким, что $BT \gg \sqrt{\gamma}$, все плоские волны с отстройками p_0 в интервале $[-BT, 0]$, обычно намного превышающем изначальную ширину кривой качания, будут претерпевать дифракционное рассеяние в кристалле. Т.е. нужный наклон отражающей плоскости волна находит на соответствующей глубине, где и происходит эффективное дифракционное рассеяние. При этом ширина фокусного пятна может быть достаточно малой (см. (1.156)).

Важно отметить, что фокусирующие свойства кристалла меняются во времени с периодом ультразвуковых колебаний. Например, положение точки фокуса будет прочерчивать в пространстве линию за каждый период колебаний.

Одним из возможных применений эффекта фокусировки на колеблющихся кристаллах при динамической дифракции в случае Лауэ является рентгеновская литография и эксперименты с движущимся одиночными образцами-молекулами и наночастицами (например, в рамках серийной нанокристаллографии на источниках РЛСЭ). В первом случае пучок может двигаться по заранее заданной траектории, засвечивая резист. Во втором движение точки фокуса может быть синхронизовано со структурой падающего импульсного пучка и движением потока частиц.

ГЛАВА 2 ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КОЛЕБЛЮЩИХСЯ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

2.1 РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЛНОВОГО ПОЛЯ В КРИСТАЛЛАХ.

В данной главе представлена последовательная теория динамического рассеяния рентгеновских лучей в колеблющемся деформированном кристалле в случае, когда длина волны ультразвука λ_s много меньше длины экстинкции Λ . Построенная картина распространения волнового поля в кристалле основана на представлении блоховских волн, отвечающих движению рентгеновского кванта с испусканием или с поглощением фононов. Специальное внимание уделяется расчету интегрального коэффициента дифракции I_h^{int} , который является функцией двух параметров: модуля амплитуды ультразвуковой волны $|w|$ и градиента деформации кристаллической решетки B . Показано, что при определенных условиях I_h^{int} имеет аномальную (немонотонную) зависимость от амплитуды ультразвуковой волны $|w|$ (проходит через минимум) при определенных значениях градиента деформации B . Развитая теория количественно объясняет выполненные недавно эксперименты по измерению аномальной зависимости I_h^{int} .

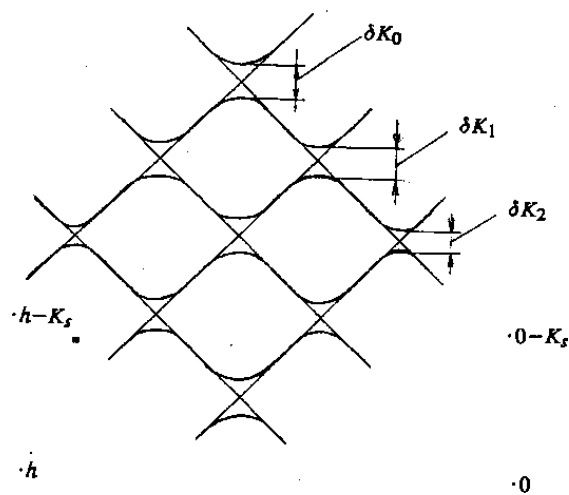


Рисунок 2.1. Шестиволновая дисперсионная поверхность. Показаны расстояния между её листами для отдельных сателлитов, $\delta K_n = 2\pi J_n(\mathbf{hw})/\Lambda$, $n = 0, 1, 2$.

В первых работах по исследованию влияния акустических колебаний на динамическое рассеяние рентгеновских лучей (см., например, обзор [55]) была показана принципиальная возможность измерения амплитуды ультразвуковой волны w , а также определения структуры нормальных мод в пьезоэлектрических преобразователях и резонаторах. В дальнейшем метод ультразвукового воздействия на брэгговскую дифракцию рентгеновских лучей, а также нейтронов был использован для изучения широкого круга акустоэлектронных, магнитоакустических и акустомагнитных эффектов в совершенных кристаллах, [56, 57]. Основные положения теории динамической дифракции в совершенных кристаллах, в которых возбуждена ультразвуковая волна с синусоидальным периодическим полем смещений атомов, были сформулированы в [58—60]. При этом характерным параметром задачи дифракции является отношение длины волны ультразвука λ_s к длине экстинкции Λ рентгеновских лучей. Ниже мы ограничимся случаем $\lambda_s \ll \Lambda$ (ультразвук высокой частоты), когда на дисперсионной поверхности возникают дополнительные щели (см. Рисунок 2.1), величина которых отвечает перенормированным значениям структурного фактора брэгговских отражений, [59, 60]. Физически новые «щели» на многолистной дисперсионной поверхности отвечают дифракционным отражениям с поглощением или испусканием n фононов (спутники n -го порядка, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

В [58- 60] (см. также [61, 62]) был предложен удобный формализм для описания динамической дифракции в колеблющихся кристаллах, основанный на разложении амплитуд прошедшей и дифрагированной волн в ряд Фурье по волновым векторам высокочастотной ультразвуковой волны. При этом в угловой области каждого спутника учитываются лишь две соответствующие компоненты этого разложения, что позволяет в принципе свести задачу к канонической форме динамической теории - двухволновому приближению. В [63] автором

было получено точное решение задачи дифракции в колеблющемся кристалле, когда в разложениях для прошедшей и дифрагированной волн учитываются по две компоненты - четырехволновое приближение. Было показано, что в случае высокочастотного ультразвука поправки к «двухволновой» амплитуде прошедшей (дифрагированной) волны и форме ДП по порядку величины равны соответственно $(\Lambda/\lambda_s)^{-1}$ и $(\Lambda/\lambda_s)^{-2} \ll 1$. В случае колеблющегося кристалла с высокочастотной ультразвуковой волной интегральный коэффициент дифракции I_h^{int} можно представить в виде суммы интегральной интенсивностей рассеяния $I_{h,n}^{int}$ на всех сателлитах и основном рефлексе. Из теории и экспериментов известно, что I_h^{int} при дифракции на колеблющемся совершенном кристалле с ростом амплитуды высокочастотной ультразвуковой волны \mathbf{hw} (\mathbf{h} — вектор дифракции) выходит на кинематический предел [58, 60]. Физически это связано с тем, что с ростом \mathbf{hw} структурный фактор каждого сателлита ($\sim \chi_h J_n(\mathbf{hw})$) уменьшается и дифракционное рассеяние в угловой области каждого сателлита принимает кинематический характер. Таким образом, в случае непоглощающего дифрагирующего кристалла интегральный коэффициент дифракции в целом возрастает от динамического значения при $\mathbf{hw} = 0$ до кинематического при $\mathbf{hw} \rightarrow \infty$. Это, в принципе, согласуется с общим утверждением, [62], о том, что I_h^{int} растет с ростом деформации кристаллической решетки. Однако ситуация становится более сложной в случае ультразвука, возбужденного в деформированном (например, изогнутом) кристалле. Экспериментально было показано [64, 65], что I_h^{int} имеет немонотонную (аномальную) зависимость от амплитуды ультразвуковой волны с минимумом при значении напряжения на пьезопреобразователе $V \sim 4$ В. В [64] было указано на межветвевое рассеяние при прохождении точки возбуждения через угловые области ближайших к основному рефлексу сателлитов как на возможную причину аномальной

зависимости I_h^{int} от hw . При этом рассмотрение в [64] было основано на квазиклассическом описании динамики точек возбуждения, соответственно результаты работы [64] применимы лишь при $B \ll 1$. Ниже построена последовательная динамическая теория дифракции сферической волны на деформированном кристалле, в котором возбужден ультразвук высокой частоты. Изложение основано на формализме функций Грина. Показано, что параметром задачи является отношение углового расстояния $\Delta\theta_d$, проходимого точкой возбуждения за счет деформации, к расстоянию между сателлитами $\Delta\theta_s = K_s/2k_0 \sin \theta$, θ - угол Брэгга, K_s — волновой вектор ультразвуковой волны, k_0 — волновой вектор проходящей волны. В частном случае дифракции на кристалле с постоянным градиентом деформации угловое расстояние, проходимое точкой возбуждения, равно

$$\Delta\theta_d = 2\pi BT / \Lambda k_0 \sin \theta,$$

где $T = \pi t / \Lambda$, t — толщина кристалла,

$$4B = \left(\frac{\Lambda}{\pi}\right)^2 \frac{\partial^2 \mathbf{u}_d}{\partial s_0 \partial s_h},$$

\mathbf{u}_d - вектор смещения в поле статической деформации. При $2BT < \Delta K$, где $\Delta K = \frac{\Lambda k_0 \sin \theta \Delta\theta_s}{\pi}$, каждая точка возбуждения проходит не более чем через одну точку поворота (точку локального выполнения условия Брэгга). При этом условии для описания дифракции вблизи отдельного n -го сателлита можно использовать известные выражения для функции Грина в кристалле с постоянным градиентом деформации с перенормированной длиной экстинкции. Полная функция Грина представляет собой суперпозицию функций Грина, отвечающих отдельным сателлитам. Нетрудно показать, что при $\Delta K < 2BT < 2\Delta K$ точка возбуждения проходит последовательно через две точки поворота. При $2\Delta K < 2BT < 3\Delta K$ точка возбуждения проходит через три точки поворота и т. д.

При прохождении точки возбуждения через несколько точек поворота происходит перераспределение возбуждения между ветвями дисперсионной поверхности за счет внутри- и межветвевое рассеяния блоховских волн в кристалле. Используя квазиклассическое приближение, можно в явном виде выписать интерферирующие члены и приближенные выражения для I_h^{int} .

Эти физические соображения позволяют развить последовательную динамическую теорию дифракции на колеблющихся деформированных кристаллах, изложение которой дано ниже.

Постановка задачи. Основные уравнения. В дальнейшем для простоты ограничимся рассмотрением симметричного дифракционного рассеяния рентгеновских лучей с углом Брэгга θ , при этом ось z направлена перпендикулярно входной поверхности кристалла, а ось x — антипараллельна вектору дифракции \mathbf{h} (см. Рисунок 2.1). Остальные обозначения те же, что и в Главе 1.

Как известно, амплитуды прошедшей и дифрагированной волн рентгеновского поля в точке \mathbf{r} в кристалле определяются интегралами-свертками от функций Грина $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $G_h(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и амплитуды падающей на кристалл волны $E_0(\mathbf{r})$ по входной поверхности кристалла $z = 0$:

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = \int_{s'_0 = -s'_h} ds'_h G_{0,h}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') E_{0,h}(\mathbf{r}'). \quad (2.1)$$

Функции Грина, входящие в (2.1) (после экспоненциальных подстановок, учитывающих рефракцию рентгеновских лучей в кристалле), удовлетворяют системе неоднородных уравнений в частных производных первого порядка [66]:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial s_0} G_0 + \sigma_{-h} \exp(i\mathbf{h}\mathbf{v}) G_h &= i\delta(s_0 - s'_0)\delta(s_h - s'_h), \\ i \frac{\partial}{\partial s_0} G_h + \sigma_h \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{v}) G_0 &= 0, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где динамические коэффициенты задачи равны

$$\sigma_h = (1 + ik) \left(\frac{\chi_{hr}}{\chi_{-hr}} \right)^{1/2}, \quad \sigma_{-h} = (1 + ik) \left(\frac{\chi_{-hr}}{\chi_{hr}} \right)^{1/2},$$

а нормализованный динамический коэффициент поглощения κ определяется выражением

$$\kappa = \frac{\chi_{hi}\chi_{-hr} + \chi_{-ir}\chi_{hr}}{2(\chi_{hr}\chi_{-hr} - \chi_{hi}\chi_{-hi})}.$$

Вектор полного смещения атомов \mathbf{V} из их равновесного положения можно представить в виде суммы $\mathbf{u}_s + \mathbf{u}_d$, где \mathbf{u}_s — вектор смещения в поле поперечной стоячей ультразвуковой волны,

$$\mathbf{h}\mathbf{u}_s = \mathbf{h}\mathbf{w} \cos(2K_z z) \mathbf{w} = \mathbf{u}_0 \cos(\omega t),$$

\mathbf{u}_d - квадратичное по координатам поля смещение,

$$\mathbf{h}\mathbf{u}_d = 2 (A s_0^2 + 2B s_0 s_h + C s_h^2). \quad (2.3)$$

Представляя функции Грина $\mathbf{G}_g(g = 0, h)$ в виде

$$\begin{aligned} G_0 &= iQ_0 \exp(2iC s_h^2) \theta(s_0 - s'_0) \theta(s_h - s'_h) \exp\{-i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}')\}, \\ G_h &= iQ_h \exp(-2iA s_0^2) \theta(s_0 - s'_0) \theta(s_h - s'_h) \exp\{-i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r}')\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

и подставляя их в (2.2), находим, что функции \mathbf{Q}_g удовлетворяют системе однородных уравнений

$$i \frac{\partial}{\partial s_0} Q_0 + \sigma_{-h} Q_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) = 0, \quad i \frac{\partial}{\partial s_0} Q_h + \sigma_h Q_0 \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}) = 0, \quad (2.5)$$

где $\mathbf{h}\mathbf{u} = \mathbf{h}\mathbf{u}_s + 4B s_0 s_h$.

Из определения (2.4) с учетом (2.2) также следует, что функция Q_h на характеристических линиях $s_{h,0} = s'_{h,0}$ удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned} Q_h(s'_0, s_h; s'_0, s'_h) &= 1, \\ Q_h(s_0, s'_h; s'_0, s'_h) &= \exp\{i\mathbf{h}[\mathbf{u}(\mathbf{r}') - \mathbf{u}(s_0, s'_h)]\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

При $\Delta K \gg 1$ (случай высокочастотной ультразвуковой волны) будем искать решение системы уравнений (2.5) в виде разложения

$$Q_g = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Q_{g,n} \exp(2in\Delta Kz). \quad (2.7)$$

Тогда система (2.5) сводится к следующей бесконечной системе уравнений в частных производных

$$\begin{aligned} \left(-2n\Delta K + i \frac{\partial}{\partial s_h}\right) Q_{h,n} + \sigma_h \exp(-4Bis_0s_h) \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^{m-n} J_{m-n}(\mathbf{hw}) Q_{0,m} &= 0, \\ \left(-2m\Delta K + i \frac{\partial}{\partial s_0}\right) Q_{0,m} + \sigma_{-h} \exp(4Bis_0s_h) \sum_{m=-\infty}^{\infty} (i)^{n-m} J_{n-m}(\mathbf{hw}) Q_{h,n} &= 0, \end{aligned} \quad (2.8)$$

где $J_n(\mathbf{hw})$ функция Бесселя действительного аргумента n -го порядка.

Подставляя (2.7) в граничные условия (2.6) и используя известное разложение Гегенбауэра

$$\exp(i\mathbf{hw} \cos(2\Delta Kz)) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (i)^m J_m(\mathbf{hw}) \exp(2im\Delta Kz), \quad (2.9)$$

находим, что функции $Q_{h,n}$, описывающие дифракцию с возбуждением n фононов, удовлетворяют следующим граничным условиям (ГУ):

$$Q_{h,n}(s_0, s'_h; s'_0, s'_h) = J_n(\mathbf{hw}) i^n \exp(i \mathbf{hu}_s(\mathbf{r}') - 4iB(s_0 - s'_0) s'_h), \quad (2.10)$$

$$Q_{0,n}(s'_0, s_h; s'_0, s'_h) = J_n(\mathbf{hw}) i^n \exp(i \mathbf{hu}_s(\mathbf{r}') - 2in\Delta Kz). \quad (2.11)$$

Обычно при решении задачи дифракции рентгеновских лучей на кристалле, в котором возбуждена высокочастотная ультразвуковая волна, ограничиваются так называемым двухволновым приближением, учитывая вблизи n -го сателлита только члены $Q_{0,0}, Q_{h,n}$. В $2m$ -волновом приближении при решении системы (8) учитываются m членов. Получающаяся в результате замкнутая система уравнений вместе с ГУ (2.10), (2.11) полностью описывает задачу дифракционного рассеяния рентгеновских лучей в колеблющемся кристалле с ПГД.

Распространение волнового поля в кристалле. В рассматриваемом случае (высокочастотная ультразвуковая волна), когда $\Delta K \gg 1$, угловое расстояние между сателлитами $\Delta\theta_s$ много больше ширины брэгговского отражения основного рефлекса. При этом процессы дифракционного рассеяния рентгеновских лучей, отвечающие каждому из сателлитов, можно рассматривать независимо друг от друга, [56, 58, 61].

Вблизи сателлита, отвечающего дифракции рентгеновских лучей с поглощением n фоонов, система (2.8) сводится к двум уравнениям относительно амплитуд $Q_{0,0}, Q_{h,n}$ (двухволновое приближение)

$$\begin{aligned} \left(-2n\Delta K + i \frac{\partial}{\partial s_h}\right) Q_{h,n} &= \sigma_h \exp(-4Bis_0 s_h) J_n(\mathbf{hw}) Q_{0,0}, \\ i \frac{\partial}{\partial s_0} Q_{0,0} &= i^n \sigma_{-h} \exp(4Bis_0 s_h) J_n(\mathbf{hw}) Q_{h,n}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Система уравнений (2.12) с точностью до перенормировки коэффициентов совпадает с соответствующими уравнениями теории дифракции рентгеновских лучей в кристалле с ПГД, [66]. Точное решение системы уравнений (2.12) с учетом (2.10), (2.11) можно записать в виде

$$\begin{aligned} Q_{h,n} &= i^n J_n(\mathbf{hw}) \sigma_{-h} \exp(i \mathbf{hu}_s(\mathbf{r}') - 4iB(s_0 - s'_0) s'_h - 2in\Delta K(s_h - s'_h)) \\ &\quad {}_1F_1(-\nu_n, 1, -4iB(s_0 - s'_0)(s_h - s'_h)), \\ \xi_0 &= s_0 - s'_0, \xi_h = s_h - s'_h, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где ${}_1F_1$ - вырожденная гипергеометрическая функция, ν_n - параметр, определяющий характер дифракционного рассеяния рентгеновских лучей

$$\nu_n = i J_n(\mathbf{hw}) \sigma^2 / 4B, \sigma^2 = \sigma_h \sigma_{-h}. \quad (2.14)$$

Переходя с учетом (2.4), (2.13) к Фурье-представлению «парциальной» функции Грина (см. [57])

$$\begin{aligned} G_{h,n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{i^n}{2\pi} \sqrt{\nu_n} J_n(\mathbf{hw}) \exp\left(-\frac{i\pi\nu_n}{2} - iB[\xi_h^2 + 2\xi_0(s'_h + s_0) - \xi_0^2]\right) \\ &\int_{-\infty}^{\infty} d\eta_0 P_{h,n}(\eta_0, \xi_0, \xi_h) \exp\left\{\frac{i\eta_0}{2}(\xi_h - \xi_0) + 2in\Delta K(x - x')\right\} \end{aligned} \quad (2.15)$$

находим, что плоскотоволновые гармоники $P_{h,n}(\eta_0, \xi_0, \xi_h)$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} P_{h,n}(\eta_0, \xi_0, \xi_h) &= \exp\{-in\Delta K(z - z')\} \\ &\{D_{-\nu_n}(iY_n(0))D_{-\nu_n-1}(-Y_n) - D_{-\nu_n}(iY_n)D_{-\nu_n-1}(-Y_n(0))\}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где

$$Y_n(0) = \sqrt{i/B}(\eta_0 + n\Delta K), Y_n = \sqrt{i/B}(\eta + n\Delta K)$$

В (2.16) параметр η ,

$$\eta = \eta_0 + 2Bz, \quad (2.17)$$

является линейной функцией координаты z и определяет отклонение отражающих плоскостей по мере проникновения блоховской волны вглубь кристалла. При этом обращение в нуль аргумента функций Вебера $D_{-\nu_n}$, в (2.16)

$$\eta(Z_n) + n\Delta K = 0 \quad (2.18)$$

физически отвечает прохождению блоховской волны через точку поворота Z_n (точку локального выполнения условий Брэгга для n -го сателлита).

По мере проникновения волны вглубь кристалла, когда для изменения параметра отклонения отражающих плоскостей выполняется соотношение

$$\Delta\eta(z) = 2Bz > \Delta K$$

блоховская волна может проходить через одну или несколько точек поворота, причем в обратном пространстве этому процессу отвечает движение точки возбуждения с учетом переходов с одной на другую ветвь многолистной дисперсионной поверхности (внутри- и межветвевое рассеяние блоховской волны). Пусть теперь в кристалле распространяется блоховская волна с начальным отклонением η_0 , лежащим в интервале значений

$$-2\Delta K < \Delta\eta(z) < \Delta K. \quad (2.19)$$

Из граничных условий на входной поверхности и условия (2.19) следует, что в нашем случае практически возбуждена лишь ветвь дисперсионной поверхности с асимптотой, перпендикулярной радиусу \mathbf{k}_0 (Рисунок 2.2).

Из Рисунка 2.2 видно, что по мере распространения волны вглубь кристалла точка возбуждения будет последовательно проходить через точки поворота $Z_1, Z_0, Z_{-1}, Z_{-2} \dots Z_n$, положение которых определяется выражением

$$Z_n = -(n\Delta K + \eta_0)/2B \quad (2.20)$$

Так, вблизи первой точки поворота Z_1 возбуждается сателлит, отвечающий пересечению двух прямых, перпендикулярных радиусам \mathbf{k}_0 , $\mathbf{k}_h + \mathbf{K}_s$ (рис. 2.2), и компонентам $P_{0,0}(Y_1)P_{h,1}(Y_1)$, квазиплоской блоховской волны. В соответствии с (2.8) эти компоненты имеют следующий вид:

$$P_{0,0}(Y_1) = \exp\{-i\Delta K(z)\} \{N_1 D_{-\nu_1-1}(-iY_1) + M_1 D_{-\nu_1}(-iY_1)\}, \quad (2.21)$$

$$P_{h,1}(Y_1) = \exp\{-i\Delta K(z)\} \left[2 \frac{\sqrt{iB}}{|J_1(\mathbf{hw})|} \right] \{ \nu_1 M_1 D_{-\nu_1-1}(-Y_1) - i N_1 D_{\nu_1}(-iY_1) \}.$$

Далее, вблизи точки поворота Z_0 возбуждаются два сателлита, отвечающие пересечению попарно двух прямых, перпендикулярных соответственно радиусам \mathbf{k}_0 , \mathbf{k}_h и $\mathbf{k}_0 + \mathbf{K}_s$, $\mathbf{k}_h + \mathbf{K}_s$ (Рисунок 2.2). Отвечающие им рентгеновские волны описываются следующими выражениями:

$$P_{0,0}(Y_0) = \exp\{-i\Delta K(z)\} \{N_0^{(1)} D_{-\nu_0-1}(-iY_0) + M_0^{(1)} D_{-\nu_0}(-Y_0)\}, \quad (2.22)$$

$$P_{h,0}(Y_0) = \exp\{-i\Delta K(z)\} \left[2 \frac{\sqrt{iB}}{|J_0(\mathbf{hw})|} \right] \{ \nu_0 M_0^{(1)} D_{-\nu_0-1}(-Y_0) - i N_0^{(1)} D_{\nu_0}(-iY_0) \},$$

$$P_{0,1}(Y_0) = \exp\{-2i\Delta K(z)\} \{N_0^{(2)} D_{-\nu_0-1}(-iY_0) + M_0^{(2)} D_{-\nu_0}(-Y_0)\}, \quad (2.23)$$

$$P_{h,1}(Y_0) = \exp\{-2i\Delta K(z)\} \left[2 \frac{\sqrt{iB}}{|J_0(\mathbf{hw})|} \right] \{ \nu_0 M_0^{(2)} D_{-\nu_0-1}(-Y_0) - i N_0^{(2)} D_{\nu_0}(-iY_0) \}.$$

В (2.22)-(2.23) переменные Y_0, Y_1 равны

$$Y_0 = 2\sqrt{iB}(z - Z_0), Y_1 = 2\sqrt{iB}(z - Z_1).$$

Коэффициенты M_l, N_l для точек возбуждения с $\eta_0 + n\Delta K \sim 0$ (вблизи n -го

рефлекса) определяются из граничных условий на входной поверхности при $z = 0$

$$N_1 = D_{-\nu_1}(-iY_1(0)), M_1 = D_{-\nu_1-1}(-iY_1(0)), \quad (2.25)$$

а коэффициенты $N_0^{(2)}, M_0^{(2)}, N_0^{(1)}, M_0^{(1)}$ определяются из условий сшивки решений (2.16)—(2.23) при $z = z_*$, $Z_1 < z_* < Z_0$. Выберем для простоты точку сшивки решений z_* следующей:

$$z_* = (Z_0 + Z_1)/2 \quad (2.26)$$

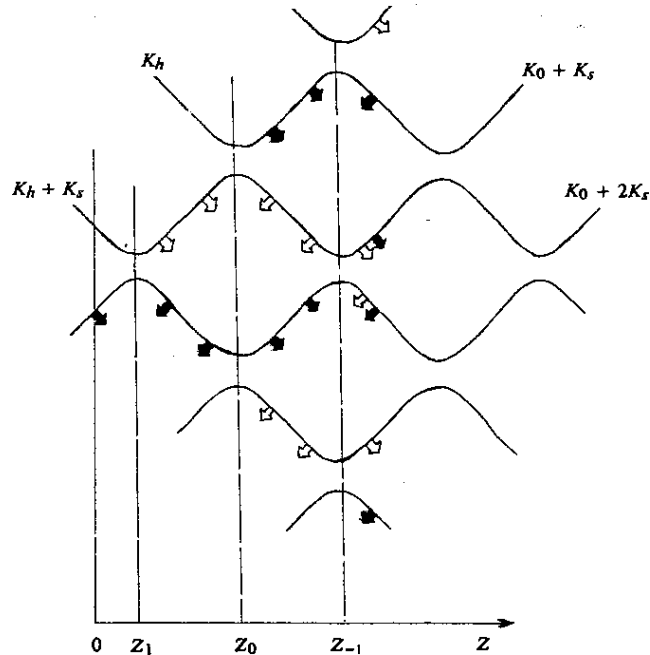


Рисунок 2.2. Внутри- и межветвевое рассеяние блоховской волны при прохождении через три точки поворота

Предполагая выполненным неравенство $\sqrt{B} \ll \Delta K/2$ и используя стандартные асимптотики функций Вебера, после непосредственных вычислений находим

$$M_0^{(1)} = [M_1 r_1 + N_1 t_1 \exp(i\varphi_1)] \exp[-iB(Z_1^2 - Z_0^2)] |Y_*|^{\nu_0 - \nu_1}$$

$$N_0^{(1)} = [N_1 r_1 + M_1 t_1 \exp(i\varphi_1)] \exp[iB(Z_1^2 - Z_0^2)] |Y_*|^{-\nu_0 + \nu_1}, \quad (2.27)$$

здесь r_1 — амплитуда межветвевоего рассеяния, t_1, φ_1 — модуль и фаза амплитуды внутриветвевоего рассеяния, определяемые известными выражениями

$$r_1 = \exp(-\pi|\nu_1|), t_1^2 = 1 - r_1^2,$$

$$\varphi_1 = \text{Im} \{ \ln \Gamma(1 + i|\nu_1|) \} + |\nu_1|(1 - \ln|\nu_1|) + \pi/4. \quad (2.28)$$

Как это следует из (2.27), (2.28), коэффициенты $M_0^{(1)}, N_0^{(2)}$, зависят от положения точки сшивки z_* , что является следствием упрощенного описания процесса распространения волн между точками поворота Z_0, Z_1 . Более корректное рассмотрение показывает, что входящий в (2.27), (2.28) множитель

$$\exp[-iB(Z_1^2 - Z_0^2) + i(|\nu_0| - |\nu_1|) \ln|Y_*|] \quad (2.29)$$

необходимо заменить на

$$W_{1,0} = \exp \left[-i \int_{Z_1}^{Z_0} dz K_{1,0}(z) + \nu_0 \ln(2\sqrt{|\nu_0|}) - \nu_0 \ln(2\sqrt{|\nu_0|}) \right], \quad (2.30)$$

где $K_{1,0}(z)$ - квазиимпульс блоховской волны, вычисленный в четырехволновом приближении (см. [63]),

$$K_{1,0}(z) = -\Delta K + \left\{ [\Delta K - \sqrt{\eta^2 + (J_0(\mathbf{hw}))^2}] + [J_1(\mathbf{hw})]^2 \right\}^{1/2}. \quad (2.31)$$

Физически величина $W_{1,0}$ представляет собой с точностью до постоянного коэффициента набег фазы блоховской рентгеновской волны, распространяющейся в кристалле между точками поворота Z_0, Z_1 . Нетрудно показать, что угловая ширина n -го сателлита δ_n на кривой дифракционного отражения при ΔK

$> 2BT \gg | \chi_{h,n} |$ определяется выражением

$$\delta_n \approx \left[(BT)^2 + | \chi_{h,n} |^2 \right]^{1/2}. \quad (2.32)$$

Действительно, если использовать стандартную асимптотику функций Вебера ($|Y_n|, |Y_n(0)| \gg 1$), то в зависимости от значения параметра угловой отстройки η_0 асимптотическое выражение для $P_{h,n}(\eta_0, \xi_0, \xi_h)$ принимает следующий вид:

1) при $\eta_0 < -2BT$ и при $\eta_0 > 0$

$$P_{h,n}(\eta_0, \xi_0, \xi_h) = (2\pi)^{-1} \sqrt{|v_n|} \{ |Y_n(0)|^{v_n} |Y_n|^{-v_n-1} \exp[i(|Y_n(0)|^2 - |Y_n|^2)/4] + |Y_n|^{v_n} |Y_n(0)|^{-v_n-1} \exp(i(|Y_n|^2 - |Y_n(0)|^2)/4) \} \quad (2.33)$$

2) при $0 > \eta_0 > -2BT$

$$P_{h,n}(\eta_0, \xi_0, \xi_h) =$$

$$(2\pi)^{-1} \left\{ r_n \sqrt{|v_n|} |Y_n|^{v_n} |Y_n(0)|^{-v_n-1} \exp\left(\frac{i(|Y_n|^2 - |Y_n(0)|^2)}{4}\right) - t_n \exp(i\pi/4) |Y_n(0)Y_n|^{v_n} \exp[i(|Y_n(0)|^2 + |Y_n|^2)/4] \right\}. \quad (2.34)$$

Видно, что в угловых областях $0 < \eta_0$ (справа) и $\eta_0 < -2BT$ (слева от максимума n -го спутника) интенсивность дифракции $|P_{h,n}|^2$ спадает пропорционально $|Y_n(0)|^{-2}$ и $|Y_n|^{-2}$ соответственно. В то время как в угловой области $0 > \eta_0 > -2BT$ (центральная часть пика) интенсивность $|P_{h,n}|^2$ не зависит от η_0 и пропорциональна t_n^2 . Следовательно, для угловой ширины спутника справедлива оценка (2.32).

Рассмотрим случай, когда для падающей волны на входной поверхности $z = 0$ выполняется неравенство

$$|Y_n(0)| = \sqrt{1/B}(\eta_0 + n\Delta K) \gg 1,$$

тогда коэффициент N_1 , входящий в (2.25), мал по сравнению с M_1

$$|N_1|/|M_1| \sim |Y_1(0)|^{-1} \ll 1. \quad (2.35)$$

Далее формулы (2.33), (2.34) значительно упрощаются при условиях

$$\frac{|N_1|t_1}{|M_1|r_1} \ll 1, |N_1|r_1/|M_1|t_1 \ll 1,$$

которые одновременно выполняются, если

$$B_1 < B < B_2, \quad (2.36)$$

где характерные значения постоянного градиента деформации равны

$$B_1 = \frac{\Delta K}{2T}, B_2 = \frac{\Delta K}{\sqrt{2\pi}}. \quad (2.37)$$

Например, для возможных в эксперименте значений $\Delta K=10$, $T = 10$ получаем $B_1 \sim 1/3$, $B_2 \sim 4$.

С учетом (2.35), (2.36) формулы (2.27) принимают вид

$$M_0^{(1)} = M_1 r_1 W_{1,0}, N_0^{(2)} = M_1 t_1 (\exp(-i\varphi_1) W_{1,0})^{-1}. \quad (2.38)$$

При больших толщинах кристалла z таких что

$$2Bz > 2\Delta K, \quad (2.39)$$

рентгеновская блоховская волна проходит еще одну (третью) точку поворота Z_{-1} (см. Рисунок 2.2). Вблизи точки поворота Z_{-1} возбуждаются три сателлита, отвечающие на дисперсионной поверхности по парному пересечению прямых перпендикулярных радиусам \mathbf{k}_0 и $\mathbf{k}_h - \mathbf{K}_s$, $\mathbf{k}_0 + \mathbf{K}_s$ и $\mathbf{k}_h + \mathbf{K}_s$, $\mathbf{k}_0 + 2\mathbf{K}_s$ и $\mathbf{k}_h + \mathbf{K}_s$.

Применяя ту же процедуру, которая была использована раньше, и, опуская промежуточные вычисления, находим, что вблизи точки поворота Z_{-1} соответствующие коэффициенты в двухволновом разложении (2.27) равны

$$M_{-1}^{(1)} = M_1 r_1 W_{1,0} r_0 W_{0,-1}, N_{-1}^{(2)} = M_1 r_1 t_0 \exp(-i\varphi_0) W_{1,0} (W_{0,-1})^{-1}, \quad (2.40)$$

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

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

$$N_{-1}^{(1)}, M_{-1}^{(3)} \sim 1/\Delta K \ll 1.$$

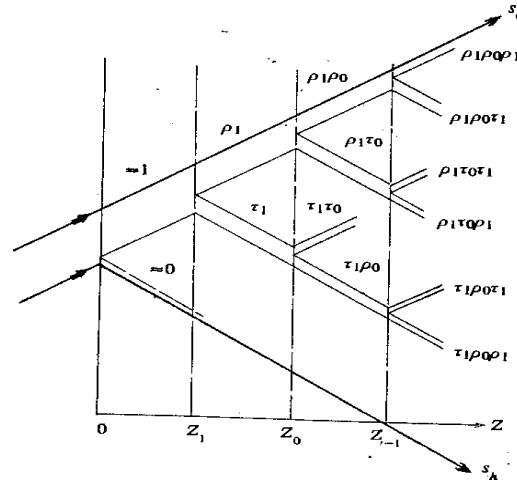


Рисунок 2.3. Картина распространения и относительные интенсивности блоховских волн, претерпевших внутри- и межветвевое рассеяние в колеблющемся деформированном кристалле.

Таким образом, можно сказать, что в общем случае на выходе из кристалла с такой толщиной T , что

$$n\Delta K < 2BT < (n + 1)\Delta K ,$$

падающая на кристалл квазиплоская волна трансформируется в суперпозицию $n + 1$ блоховских волн, вероятность возбуждения которых является произведением вероятностей внутри- и межветвевое рассеяния в результате последовательного прохождения $n + 1$ точек поворота.

В качестве иллюстрации на Рисунке 2.3 приведены траектории блоховских волн в деформированном колеблющемся кристалле (так называемое “дерево распространения волн”) при падении плоской волны. На каждой ветви “дерева распространения волн” показаны вероятности возбуждения. На входной поверхности кристалла возбуждена с вероятностью ≈ 1 только проходящая

волна. Распространяясь внутри кристалла, волна последовательно проходит через одну, две и три точки поворота, отвечающих дифракции рентгеновских лучей с испусканием, а также с поглощением одного или нескольких фононов.

Эффект аномальной зависимости интегральной интенсивности дифракции

Как известно, I_h^{int} можно представить в виде интеграла от квадрата модуля функции Грина по входной поверхности кристалла $z = 0$:

$$I_h^{int} = \alpha \int_{-1}^1 |G_h(x, T; x - \mu T \tan \theta, 0)|^2 d\mu, \quad (2.41)$$

где T — толщина кристалла, $\alpha = C|\chi_h|/2 \sin \theta$.

Формула (2.41) наряду с процедурой формирования “дерева распространения волн”, описанной в предыдущем разделе, позволяет провести расчет I_h^{int} в зависимости от двух параметров hw и B .

Случай $2BT < DK$. Одна точка поворота.

Подставляя выражение для функции Грина G_h (2.21) в (2.41), I_h^{int} можно записать в виде

$$I_h^{int} = \widetilde{I}_h^{int} + \Delta I_h^{int}, \quad (2.42)$$

где \widetilde{I}_h^{int} есть сумма интенсивностей дифракции, отвечающих отдельным сателлитам:

$$\widetilde{I}_h^{int} = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(hw) \int_{-1}^1 d\mu |{}_1F_1(-v_n, 1, -iBT^2(1 - \mu^2))|^2, \quad (2.43)$$

а ΔI_h^{int} - слагаемое, описывающее интерференцию волновых полей, отвечающих отдельным сателлитам:

$$\Delta I_h^{int} = \alpha \sum_{n'=-\infty}^{\infty} J_{n'}(hw) \sum_{\substack{n=-\infty, \\ n \neq n'}}^{\infty} J_n(hw) \int_{-1}^1 d\mu \exp[i(n - n')\Delta KT(1 + \mu)/2]$$

$${}_1F_1(-v_{n'}, 1, -iBT^2(1 - \mu^2)) {}_1F_1^*(-v_n, 1, -iBT^2(1 - \mu^2)). \quad (2.44)$$

Из (2.44) видно, что ΔI_h^{int} содержит быстро осциллирующий множитель $\exp(i(n - n')\Delta KT\mu/2)$ в области интегрирования $-1 \leq \mu \leq 1$. В результате, ΔI_h^{int} отличие от

I_h^{int} содержит малый параметр порядка $\sim(\Delta KT)^{-1} \ll 1$. Таким образом, с точностью до членов $\sim(\Delta KT)^{-1} \ll 1$, I_h^{int} представляет собой сумму интенсивностей дифракции, отвечающих отдельным сателлитам \widetilde{I}_h^{int} .

Рассмотрим для простоты случай непоглощающего кристалла. Используя квазиклассические асимптотики функции Грина $G_{h,n}$ (см. [66]), находим следующее выражение для “парциальной” интенсивности дифракции \widetilde{I}_h^{int}

$$\widetilde{I}_h^{int} = \alpha t_n^2 \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\sqrt{1-\mu^2}} \frac{J_n^2(\mathbf{hw}) + 2D^2(1-\mu^2)}{\sqrt{J_n^2(\mathbf{hw}) + D^2(1-\mu^2)}}, \quad (2.45)$$

где $D = BT$. Физический смысл выражения (2.45) заключается в том, что каждому n -ому сателлиту отвечают значения экстинкционной длины $\Lambda_n = \Lambda/|J_n(\mathbf{hw})|$, толщины кристалла $T_n = T|J_n(\mathbf{hw})|$ и градиента деформации $B_n = B/|J_n(\mathbf{hw})|^2$.

В пределе $B_n T_n \ll 1$ формула (2.45) переходит в соответствующее выражение $I_{h,n}^{dyn}$ для идеального колеблющегося кристалла (динамический предел)

$$I_{h,n}^{dyn} = \pi\alpha |J_n(\mathbf{hw})|. \quad (2.46)$$

В обратном предельном случае $B_n T_n \gg 1$ из (2.46) получаем

$$\widetilde{I}_{h,n}^{int B} \approx 4D\alpha t_n^2. \quad (2.47)$$

Если, кроме того, коэффициент внутриветвевое рассеяния мал, $t_n^2 \ll 1$, формула (2.46) переходит в кинематический предельный случай

$$I_{h,n}^{kin} = 2\pi T\alpha |J_n(\mathbf{hw})|^2. \quad (2.48)$$

В общем случае для расчета “парциального” интегрального коэффициента дифракции $\widetilde{I}_{h,n}^{int}$ по формуле (2.45) было применено численное интегрирование по методу Гаусса Чебышева (см. [66]). Кроме того, приведенные ниже результаты расчетов по формулам (2.45) усреднялись по периоду колебаний стоячей волны

ультразвука.

На Рисунке 2.4 показаны зависимости \widetilde{I}_h^{int} от амплитуды ультразвуковой волны при $B = 0$; 0,01; 0,02; 0,03 (кривые с номерами 1—4 соответственно) для кристалла толщиной $z = 12,8$, рассчитанные по формулам (50) с учетом $n = (-5,5)$ сателлитов. Несмотря на то, что интенсивности дифракции на каждом сателлите $\widetilde{I}_{h,n}^{int}$ сильно меняются в зависимости от величины амплитуды ультразвуковой волны, суммарная интенсивность I_h^{int} монотонно возрастает с увеличением амплитуды, стремясь к кинематическому пределу.

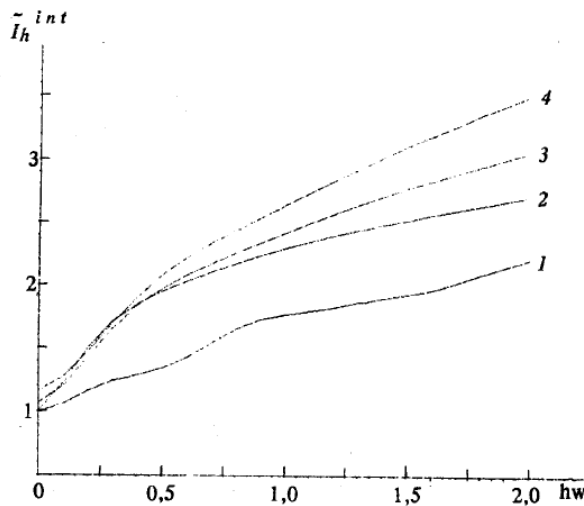


Рисунок 2.4. Зависимость \widetilde{I}_h^{int} от амплитуды ультразвуковой волны hw , при $z = 12,8$, $B = 0$ (кривая 1), 0,01 (2), 0,02 (3), 0,03 (4)

Сделаем следующее важное замечание, поясняющее физический смысл формулы (2.45). Как видно из (2.47), $\widetilde{I}_{h,n}^{int}$ представляет собой произведение параметра деформации, равного изменению углового отклонения отражающих плоскостей $\delta\eta = 2BT$ ($B > 0$) на полную толщину кристалла, на вероятность внутриветвевое рассеяния $\tau_n = t_n^2$ квазиплоской блоховской волны. Это означает, что основной вклад в дифракционное рассеяние, отвечающее n -ому сателлиту, дают точки возбуждения, которые в процессе движения переходят

вдоль ветви дисперсионной поверхности с асимптотой, перпендикулярной \mathbf{k}_g , на соответствующую часть дисперсионной поверхности с асимптотой, перпендикулярной $\mathbf{h} + n\mathbf{K}_s$.

Случай 2 $\Delta K < 2BT < 3\Delta K$. Три точки поворота

На основании формул (2.30), (2.33) можно вывести выражения, аналогичные (2.45), для случая $\Delta K < 2BT < 2\Delta K$, когда блоховская волна проходит через две точки поворота.

Однако особый интерес представляет случай, когда блоховская волна проходит не менее чем через три точки поворота. В случае, когда блоховская волна проходит через три точки поворота $2\Delta K < 2BT < 3\Delta K$ (см. Рисунок 2.5), вместо формулы (2.45) для $\widetilde{I}_{h,n}^{int}$ имеем

$$\widetilde{I}_{h,n}^{int} = 2\alpha \left[\Delta\eta_4 (\rho_n \rho_{n+1} \tau_{n+2} + \tau_n \tau_{n+1} \tau_{n+2} + \rho_n \tau_{n+1} \rho_{n+2} + \tau_n \rho_{n+1} \rho_{n+2}) + \Delta\eta_3 (\rho_{n+1} \tau_n + \rho_n \tau_{n+1}) \right], \quad (2.49)$$

где $\Delta\eta_4 = 2BT - \Delta K$, $\Delta\eta_3 = 3\Delta K - 2BT$.

Отметим, что при $\mathbf{hw}=0$ формула (2.49) переходит в соответствующее выражение для кристалла с ПГД, а в пределе больших деформаций, когда $|\mathbf{hw}| \gg 1$ или $|B| \gg 1$ (но $2BT < \Delta K$) получающийся интегральный коэффициент интенсивности дифракции совпадает с кинематическим значением.

Обобщая сказанное выше, для случая прохождения блоховской волны последовательно через m точек поворота выражение для I_h^{int} можно записать в виде

$$\widetilde{I}_h^{int} = 2\alpha \sum_{m=-\infty}^{\infty} [\Delta\eta_m \sum_{j=1,3,5\dots} L_{jm} + \Delta\eta_{m+1} \sum_{j=1,3,5\dots} Q_{jm}]. \quad (2.50)$$

Здесь

$$\Delta\eta_m = 2BT - (m - 1)\Delta K, \Delta\eta_{m1} = m\Delta K - 2BT,$$

и введены коэффициенты

$$L_{jm} = \sum_P f_n f_{n+1} f_{n+2} \dots f_{n+m-1}, Q_{jm} = \sum_P f_n f_{n+1} f_{n+2} \dots f_{n+m-2},$$

где суммирование ведется по нечетным j вплоть до фиксированного m . При вычислении L_{jm}, Q_{jm} f_n в произведении выбираются всеми возможными перестановками из ряда, в котором j элементов τ и $m - j$ элементов ρ . При этом каждый член в (2.50) физически представляет собой вероятность рождения блоховской волны, претерпевшей j раз внутри- и $m - j$ раз межветвевое рассеяние. Например, коэффициенту L_{14} отвечает сумма четырех членов:

$$L_{14} = \tau_n \rho_{n+1} \rho_{n+2} \rho_{n+3} + \rho_n \tau_{n+1} \rho_{n+2} \rho_{n+3} + \rho_n \rho_{n+1} \tau_{n+2} \rho_{n+3} + \rho_n \rho_{n+1} \rho_{n+2} \tau_{n+3}$$

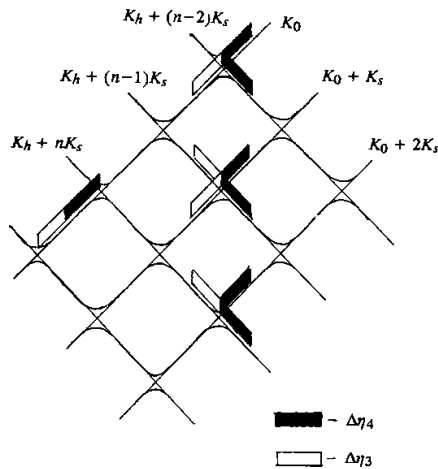


Рисунок 2.5. Распространение блоховских волн по дисперсионной поверхности. Точки возбуждения, прошедшие через три точки поворота, показаны черным цветом, через две точки поворота — белым

Сравнение теории с экспериментом

Для сравнения теории с экспериментом воспользуемся результатами измерения кривых зависимости от напряжения V на пьезопреобразователе, проведенных в Институте физики Латвийской Академии наук (см. Рисунок 2.6, а

также Рисунок 4 из [65]).

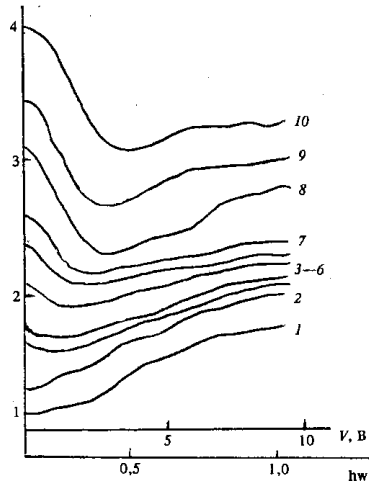


Рисунок 2.6. Экспериментальные кривые зависимости I_h^{int} от амплитуды ультразвуковой волны hw ; $T = 360$ мкм, $\Lambda = 88,8$ мкм, рефлекс 660, Si, MoK_α . Значения характерных параметров кривых приведены в таблице

Исследовалась дифракция рентгеновского $Mo K_\alpha$ -излучения на колеблющемся кристалле Si (толщина $t = 360$ мкм, отражение (660), длина экстинкции $\Lambda = 88,8$ мкм, третья гармоника стоячей ультразвуковой волны с $\lambda_s = 2t/3 \sim 240$ мкм). Видно, что в деформированных кристаллах на начальных участках зависимостей $I_h^{int}(V)$ наблюдается заметное уменьшение интенсивности, достигающее максимальной величины порядка 30% (эффект аномальной зависимости $I_h^{int}(V)$).

Для количественного сравнения экспериментальных данных с результатами расчетов необходимо, исходя из экспериментальной кривой зависимости $I_h^{int}(V)$ провести калибровку подаваемого на пьезопреобразователь напряжения V по величине амплитуды ультразвуковой волны hw , и определить величину постоянного градиента деформации B . Определим величину B , исходя из вида экспериментальной кривой $I_h^{int}(hw = 0; B)$ с помощью вытекающей из (2.50)

зависимости ($\pi/2 > B > 1/2T$)

$$\frac{[I_h^{int}(0,B) - I_h^{int}(0,0)]}{I_h^{int}(0,0)} = \frac{4BT}{\pi} + \dots \quad (2.51)$$

В таблице приведены рассчитанные по формуле (2.49) значения постоянного градиента деформации для кривых на Рисунке 2.6. В последней колонке дано число точек поворота N , пройденных точками возбуждениями:

$$N = [4BT/\Delta K],$$

где $[x]$ — обозначает целую часть числа x .

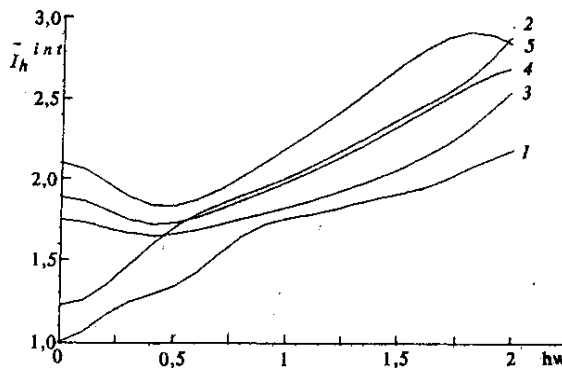


Рисунок 2.7. Расчетные зависимости $I_h^{int}(\mathbf{hw}, V)$ при многократном прохождении волны через точки поворота. Значения характерных параметров кривых приведены в таблице

На Рисунке 2.7 представлены результаты соответствующих расчетов зависимости I_h^{int} от \mathbf{hw} ($n = -5, \dots, 5$) применительно к экспериментальным данным [65]: $\Delta K = 1,1$, $T = 12,8$. Расчетные кривые усреднялись по периоду колебаний ультразвуковой волны.

Для того чтобы построить калибровочную зависимость между напряжением V и амплитудой волны \mathbf{hw} , аппроксимируем кривую 1 ($B = 0$) на Рисунке 2.7 линейной функцией по методу наименьших квадратов. В результате, определяемый таким образом коэффициент связи между амплитудой ультразвуковой волны \mathbf{hw} и напряжением V приблизительно равен 8,1 В. Анализ

показывает (см. таблицу 2.1), что в случае, когда блоховские волны проходят одну или две точки поворота, I_h^{int} монотонно возрастает (см. на Рисунке 2.7, кривые 1, 2). Если блоховские волны проходят через три точки поворота, на кривой зависимости I_h^{int} от hw появляется локальный минимум, достигающий величины 12%.

Таблица 2.1. Параметры экспериментальных кривых.

Номер кривой	$I_h^{int}(0, B)$	Градиент деформации,	Число	
	$I_h^{int}(0,0)$		точек	пово-
1	1	0	—	
2	1,2	0,07	2	
3	1,77	0,108	3	
4	1,89	0,12	3	
5	2,14	0,13	3	
6	2,34	0,148	3	
7	2,56	0,15	3	
8 *	3,1	0,189	4	
9	3,43	0,21	4	
10	4,0	0,244	5	

Причем его положение и величина с точностью $\pm 5\%$ совпадают с соответствующими экспериментальными значениями (кривые 3—5 на Рисунке 2.6- 2.7).

Для расчета интегрального коэффициента дифракции при прохождении волн через четыре и больше точек поворота следует использовать формулу (2.49). Расчеты показывают, что глубина провала на кривой зависимости I_h^{int} от амплитуды ультразвуковой волны при фиксированных B сначала увеличивается с ростом параметра B , определяющего число пройденных точек поворота, а затем, начиная с некоторых значений B , происходит сглаживание кривой $I_h^{int}(hw)$, переходящей в $I_{h,kin}^{int}$.

Дадим качественное объяснение этому результату на основании простой

модели, предложенной в [60]. Как показывают результаты численных расчетов, минимум на кривой зависимости I_h^{int} образуется при малых значениях амплитуды волны ($hw \sim 0,4$) и малых значениях градиента деформации $B \ll \pi/2$, когда рассеяние блоховских волн в угловой области основного рефлекса носит внутриветвевой характер ($\rho_0 \rightarrow 0$), а вероятности межветвевое рассеяния в области n -го сателлита принимают вид

$$\rho_n = \exp \left[-\pi \left(\frac{hw}{2} \right)^{2n} / 2B \right], n > 1.$$

В этих условиях рассеяние в области сателлитов высоких порядков ($n > 2$) носит преимущественно межветвевой характер ($\tau_n \rightarrow 0$), так что их влиянием можно пренебречь:

$$\widetilde{I}_h^{int} = 2\alpha[2\Delta K - 2(BT - \Delta K)(1 - 2\rho_1 + 2\rho_1^2)]. \quad (2.52)$$

Легко показать [60], что в этом приближении положение точки минимума hw_* определяется выражением

$$hw_* = [8B \ln(2/\pi)]^{1/2} \quad (2.53)$$

а отношение значения \widetilde{I}_h^{int} в точке минимума $\widetilde{I}_h^{int}(hw_*, B)$ к \widetilde{I}_h^{int} неколеблущегося кристалла $\widetilde{I}_h^{int}(0, B)$ имеет вид

$$\widetilde{I}_h^{int}(hw_*, B) / \widetilde{I}_h^{int}(0, B) = \frac{1}{2} + \Delta K / 2BT. \quad (2.54)$$

Из экспериментальных данных (см. Рисунок 2.7 и Таблицу 2.1) следует, что зависимость отношения $\widetilde{I}_{h,n}^{int}(hw_*, B) / \widetilde{I}_{h,n}^{int}(0, B)$ от $1/B$ можно аппроксимировать линейной функцией с точностью около 5%. Коэффициент линейной пропорциональности, вычисленный по методу наименьших квадратов, оказался

равным 0,052 , в то время как теория дает для него значение $\Delta K/2T = 0,043$.

При $B \gg \pi/2$ рассеяние блоховских волн в угловой области всех сателлитов носит межветвевой характер

$$\tau_n \approx \pi \left(\frac{\mathbf{hw}}{2} \right)^{2n} / 2B,$$

и общую формулу (2.49) можно записать в виде ряда по степеням $\pi/2B$, первый член которого совпадает с кинематическим пределом

$$\widetilde{I}_h^{int} = 4BT\alpha \left[\frac{\pi}{2B} - \left(\frac{\pi}{2B} \right)^2 \left[1 + 3(\mathbf{hw})^2 \frac{BT - \Delta K}{4BT} \right] + \dots \right]. \quad (2.55)$$

В области промежуточных значений B получить явное выражение для экстремума $\widetilde{I}_{h,n}^{int}$ как функции от ρ_1 , на основании выражения (2.49) не удастся. Таким образом, в данном приближении максимальное уменьшение интегрального коэффициента дифракции в колеблющемся деформированном кристалле достигает 30% при $\pi/2 \gg B \gg \Delta K/T$. Положение минимума \mathbf{hw}_* , при $\pi/2 \gg B$ описывается формулой (2.49), а при дальнейшем увеличении B и переходе к кинематическому режиму дифракции минимум исчезает вовсе. Отметим, что рассмотренная модель хорошо согласуется с экспериментальными результатами (см. Рисунки 2.6, 2.7).

Резюмируя, можно сказать, что эффект аномальной зависимости интегрального коэффициента дифракции от амплитуды ультразвуковой волны в деформированных кристаллах связан с многократным внутри- и меж-ветвевым рассеянием блоховских волн при прохождении трех и более точек поворота.

В заключении отметим, что качественно этот эффект был объяснен в [60], где предполагалось, что основной вклад в \widetilde{I}_h^{int} вносят три точки поворота, включая основной рефлекс. Согласно [60], \widetilde{I}_h^{int} определяется выражением

$$\widetilde{I}_h^{int} \propto 1 - 2\rho_1 + 2\rho_1^2. \quad (2.56)$$

Видно, что эта величина достигает минимального значения $1/2$ при hw_* , причем величина минимума не зависит, вообще говоря, от градиента деформации B . Однако, как показывает проведенное рассмотрение, количественное сопоставление расчетных и экспериментальных возможно только в рамках строгой теории дифракции рентгеновских волн в колеблющихся деформированных кристаллах.

2.2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ В КОЛЕБЛЮЩИХСЯ КРИСТАЛЛАХ, ПРИКЛЕЕННЫХ К КВАРЦЕВОМУ ПЬЕЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЮ

Большинство кристаллов являются непьезоэлектрическими и для возбуждения в них УЗ колебаний требуется разработать методики передачи возбуждений от пьезопреобразователя к кристаллу. В работе были исследованы деформации кристалла (стационарные отклонения в положении отражающих плоскостей), возникающие в результате приклеивания пьезопреобразователя.

Измерения были выполнены в двукристалльной Брэгг-Лауэ схеме (дифрактометр ВИП-2) с MoK_α излучением. Кристалл кремния, отражение (220), использовался как монохроматор в геометрии Брэгга. Кристалл-образец - кремниевая пластина, отражение (220), диаметром 59 мм и толщиной 1.04 мм. Одна поверхность кристалла была отполирована и прямоугольный кварцевый кристалл (8x13 мм) был приклеен к другой поверхности, прошедшей процедуру химической и механической полировки (Рисунок 2.8).

Пьезопреобразователь возбуждал поперечные УЗ колебания на первой гармонике ($f=36$ МГц). Ширина резонанса нагруженного (с приклеенным

кристаллом) пьезопреобразователя около 1-10 МГц, что оказалось достаточно для эффективной передачи УЗ волн от ПП к кристаллу.

Для оценки зависимости ИИД от градиента деформации, будем использовать выражение для пикового значения ИИД, выведенное выше, (2.51),

$$\frac{[I_h^{int}(0,B) - I_h^{int}(0,0)]}{I_h^{int}(0,0)} = \frac{4BT}{\pi} + \dots \quad (2.57)$$

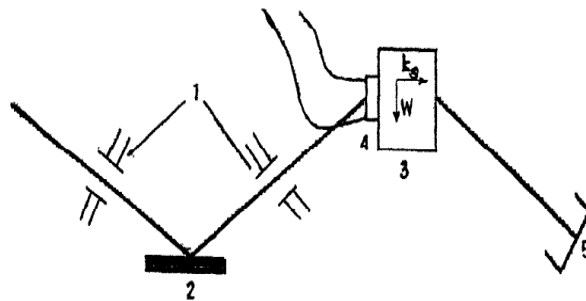


Рисунок 2.8. Схема эксперимента: (1) - система коллимирующих щелей, (2)- монохроматор, (3) – кристалл-образец, (4) пьезопреобразователь, (5) - детектор.

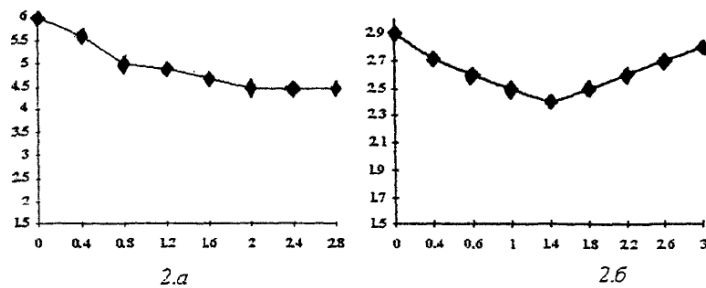


Рисунок 2.9. Пиковая интенсивность дифракции как функция от напряжения, подаваемого на преобразователь при малых деформациях (а) и при больших деформациях (б) (отн. ед.).

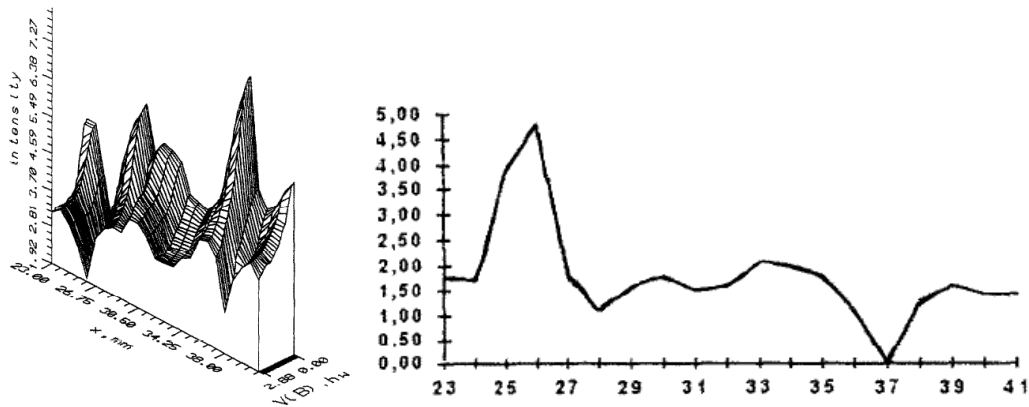


Рисунок 2.10. а) Интенсивность дифракции как функция от координаты вдоль поверхности кристалла (x) и напряжения, б) Зависимость градиента деформации от координаты вдоль поверхности.

Набор кривых качания в зависимости от координаты был получен сканированием первичного пучка вдоль вектора дифракции (ось x): от точки $x=23$ до точки $x=41$ падающий пучок прошел последовательно через области, где ПП был приклеен, к области без клея. Края ПП были расположены в точках с координатами $x=25$ и $x=38$ мм.

Рисунок 2.9 показывает зависимость пиковой интенсивности дифракции от напряжения, подаваемого на ПП, в двух точках: $x=41$ мм (Рисунок 2.9 а – минимум деформаций), и $x=25$ мм (Рисунок 2.9б – максимум деформаций). Как видно из Рисунка 2.9а – провал на кривой ИИД еще не достигнут, а на Рисунке 2.9б – эффект аномального уменьшения ИИД уже проявился. Значение амплитуды УЗ, при котором минимум наблюдается, совпадает в пределах ошибки измерений с B , вычисленным по формуле (2.58) в результате калибровки.

В общем случае деформационное поле в кристалле не является однородным. На Рисунке 2.7а представлена зависимость интенсивности пиковой дифракции от приложенного напряжение (или амплитуды ультразвука) и положения относительно поверхности кристалла, по которым можно реконструировать профиль деформации (см. Рисунок 2.7б).

Топограмма кремниевого кристалла с приклеенным преобразователем представлена на Рисунке 2.10. Видно, что левая часть картины более яркая, чем правая, что может быть объяснено отклонением части отклоняющих плоскостей от точного условия Брэгга из-за широкомасштабных деформаций.



Рисунок 2.10. Топограмма кремниевого кристалла с приклеенным преобразователем.

Хорошо известно, что с увеличением амплитуды ультразвуковых колебаний, интегральная интенсивность дифракции (ИИД), I_h^{int} , плавно увеличивается от

динамического предельного значения к кинематическому [68-72]. В тоже время эксперименты [72-73] показали, что зависимость ИИД от амплитуды ультразвука в колеблющемся изогнутом кристалле является аномальной. В частности в случае кристалла с постоянным градиентом деформации B , зависимость ИИД имеет минимум при определенном значении амплитуды УЗ, определяемый формулой

$$\widetilde{I}_h^{int} = 2\alpha[2\Delta K - 2(BT - \Delta K)(1 - 2\rho_1 + 2\rho_1^2)]. \quad (2.58)$$

При этом, несмотря на то, что для создания деформаций было использовано калиброванное изгибное устройство, приклеивание вносит свой вклад в деформационное поле. Особенности зависимости ИИД от амплитуды УЗ могут использоваться для калибровки возбуждаемых ультразвуковых колебаний и исследования деформации с постоянным градиентом (ДПГ).

В частности выше (см. [74]) было выведено следующее выражение для оценки зависимости ИИД от градиента деформации (2.57) и пикового значения интенсивности дифракции

$$I_h^{\max}(B) = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{2B}\right). \quad (2.59)$$

В [75] было предложено использовать зависимость точки минимума на кривой интегральной (или пиковой) интенсивности от амплитуды УЗ (2.58,2.59) для калибровки амплитуды УЗ (2.53)

$$hw_* = [8B \ln(2/\pi)]^{1/2}. \quad (2.60)$$

Измеренные деформации – экстремально велики, градиент деформации B меняется по величине в несколько раз. Характеристическая длина, на которой деформации меняется вдоль поверхности кристалла, составляет 2-3 мм.

Принимая во внимание большое значение деформации, можно сделать правдоподобное предположение, что поле деформаций изменяется вдоль нормали к поверхности на характерной длине в несколько микрон. Характерная длина изменения поля по глубине намного меньше, чем аналогичная длина изменения поля вдоль поверхности. Таким образом, деформации сконцентрированы в узкой области вблизи поверхности. Негативного влияния этих деформаций можно избежать при проведении рентгеновских измерений в геометрии Брэгга при отражении от поверхности кристалла противоположной к той, где приклеен пьезопреобразователь.

Предложенный метод измерения деформаций и калибровки амплитуды УЗ колебаний (напряжения на пьезопреобразователе) дает возможность протестировать процедуру приклеивания, используя стандартные рентгеновские методики.

ГЛАВА 3. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ МЕССБАУЭРОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Вскоре после открытия эффекта Мессбауэра дифракция на кристаллах с резонансными ядрами была детально изучена как в случае идеальных монокристаллов [77,78], так и поликристаллов [79]. Была продемонстрирована высокая когерентность мессбауэровского излучения (МИ), обнаружена интерференция между резонансным и электронным каналами рассеяния. Для наблюдения динамических дифракционных эффектов желательно использовать совершенные кристаллы, специально обогащенные резонансным изотопом. Например, при исследовании эффекта подавления неупругих каналов ядерных реакций были использованы обогащенные, почти совершенные кристаллы олова [80], железа [81], FeVO_3 [82] и гематита [83]. Однако, из-за исключительно малой ширины ядерных уровней (< 100 нэВ), количество резонансных фотонов даже в пучках СИ относительно невелико.

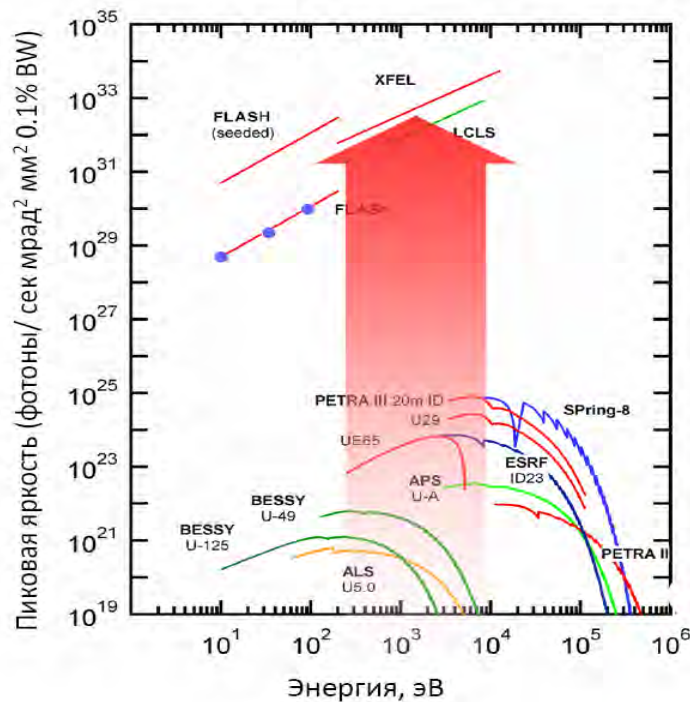


Рисунок 3.1. Яркость Европейского XFEL и действующих источников СИ.

В последнее время в связи с широким распространением источников синхротронного излучения (СИ) 3-го поколения и сверхярких рентгеновских лазеров на свободных электронах (РЛСЭ) возрос интерес к изучению «задержанных» во времени (относительное упруго рассеянной электронной компоненты) сигналов ядерного излучения. Благодаря тому, что короткие импульсы СИ (0.2 нс) разделены большими промежутками (1-2 мс), возникает уникальная возможность отделить «быстрый» (упругий) электронный отклик кристалла от «медленного» (резонансного) ядерного МИ.

Высокая пиковая яркость (см. Рисунок 3.1), Европейского РЛСЭ выше, чем у самых современных источников СИ третьего поколения в миллиарды раз.

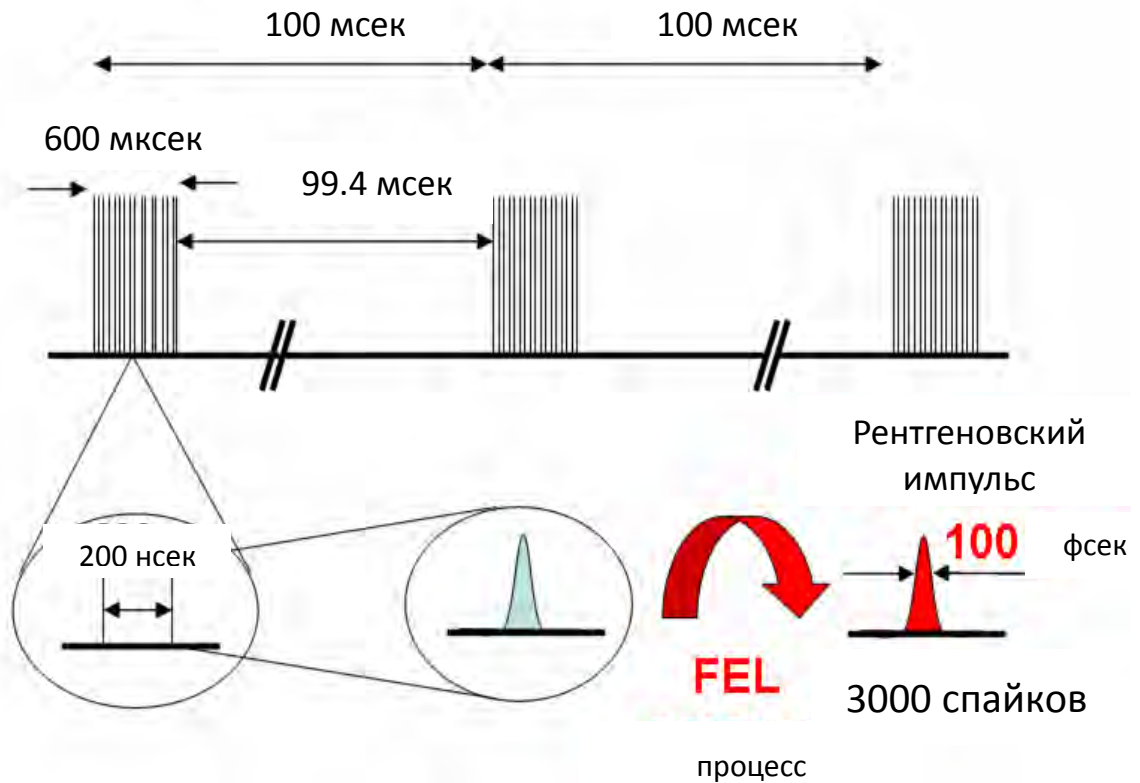


Рис. 3.2. Схематическое изображение временной структуры излучения РЛСЭ. Импульсная структура излучения Европейского РЛСЭ имеет три временных масштаба:

- «малые» импульсы (spike) продолжительностью около 100 фс,

- цуги волн, разделенные интервалами в 200 нс,
- «большой импульс» - 100 мс.

Временная структура излучения РЛСЭ открывает новые возможности для экспериментов с временным разрешением (с контролируемой задержкой сигналов «проба-накачка», pump-probe), «задержанным излучением», прямого ядерного рассеяния (NFS) и др. Причем недавно было показано, что при использовании системы кристаллов-монокроматоров («самозатравка», self seeding) внутри линии ондуляторов РЛСЭ спектральное разрешение можно значительно увеличить.

Однако поляризационные характеристики и высокая интенсивность даже таких «старых» источников СИ как Photon Factory (Япония) позволили провести уникальные эксперименты по изучению «чисто» ядерного рассеяния (железо-иттриевые гранаты [84], борат железа [85], гематит [86]) и интерференции электронного и ядерного рассеяния в гематите, [87]. В настоящий момент существует довольно обширная литература, посвященная теории и практике когерентного ядерного рассеяния [88-92].

В связи с исключительной малостью ширины ядерных уровней эксперименты с МИ требуют использования специальных кристаллов монокроматоров с высоким энергетическим разрешением (для уменьшения вклада электронного рассеяния) и специальной защитой от вибраций. Высокая чувствительность МИ к магнитной структуре и разного рода динамическим возбуждениям (фононы, магноны), структурным фазовым переходам, диффузии и релаксации возбуждений вкпе с высокой интенсивностью СИ и РЛСЭ открывают новые возможности для экспериментов по изучению диффузного рассеяния мессбауэровского излучения и делают актуальным построение соответствующей теории.

Вследствие высокой монохроматичности МИ длина когерентности l цуга элек-

тромагнитных волн, порожденного отдельным ядром при испускании кванта, определяется шириной уровня (временем жизни) возбужденного состояния

$$\tau = \Gamma^{-1}$$

и составляет в вакууме $l = c\tau = 30$ м (для источника Co^{57}). Это намного больше, чем длина продольной когерентности для рентгеновского излучения обычных источников ($\Gamma_X \ll 1$ эВ) с той же длиной волны $l_X = 0.3$ мкм.

Поэтому при изучении дифракции МИ мы можем считать, что все ограничения на длину (объем) когерентности связаны с дефектами кристаллической решетки образца, а не с характеристиками задержанного ядерного излучения. Для дальнейшего изложения важно, что при дифракционном рассеянии рентгеновского излучения (и МИ тоже) в кристалле с дефектами, как показал Н. Като, когерентный объем дифракционного поля существенно уменьшается.

Рассеяние в кристалле происходит на совокупности атомов, которые являются когерентным ансамблем, только если все ядра имеют одну и ту же амплитуду рассеяния и расположены строго периодически. Тогда когерентно рассеивающий объем равен объему всего кристалла или размеру освещенной когерентным излучением области. В реальном кристалле также можно выделить некоторый когерентно рассеивающий объем V_s , который может быть как больше, так и меньше, чем объем когерентности электромагнитного поля (V_c). В общем случае V_c определяется особенностями диэлектрической проницаемости среды, [93], хотя в условиях дифракции применение флуктуационно-диссипационной теоремы становится сложной задачей.

Согласно стандартному определению длина продольной когерентности волнового пакета с «несущей» длиной волны λ и спектральным разбросом $\Delta\lambda$ равна $L_c = \lambda^2 / \Delta\lambda$. Однако при дифракции по Брэггу ограничивающим параметром может стать глубина проникновения поля в кристалл: при падении излучения под

углом Брэгга она совпадает с длиной экстинкции Λ , а вдали от него - с длиной поглощения μ_a^{-1} и т.д.

Отметим, что диффузно и когерентно рассеянное излучения могут обладать несовпадающими параметрами когерентности. Область, в которой формируются так называемые диффузные волны, может быть весьма большой. Например, в случае теплового диффузного рассеяния (ТДР) существенный вклад дают акустические фононы с наибольшими для данного кристалла длинами волн. Из микроскопической теории известно, что фазовый переход может быть связан с нестабильностью некоторых оптических колебаний, частота возбуждения которых аномально уменьшается при приближении к температуре перехода ($\omega_0 = \alpha|T - T_c|^{1/2}$, [94]). В этом случае размер «когерентной» области фазовой «перестройки» растет пропорционально ω_0^{-1} .

Давно и активно ведутся исследования особенностей взаимодействия когерентно и диффузно рассеянного излучений при произвольных концентрациях и типах дефектов. Выяснилось, что при определенных условиях в методики рентгеноструктурного анализа приходится вносить поправки на диффузное рассеяние. Хотя динамические эффекты могут влиять и на диффузное рассеяние вдали от сильных когерентных рефлексов. Высокая когерентность МИ и модельный характер задачи (в случае дефектов изотопического замещения не возникают искажения решетки) позволяет по-новому подойти к задаче влияния дефектов на форму кривой качания и интегральной интенсивности.

Ниже представлена теория статистической дифракции МИ на кристалле гематита, которая позволяет последовательно учесть некогерентное «упругое» (т.е. происходящее без изменения частоты рассеянного излучения) рассеяние и его влияние на когерентную часть. Также приведен анализ «неупругих» каналов рассеяния (фононы, магноны, критические флуктуации), которые могут дать существенный вклад в интенсивность диффузного рассеяния.

3.1 ИСТОЧНИКИ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ, УЧЕТ СТАТИЧЕСКИХ И ДИНАМИЧЕСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

При дифракции МИ необходимо различать случаи упругого и неупругого некогерентного рассеяния. В случае упругого рассеяния рентгеновский квант рассеивается так, что его энергия не изменяется, и он может претерпеть резонансное рассеяние и участвовать в динамической дифракции еще раз. В случае неупругого рассеяния, например, на фонах квант приобретает дополнительную энергию ($\omega_0 \approx 10^{-3}$ эВ), что исключает для него динамическое резонансное рассеяние. В этом состоит коренное отличие рассмотрения некогерентной части дифракционного поля МИ от случая рентгеновских лучей [95].

Упругие некогерентные процессы.

Спиновая некогерентность. Ядро изотопа в основном состоянии обладает собственным моментом количества движения $\mathbf{J} = \hbar \mathbf{I}_g$, где \mathbf{I}_g - ядерный спин, магнитный момент равен $\boldsymbol{\mu} = g\mu_n \mathbf{I}_g$. Для проекции магнитного момента на выбранную ось квантования возможны $2I_g + 1$ значения:

$$m_g = -I_g, -I_g + 1, \dots, I_g. \quad (3.1)$$

Благодаря тому, что ядерный магнетон

$$\mu_n = \frac{e\hbar}{m_n c} \quad (3.2)$$

в тысячи раз меньше, чем магнетон Бора (μ_B), для установления магнитного порядка в системе ядерных спинов требуются либо большие магнитные поля, либо очень низкие температуры (0.1 К). Из-за узости мессбауэровской линии даже в относительно слабом поле атомного момента только ядра с определенной проекцией момента попадают в ядерный резонанс. В соответствии со статистикой число таких ядер равно

$$w_n = \frac{1}{Z} \exp(-\beta m_I M) \approx \frac{1}{2I_g + 1}, \quad Z = \sum \exp(-\beta m_I M), \quad \beta^{-1} = KT \quad (3.3)$$

Так, в случае изотопа Fe^{57} ($I_g = 1/2$) только половина ядер сможет участвовать в резонансном когерентном рассеянии.

Изотопическая некогерентность. Естественное содержание резонансного изотопа достаточно мало (2.2%). Как и в случае твердотельных растворов двух элементов [96], замена Fe^{56} на изотоп Fe^{57} в кристалле гематита приводит к незначительным смещениям соседних атомов и изменению энергии их взаимодействия, и не изменяет симметрию кристаллической решетки.

Обогащенные кристаллы были выращены из расплава [97], ось c направлена нормально к поверхности, толщина $T = 0.4$ мм, площадь поверхности - 5×10 мм². Тщательное изучение рентгеновскими методами [97-98] показало, что кристаллы являются слегка изогнутыми (радиус кривизны 8-64 м) с секторами роста (доменами).

Следует напомнить, что статистически полное описание любой системы подразумевает знание всех моментов распределения. Фактически это означает, что при построении законченной модели статистической дифракции нужно выписать дифракционные уравнения с учетом средней концентрации изотопа, затем их аналог для корреляционных моментов высшего порядка и т.д. Однако в большинстве случаев ограничиваются рассмотрением только первых двух моментов: средней поляризуемости кристалла и ее дисперсии (что оказывается достаточным для описания нормальных распределений).

Для магнитных рефлексов с вектором дифракции $g = (h, h, h) \frac{2\pi}{a}$, h - нечетное. Поляризуемость кристалла гематита в пересчете на одну из N элементарных ячеек с произвольно распределенными изотопами определяется выражением (см. Приложение 3.1)

$$\hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) = (1/N) \sum_{j=1}^N \exp(i(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \mathbf{x}_k) \hat{c}_{jk} \chi_{\alpha\beta}^k \quad (3.4)$$

где $\mathbf{x}_k = \mathbf{R}_j + \mathbf{r}_{jk}$, \mathbf{R}_j - положение j -й элементарной ячейки в кристалле, \mathbf{r}_{jk} -

положение k -го атома в j -й элементарной ячейке ($k = 1-4$). Вклад в поляризуемость кристалла при рассеянии σ - поляризованного СИ дают четыре перехода

$$\chi_{\alpha\beta}^k = g_0 \sum_{l=1}^4 P_{\alpha\beta}^k \exp(-M_k) C_1^2(m_g, \Delta m_l) \frac{1}{\Delta E_l + i}. \quad (3.5)$$

Операторы c_{jk} определены таким образом, что

$$\hat{c}_{jk} = I, \quad (3.6)$$

если k -ая позиция в j -й элементарной ячейке занята изотопом Fe^{57} и фиксирована проекция момента m_l ; $\hat{c}_{jk} = 0$, если позиция занята Fe^{56} или ядро обладает другой проекцией магнитного момента.

Усреднение по ансамблю всех атомов, участвующих в дифракции, дает для поляризуемости на одну ячейку следующее выражение:

$$\langle \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \rangle = \left(\frac{c}{2}\right) \sum_g \chi_{10}^{57} \delta(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta - \mathbf{g}) \quad (3.7)$$

где χ_{10}^{57} - восприимчивость кристалла, состоящего только из резонансных изотопов, а суммирование ведется по набору векторов дифракции \mathbf{g} кристалла.

Дисперсия поляризуемости кристалла по определению равна

$$\begin{aligned} \Omega(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) &= \langle \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \rangle - \langle \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \rangle^2 = \\ &= \left(\frac{1}{N^2}\right) \sum_{k,k'=1}^{N,N} \exp(i\mathbf{g}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta)) \chi_{\alpha\beta}^k \chi_{\alpha\beta}^{k'} \left\{ \frac{\delta_{k,k'}}{2} c \left(1 - \frac{c}{2}\right) + \frac{c}{2} (1 - \delta_{k,k'}) G_{k,k'} \right\}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

где $G_{kk'}$ - условная вероятность найти один атом Fe^{57} в позиции k' , если другой Fe^{57} находится в положении k . Предполагая, что изотопы распределены по кристаллу равномерно ($G_{k,k'} = 0$), приходим к выводу, что в данном случае дисперсия поляризуемости примерно в N раз меньше, чем квадрат средней поляризуемости для отражения с вектором дифракции \mathbf{g} :

$$\Omega_r(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) = \left(\frac{1}{N}\right) \sum_{k=1}^N \exp(i\mathbf{g}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta)) (\chi_{\alpha\beta}^k)^2 \frac{c}{2} \left(1 - \frac{c}{2}\right) \quad (3.9)$$

Замена полного числа ячеек кристалла N на число ячеек, освещенных пучком СИ

с поперечным сечением $0.9 \times 4 \text{ мм}^2$ [97], $N_r = 1.6 \times 10^{19}$, не может сравнить вклады в $|\hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta)|^2$ от (3.7) и (3.9). С отклонением от угла Брэгга вклад от когерентного рассеяния быстро спадает и ситуация меняется на противоположную. Отметим, что при гипотетическом образовании кластеров из атомов Fe^{57} вклад в диффузное рассеяние из-за изотопической некогерентности может значительно увеличиться.

Очевидно, что дисперсия поляризуемости (3.9) достигает своего максимума в полностью обогащенном образце ($c = 1$), когда влияние спиновой некогерентности максимально.

Образование магнитных доменов. Малая ширина мессбауэровской линии определяет высокую чувствительность к флуктуациям магнитного момента атома, $\mathbf{M} = \mathbf{M}_0 + \delta\mathbf{M}$. При отклонении $\delta\mathbf{M}$ на величину порядка

$$\frac{\delta M}{M_0} = \frac{\Gamma}{\mu_n} \approx 10^{-7}, \quad (3.10)$$

такой атом становится “невидимым” для когерентного пучка, настроенного на энергию $E = \hbar\omega_0 - \mu_n \mathbf{M}_0$.

На рис. 3.3 представлена элементарная ромбоэдрическая ячейка кристалла гематита, положение атомных магнитных моментов в магнитной гексагональной структуре выше и ниже температуры перехода Морина ($T_M = 253 \text{ К}$) [99], а также геометрия дифракции. При комнатной температуре магнитные моменты в соседних слоях (например, M_B, M_A) не точно коллинеарны, а повернуты на малый угол (10^{-4} рад) относительно идеального положения M_0 в плоскости, перпендикулярной оси c (единичный вектор \mathbf{n}):

$$\mathbf{m}(0) = d[\mathbf{n}, \mathbf{M}_B], \quad (3.11)$$

что сразу нарушает магнитную симметрию системы (d - константа).

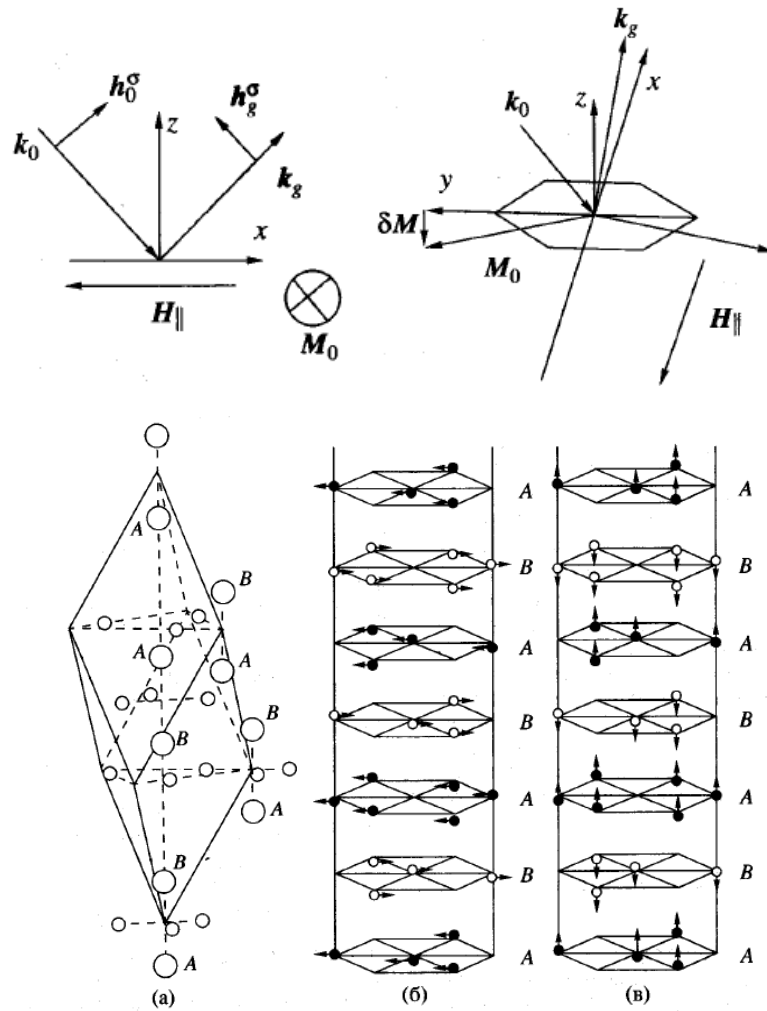


Рисунок 3.3. Элементарная ромбоэдрическая ячейка кристалла α - Fe_2O_3 (а) и положение магнитных моментов в гексагональной структуре при температуре выше (б) и ниже T_N (в) [99].

Экспериментальные данные [97, 98] относятся к случаю, когда для разрушения доменной структуры образца прикладывалось магнитное поле величиной 1 кГс параллельно плоскости дифракции \mathbf{H}_{\parallel} Нц (вдоль оси c) и перпендикулярно к ней \mathbf{H}_{\perp} . Причем в случае \mathbf{H}_{\parallel} пиковая интенсивность рефлекса (777) была в 1.5 раза больше, чем интенсивность в случае \mathbf{H}_{\perp} .

С кристаллографической точки зрения три направления атомного магнитного момента ($\mu_{Fe}(4.3 \text{ K}) = 4.9 \mu_B$) в гексагональной структуре на Рисунке 3.3б,

равноправны, и кристалл разделен на три домена примерно равного объема. Направим ось z вдоль оси c , а оси в плоскости (111) выберем так, что

$$\mathbf{M}_{2,3} = \mu_{Fe} \left(\frac{1}{2}, \pm \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right),$$

$$\mathbf{M}_1 = \mu_{Fe} (0, 1, 0). \quad (3.12)$$

Пусть антиферромагнитный кристалл находится под действием магнитного поля \mathbf{H} , тогда магнитные поля, действующие на магнитные моменты в соседних слоях:

$$\mathbf{H}_{B,A} = \mathbf{H} - N_{B,A} \mathbf{M}_{B,A} \quad (3.13)$$

разворачивают моменты так, что

$$[\mathbf{H}_{B,A}, \mathbf{M}_{B,A}] = 0. \quad (3.14)$$

Одновременно происходит незначительное изменение величины среднего момента [100]. В результате атомный магнитный момент в основном поворачивается во внешнем поле следующим образом:

$$\mathbf{M} = \mathbf{H}_0 + \frac{1}{N_{B,A}} \left(\mathbf{H} - \frac{1}{M_0^2} \mathbf{M}_0 (\mathbf{H} \mathbf{M}_0) \right), \quad (3.15)$$

$$N_{B,A} = \frac{6kT_N}{[Ng^2 \mu_B^2 S(S+1)]}$$

где N - число магнитных атомов в единице объема. Когда магнитное поле перпендикулярно плоскости (111), атомы во всех трех доменах обладают одинаковой энергией

$$\delta E_i = \mathbf{M}_i \mathbf{H}_{\parallel} = 0, \quad (3.16)$$

и домены сохраняют свой объем.

Когда магнитное поле лежит в плоскости (111), ядра внутри одного домена обладают наименьшей энергией Зеемана, и поэтому он доминирует в объеме над остальными:

$$W_1 = \exp(-\beta \mathbf{M}_i \mathbf{H}_{\perp}) / Z. \quad (3.17)$$

При определенном значении H_c почти все атомные магнитные моменты направлены перпендикулярно внешнему полю. Тем не менее, даже в этом случае часть объема кристалла (V_d) будет “выведена” из ядерного резонанса тепловыми колебаниями

$$\rho = \frac{V_d}{V} \approx \sum_{i=2,3} \exp\{-\beta(\mathbf{M}_i - \mathbf{M}_1, \mathbf{H}_\perp)\}. \quad (3.18)$$

При дальнейшем увеличении магнитного поля моменты поворачиваются по внешнему полю в соответствии с формулой (3.15).

Учитывая случайный характер распределения малых доменов относительно падающего пучка, можно считать, что большая часть кристалла рассеивает МИ когерентно:

$$\langle \chi(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \rangle = (1 - \rho) \sum_g \chi_g^{57} \delta(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta - \mathbf{g}) \quad , \quad (3.19)$$

а меньшая часть дает вклад в дисперсию поляризуемости:

$$\Omega_d = \left(\rho \chi^{id}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) \right)^2 \quad . \quad (3.20)$$

Отметим попутно, что наблюдаемое в [97, 98] увеличение пиковой интенсивности магнитного рефлекса (777) в 1.5 раза при повороте внешнего поля от \mathbf{H}_\perp к \mathbf{H}_\parallel может быть связано с увеличением числа динамических рефлексов. Если при \mathbf{H}_\perp все магнитные домены обладают одной энергией Зеемана и дают только одну область полного внешнего отражения, то в случае \mathbf{H}_\parallel возникают дополнительные рефлексы при других значениях энергии резонанса.

Неупругие некогерентные процессы

Рассеяние с участием фононов. Как было указано выше, при поглощении одного или нескольких фононов (с характерной энергией 10^{-3} эВ) рентгеновский квант и дальше претерпевает динамическую дифракцию (ширина линии порядка 1 эВ), в то время как мессбауэровский квант после подобного акта больше не рассеивается ядрами.

Рассмотрим тепловое диффузное рассеяние в рамках борновского

приближения. Волновое поле внутри кристалла состоит из суммы плоских (блоховских) волн (см. Приложение к 3.2)

$$E = \sum_{i=1}^4 \{a_0^i \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + a_g^i \exp(i\mathbf{k}_{0t} \mathbf{r})\} \exp(iq_i z) = \sum_{\alpha=1}^8 |\mathbf{q}_\alpha \rangle, \quad (3.21)$$

тогда сечение рассеяния в единицу телесного угла при рассеянии одной из блоховских волн с импульсом $\mathbf{q}_\alpha = \mathbf{k}_{0t} + \mathbf{e}_z(g_n + q_i)$ в плоскую волну с импульсом \mathbf{p}' имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 \hbar^2} |\chi(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{p}')|^2, \chi(\mathbf{q}_\alpha - \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}' | \chi(\mathbf{r}) | \mathbf{q}_\alpha \rangle. \quad (3.22)$$

С учетом колебаний кристаллической решетки часть поляризуемости кристалла, отвечающая диффузному рассеянию, имеет вид [101, 102] (см. Приложение к 3.1)

$$F \sum_{nf} \frac{(\exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{u}_j))_{0n} (\exp(-i\mathbf{k}_g \mathbf{u}_j))_{nf}}{\hbar\omega - E_{s0} - E_n + i\Gamma/2}, \quad (3.23)$$

где $\hbar\omega$ - энергия фотона, E_{s0} - энергия резонанса, E_n - энергия n -го промежуточного фононного состояния, f - состояние фононной системы после акта рассеяния, F - константа.

Рассеяние МИ проходит в два этапа: поглощение электромагнитного кванта с волновым вектором \mathbf{k}_0 и испускание кванта \mathbf{k}_g через промежуток времени ($\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$), много больший периода характерных фононных колебаний. Поэтому усреднение по состояниям n проводится отдельно, давая в случае когерентного рассеяния множитель в виде суммы факторов Лэмба-Мессбауэра

$$M_j = M(\mathbf{k}_0) + M(\mathbf{k}_g), \quad (3.24)$$

$$\exp(-M(\mathbf{k}_{0,g})) = (\exp(i\mathbf{k}_{0,g} \mathbf{u}_j))_{00}, \quad (3.25)$$

а не фактор Дебая-Валлера $W(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_g)$, как в случае дифракции рентгеновских лучей.

Ограничиваясь рассмотрением однофононных процессов, выражение (3.23) можно свести к виду

$$F \left\{ \sum_n \frac{(\exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{u}_j))_{on} \exp(-M(\mathbf{k}_g))}{\hbar\omega - E_{s0} - E_n + i\Gamma/2} + \sum_f \frac{(\exp(-i\mathbf{k}_g \mathbf{u}_j))_{of} \exp(-M(\mathbf{k}_0))}{\hbar\omega - E_{s0} + i\Gamma/2} \right\}. \quad (3.26)$$

Оператор фононного смещения при использовании формализма вторичного квантования может быть записан в следующем виде:

$$\mathbf{u}_j = \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_\alpha(\mathbf{q})}} \text{Re}(\hat{a}\mathbf{e}_\alpha(\mathbf{q})\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j - \omega_\alpha(\mathbf{q})t)), \quad (3.27)$$

где N - число элементарных ячеек, $\mathbf{e}_\alpha(\mathbf{q})$, $\omega_\alpha(\mathbf{q})$ - единичный вектор смещения и частота фонона с волновым вектором \mathbf{q} , относящегося к ветви α . Тогда матричный элемент в (3.22) принимает вид, [104], (множитель $|\langle \mathbf{p}' || \mathbf{q}_\alpha \rangle|^2$ - опущен)

$$|\chi(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \sim |F|^2 \exp(-M(\mathbf{k}_0)) \frac{(2\pi)^3 kT}{2MN} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \sum_{\mathbf{g}} \frac{1}{\omega_\alpha^2(\mathbf{q})} \left(1 + \frac{1}{\omega_\alpha^2(\mathbf{q})}\right) |\mathbf{p} - \mathbf{p}'| \mathbf{e}_\alpha(\mathbf{q})|^2 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}' + \mathbf{g} + \mathbf{q}). \quad (3.28)$$

Основное значение в последнем выражении имеют акустические фононы (с законом дисперсии $\omega_\alpha = c_\alpha q$), что приводит к известному расхождению сечения теплового диффузного рассеяния q^{-2} (или даже q^{-4}) при приближении к углу Брэгга, а также к осцилляциям Фриделя.

Спиновые флуктуации. Как показано в Приложении 3.1, поляризационный коэффициент в выражении для поляризуемости кристалла при рассеянии волны связан с направлением магнитного поля \mathbf{h}_a в

$$P_{\alpha\beta}^j = (\mathbf{h}_\alpha \mathbf{u}_j)(\mathbf{h}_\beta \mathbf{u}_j), \quad (3.29)$$

где \mathbf{u}_j - направление внешнего поля (атомного момента) на j -м ядре.

Очевидно, что под влиянием тепловых флуктуаций атомные моменты только в среднем сохраняют свое направление. Формализм спиновых волн (магнонов) является наиболее удобным математическим аппаратом для описания этих флуктуаций. В рамках гармонического приближения гамильтониан антиферромагнетика имеет вид суммы по двум магнитным подрешеткам

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q}} + \hbar \Omega \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{q}} \quad , \quad (3.30)$$

где $\hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{q}}$ - соответственно операторы рождения и уничтожения спиновой волны.

В случае кристалла гематита, помещенного во внешнее поле \mathbf{H}_{\parallel} ($T < T_N$), спектр элементарных магнитных возбуждений определяется выражением [105]

$$\begin{aligned} \omega_q^2 &= \omega^2(H) + v^2 q^2, \Omega_q^2 = \Omega^2(H) + v^2 q^2 \\ \omega^2(H) &= g^2 (H(H + H_D) + 2H_{ex}H_n) + gH_{ex}\omega_{ph}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

где H_a - поле кристаллографической анизотропии (2-3 кЭ), H_{ex} - поле антиферромагнитного обмена между подрешетками (300 кЭ), H_D - поле Дзялошинского, H_n и ω_{ph} обусловлены малым взаимодействием электронов с ядерными спинами и с фононами. Важно отметить, что даже при $H = 0, T = 0$ из-за нарушения аксиальной симметрии магнитной подсистемы в спектре волн возникает щель. При этом спиновая корреляционная функция [29], связывающая проекции спина в узлах \mathbf{j} и $\mathbf{j} + \mathbf{R}$, дается выражением (спектрально неупорядоченная система)

$$\Delta = \langle S_j^z S_{j+\mathbf{R}}^z \rangle - S_0^2 \approx -\frac{2S}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q}} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}). \quad (3.32)$$

В соответствии со статистикой Бозе при высоких температурах средний квадрат амплитуды равен

$$\langle \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q}} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle = \frac{kT}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}} \quad (3.33)$$

Подставляя выражения (3.30),(3.31) и (3.33) в определение (3.32) и интегрируя по \mathbf{q} , получаем

$$\Delta = \frac{2S}{N\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \frac{kT}{\omega^2(H) + v^2 q^2} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}) \sim \frac{c}{R} \exp\left(-\frac{R}{\xi}\right), \quad (3.34)$$

где ξ_i - размеры двух областей упорядочения спинов,

$$\xi_1 = \frac{\omega(H)}{v}, \quad \xi_2 = \frac{\Omega(H)}{v}, \quad (3.35)$$

причем каждая из ветвей спиновых возбуждений (аналоги оптической и акустической ветвей колебаний) обладает своей областью упорядочения. Численные оценки дают для параметра ξ_i значение порядка 100-200 $a \sim 500-1000$ А, где a - межатомное расстояние.

Некогерентное рассеяние на ансамбле спиновых волн определяет следующую угловую зависимость диффузного рассеяния вблизи рефлекса ($\mathbf{k}' = \mathbf{k}_g + \mathbf{q}$):

$$I_{spin}^{dif}(\mathbf{q}) = I(0) \sum_{i=1,2} \frac{1}{1 + \xi_i^2 q^2}, \quad (3.36)$$

которая существенно отличается от зависимости q^{-2} (при $q \ll \xi_i^{-1}$) для рассеяния на фононах и также может привести к появлению рассматриваемого ниже “пьедестала” диффузного рассеяния.

Интересно отметить, что к подобным эффектам может привести и существование ядерных спиновых волн [106], коллективные движения которых возникают за счет сверхтонкого взаимодействия ядерных и электронных спинов (косвенное обменное взаимодействие Сула-Накамуры).

Флуктуации вблизи фазового перехода

С приближением к температуре перехода в системе спинов начинают образовываться ограниченные области упорядочения, рост которых приводит к установлению дальнедействующего “нового” порядка. Диффузное рассеяние на этих областях вблизи перехода в общем случае является упругим, хотя в формировании кластеров упорядоченных спинов принимают участие фононы.

Формально нас интересует корреляция спинов на разнесенных в пространстве узлах. В квазихимическом приближении (обобщение теории среднего поля Кюри-

Вейса), [105,108], для корреляционной длины вблизи перехода можно получить выражение, аналогичное (3.34),

$$\xi = \left(\frac{T_c}{3(T_c - \frac{T}{M})} \right)^{1/2} a, \quad \mathcal{M} = 1 - \left(\frac{M}{M_0} \right)^2, \quad (3.37)$$

где M - среднее значение магнитного момента (равное нулю при $T > T_c$ и M_0 при $T=0$), a -постоянная решетки. При комнатной температуре для кристалла гематита, $T - T_N = 40$ К, последнее выражение дает для длины корреляций значение в несколько межатомных расстояний.

Количество публикаций, посвященных рассмотрению перехода порядок-беспорядок в магнитных кристаллах вблизи температуры фазового перехода T_c , огромно. Хорошо разработанные теоретические подходы: кластерные методы (метод Бете, [108], и др.), теория графов (“дерево” Кейли, [110]), методы ренорм-группы, [111], при удачном выборе модели могут дать ценную информацию о беспорядке в системе спинов. Эксперименты по диффузному рассеянию МИ могут стать средством для извлечения этой информации.

3.2 УРАВНЕНИЯ ДЛЯ АМПЛИТУДЫ КОГЕРЕНТНОЙ ЧАСТИ Э/М ПОЛЯ И ИНТЕНСИВНОСТИ ДИФФУЗНОЙ КОМПОНЕНТЫ

Пусть ось z направлена по нормали (оси c) к поверхности кристалла гематита, направление которой совпадает с вектором дифракции $\mathbf{g} = (hhh)$.

Излучение, которое после кристалла-монокроматора падает на кристалл, будем аппроксимировать плоской волной с отклонением $\delta\theta$ от точного условия Брэгга.

В общем случае при дифракции МИ компоненты с σ и π -поляризациями сильно взаимодействуют друг с другом [89-91]. Однако в определенных случаях и при соответствующем выборе геометрии дифракции (см. Приложение 3.2) можно считать, что рассеяние происходит без изменения поляризации.

В условиях динамической дифракции волновое поле с определенной (а) поляризацией можно представить в виде суммы

$$E(\mathbf{r}) = E_0(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + E_g(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_g\mathbf{r}), \quad (3.38)$$

где $E_{0,g}(\mathbf{r})$, $\mathbf{k}_{0,g}$ - амплитуда и волновой вектор прошедшей и дифрагированной волн соответственно.

Обычно описание волнового поля в кристаллах с широкомасштабными искажениями строится на основе уравнений Такаги-Топена [111-114]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} E_0 &= i\hat{\sigma}_{00} E_0 + i\hat{\sigma}_{01} E_g, \\ \frac{d}{dz} E_g &= i(\hat{\sigma}_{11} + \eta) E_g + i\hat{\sigma}_{10} E_0. \end{aligned} \quad (3.39)$$

В случае симметричной дифракции

$$\hat{\sigma}_{11} = \frac{\pi}{\lambda\gamma_0} \hat{\chi}(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta), \eta = \frac{\pi}{\lambda\gamma_g} \sin 2\theta_0 (\theta - \theta_0),$$

где $\chi_{0,g} \sim$ Фурье-компоненты поляризуемости, $\gamma_{0,g}$ - косинусы углов между внутренней нормалью и вектором \mathbf{k}_0 , λ - длина волны падающего излучения.

Когерентное волновое поле.

С учетом некогерентных процессов амплитуда каждой волны равна сумме когерентной и диффузной компонент

$$E_{0,g} = E_{0,g}^c + \delta E_{0,g} \quad , \quad (3.40)$$

так же, как и безразмерные поляризуемости кристалла

$$\hat{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} + \delta\sigma_{ij} \quad (3.41)$$

Следует отметить, что в случае мессбауэровской дифракции параметр $\sigma_{00(11)}$ также становится флуктуирующей величиной. Тем не менее, здесь мы будем считать его постоянной величиной, так как дифракционное рассеяние определяется в основном недиагональными компонентами σ_{10}, σ_{01} . Кроме того, описание этих эффектов можно найти в многочисленных работах, посвященных прохождению электромагнитных волн через неупорядоченные среды, например, через атмосферу Земли, [115].

После усреднения уравнений Такаги, [111, 112], с учетом двух моментов распределения поляризуемости (среднего значения и дисперсии Ω) получим следующую систему уравнений для определения когерентных амплитуд:

$$\begin{aligned} -i\sigma_{00}E_0^c + \frac{d}{dz}E_0^c &= i\sigma_{01}E_g^c - \beta\sigma^2 L_0(z), \\ -i\Delta_{11}E_g^c + \frac{d}{dz}E_g^c &= i\sigma_{10}E_0^c - \beta\sigma^2 L_g(z), \end{aligned} \quad (3.42)$$

где

$$\begin{aligned} L_0(z) &= \int_0^z dz' \exp(i\Delta_{11}(z-z')) E_0^c(z'), \\ L_g(z) &= \int_0^z dz' \exp(-i\sigma_{00}(z-z')) E_g^c(z'), \\ \beta &= \frac{\pi^2}{(\lambda \gamma_0 \sigma)^2} \Omega \quad , \quad \sigma^2 = \sigma_{10}\sigma_{01}, \Delta_{11} = \eta + \sigma_{11}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

В Приложении к 3.2 приведено точное решение системы (3.42) с

использованием преобразования Лапласа. Анализ этого решения показывает, что волновое поле внутри кристалла состоит из четырех блоховских волн с разными коэффициентами преломления и поглощения (3.21).

Для описания двух “сильных” блоховских волн можно использовать решение для идеального кристалла с перенормированным значением поляризуемости кристалла:

$$\sigma^2 \rightarrow \alpha \sigma^2, \lim_{\beta \rightarrow 0} \alpha = 1, \quad (3.44)$$

в то время как две новые блоховские волны обладают поляризуемостью, исчезающей при $\beta \rightarrow 0$, в соответствующих угловых областях

$$\alpha_{1,2} = (1/2)\{1 + 2\beta \pm \sqrt{(1 + 2\beta)^2 - 4\beta^2}\}. \quad (3.45)$$

Детальный анализ зависимости коэффициента отражения в случае расщепленной линии возможен только численными методами из-за того, что поляризуемость кристалла (и действительная, и мнимая части) сильно зависит от энергии кванта. Результаты расчета показывают, что с увеличением параметра β пиковое значение коэффициента отражения уменьшается, а ширина отражения растет пропорционально $\sqrt{|\alpha_2|}$ (см. Рисунок 3.4).

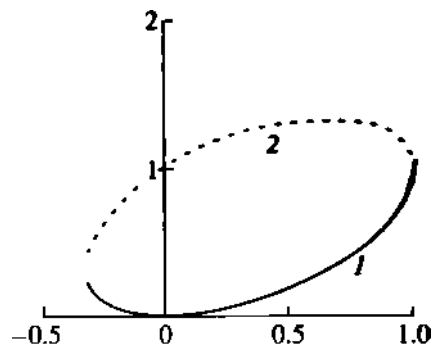


Рисунок 3.4. Зависимости параметров l_1 (1) и l_2 (2) от дисперсии поляризуемости β .

Вообще говоря, влияние беспорядка в расположении изотопов на когерентное

волновое поле относительно слабое, но оно проявляется на структуре самого дифракционного пика.

3.3. ОСОБЕННОСТИ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ МЕССБАУЭРОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

На Рисунке 3.5 представлены результаты вычисления коэффициента отражения $|R|^2$ как функции угловой отстройки η и энергии падающего фотона для симметричного чисто ядерного отражения (777) гематита.

Эксперименты по рассеянию МИ проводятся в целом ряде синхротронных центров. Благодаря временной структуре СИ, регистрируя дифракционный сигнал между импульсами СИ, удается разделить мгновенный электронный отклик (рэлеевское рассеяние) и ядерное (резонансное) излучение, генерируемое ядрами кристалла в течение микросекунд. Одна из таких методик в течение ряда лет разрабатывалась для станции NE3 на источнике СИ Accumulation Ring (AR) Photon Factory (Tsukuba, Япония) [86, 96, 97, 115, 116]. Важной частью мессбауэровской станции является рентгеновская оптика, одно из предназначений которой - уменьшить вклад электронного рассеяния в общий регистрируемый сигнал. В частности, на источнике AR использовался асимметричный (channel-cut) монохроматор с “косыми” отражениями (12,2,2) и (4,2,2), который «уменьшает» энергетическую ширину пучка до 6.7 мэВ.

Отметим, что такого энергетического разрешения недостаточно для возбуждения одного из сверхтонких (зеемановских) ядерных переходов при доступных магнитных полях. Например, при импульсе СИ длительностью $\tau = 0.2$ нс [86, 97, 99] все расщепленные уровни были возбуждены одинаково (энергетическая ширина пучка $\Delta E = \hbar/2\tau \sim 10^{-5}$ эВ).

На Рисунке 3.6 представлены экспериментальные кривые качания, отвечающие ядерному магнитному рефлексу (777), в случае кристаллов с естественным

содержанием изотопа ($c = 0.022$) и обогащенного ($c = 0.95$) [86, 96, 97, 115, 116]. Из рисунка видно, что при дифракции на кристалле с малым содержанием изотопа наблюдается широкое “гало” диффузного рассеяния, пик - невысокий. Ширина кривой качания практически такая же, как и при дифракции на обогащенном кристалле. Отсюда следует, что образец показывает сильное диффузное рассеяние, интенсивность которого растет пропорционально увеличению интенсивности когерентного рассеяния, а угловые характеристики изменяются мало. Действительно, при отсутствии диффузного рассеяния и ширина, и высота пика должны расти пропорционально концентрации изотопа (усредненному структурному фактору).

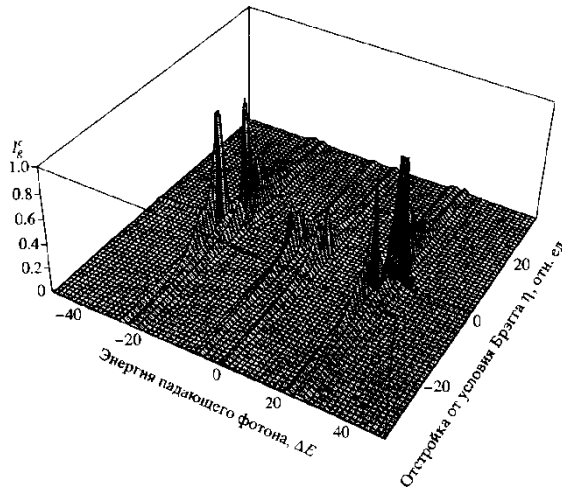


Рисунок 3.5. Расчетный коэффициент отражения (когерентная часть) как функция угловой отстройки (η) и энергии падающего фотона. Рефлекс (777).

Отметим, что в случае обогащенного кристалла ($c = 0.95$) общая интенсивность рассеяния (диффузного и когерентного) резко уменьшается при отстройке от условия Брэгга порядка 10 угл. сек. (точка “перегиба плато”).

Для сравнения на Рисунке 3.7 представлены расчетные кривые распределения когерентной интенсивности в рамках обычного расчета (Рисунок 3.7а) и статистической теории (Рисунок 3.7б), рефлекс (777), $\beta = 0.1$ (отн. ед.). Кривые получены в результате интегрирования по энергии вблизи резонанса, толщина

кристалла $T = \frac{10\lambda}{g_0}$. Видно, что статистический расчет приводит к расширению кривой качания и некоторой особенности в ее центре.

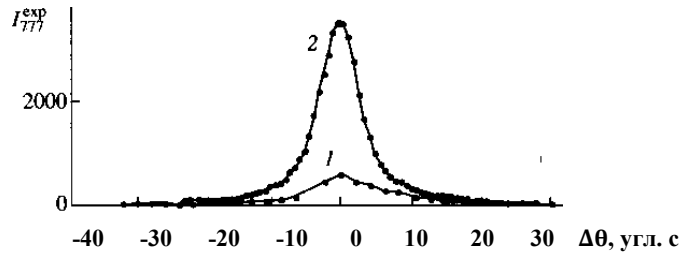


Рисунок 3.6. Экспериментальные кривые качания для ядерного рефлекса (777) с естественным содержанием изотопа $c = 0.022$ (кривая 1, увеличено в 40 раз) и обогащенного кристалла ($c = 0.95$, кривая 2).

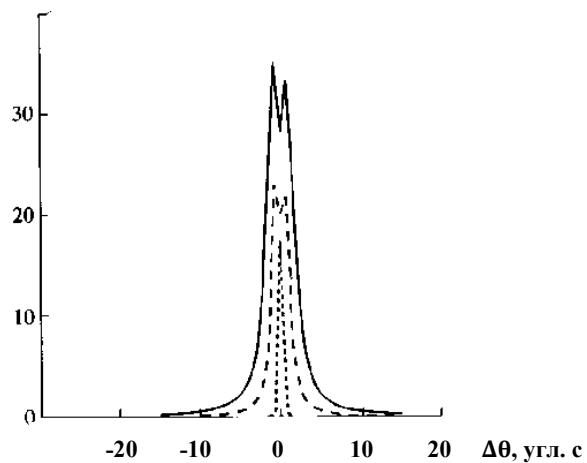


Рисунок 3.7. Расчетные кривые качания для когерентной интенсивности, рефлекс (777): а - обычный расчет, б - статистическая теория ($\beta = 0.1$). Концентрация изотопа: $c = 0.022$ - пунктир (x40), $c = 0.95$ - сплошная линия.

Диффузное волновое поле. Экспериментально наблюдаемыми величинами являются интенсивности дифрагированной I_g и прошедшей волн I_0 , которые состоят из когерентной и диффузной частей. Уравнения для определения когерентной составляющей были получены выше. Уравнения для определения

интенсивности диффузных волн могут быть получены как разность уравнений для усредненных и когерентных волн:

$$\langle I_n \rangle = I_n^c + I_n^d, \quad \langle \delta E_0^*(z) \delta E_g \rangle = \langle I_n \rangle - I_n^c, \quad I_n^c = \langle E_n^* \rangle \langle E_n \rangle, \quad n = 0, g. \quad (3.46)$$

Используя исходные уравнения Такаги- Топена (3.39) и их усредненный вариант (3.43), можно вывести дифференциальные уравнения для полных и когерентных интенсивностей:

$$\frac{d}{dz} \langle I_n \rangle = \text{Re} \left(E_n^* \frac{d}{dz} E_n^c \right), \quad \frac{d}{dz} I_n^c = \text{Re} \left(E_n^{c*} \frac{d}{dz} E_n^c \right). \quad (3.47)$$

Опуская необходимые преобразования, усредняя и вычитая из полной системы уравнений когерентные части, получаем следующие уравнения

$$\frac{d}{dz} I_0^d = \text{Re} \left(i\sigma_{00} I_0^d + i\sigma_{01} \langle \delta E_0^*(z) \delta E_g \rangle + \beta \sigma^2 L_0(z) E_0^c(z) \right), \quad (3.48)$$

$$\frac{d}{dz} I_g^d = \text{Re} \left(i\Delta_{11} I_g^d + i\sigma_{01} \langle \delta E_g^*(z) \delta E_0 \rangle + \beta \sigma^2 L_g(z) E_g^c(z) \right).$$

В уравнениях (3.48) были опущены как члены, пропорциональные нечетным произведениям флуктуационной части поляризуемостей и волновых полей для интенсивности диффузных волн:

$$\langle \delta E_{0,g}^* \sigma_{01,10} \rangle = \langle E_{0,g}^c \delta \sigma_{01,10} \rangle = 0, \quad (3.49)$$

так и члены, пропорциональные

$$\langle \delta E_{0,g}^* \delta \sigma_{01,10} \rangle = \langle \delta E_{0,g}^c \delta E_{0,g}^c \delta \sigma_{01,10} \rangle = 0. \quad (3.50)$$

Воспользовавшись известным приближением [111, 112], вклад от усредненного произведения флуктуаций дифрагированной и прошедшей волны можно представить в следующем виде:

$$\text{Re} \{ i\delta \sigma_{01} \langle \delta E_0^* \delta E_g \rangle \} \approx -2 \text{Re} \{ \sigma^2 \} \Gamma_c I_0^d + 2 |\sigma_{01}|^2 \Gamma_c I_g^d, \quad (3.51)$$

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

Фактически последними выражениями была введена корреляционная длина электромагнитного поля в условиях динамической дифракции, Γ_c . Отметим, что эти выражения не являются точными. Согласно флуктуационно-диссипативной

теореме флуктуации векторного потенциала (калибровка $A_0 = \varphi =$) определяются выражением [93]

$$\langle A_1^*(\mathbf{r}_1, 0) A_j(\mathbf{r}_2, t) \rangle |_{\mathbf{k}, \omega} = -\tan^{-1} \frac{\hbar \omega}{kT} \text{Im} \left(D_{ij}^R(\omega, \mathbf{k}) \right), \quad (3.52)$$

где $D_{ij}^R(\omega, \mathbf{k})$ - фурье-компонента запаздывающей функции Грина, определяемой из системы уравнений, в которой статистические характеристики среды участвуют через диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{r})$:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} - \delta_{il} \Delta - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{il}(\omega, \mathbf{r}) \right\} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.53)$$

Таким образом, задача определения статистических характеристик поля является самосогласованной. В случае динамической дифракции одно из таких самосогласованных решений было получено в [118]. В одном из приближений оно сводится к выражению (3.51), которым мы и ограничимся для простоты.

Окончательно система уравнений для определения интенсивностей диффузных волн принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} I_0^d &= -\mu_0 I_0^d + \varphi_{01} I_g^d + G_0(z), \\ \frac{d}{dz} I_g^d &= -\mu_g I_g^d + \varphi_{10} I_0^d + G_g(z), \end{aligned} \quad (3.54)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} G_{0,g}(z) &= \text{Re} \{ \beta \sigma^2 L_{0,g} E_{0,g}^{c*} \}, \quad \mu_{0,g} = 2 \text{Im}(\sigma_{11,00}) + 2 \text{Re} \{ \sigma^2 \} \Gamma_c, \\ \varphi_{10,01} &= 2 |\sigma_{11,00}|^2 \Gamma_c. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Корреляционная длина электромагнитного поля Γ_c определяет размер области, внутри которой флуктуации поля скоррелированы. В условиях дифракции естественно полагать, [111], что Γ_c имеет тот же порядок величины, что и длина экстинкции, так как любое отклонение в проходящем пучке рано или поздно скажется на дифрагированном, и наоборот.

Как следует из сказанного выше, этот параметр скорее вводится

феноменологически, чем вычисляется, и связан он как с когерентностью и волновыми характеристиками падающего излучения, так и с параметрами рассеивающей среды.

В случае дифракции по Брэггу можно пренебречь взаимным рассеянием диффузных дифрагировавших и прошедших волн [118-120], тогда

$$\frac{d}{dz} I_0^d = -\mu_0 I_0^d + G_0(z), \frac{d}{dz} I_g^d = -\mu_g I_g^d + G_g(z), \quad (3.56)$$

Физический смысл уравнений (3.56) состоит в конкуренции двух процессов: превращения когерентных волн в диффузные за счет флуктуаций поляризуемости $G_g(z)$, действующих как источник, и поглощения, которое эффективно “удаляет” (или добавляет” при $\mu_g < 0$) кванты излучения из диффузного пучка.

Для интенсивности диффузной компоненты на входной поверхности кристалла из (3.56) получаем выражение

$$I_g^d(0) = - \int_0^T dz' \exp(\mu_g z') G_g(z) \quad (3.57)$$

В Приложении 3.2 получены аналитические выражения для когерентных амплитуд прошедшей и дифрагированной волн, подставляя которые в (3.57), можно получить

$$G_g(z) = Re(\sum_{j,k=1}^4 \rho_g^{kj} [\exp(i\{q_j - q_k^*\}z) - \exp(i\{q_j - \sigma_{00}^*\}z)]), \quad (3.58)$$

где

$$\rho_g^{kj} = \beta \sigma^2 E_0^2(0) \frac{\xi_k^* \xi_j}{i(\sigma_{00} - q_k^*)} \psi_g^j \psi_g^{k*}. \quad (3.59)$$

Пренебрегая быстро осциллирующими членами, интенсивность диффузных волн можно представить в виде

$$I_g^d = Re \left(\sum_{k=1}^4 \sum_{j=1}^4 \rho_g^{kj} \left[\frac{1}{i(q_j - q_k^*) - \mu_g} - \frac{1}{i(q_j - \sigma_{00}^*) + \mu_g} \right] \right), \quad (3.60)$$

где q_j – проекция волнового вектора блоховской волны. Отметим, что

интенсивность упруго рассеянных диффузных волн прямо пропорциональна интенсивности падающей волны и при отсутствии дисперсии поляризуемости ($\beta = 0$) стремится к нулю.

На Рисунке 3.8 представлены расчетные кривые распределения диффузного (Рисунок 3.8а) и диффузного и когерентного (Рисунок 3.8б) рассеяния вблизи рефлекса (777) на кристаллах с разной концентрацией изотопа ($c = 0.022$ - пунктир, $c = 0.95$ сплошная линия), параметр дисперсии поляризуемости β равен 0.1. Кривые получены в результате интегрирования по энергии вблизи резонанса, толщина кристалла $T = \frac{10\lambda}{g_0}$. Учет дисперсии поляризуемости приводит к уменьшению когерентной составляющей и образованию “пьедестала” диффузного рассеяния. Для длины корреляции было подобрано значение, наиболее хорошо описывающее форму экспериментальной кривой качания

$$\Gamma_c \approx 0.11 \frac{\lambda \gamma_0}{\pi g_0}. \quad (3.61)$$

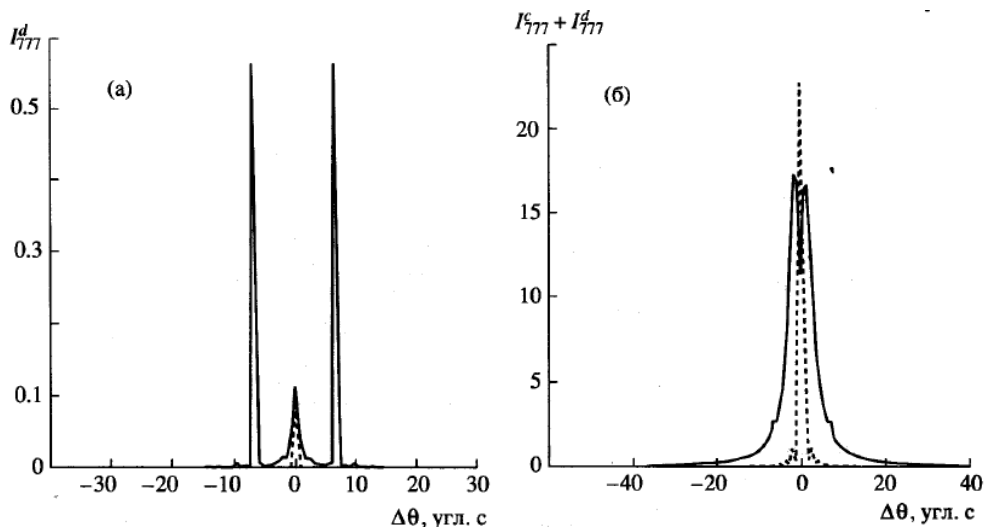


Рисунок 3.8. Расчетные кривые качания для кристалла, рефлекс (777): а - диффузное рассеяние, б - диффузное и когерентное рассеяние. Концентрация изотопа: $c = 0.022$ - пунктир (x40), $c = 0.95$ - сплошная линия.

Очевидно, что особенность в виде “плато” диффузного рассеяния на экспериментальной кривой (Рисунок 3.6) может быть связана с резким возрастанием упругого диффузного рассеяния при определенных значениях отстройки от угла Брэгга.

С чем связана эта аномалия диффузного рассеяния? Вернемся к исходному дифференциальному уравнению (3.56). В условиях динамической дифракции когерентное электромагнитное поле проникает в кристалл на расстояние порядка длины экстинкции. С отклонением от угла Брэгга глубина проникновения возрастает, сравнивается,

$$\mu_g = 2q_k'', k = 1 - 4 \quad (3.62)$$

и превышает толщину слоя, в котором могут формироваться диффузные волны $L = \mu_g^{-1}$. Такое увеличение объема, в котором формируются диффузные волны, увеличивает и их интенсивность. Однако с отклонением от угла Брэгга резко падает интенсивность когерентной волны, что компенсирует резкий “выброс” диффузного рассеяния с ростом отстройки. Таким образом, наиболее резко диффузная компонента будет меняться на краях области полного отражения («столика Дарвина»), где глубина проникновения поля в кристалл меняется в широких пределах и становится соразмерной с глубиной выхода диффузного излучения.

В данном эксперименте не проводилось разделение упруго и неупруго рассеянных диффузных волн, так что отделить описанное увеличение упругого диффузного пика от рассеяния на спиновых волнах или флуктуациях вблизи фазового перехода практически невозможно.

За последние десятилетия в целом вырос интерес к изучению диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Развитие экспериментальных методов стимулировало широкое распространение мощных источников СИ, высокая интенсивность которых позволяет детектировать слабые диффузные сигналы.

Изучение особенностей диффузного рассеяния МИ в условиях динамической дифракции может дать ценную информацию об источниках как упругого (доменная структура, изотопическая спиновая некогерентность, флуктуации порядка), так и неупругого (фононы и спиновые волны) рассеянного диффузного излучения.

Временная структура пучков СИ позволяет экспериментально изучать распад ядерных возбуждений в кристалле, разделяя «задержанное» ядерное излучение и быстрый электронный отклик. С точки зрения материаловедения одной из важных проблем является разделение когерентной и диффузной (упругой и неупругой) компонент [35, 36]. Отделение упругой компоненты от неупругой, в принципе, может быть достигнуто при использовании мессбауэровского кристалла-анализатора, настроенного на определенную энергию. Альтернативой является разделение когерентной и упругой диффузной составляющей численными методами на основе конкретной математической модели. Развитая теория позволяет провести последовательный анализ взаимного влияния упруго рассеянных диффузных и когерентных волн при дифракции МИ.

Кроме того, данная теория позволяет определить корреляционную длину электромагнитных полей Γ_c по данным диффузного рассеяния. По-видимому, дальнейшие исследования в этом направлении позволят лучше понять природу флуктуаций электромагнитного поля внутри кристаллов при ядерном и электронном рассеянии.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3.1. МЕССБАУЭРОВСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ КРИСТАЛЛА ГЕМАТИТА

Кристалл гематита ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) обладает ромбоэдрической симметрией (пр. гр. $D_{3d}^6(\bar{R}3c)$). Элементарная ячейка состоит из двух молекул (рис. 1), $a_0 = 5.4243 \text{ \AA}$, $\alpha = 55.17^\circ$, $V_c = 100.5 \text{ \AA}^3$.

Координаты четырех ионов Fe^{+3} (A, B, C, D) можно представить в виде (в единицах a_0 , $u = 0.355$)

$$\begin{aligned} A: (-u, -u, -u), B: \left(u - \frac{1}{2}, u - \frac{1}{2}, u - \frac{1}{2}\right), \\ C: \left(\frac{1}{2} - u, \frac{1}{2} - u, \frac{1}{2} - u\right), D: (u, u, u). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Как было сказано выше, мы ограничимся рассмотрением только ядерной части поляризуемости кристалла. Пусть при рассеянии падающего излучения фотон с волновым вектором \mathbf{k}_α и единичными векторами электрического \mathbf{e}_α и магнитного \mathbf{h}_α полей переходит в состояние с индексами β ($\alpha, \beta = 0, g$). При этом единичные векторы этих полей связаны между собой условием поперечности

$$\mathbf{h}_\alpha = [\mathbf{e}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha] \frac{1}{k}. \quad (3.64)$$

С учетом сверхтонкого расщепления в ядерную часть восприимчивости дают вклад несколько переходов между уровнями основного и возбужденного состояний ядра с разными значениями проекции магнитного момента. Принимая во внимание только магнито-дипольные переходы, для падающего излучения σ -поляризации получаем

$$\chi(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) = c g_0 \sum_{j,l=1}^N \exp\{i(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta)\mathbf{r}_j\} P_{\alpha\beta}^j \exp\{-M_j\} \frac{1}{\Delta E_l + i} C_1^2(I_g, l, I_e; m_g, \Delta m_l), \quad (3.65)$$

где M_j - фактор Лемба-Мессбауэра для j -го атома в элементарной ячейке, C_1^2 - коэффициент Клебша-Гордона, I_g, I_e - моменты основного и возбужденного

ядерных состояний соответственно, m_g , Δm_l - проекции момента на ось квантования в основном состоянии и его изменение при переходе, α - коэффициент внутренней конверсии ($\alpha^{57} = 9$):

$$g_0 = -\frac{3\lambda^3}{4\pi^2 V_c} \frac{1}{2I_g + 1} \frac{1}{1 + \alpha}, \quad (3.66)$$

$P_{\alpha\beta}^j$ - ядерный поляризационный фактор, который зависит от направления единичных магнитных векторов падающего и рассеянного излучений \mathbf{h}_α , \mathbf{h}_β и направления магнитного поля на ядре j -го атома \mathbf{u}_j :

$$P_{\alpha\beta}^j = (\mathbf{h}_\alpha \mathbf{u}_j)(\mathbf{h}_\beta \mathbf{u}_j). \quad (3.67)$$

Существуют три температурных интервала, находясь в пределах которых, гематит обладает различной магнитной структурой. Выше температуры Нееля ($T_N = 948$ К) все магнитные моменты гематита полностью разупорядочены за счет тепловых колебаний (парамагнитная структура).

В интервале температур $T_M < T < T_N$, где T_M - температура, при которой происходит переход Морина ($T_M = 253$ К), спины атомов железа в позициях $A(\mathbf{M}_1)$ и $B(\mathbf{M}_2 \approx -\mathbf{M}_1)$ направлены почти противоположно друг другу. При этом в объеме образуется слабый ферромагнитный момент ($0.4 \text{ G cm}^3 \text{ g}^{-1}$) в плоскости (111)_г, перпендикулярный к основному направлению спинов (см. Рисунок 3.3).

Ниже температуры перехода Морина ($T < T_M$), после выстраивания спинов вдоль оси c кристалл гематита становится антиферромагнитным.

В экспериментах [86, 97, 98] к образцу было приложено слабое внешнее магнитное поле \mathbf{H}_{\parallel} , параллельное плоскости дифракции (но перпендикулярное к оси c , см. рис. 3.3)

$$\mathbf{H}_{\parallel} = (-H, 0, 0), \quad (3.68)$$

что привело к переходу образца в однодоменное состояние и ориентации большинства магнитных моментов (\mathbf{M}_i) атомов перпендикулярно к \mathbf{H}_{\parallel} :

$$\mathbf{M}_{B,A} = (-\delta M, \pm M, 0), \mathbf{M} = \mathbf{M}_0 - \frac{1}{2M_0} (\delta \mathbf{M})^2 \quad (3.69)$$

Таблица 3.1. Поляризационные факторы при рассеянии без изменения поляризации

Переход σ	$\Delta m = 0$	$\Delta m = \pm 1$
$2P_{00}$	D^2	D^2
$2P_{11}$	D^2	$-D^2$
$2P_{10}$	$-D^2$	$\cos 2\theta - D^2 \pm iM u_z \sin 2\theta$
$2P_{01}$	$-D^2$	$\cos 2\theta - D^2 \mp iM u_z \sin 2\theta$

Таблица 3.2. Поляризационные факторы при рассеянии с изменением поляризации

Переход σ	$\Delta m = 0$	$\Delta m = \pm 1$
$2P_{00}$	$-Du_z$	$-Du_z \pm i\delta M \sin 2\theta$
$2P_{11}$	Du_z	$Du_z \pm i\delta M \sin 2\theta$
$2P_{10}$	Du_z	$Du_z \pm i\delta M \sin 2\theta$
$2P_{01}$	$-Du_z$	$-Du_z \mp i\delta M \sin 2\theta$

Примечание: θ - угол Брэгга; $D = \delta \mathbf{M} \cos \theta$.

Здесь в качестве примера влияния флуктуаций спина мы учли слабый ферромагнитный момент объема кристалла, направленный по полю, его численное значение мало $\frac{\delta M}{M_0} \sim 10^{-4}$.

В зависимости от разницы проекций момента основного и возбужденного состояний (Δm) возможны следующие варианты:

$$u_l(\Delta m = 0) = u_z, u_l(\Delta m = \pm 1) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (u_x \pm iu_y) \quad (3.70)$$

где (u_x, u_y, u_z) - правосторонний набор единичных векторов в системе координат, где вектор u_z параллелен \mathbf{M} . После некоторых очевидных преобразований легко получить

$$P_{\alpha\beta}(\Delta m = 0) = (\mathbf{h}_\alpha \mathbf{u}_z)(\mathbf{h}_\beta \mathbf{u}_z) \quad (3.71)$$

$$P_{\alpha\beta}(\Delta m = \pm 1) = \frac{1}{2} \{ (\mathbf{h}_\alpha \mathbf{h}_\beta) - (\mathbf{h}_\alpha \mathbf{u}_z)(\mathbf{h}_\beta \mathbf{u}_z) \mp i([\mathbf{h}_\alpha, \mathbf{h}_\beta], \mathbf{u}_z) \}$$

Удобно рассматривать отдельно σ и π -поляризации падающего излучения

$$\mathbf{h}_{0,g}^\sigma = (\pm \cos\theta, 0, \sin\theta), \quad \mathbf{h}_{0,g}^\pi = (0, -1, 0). \quad (3.72)$$

Подставляя полученные выше выражения в определение (3.71), можно получить $P_{\alpha\beta}$ для отдельных переходов.

В случае падающего излучения π -поляризации дифракция в основном идет без изменения поляризации (Таблица 3.1), а канал рассеяния с изменением поляризации $\sigma \rightarrow \pi$ можно рассматривать по теории возмущений в силу малости δM (Таблица 3.2).

В случае падающего излучения σ -поляризации преобладает дифракционное рассеяние без изменения поляризации, а канал рассеяния с изменением поляризации $\sigma \rightarrow \pi$ можно рассматривать по теории возмущений (в силу малости δM). Кроме того, при рассеянии $\sigma \rightarrow \sigma$ нужно учитывать только четыре перехода с $\Delta m = \pm 1$.

Кинематическое рассеяние с изменением поляризации $\sigma \rightarrow \pi$ уменьшает число когерентных квантов, участвующих в динамической дифракции. Учитывая малость соответствующей компоненты поляризуемости кристалла, можно не учитывать возможность обратного перехода кванта $\pi \rightarrow \sigma$. Используя для когерентных пучков разложение по блоховским волнам (см. Приложение 3.2)

$$E_{0,g}^c = \sum_{l=1}^4 a_{0,g}^l \exp(iq_l z), \quad (3.73)$$

для сечения упругого кинематического рассеяния, отнесенного к одному ядру, в единицу угла в направлении \mathbf{k}' получим

$$\frac{d\sigma(\mathbf{k}')}{d\Omega} \sim \frac{1}{N} \left| \sum_{l=1}^4 \left(\chi_{01}^{\sigma\pi}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_0 + \chi_{11}^{\sigma\pi}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_1 \right) \sum_j \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{x}_j) \right|^2 \quad (3.74)$$

пределы суммирования по числу элементарных ячеек (j) направляют к

бесконечности. Пусть область кристалла, участвующая в дифракции конечна ($N_1 \times N_2 \times N_3$), тогда пик кинематического рассеяния имеет конечную ширину

$$\delta k_m = \frac{\pi}{4N_m a_0}, \quad (3.75)$$

так как

$$F(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \prod_{m=1}^3 \left| \sum_{x_m}^{N_m} \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')x_m) \right|^2 = \prod_{m=1}^3 \frac{\sin^2(a_0[N_m+1][k_m-k_{m'}]/2)}{\sin^2(a_0[k_m-k_{m'}]/2)}. \quad (3.76)$$

Из-за сложного характера изменения амплитуд когерентных волн с отклонением от угла Брэгга результирующая ширина такого кинематического пика, скорее всего, будет превышать ширину динамической кривой качания. Таким образом, хотя причиной образования “пьедестала” диффузного рассеяния (помимо перечисленных выше) может быть и рассеяние с изменением поляризации. Однако, этот вклад также относительно мал, а его угловая зависимость отличается от наблюдаемой на эксперименте.

Для отражения $\mathbf{g} = (h, h, h)$ в кристалле гематита суммирование по всем атомам железа дает для рассеяния $\sigma \rightarrow \sigma$ (без учета слабого ферромагнетизма)

$$\chi_{\alpha\beta} = \chi(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_\beta) = 2c g_0 \sum_{l=1}^4 \frac{1}{\Delta E_l + i} \Phi_{\alpha\beta}^l C_1^2(I_g, l, I_e; m_g, \Delta m_l),$$

$$\Phi_{\alpha\beta}^l = \cos(6\pi u h) P_{\alpha\beta}^{n,l}(u_z) + \cos(6\pi u h - 3\pi h) P_{\alpha\beta}^{n,l}(-u_z), \quad (3.77)$$

где значения коэффициентов $\Phi_{\alpha\beta}^l$ приведены в Таблице 3.3.

В нашем случае внутреннее магнитное поле расщепляет ядерный переход при энергии $E = 14.413$ кэВ на четыре симметричных уровня с отстройками $E_l = E + \delta E_l$, параметры которых приведены в Таблице 3.4.

Таблица 3.3. Поляризуемость кристалла в зависимости от индекса рефлекса

Рефлекс	$\Phi_{00,11}$	$\Phi_{10,01}$
<i>h</i> - чет.	1	$\cos(6\pi uh)\cos 2\theta$
<i>h</i> - нечет.	1	$\mp i \cos(6\pi uh)\sin 2\theta$

Таблица 3.4. Параметры сверхтонких уровней

Δm	$\delta E_l, \text{нЭВ}$	$C_1^2(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; m_g, \Delta m)$
1	- 419	3/12
1	-63	1/12
-1	63	12
-1	419	1/12

Примечание. Энергетическая ширина уровней $\Gamma_0 = 17$ нЭВ.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3.2. КОГЕРЕНТНОЕ ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ. ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ

Применим к системе уравнений Такаги (3.43) относительно когерентных волн преобразование Лапласа [121]. Использование обычных правил трансформации

$$\frac{dE_{0,g}^c}{dz} \Rightarrow s e_{0,g} - E_{0,g}(0), \exp(i\Delta_{11}z)E_{0,g}^c \Rightarrow (s + i\Delta_{11})e_{0,g}^c,$$

$$\int_z g(z')dz' = g(s) / s,$$

приводит интегро-дифференциальную систему уравнений Такаги к алгебраической системе относительно лаплас-трансформант:

$$\begin{aligned} A_{00}e_0^c(s) - i\sigma_{10}e_g^c(s) &= E_0(0), \\ A_{11}e_g^c(s) - i\sigma_{01}e_0^c(s) &= E_g(0), \end{aligned} \quad (3.78)$$

где

$$\begin{aligned} A_{00} &= -i\sigma_{00} + s + \beta\sigma^2 \frac{1}{s - i\Delta_{11}}, \\ A_{11} &= -i\Delta_{11} + s + \beta\sigma^2 \frac{1}{s - i\sigma_{00}}. \end{aligned}$$

Решение последней системы имеет вид:

$$\begin{aligned} e_0^c(s) &= \frac{1}{Det} \{i\sigma_{11}E_g(0) + A_{11}E_0(0)\}, \\ e_g^c(s) &= \frac{1}{Det} \{i\sigma_{01}E_0(0) + A_{00}E_g(0)\}, \end{aligned} \quad (3.79)$$

где

$$\begin{aligned} Det &= A_{11}A_{00} + \sigma_{10}\sigma_{01} = \frac{D(s)}{l(s)}, \\ l(s) &= (-i\sigma_{00} + s)(-i\Delta_{11} + s), \\ D(s) &= (l + \beta\sigma^2)^2 + \sigma^2 l, \sigma^2 = \sigma_{10}\sigma_{01}. \end{aligned}$$

Нули функции $Det(s)$ определяют четыре точки полюса s_k , т.е. полученное решение состоит из четырех волн ($k = 1-4$):

$$D(s_k) = 0. \quad (3.80)$$

Функция $D(s)$ может быть представлена в виде

$$D(s) = (l - l_1)(l - l_2) = \prod_{j=1}^4 (s - s_j), \quad (3.81)$$

$$s_j = iq_j.$$

В случае симметричной дифракции положение точки полюса определяет волновые векторы блоховских волн в кристалле:

$$q_{1,2}^s = \eta/2 \pm \sqrt{\left(\frac{\eta}{2} - \sigma_{00}\right)^2 - l_1^2},$$

$$q_{3,4}^s = \frac{\eta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta}{2} - \sigma_{00}\right)^2 - l_2^2}, \quad (3.82)$$

где постоянные $l_{1,2}$ соответствуют новым значениям поляризуемости кристалла,

$$l_{1,2}^2 = \alpha_{1,2} \sigma^2,$$

$$\alpha_{2,1} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + 2\beta \pm \sqrt{(1 + 2\beta)^2 - 4\beta^2} \right\}. \quad (3.83)$$

На Рисунке 3.4 показаны зависимости параметра $\sqrt{\alpha_{2,1}}$ (пунктир и сплошная линия) от дисперсии поляризуемости β . В случае малых значений β вкладом “слабых” рефлексов

$$l_1 \approx 3\beta^2 \sigma^2 \quad (3.84)$$

можно пренебречь по сравнению с “сильными” рефлексами, поляризуемость которых близка к поляризуемости идеального кристалла:

$$l_2 \approx (1 + 2\beta) \sigma^2. \quad (3.85)$$

Вернемся к вычислению амплитуды когерентных волн по известным лаплас-образам (3.79). Согласно известным правилам, [121], оригинал функции равен

$$\frac{F(s)}{D(s)} \Rightarrow \sum_{k=1}^4 \frac{F(s_k)}{D_k} \exp(s_k z), \quad (3.86)$$

где s_k - точки полюса, определяемые выражениями (3.79),

$$D_k = \prod_{j=1, j \neq k}^4 (s_k - s_j). \quad (3.87)$$

Легко проверить, что полюсы выражения A_{00} компенсируются

соответствующими частями выражения для D . В результате вычислений получаем:

$$E_g^c(z) = \sum_{k=1}^4 \xi_k \exp(iq_k z) [E_g(0)A_{00}(s_k) + iE_0(0)\sigma_{01}],$$

$$E_0^c(z) = \sum_{k=1}^4 \xi_k \exp(iq_k z) [E_0(0)A_{gg}(s_k) + iE_g(0)\sigma_{10}], \quad (3.89)$$

где

$$\xi_k = \frac{l(s_k)}{D_k}, \quad \xi_{2,1} = \pm \frac{il_1}{Q_1 L}, \quad \xi_{3,4} = \pm \frac{il_2}{Q_2 L},$$

$$Q_{1,2} = 2 \sqrt{\left(\frac{\eta}{2} - \sigma_{00}\right)^2 - l_{1,2}}, \quad L = l_1 - l_2 = |\sigma|^2 \sqrt{1 + 4\beta}.$$

В случае дифракции по Лауэ амплитуда дифрагированной волны на входной поверхности кристалла равна нулю, $E_g(0) = 0$, тогда

$$E_g^c(z) = i\sigma_{01}E_0(0) \sum_{k=1}^4 \xi_k \exp(iq_k z). \quad (3.90)$$

В случае дифракции по Брэггу граничные условия должны быть удовлетворены на выходной поверхности кристалла

$$E_g^c(T) = 0,$$

тогда амплитуда дифрагированной волны на входной поверхности кристалла определяется выражением

$$E_g(T) = RE_0(0), \quad (3.91)$$

$$R = -i \frac{\sigma_{01}E_0(0) \sum_{k=1}^4 \xi_k \exp(iq_k T)}{\sum_{k=1}^4 \xi_k A_{00}(s_k) \exp(iq_k T)},$$

где R - коэффициент отражения.

При вычислении интенсивности диффузных волн нам потребуется не только коэффициент отражения, но и когерентное волновое поле внутри кристалла. Тогда для коэффициента отражения получаем

$$E_{0,g}^c(z) = i\sigma_{01}E_0(0) \sum_{k=1}^4 \xi_k \exp(iq_k z) \psi_{0,g}^k,$$

где

$$\psi_{0,g}^k = i\sigma_{01}R + A_{11}(q_k), \psi_g^k = i\sigma_{01} + A_{00}(q_k)R. \quad (3.92)$$

ГЛАВА 4. РЕФЛЕКТОМЕТРИЧЕСКИЕ И СПЕКТРАЛЬНО ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ПРИ РАССЕЯНИИ НА КРИСТАЛЛАХ СО СВЕРХРЕШЕТКАМИ

Вопросы рассеяния РИ на шероховатых поверхностях и возможности диагностики состояния поверхности и приповерхностного слоя традиционно находятся в фокусе исследователей, занимающихся материаловедением. Исследование рассеяния и дифракции на реальных поверхностях с сверхрешетками, периодическими вдоль поверхности или перпендикулярно к ней, открывает уникальные возможности по созданию новых рентгенооптических элементов и диагностике структурных изменений в положении атомов на поверхности.

Несмотря на большую проникающую способность РЛ и нейтронов, методикам с их использованием трудно придать поверхностную чувствительность. Одним из методов, которые могут дать прямой ответ на вопрос в каком структурном положении находится конкретный атом, является метод стоячих рентгеновских волн (СРВ). Он основан на регистрации выхода вторичного процесса в зависимости от угла падения плоской волны при условии образования в кристалле стоячей волны. Угловое сканирование области рефлекса сопровождается смещением пучностей стоячей волны из кристаллической плоскости в межплоскостное пространство, что уменьшает поглощение и выход вторичного процесса и приводит к угловой зависимости его выхода.

4.1 РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА НЕРОВНОЙ ПОВЕРХНОСТИ. ДВУХМАСШТАБНАЯ МОДЕЛЬ.

Рассеяние рентгеновских лучей при малых углах падения излучения является широко используемым неразрушающим методом исследования различных поверхностей раздела сред, тонких пленок и многослойных структур. Рентгеновская рефлектометрия в отличие от классических дифракционных методов позволяет одновременно изучать неоднородности профиля субмикронного и атомного масштабов. Известно, что обычно профили латерально структурированных поверхностей или поверхностных сверхрешеток характеризуются одним масштабом длины в направлении параллельно поверхности, составляющим от долей микрона до нескольких микрон (латеральные периоды), в то время как другой наномасштаб применим для направлений, нормальных к поверхности (шероховатости).

Анализ рефлектометрических данных для неровных поверхностей чаще всего основывается на выводах теории возмущений в двух ее вариантах. Это первое борновское приближение, [122, 123], (кинематическая теория), в котором начальным состоянием считается падающая волна, и приближение искаженной волны (DWBA – Distorted Wave Born Approximation) [124 – 126], в котором невозмущенными состояниями являются отраженные или преломленные волны, описываемые формулами Френеля. Первое борновское приближение количественно объясняет многие экспериментальные данные при углах падения, далеких от критического угла (т.е. угла полного внешнего отражения – ПВО), однако дает расходящийся результат для сечения рассеяния в области критического угла, когда эффектами многократного рассеяния нельзя пренебрегать.

Методы теории возмущений успешно применяются при анализе рассеяния на шероховатых поверхностях с различного рода случайными распределениями

высот рельефа, когда при решении волновых уравнений в качестве начальных состояний можно брать решения для бесконечной среды, [122], или среды, ограниченной гладкой плоскостью, [124]. Этот подход нельзя применять для поверхностей, имеющих еще один, более крупный масштаб неровностей. Рассеяние на таких неровных поверхностях лучше всего описывается с помощью квазиклассического приближения Кирхгофа, называемого также приближением касательной плоскости (Tangent Plane Approximation), [127, 128]. В этих случаях используют двухмасштабную модель поверхности, [129], в которой расчет рассеяния выполняется с помощью комбинации двух упомянутых аналитических методов: рассеяние на крупномасштабных плавных неровностях описывают в приближении Кирхгофа, а наличие мелкомасштабных неровностей учитывают 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), [130].

Ниже рассмотрено рассеяние электромагнитных волн рентгеновского диапазона на неровной границе раздела двух сред, которая описывается двухмасштабной моделью. Расчет выполнен с помощью квазиклассического метода, причем рельеф состоял из двух слагаемых различного масштаба. После вычисления интегралов Кирхгофа было проведено усреднение сначала по мелким шероховатостям, а затем – по неровностям крупного масштаба. Такой подход позволяет последовательно учесть как латеральную структуру поверхности, обусловленную технологией ее создания, так и мелкие флуктуации профиля, вызванные несовершенством технологии.

Интеграл Кирхгофа. Будем считать, что две среды 1 и 2, имеющие диэлектрические проницаемости соответственно ε_1 и ε_2 , разделены неровной поверхностью, и монохроматическое излучение частоты ω распространяется из

среды 1 в среду 2 (Рисунок 4.1). Для рассматриваемого типа поверхности можно определить некую среднюю поверхность $z = 0$, относительно которой будет отсчитываться локальная высота неровностей $z = H(\mathbf{p})$ ($\mathbf{p} = (x, y)$ - радиус вектор проекции точки поверхности на плоскость $z = 0$). Существует широкий класс поверхностей, неровности которых имеют два масштаба. Крупный масштаб, связан, как правило, с процессом целенаправленного формирования поверхности, например, путем травления или эпитаксиального напыления. Он может создаваться целенаправленно, например, при изготовлении эшелетов или возникать из-за особенностей технологии. Мелкий масштаб почти всегда обусловлен несовершенством технологии, флуктуациями и т.п. Соответственно функцию $H(\mathbf{p})$ представим как сумму:

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

где $\zeta(\mathbf{p})$ - высота крупномасштабных неровностей, $h(\mathbf{p})$ - мелкомасштабные флуктуации высоты. В дальнейшем ограничимся одномерным рельефом крупномасштабных неровностей: $\zeta(\mathbf{p}) = \zeta(x)$ (на рис. 4.1 они показаны пунктиром).

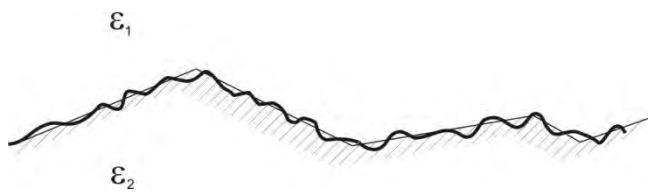


Рисунок 4.1 Одномерный рельеф крупномасштабных неровностей

Диэлектрическую проницаемость будем описывать с помощью ступенчатых функций Хэвисайда $\theta(z)$:

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

где $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Для рентгеновских лучей ввиду малого отличия диэлектрических проницаемостей ε_1 , ε_2 от единицы всегда выполняется

неравенство $\Delta \ll 1$. Исследование рельефа поверхности с помощью рентгеновских лучей обычно выполняется при малых углах скольжения. В этих случаях электромагнитное поле описывается скалярным уравнением Максвелла вида

$$(\nabla^2 + k_0^2)E(\mathbf{r}) = -V(\mathbf{r}), \quad (4.3)$$

где $E(\mathbf{r})$ – напряженность электрического поля,

$$V(\mathbf{r}) = \Delta \bar{\omega}^2 E(\mathbf{r}), \quad k_0^2 = \varepsilon_1 \bar{\omega}^2, \quad \bar{\omega} = \omega / c \quad (4.4)$$

Обозначим статическую функцию Грина бесконечной среды как :

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (4.5)$$

которая является решением уравнения с сингулярной правой частью:

$$(\nabla^2 + k_0^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.6)$$

Согласно теореме Грина поле $E(\mathbf{r})$ удовлетворяет следующему интегральному уравнению [123, 131]:

$$E(\mathbf{r}) = \int d^3 r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') + \oint ds' \mathbf{n}' [E(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' E(\mathbf{r}')]. \quad (4.7)$$

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 рассеивателя, если известны значения поля и его производной на поверхности. Действительно, пусть точка наблюдения \mathbf{r} находится внутри рассеивателя, далеко от границы раздела сред. Тогда, поскольку функция $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и ее производная стремятся при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ к нулю, вклад второго интеграла в значение $E(\mathbf{r})$ мал по сравнению с вкладом первого интеграла. Если же точка \mathbf{r} расположена в среде 1, то можно рассматривать только поверхностный интеграл и не учитывать влияние объема, поскольку поляризация объема рассеивателя учитывается в граничных значениях E и $\frac{\partial E}{\partial n}$.

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, выражаемое через коэффициенты Френеля отражения R и преломления T [132]:

$$E(\mathbf{p}, z) = \begin{cases} E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{p} - i\nu_0 z) + R(\kappa_0) E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{p} + i\nu_0 z), & z > 0 \\ T(\kappa_0) E_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{p} + i\nu_t z), & z < 0 \end{cases}, \quad (4.8)$$

где первое слагаемое в верхней строке (4.8) представляет падающую волну с амплитудой E_0 , второе слагаемое – отраженную волну, а нижняя строка – преломленную волну. В формулах (8) κ_0 - тангенциальная компонента волнового вектора падающей волны, ν_0 и ν_t - нормальные компоненты волновых векторов падающей и преломленной волн, т.е.

$$\mathbf{k}_0 = \kappa_0 - \nu_0 \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{k}_t = \kappa_0 - \nu_t \mathbf{e}_z.$$

$$\nu_0 = \sqrt{\varepsilon_1 \bar{\omega}^2 - \kappa_0^2} \quad \nu_t = \sqrt{\varepsilon_2 \bar{\omega}^2 - \kappa_0^2} \quad (4.9)$$

При заданном \mathbf{k}_0 коэффициенты R и T являются функциями κ_0 :

$$R(\kappa_0) = \frac{\nu_0 - \nu_t}{\nu_0 + \nu_t}, \quad T(\kappa_0) = \frac{2\nu_0}{\nu_0 + \nu_t}. \quad (4.10)$$

Вычислим значение объемного интеграла, входящего в выражение (4.7). Для этого в функции Грина (4.5) перейдем к представлению Вейля [133], которое учитывает трансляционную симметрию вдоль границы раздела:

$$G(\mathbf{p} - \mathbf{p}'; z, z') = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} g(\mathbf{k}; z, z') \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')) \quad (4.11)$$

где

$$g(\mathbf{k}; z, z') = \frac{i}{2\nu} [\theta(z - z') \exp(i\nu(z - z')) + \theta(z' - z) \exp(i\nu(z' - z))]. \quad (4.12)$$

Здесь величина ν может принимать как действительные, так и мнимые значения:

$$\nu = \begin{cases} \sqrt{\varepsilon_1 \bar{\omega}^2 - \kappa^2}, & \kappa^2 < \varepsilon_1 \bar{\omega}^2 \\ i\sqrt{\kappa^2 - \varepsilon_1 \bar{\omega}^2}, & \kappa^2 > \varepsilon_1 \bar{\omega}^2 \end{cases}. \quad (4.13)$$

Знак перед i выбран из условия затухания поля на бесконечности ($\text{Im} \nu > 0$). Нетрудно проверить, что решение $E(\boldsymbol{\rho}, z)$ (4.8) при $z > 0$ обращает в нуль объемный интеграл:

$$\int d^3 r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') = \Delta \bar{\omega}^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^0 d^2 \rho' \int dz' g(\mathbf{k}; z, z') E(\boldsymbol{\rho}', z') \exp(i \mathbf{k}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')) = 0. \quad (4.14)$$

В то же время вычисление поверхностного интеграла в (4.7), при котором в качестве поля на поверхности берется аналитическое продолжение функции $E(\boldsymbol{\rho}, z)$ (4.8), показывает, что интеграл точно равен напряженности отраженной волны:

$$\oint ds' \left[E(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial E(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] = R(\kappa_0) E_0 \exp(i \kappa_0 \boldsymbol{\rho} + i \nu_0 z). \quad (4.15)$$

Таким образом, можно утверждать, что поверхностный интеграл в уравнении (4.7) (интеграл Кирхгоффа, [132]), является решением граничной задачи отражения электромагнитных волн от гладкой поверхности. В дальнейшем будем считать, что это справедливо и для неровных границ раздела.

Учет крупномасштабных неровностей в задаче отражения.

Чтобы найти поле в случае неровной поверхности, используем приближение касательной плоскости, согласно которому рассеивающая поверхность разбивается на ячейки таким образом, что внутри каждой ячейки поверхность рассматривается как локально плоская и считается частью некой бесконечной плоскости, наклоненной к средней плоскости раздела сред. Очевидно, такое рассмотрение возможно, когда длина волны $\lambda \ll l$, где l – характерный размер ячеек. Касательные плоскости будем проводить к крупномасштабным неровностям так, что модельный рельеф будет выглядеть, как показано на Рисунке 4.1. Мелкомасштабные флуктуации при этом отсчитываются от наклонных касательных плоскостей.

Если для E воспользоваться выражением (4.8), а точку наблюдения расположить в зоне дифракции Фраунгофера, то для рассеянной волны получим выражение [124]

$$E_r(\mathbf{r}) = -\oint ds' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{n}' (i\mathbf{k}_r + \nabla') E(\mathbf{r}'). \quad (4.16)$$

Для поверхности, состоящей из локально плоских участков p , интеграл в (4.16) разбивается на сумму интегралов по участкам с нормальными \mathbf{n}_p :

$$E_r(\mathbf{r}) = \frac{ie^{ik_0 r} E_0}{4\pi r} \sum_p \oint ds_p [R(\theta_0, \mathbf{n}_p) \mathbf{v} - \mathbf{w}] \mathbf{n}_p e^{iv r_p}, \quad (4.17)$$

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.

Протяженность каждого участка в направлении x должна быть достаточно большой, чтобы не сказывались краевые эффекты. Модельные расчеты показывают, что отражение от плоского участка можно считать почти зеркальным (превышение зеркального пика над фоном в 10 раз), когда отношение длины участка l к длине волны $l/\lambda > 10^3$.

Для нахождения потока энергии излучения, отраженного в определенном направлении, вычислим вектор Пойнтинга. Полагаем излучение поляризованным вдоль оси y , т.е. $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_r(\mathbf{r}) \mathbf{e}_y$, а вектор напряженности магнитного поля равен

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\omega} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \frac{i\sqrt{\varepsilon_1} e^{ik_0 r} E_0}{4\pi r} (\mathbf{n}_r \times \mathbf{e}_y) \sum_p I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p), \quad (4.18)$$

где $\mathbf{n}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}$,

$$I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) = \oint ds_p [R(\theta_0, \mathbf{n}_p) \mathbf{v} - \mathbf{w}] \mathbf{n}_p e^{iv r_p}, \quad (4.19)$$

θ_r - угол наклона вектора \mathbf{k}_r к средней плоскости $z = 0$. При вычислениях в формуле (4.18) опущены слагаемые порядка r^{-2} . Тогда вектор Пойнтинга равен

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re}(\mathbf{E}^*(\mathbf{r}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r})) = \frac{c\sqrt{\varepsilon_1}E_0^2}{128\pi^3 r^2} \mathbf{n}_r \left| \sum_p I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) \right|^2. \quad (4.20)$$

Дифференциальное сечение рассеяния выражается как предел отношения [135]:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r^2 S(r)}{S_0}, \quad (4.21)$$

где S_0 – плотность потока энергии в падающей волне:

$$S_0 = \frac{c\sqrt{\varepsilon_1}E_0^2}{8\pi} \sin \theta_0. \quad (4.22)$$

В итоге получим

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2} \frac{\sin \theta_r}{\sin \theta_0} \left| \sum_p I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) \right|^2. \quad (4.23)$$

Здесь θ_r – угол наклона элемента телесного угла $d\Omega$ к плоскости $z = 0$, \mathbf{n}_p – нормали локально плоских участков поверхности. Поскольку $\frac{dP}{d\Omega}$, (4.23), расходится при $\theta_0 \rightarrow 0$, может показаться, что полученная формула справедлива только вдали от скользящих углов падения. Однако в (4.23) входит множитель $\frac{\sin \theta_r}{\sin \theta_0}$, и область применимости этой формулы может быть расширена на малые значения θ_0 , если углы наблюдения θ_r также малы.

При вычислении интеграла (4.19) учтем, что нормаль наклонного участка записывается через орт - векторы \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_z как

$$\mathbf{n}_p = -\mathbf{e}_x \sin \alpha_p + \mathbf{e}_z \cos \alpha_p, \quad (4.24)$$

где α_p – угол между нормалью к участку p и осью z (Рисунок 4.2), а радиус-вектор точки на поверхности равен $\mathbf{r}_p = \mathbf{e}_x x_p + \mathbf{e}_z z_p$, где $x_p = X_p + x'_p$, $z_p = Z_p + z'_p$. Величины X_p, Z_p представляют координаты начала участка p , а x'_p, z'_p –

координаты внутри участка, причем $z'_p = \zeta_p(x_p) + h(x_p, y)$ – сумма высот неровностей двух масштабов. Векторы \mathbf{v}, \mathbf{w} , а также элемент поверхности ds_p равны

$$\mathbf{v} = k_0 [(\cos \theta_0 - \cos \theta_r) \mathbf{e}_x - (\sin \theta_0 + \sin \theta_r) \mathbf{e}_z],$$

$$\mathbf{w} = k_0 [(\cos \theta_0 + \cos \theta_r) \mathbf{e}_x - (\sin \theta_0 - \sin \theta_r) \mathbf{e}_z],$$

$$ds_p = L_y \sec \alpha_p dx_p,$$

где L_y – полная длина рассеивающей поверхности вдоль оси y .

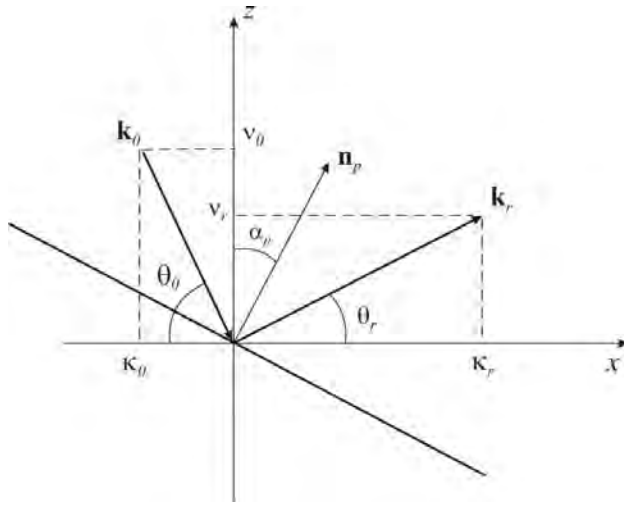


Рисунок 4.2. Геометрия рассеяния.

В результате для I_p будем иметь следующее выражение:

$$I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) = e^{iv_x X_p} k_0 L_y \int dx_p (b_p - a_p \zeta'_p) \exp [i(v_x + \zeta'_p v_z) x'_p + iv_z h(x'_p, y)], \quad (4.25)$$

где $\zeta'_p = \frac{d\zeta_p}{dx} = \operatorname{tg} \alpha_p$, v_x и v_z – это x и z -компоненты вектора рассеяния \mathbf{v} .

Величины a_p , b_p в (25) выражаются через коэффициент Френеля $R = R(\theta_0, \mathbf{n}_p)$ для наклонного участка p :

$$a_p = (1 - R) \cos \theta_0 + (1 + R) \cos \theta_r, \quad b_p = -(1 - R) \sin \theta_0 + (1 + R) \sin \theta_r. \quad (4.26)$$

Отметим, что зеркальному отражению от наклонной плоскости соответствует угол $\theta_r = \theta_0 - 2\alpha_p$ (см. Рисунок 4.2).

Усреднение по неровностям профиля.

При вычислении сечения рассеяния (4.23) необходимо выполнить усреднение по мелкомасштабным шероховатостям, т.е. вычислить среднее вида:

$$\langle e^{iv_z h(x_p, y) - iv_z h(x_{p'}, y)} \rangle = \left| \langle e^{iv_z h(x_p, y)} \rangle \right|^2 + \langle e^{iv_z h(x_p, y) - iv_z h(x_{p'}, y)} \rangle_c, \quad (4.27)$$

где первое слагаемое дает когерентную (относительно мелкого масштаба) и некогерентную компоненты интенсивности рассеяния (индекс c обозначает скоррелированную часть среднего). В дальнейшем для простоты будем опускать некогерентную компоненту в (4.27), считая, что корреляция между флуктуациями неровностей мелкого масштаба отсутствует. Если высоты точек поверхности относительно крупномасштабных неровностей распределены по Гауссу:

$$f(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_h} \exp\left(-\frac{h^2}{2\sigma_h^2}\right), \quad (4.28)$$

то для среднего в первом слагаемом (4.27) будем иметь [122, 125]

$$\langle e^{iv_z h(x_p)} \rangle = e^{-M_h}, \quad M_h = \frac{1}{2} v_z^2 \sigma_h^2, \quad (4.29)$$

где σ_h – дисперсия распределения высот мелких шероховатостей. Выражение (4.29) справедливо при $|v_z \sigma_h| \ll 1$, т.е. при малых углах рассеяния. Учитывая (4.29), для среднего от интеграла I_p будем иметь:

$$\langle I_p(\theta_0, \theta_r, \mathbf{n}_p) \rangle_h = e^{-M_h} e^{iv_x X_p} k_0 L_y \int dx_p (b_p - a_p \zeta'_p) \exp[i(v_x + \zeta'_p v_z) x_p]. \quad (4.30)$$

Обозначение координаты x'_p под знаком интеграла заменено на x_p . Нижний индекс в среднем $\langle \dots \rangle_h$ обозначает усреднение по переменной h .

Усреднение по крупномасштабным неровностям будем выполнять только для когерентной амплитуды рассеяния, тогда

$$\langle \sum_p I_p \rangle_{\zeta, h} = e^{-M_h} k_0 L_y \langle \sum_p e^{iv_x X_p} \int dx_p (b_p - a_p \zeta'_p) \exp[i(v_x + \zeta'_p v_z) x_p] \rangle_{\zeta}, \quad (4.31)$$

где угловые скобки $\langle \dots \rangle_{\zeta, h}$ означают усреднение по крупномасштабному рельефу ζ и по мелкомасштабным флуктуациям h . После интегрирования по каждому участку получим

$$\langle \sum_p I_p \rangle_{\zeta, h} = e^{-M_h} k_0 L_y \langle \sum_p \frac{C_p}{i\beta_p} e^{iv_x X_p} (e^{i\beta_p l_p} - 1) \rangle_{\zeta}, \quad (4.32)$$

где $\beta_p = v_x + \zeta'_p v_z$, $C_p = a\zeta'_p - b$, l_p – длина участка вдоль x . Пользуясь определениями (26), можно показать, что

$$\beta_p = \frac{k_0}{\cos \alpha_p} [\cos(\theta_0 + \alpha_p) - \cos(\theta_r - \alpha_p)], \quad (4.33)$$

$$C_p = \frac{1}{\cos \alpha_p} \{ \sin(\theta_0 + \alpha_p) - \sin(\theta_r - \alpha_p) - R[\sin(\theta_0 + \alpha_p) + \sin(\theta_r - \alpha_p)] \}. \quad (4.34)$$

Модельный профиль.

Чтобы найти статистическое среднее по крупномасштабным неровностям (4.32), необходимо использовать модельный профиль, который на практике определяется, вообще говоря, технологией создания поверхности. Допустим, что крупномасштабный профиль поверхности является одномерным и имеет вид, показанный на рис. 4.3.

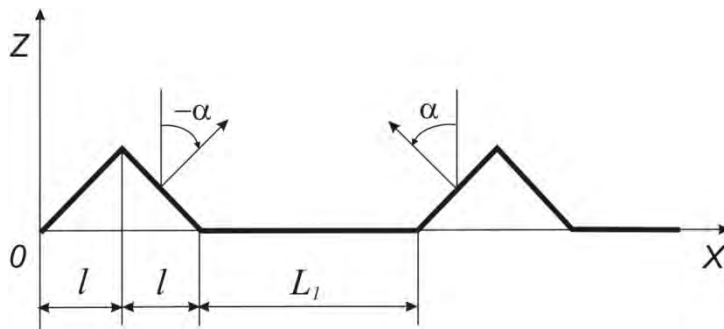


Рисунок 4.3. Модельный крупномасштабный профиль поверхности

Данный профиль представляет собой набор одинаковых одномерных бугорков (напоминающих сечение нанопроводов), расстояние между которыми

является случайной величиной. В сумму по p в (4.27) дают вклад участки с наклонами α и $-\alpha$, который выносится за знак среднего, и дают вклад 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. Тогда координату начала p -го участка можно записать в виде:

$$X_p = 2l(p-1) + \sum_{s=1}^{p-1} L_s = (p-1)\Lambda + \sum_{s=1}^{p-1} \Delta L_s, \quad (4.35)$$

где $\Lambda = 2l + \bar{L}$ – длина «средней» ячейки вдоль оси x .

Представим сумму по p в виде двух сумм – по ячейкам t и по номерам участков j внутри ячейки ($j=1, 2, 3$):

$$\left\langle \sum_{p=1}^{3N} I_p \right\rangle_{\zeta, h} = \left\langle \sum_{t=1}^N \sum_{j=1}^3 I_{tj} \right\rangle_{\zeta, h}, \quad (4.36)$$

где N – число ячеек. Тогда (4.37)

$$\left\langle \sum_p I_p \right\rangle_{\zeta, h} = e^{-M_h} k_0 L_y \left\{ l \left[C_+ \operatorname{sinc}\left(\frac{\beta_+ l}{2}\right) + C_- e^{iv_x l} \operatorname{sinc}\left(\frac{\beta_- l}{2}\right) \right] \left\langle \sum_t e^{iv_x X_t} \right\rangle_{\zeta} + \bar{L} C_0 e^{iv_x 2l} \left\langle \sum_t e^{iv_x X_t} (e^{iv_x L_t} - 1) \right\rangle_{\zeta} \right\}$$

,

где $\operatorname{sinc}(x) \equiv \frac{\sin(x)}{x}$, а коэффициенты C, β равны

$$C_{\pm} = \pm atg\alpha - b, \quad C_0 = -b, \quad \beta_{\pm} = v_x \pm v_z tg\alpha. \quad (4.38)$$

Вычисляя средние, входящие в (4.37), предполагаем, что случайные величины ΔL_p , которые определяют координаты участков X_p (4.35), независимы.

При этом

$$\left\langle e^{iaX_t} \right\rangle_{\zeta} = e^{ia(t-1)\Lambda} \left\langle e^{ia \sum_s \Delta L_s} \right\rangle_{\zeta} = e^{ia(t-1)\Lambda} \prod_{s=1}^{t-1} \left\langle e^{ia\Delta L_s} \right\rangle_{\zeta}. \quad (4.39)$$

Для гауссова распределения величин ΔL_s имеем

$$\langle e^{ia\Delta_s} \rangle_\zeta = e^{-M_L}, \quad M_L = \frac{1}{2} a^2 \sigma_L^2, \quad (4.40)$$

где σ_L - дисперсия распределения участков по длинам. Учитывая равенства (4.38) – (4.40) при вычислении правой части (4.37), получим

$$\langle \sum_p I_p \rangle_{\zeta,h} = \sum_{j=1}^3 F_j, \quad (4.41)$$

где F_j описывают вклады от трех типов участков (с тремя значениями углов наклона):

$$F_j = L_y \bar{l}_j k_0 C_j \exp(i\beta_j \bar{X}_j - M_h) \operatorname{sinc}\left(\frac{\beta_j \bar{l}_j}{2}\right) \sum_{t=1}^N \exp[iv_x \Lambda(t-1) - M_L(t-1)]. \quad (4.42)$$

Здесь коэффициенты C_j, β_j даются равенствами типа (4.38), причем $C_1 = C_+, \beta_1 = \beta_+, C_2 = C_-, \beta_2 = \beta_-, C_3 = C_0, \beta_3 = v_x$. Средние длины участков равны $\bar{l}_1 = \bar{l}_2 = l$ и $\bar{l}_3 = \bar{L}$. Величина \bar{X}_j – это координаты средин участков внутри ячейки: $\bar{X}_1 = l/2, \bar{X}_2 = 3l/2, \bar{X}_3 = 2l + \bar{L}/2$.

Функции F_j (4.42) и соответственно амплитуда рассеяния зависят от угла наблюдения θ_r через величины C_j, β_j и v_x . Осциллирующая функция $\operatorname{sinc}\left(\frac{\beta_j \bar{l}_j}{2}\right)$, входящая в выражение (4.42), принимает максимальное значение 1 при $\beta_j = 0$, что отвечает условию зеркального отражения от локально плоского участка j , а именно: $\theta_r = \theta_0 + 2\alpha_j$. При этом

$$C_j = -\frac{2R \sin(\theta_0 + \alpha_j)}{\cos \alpha_j}. \quad (4.43)$$

Сечение когерентного рассеяния выражается через квадрат среднего (4.41) и оказывается равным

$$\left| \langle \sum_p I_p \rangle_{\zeta,h} \right|^2 = L_y^2 k_0^2 |H(v_x \Lambda, M_L)|^2 \left| \sum_{j=1}^3 D_j \exp(i\beta_j \bar{X}_j) \right|^2, \quad (4.44)$$

где $D_j = C_j \frac{\bar{l}_j}{\lambda} \operatorname{sinc}\left(\frac{\beta_j \bar{l}_j}{2}\right)$, а функция $H(v_x \Lambda, M_L)$ равна

$$H(v_x \Lambda, M_L) = \sum_{t=1}^N \exp[iv_x \Lambda(t-1) - M_L(t-1)] \quad (4.45)$$

и представляет собой сумму фазовых множителей, отвечающих набегу фазы волн, отраженных от «средних» ячеек, следующих с периодом Λ . Нерегулярность рельефа, описываемая в данной модели через отклонения от периодичности ΔL_s , учитывается множителями $\exp[-M_L(t-1)]$. Члены под знаком суммы в правой части (4.44) описывают когерентный вклад локально плоских участков j , входящих в «среднюю» ячейку.

Сверхструктурные максимумы. Ослабление интенсивности когерентного рассеяния.

Рассмотрим подробнее влияние на амплитуду рассеяния множителей $\exp[-M_L(t-1)]$, входящих в сумму (4.45). Заметим, что для периодического крупномасштабного рельефа дисперсия равна нулю $\sigma_L = 0$ и, соответственно, $M_L = 0$. При этом $|H|^2$ переходит в интерференционную функцию Лауэ

$$|H(v_x \Lambda)|^2 = \frac{\sin^2(v_x \Lambda N / 2)}{\sin^2(v_x \Lambda / 2)}, \quad (4.46)$$

которая периодична по переменной v_x и имеет максимумы, когда знаменатель обращается в нуль, т.е. при $v_x \Lambda = 2\pi m$ (m – целое). Это означает, что при непрерывном изменении угла расположения датчика должны наблюдаться максимумы интенсивности отраженной волны (Рисунок 4.4) при углах θ_r , удовлетворяющих следующему условию:

$$\cos \theta_0 - \cos \theta_r = \frac{m\lambda}{\Lambda}. \quad (4.47)$$

Данное равенство совпадает с известным условием отражения от одномерного профиля с периодическим расположением горизонтальных участков [136].

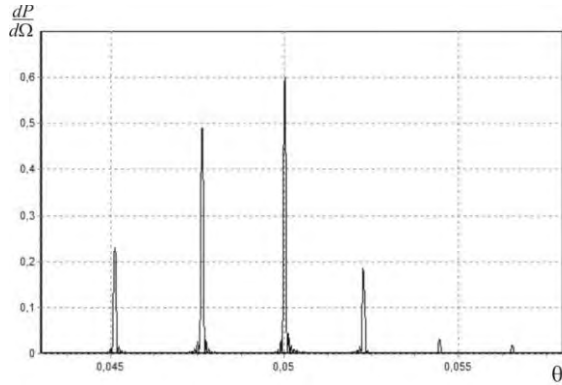


Рисунок 4.4. Сверхструктурные максимумы (в условных единицах) на кривой сечения когерентного рассеяния вблизи пика зеркального отражения $\theta_r = \theta_0 = 0.05$. Модель отвечает $\alpha=0.015$, $l=1450$, $L=10000$, $N=30$, $M_L=0.01$.

Когда рельеф не вполне периодичен, интенсивность когерентного рассеяния рентгеновских лучей падает. Известно, что ослабление амплитуды рассеяния за счет нарушений структуры кристалла в кинематической теории описывается фактором Дебая-Валлера $\exp(-W)$, [137], причем показатель W пропорционален среднему квадрату атомных смещений относительно позиций идеального кристалла. В рассматриваемой модели ситуация сложнее вследствие того, что отклонение длины одной ячейки от некоторого значения Λ_0 , присущего периодическому профилю, влечет сдвиг всех остальных ячеек. Ослабление вклада гармоник в сумму (4.44) имеет мультипликативный характер, а именно: каждая гармоника более высокого порядка вносит в $\exp(-M_L)$ раз меньший вклад, чем гармоника предыдущего, более низкого порядка. Это можно объяснить накоплением флуктуаций, определяющих расположение участков. Действительно, чтобы вычислить положение p -го участка, необходимо знать все значения ΔL_s предыдущих ($s < p$) участков (см. формулу (4.35)). Это приводит к

более значительному ослаблению, чем за счет общего фактора типа $\exp(-M_L)$ в общем случае использования среднего фактора Дебая -Валлера. Действительно, нетрудно вычислить значение функции $H(v_x\Lambda, M_L)$ (4.46) в максимуме $v_x\Lambda = 2\pi t$, которое оказывается равным $H_{\max} = (1 - e^{-M_L N}) / M_L$. Соответственно отношение этой величины к значению функции $H_{0,\max}$ для периодического профиля выражается формулой

$$\frac{H_{\max}}{H_{0,\max}} = \frac{1}{M_L N} (1 - e^{-M_L N}). \quad (4.48)$$

При малых $M_L N$ это отношение приближенно равно N , и стремительно уменьшается с увеличением числа ячеек. На Рисунке 4. 5 приведены зависимости отношения (4.48) при различных M_L , а также отмечен уровень значения фактора $\exp(-M_L)$.

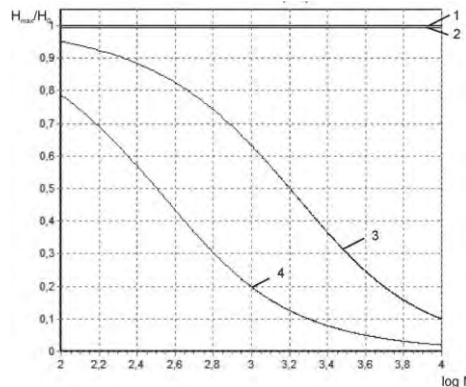


Рисунок 4.5. Зависимости от $\log N$ отношения $H_{\max} / H_{0,\max}$ (графики 3, 4), а также значения $\exp(-M_L)$ (графики 1, 2) для 1, 3 – $M_L = 0.001$; 2, 4 – $M_L = 0.005$.

Расчет дифференциального сечения рассеяния

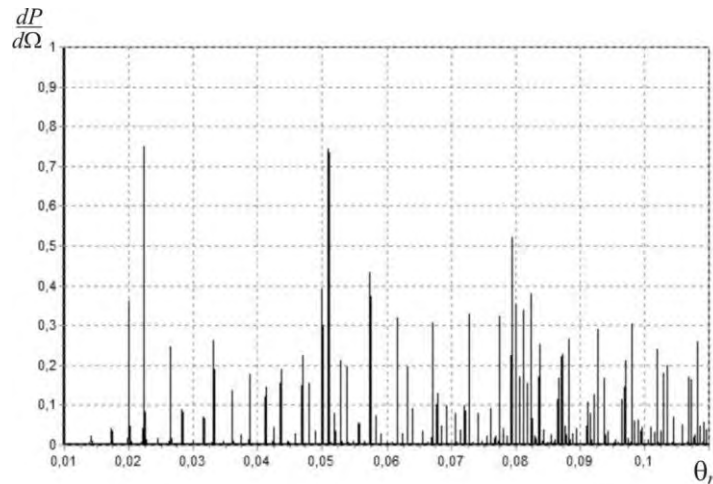
Приведем результаты расчета дифференциального сечения рассеяния для образца с модельным профилем поверхности, показанным на Рисунке 4.3. Для определенности считаем, что образец имеет форму квадрата со сторонами

$L_y = L_x = \Lambda N$. Тогда, используя формулы (4.23), (4.44), получим следующее выражение для сечения рассеяния, отнесенное к единице площади образца

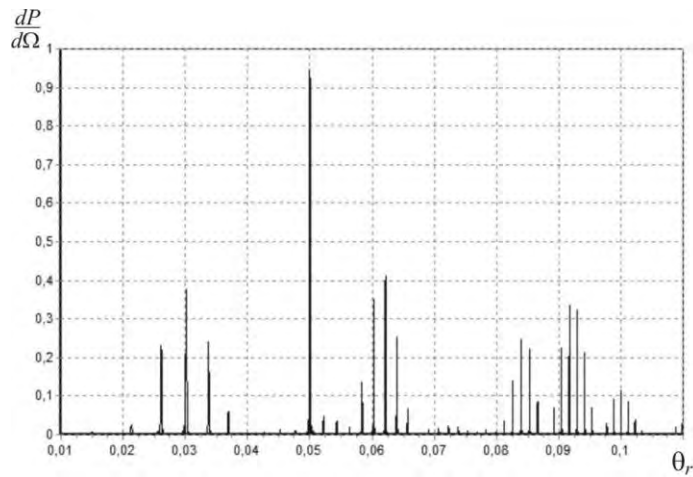
$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{\sin \theta_r}{4 \sin \theta_0} |H(v_x \Lambda)|^2 \left| \sum_{j=1}^3 D_j \exp(i\beta_j \bar{X}_j) \right|^2 . \quad (4.49)$$

Множитель $|H(v_x \Lambda)|^2$ определяет наличие множества пиков в когерентном рассеянии, обусловленных существованием «средней» решетки. Слагаемые $D_j \exp(i\beta_j \bar{X}_j)$ в сумме (4.49) описывают вклады отдельных участков «средней» ячейки с учетом интерференции отражаемых ими волн.

На Рисунке 4.6 показаны данные расчета сечения рассеяния на латеральной поверхности с числом ячеек $N=20$ как функции угла наблюдения θ_r , когда угол скольжения падающих лучей относительно средней поверхности составляет $\theta_0 = 0.05$ рад. Зависимость сечения рассеяния от θ_r имеет линейчатую структуру, причем каждая линия отвечает максимуму функции $|H(v_x \Lambda)|^2$.



a



б

Рисунок 4.6. Пики когерентного рассеяния (в условных единицах) при $\theta_0 = 0.05$, $\alpha = 0.015$, $N = 20$, $M_L = 0.01$. Угол полного внешнего отражения $\theta_c = 0.014$: а – $l = 10^4 \lambda$, $L = 10^4 \lambda$; б – $l = 1.6 \cdot 10^3 \lambda$, $L = 10^4 \lambda$

Когда размер каждого участка достаточно велик, в сечении рассеяния имеются максимумы, соответствующие зеркальному отражению от горизонтального ($\theta_r = \theta_0$) и наклонных ($\theta_r = \theta_0 \pm 2\alpha$) участков поверхности (Рисунок 4.6, а). Если протяженность какого-либо типа участков уменьшается, соответствующие максимумы исчезают. Так из расчета для модели с короткими наклонными участками (Рисунок 4.6б) видно, что максимумы в положениях $\theta_0 \pm 2\alpha$ отсутствуют, а оставшиеся группы линий обусловлены интерференцией гармоник, обусловленных краевыми эффектами. Эта интерференция описывается множителями $|\sum D_j \exp(i\beta_j \bar{X}_j)|^2$ в формуле (4.49).

Краевые эффекты могут быть настолько существенными, что при определенных углах скольжения и углах наклона α они могут приводить к полному погашению зеркального отражения даже от протяженных горизонтальных участков. Так при изменении угла скольжения с $\theta_0 = 0.05$ до $\theta_0 = 0.07$ в модели с $\alpha = 0.015$ зеркальное отражение становится неразличимым на

фоне остальных интерференционных максимумов (ср. Рисунок 4.6б и Рисунок 4.7). Однако, как показывает расчет, зеркальное отражение вновь появляется при увеличении угла скольжения до 0.08.

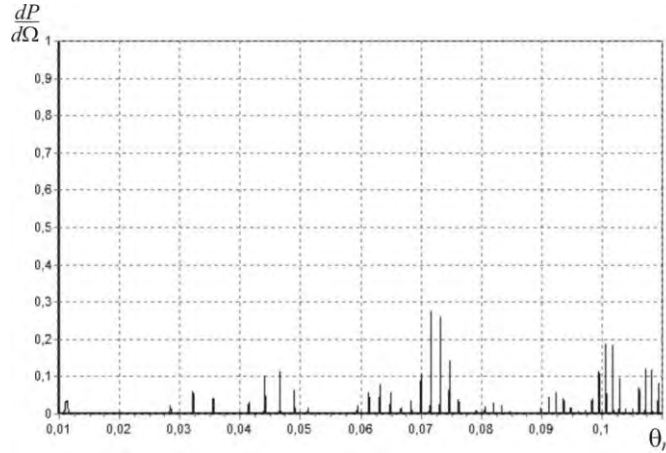


Рисунок 4.7. Пример подавления зеркального отражения из-за интерференции гармоник, связанных с краевыми эффектами. Расчет при $\theta_0 = 0.07$, $\alpha = 0.015$, $N = 20$, $M_L = 0.01$, $l = 1.6 \cdot 10^3 \lambda$, $L = 10^4 \lambda$.

Сказанное выше относится к малым углам наклона участков, когда разность фаз волн, отраженных от участков с различными α , невелика и соответственно существенна интерференция этих волн. Критерием малости углов наклона могут быть неравенства

$$|\beta_j \bar{X}_j| < 2\pi \quad (4.50)$$

для $j=1,2,3$. Подставим в это неравенство выражения, например, для случая $j=1$: $\beta_1 = v_x + v_z \operatorname{tg} \alpha$, $\bar{X}_1 = l/2$ и найдем v_x, v_z в точке $\theta_r = \theta_0 + 2\alpha$. Вычисления с точностью до членов квадратичных по α , приводят к следующему неравенству:

$$\alpha < \alpha_0 \approx \sqrt{\frac{\lambda}{l \cos \theta_0}}, \quad (4.51)$$

где α_0 отвечает углу наклона, при котором вместо (4.50) имеет место равенство $|\beta_j(\alpha_0) \bar{X}_j| \approx 2\pi$. При $l/\lambda \sim 10^4$ и малых углах θ_0 значение α_0 примерно

равно 0.03. При $\alpha < \alpha_0$ интерференция волн, отраженных от различных участков, становится существенной, и изменение условий отражения от одного участка существенно влияет на условия отражения от соседних участков. Когда $\alpha \gg \alpha_0$, подобное влияние практически отсутствует, а максимумы зеркального отражения формируются независимо друг от друга (Рисунок 4.8).

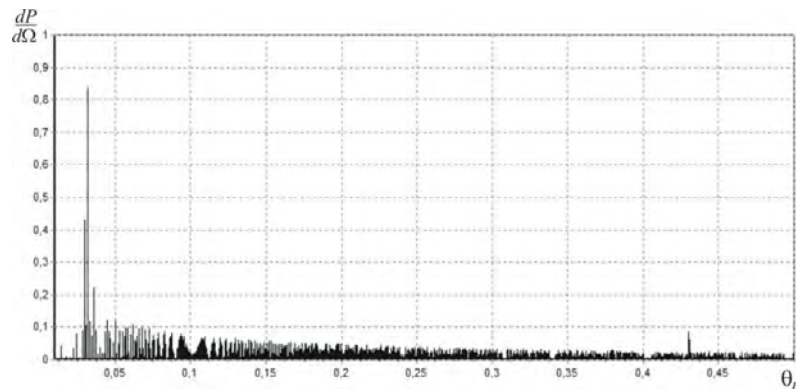


Рисунок 4.8. Пример независимого формирования пиков зеркального отражения θ_0 и $\theta_0 + 2\alpha$ при $\theta_0 = 0.03$, $\alpha = 0.2$ и прочих условиях, как в модели на Рисунке 4.7.

Выводы.

1. Проанализировано рассеяние рентгеновских лучей на неровной поверхности, которая описывается двухмасштабной моделью. Предложен подход, в котором на основе квазиклассического приближения Кирхгофа единым образом учтены неровности мелкого и крупного масштабов. В предположении статистической независимости неровностей различных масштабов вычислено дифференциальное сечение когерентного рассеяния рентгеновских лучей.

2. Рассмотрено рассеяние на модельной поверхности с одномерным крупномасштабным профилем, имеющим периодический мотив. На кривых когерентного рассеяния появляются пики зеркального отражения, сверхструктурные пики, связанные с наличием периода, и линии, обусловленные

краевыми эффектами и интерференцией волн, отраженных от участков поверхности с различными углами наклона.

3. Определен характер ослабления когерентного рассеяния при рассеянии на такой профилированной поверхности. Показано, что фактор ослабления не сводится к известным выражениям первого борновского приближения или DWBA. Если модельный профиль имеет крупномасштабные неровности, расположение которых отклоняется от периодического закона, то происходит существенное ослабление всего спектра когерентного рассеяния. Связано это с эффектом накопления флуктуаций, который нужно учитывать при определении параметров реальных крупномасштабных профилей поверхности.

4. Показано, что при анализе отражения рентгеновских лучей от поверхности с крупномасштабными неровностями необходимо учитывать краевые эффекты, которые приводят к осцилляциям сечения рассеяния при изменении угла наблюдения, а также интерференцию волн, отраженных от участков с различными углами наклона. Эта интерференция особенно существенна, когда углы наклона локально плоских участков поверхности незначительно отличаются друг от друга (см. неравенство (4.51)).

4.2 СТОЯЧИЕ НЕЙТРОННЫЕ ВОЛНЫ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ НА КРИСТАЛЛАХ

В данном разделе развита теория, описывающая угловую модуляцию выхода вторичных процессов в условиях динамической дифракции тепловых нейтронов по Брэггу и Лауэ. Рассмотрена возможность определения положения органических молекул на поверхности совершенных кристаллов в условиях возбуждения стоячих нейтронных волн. Предложено объяснение ранее полученным экспериментальным результатам для случая дифракции по Лауэ на кристалле кальцита.

Несмотря на большую проникающую способность рентгеновских лучей (РЛ) и нейтронов, методикам, использующим коротковолновое излучение, можно придать поверхностную чувствительность, применяя специальные схемы дифракции и рассеяние под скользящими углами падения.

Однако эти методы не могут дать прямой ответ на вопрос: в каком структурном положении находится конкретный атом, так как измеряемой величиной является интенсивность рассеяния или вторичного процесса. Альтернативой являются методы, позволяющие определить фазу рассеяния: многоволновая дифракция, рентгеновская голография и др. Одним из таких методов является метод стоячих рентгеновских волн (СРВ), сочетающий в себе дифракцию РЛ с позиционно чувствительной спектроскопией вторичных излучений (прежде всего фотоэлектронов и флуоресценции).

Регистрация вторичных излучений помогает решить сразу две проблемы, выделения слабого сигнала от поверхностных атомов, за счет малой глубины выхода, и регистрации этого сигнала нерентгеновскими методами.

В связи с известной аналогией между волновыми свойствами тепловых нейтронов и рентгеновских лучей естественно возникает идея применить методики стоячих волн к нейтронным структурным исследованиям. Одним из очевидных преимуществ метода нейтронных стоячих волн (СНВ) по сравнению с методом СРВ является на несколько порядков большая точность определения положения атома, испускающего вторичное излучение. Если в случае СРВ выход вторичных процессов связан с поглощением в электронной оболочке атомов с размерами $\sim 1 \text{ \AA}$, то в случае нейтронных вторичных процессов, определяемых ядерными реакциями, они зависят от значения амплитуды нейтронной стоячей волны в области ядра, т.е. разворачиваются на расстояниях порядка 10^{-5} \AA .

Нейтроноструктурные исследования обычно проводят в сочетании с рентгено- и электроноструктурными. Причем использование медленных

нейтронов позволяет в целом ряде случаев получить данные, которые не могут быть получены с помощью рентгеновских лучей и электронов или же получаются с плохим разрешением. Можно перечислить следующие группы экспериментов, где нейтроны предпочтительнее:

- исследования структуры водородосодержащих, в частности, органических соединений, позволяющие определять длину и форму связей;
- исследования структуры материалов с сильно (PbS, ThD₂, WO₂ и др.) или слабо (FeCo, Ni₃Mn, сплавы) различающимися атомными номерами;
- исследования систем, состоящих из определенных изотопов одного и того же элемента.

Отдельно стоят эксперименты в рамках метода СНВ с регистрацией вторичного сигнала в виде аномально большого некогерентного рассеяния дейтерия.

Помимо чисто структурной информации рассеяние нейтронов позволяет определить ядерные константы, в том числе поляризацию ядер, длины рассеяния и др. Первые эксперименты по динамической дифракции нейтронов, выполненные более чем 30 лет назад, были стимулированы поиском аналога эффекта Бормана при дифракции нейтронов на кальците. Несмотря на то, что сам эффект Бормана не был обнаружен, исследователи наблюдали угловую модуляцию выхода вторичного процесса - испускания γ -квантов в результате радиационного захвата нейтрона ядрами Са, характерную для стоячих нейтронных волн. К сожалению, как будет показано ниже, в этой работе допущена ошибка при расчете поляризуемости кристалла, что существенно повлияло на интерпретацию данных эксперимента.

Из-за малости амплитуды рассеяния для реализации динамической дифракции нейтронов требуются толстые совершенные кристаллы, выращивание которых было налажено только в последние десятилетия. Кроме того, применяемые в динамических экспериментах двукристалльные схемы

монохроматизации требуют нейтронных пучков с большим потоком. Оба этих обстоятельства сказались на том, что в последнее время большой интерес вызывает возбуждение стоячих нейтронных волн в слоистых некристаллических структурах, для которых характерны достаточно широкие “псевдо” брэгговские рефлексы, изучение которых не требует столь высокой степени монохроматизации излучения, падающего на образец.

Принципиальная схема метода СНВ проста: когерентная суперпозиция дифрагированной и прошедшей нейтронных волн формирует стоячую волну внутри кристалла, с пучностями, меняющими свое положение относительно отражающих плоскостей при изменении угла падения. В качестве вторичного процесса, регистрирующего положение атома удобно использовать гамма-кванты, образовавшиеся в результате радиационного захвата нейтронов ядром, например в случае кальцита это ядерная реакция $^{40}\text{Ca}(n, \gamma)^{41}\text{Ca}$. Глубина выхода гамма-квантов с характерной энергией 100 кэВ - 2 МэВ составляет величину порядка 1-5 см. Период стоячей нейтронной волны (также как и СВВ) пропорционален межплоскостному расстоянию для данного рефлекса (порядка 1-10 Å) и может быть изменен путем выбора соответствующего рефлекса. Исключая несколько элементов с большой шириной первого возбужденного ядерного уровня (Li, V, Cd), поглощение слабо сказывается на структуре нейтронной стоячей волны в кристалле.

В случае дифракции по Брэггу кривая качания будет представлять собой идеальный “столик Дарвина”, а так как длина экстинкции тепловых нейтронов сравнима со случаем рентгеновских лучей (50-100 мкм), то в угловой области рефлекса будет наблюдаться “провал” в выходе гамма-квантов, симметричный со столиком Дарвина. Объяснение этого эффекта состоит в том, что при большой глубине выхода вторичного процесса в его образовании участвует весь кристалл, а так как глубина проникновения нейтронов в кристалл в условиях дифракции

(длина экстинкции Λ_{ext}) много меньше, чем глубина проникновения вне условий дифракции (длина поглощения, $L_{\text{abs}} \sim 10$ см), то в угловой области рефлекса вторичное излучение образуется гораздо более тонким слоем кристалла, чем вне ее. Отметим, что аналогичный “провал” образуется и в выходе флуоресценции при формировании стоячей рентгеновской волны. В случае дифракции по Лауэ форма угловой зависимости выхода вторичного процесса не зависит от того рентгеновские или нейтронные стоячие волны используются и наблюдается выраженная угловая модуляция выхода вторичного процесса при Лауэ дифракции. Таким образом, нейтронные стоячие волны, возбужденные в идеальном кристалле в условиях дифракции, представляют собой измерительную линейку длиной в 1-10 А и ценой деления около 10^{-17} м.

Рассмотрим динамическую дифракцию тепловых нейтронов в идеальном кристалле с плоской поверхностью и вектором дифракции \mathbf{h} , направленным по нормали к поверхности (оси z). Распространение монохроматических тепловых нейтронов с энергией E внутри кристалла описывается уравнением Шредингера относительно спинорной волновой функции нейтрона, $\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \{\psi^+(r), \psi^-(r)\}$,

$$\left\{ \nabla^2 + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\widehat{V}_{nuc}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + \widehat{V}_m(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \right) \right\} \hat{\psi}(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.53)$$

где $\psi^+(r), \psi^-(r)$ - скалярные волновые функции, описывающие распространение пучка с +, - проекцией спина на выделенное направление z (которое пока не определено). $\widehat{V}_{nuc}(r, \sigma)$ - эффективный периодический ядерный потенциал, действующий на когерентную нейтронную волну и зависящий от спина нейтрона, $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$,

$$k^2 = 2mE/\hbar^2. \quad (4.54)$$

В первом борновском приближении в качестве ядерного потенциала можно использовать псевдопотенциал Ферми (т.е. рассматриваются предельно малые значения энергии нейтронов $E \rightarrow 0$)

$$\frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}_{nuc}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = -2\pi \langle \sum_i a_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle, \quad (4.55)$$

где сумма распространяется на все ядра в кристалле, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ - дельта-функция Дирака, a_i - длина рассеяния Ферми. Усреднение осуществляется по всем возможным местам расположения атомов и их изотопов, а также ориентациям ядерных моментов.

Существует два вида взаимодействия нейтрона с веществом: ядерное и электромагнитное, возникающее за счет наличия у нейтрона спина. Мы будем учитывать только ядерную часть взаимодействия, а все остальные взаимодействия (магнитное, швингеровское, спин-электронное и др.) в дальнейшем не учитывать.

Ядерное рассеяние может осуществляться двумя путями: через упругое рассеяние нейтрона на одном из нуклонов ядра, и через образование промежуточного компаунд ядра со временем жизни 10^{-14} - 10^{-17} с, которое в последующем распадается через различные каналы. Если при распаде из ядра не вылетают заряженные частицы, то происходит каскадное испускание γ -квантов через один или несколько резонансов, образованных переходами между основным и возбужденным состояниями ядра или возбуждение конверсионных электронов.

Основными каналами распада составного ядра являются: упругое и неупругое рассеяние нейтронов; процесс радиационного захвата нейтрона с последующим испусканием гамма кванта; ядерное деление; испускание заряженных частиц ((n, α) -, (n, p) -реакции) и др. Захват нейтрона с последующим ядерным делением наблюдается только для тяжелых изотопов, например для ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Am , ^{242}Am и некоторых других. Реакции с испусканием заряженных частиц возможны только для нескольких легких изотопов - $^6\text{Li}(n, \alpha)^3\text{T}$, $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}$, $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$, $^{35}\text{Cl}(n,p)^{35}\text{S}$. В Таблице 4.1 приведены сечения реакции, сечение радиационного захвата в среднем, полное сечение упругого рассеяния

($\sigma_{n,\alpha}, \sigma_{n,\gamma}, \sigma_e$) и некоторые другие параметры ядерного рассеяния для нейтронов с энергией 0.0235 эВ. Используя известные результаты теории s -рассеяния при наличии неупругих процессов, легко выразить длину рассеяния a через сечение упругого рассеяния (σ_e) и полное сечение ($\sigma_t = \sigma_{n,\gamma} + \sigma_e + \dots$):

$$a = \sqrt{\left(\frac{\sigma_e}{4\pi} - \left\{\frac{k\sigma_t}{4\pi}\right\}^2\right)} - i \frac{k\sigma_t}{4\pi}. \quad (4.56)$$

В принципе продукты всех этих реакций могут рассматриваться как возможные кандидаты на роль вторичного процесса в методе нейтронных стоячих волн. Благодаря тому, что глубина выхода заряженных частиц достаточно мала, появляется возможность исследовать структуру поверхности. Для измерения выхода таких вторичных процессов можно использовать модифицированное оборудование для счета фотоэлектронов, используемое в методе СРВ. Особое внимание здесь следует уделить ядерной реакции с основным изотопом азота, $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$, исследование угловой зависимости выхода которой позволяет, как это будет показано ниже, с высокой точностью определить положение атомов азота в органических пленках, нанесенных на поверхность кристалла. Аномально большой выход реакции в достаточно распространенных изотопах бора (19.8%) и лития (7,52%) делает их перспективными кандидатами на роль атомов меток.

Таблица 4.1. Сечение рассеяния тепловых нейтронов некоторыми элементами

NN	$\sigma_e, 10^{-28}$	$\sigma_t, 10^{-28}$	$\sigma_{n,\gamma}, 10^{-28}$	$\sigma_{n,\alpha,\gamma}, 10^{-28}$	$\alpha'', 10^{-17}$	$\alpha', 10^{-14}$	%
Li ⁶	0.95	950	0.04	940			7.52
B ¹⁰	4.27	385	0.1	3837			19.8
N ¹⁴	10.3	128	0.07	1.9			99.6
Ca ⁴	2.5	2.93	0.41	0.00	0.1	0.44	
O ¹⁶	3.76	3.76	0.00	0	0.2	0.54	
C ¹²	4.73	4.74	0.00	0	0.3	0.61	
Cd	5.6	252	252	0	16	0.66	
Si ²⁸	1.99	2.17	0.17	0			

Примечание. Все расстояния указаны в метрах.

Таким образом, все элементы можно условно разделить на “упруго рассеивающие” нейтроны (кальций, кремний, кислород) и на “поглотители” нейтронов (Таблица 1), которые дают большой выход вторичного процесса (γ -квантов для кадмия, альфа-частиц для бора, протонов для азота).

Если учитывать только ядерное рассеяние, то уравнения для определения нейтронных волновых функций с положительной и отрицательной проекцией спина совпадают, поэтому в дальнейшем мы не будем их различать. Заметим, что эти уравнения не совпадают при комбинированном магнитном и ядерном рассеянии. После разложения потенциала в ряд Фурье, учитывающий периодическое расположение атомов в кристалле, можно получить следующие выражения:

$$\{\nabla^2 + k^2(1 + \sum_g \varphi_g \exp(i\mathbf{g}(\mathbf{r} + \mathbf{u})))\}\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.57)$$

$$\varphi_g = \frac{4\pi}{Vk^2} \sum_i a_i \exp(-i\mathbf{g}\mathbf{r}_i),$$

где \mathbf{u} - возможное смещение атомов из равновесного положения.

Волновую функцию, описывающую распространение нейтронного пучка в условиях динамической дифракции, можно представить в виде суммы прошедшей (волновой вектор \mathbf{k}_0) и дифрагированной волн (волновой вектор $\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$):

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + \psi_g(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}_g\mathbf{r}) . \quad (4.58)$$

Обозначив

$$k^2 = 4(\pi/\lambda)^2, \quad (4.59)$$

и опуская быстро осциллирующие члены в (4.57), легко получить аналог уравнений Такаги—Топена для нейтронов:

$$\begin{aligned} 2i(\mathbf{k}_0, \nabla) \psi_0(z) + k^2 \varphi_0 \psi_0(z) + k^2 \varphi_{-g} \psi_g(z) \exp(-i\mathbf{g}\mathbf{u}) &= 0, \\ 2i(\mathbf{k}_g, \nabla) \psi_g(z) + (k^2 - k_g^2) \varphi_0 \psi_g(z) + k^2 \varphi_g \psi_0(z) \exp(i\mathbf{g}\mathbf{u}) &= 0. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Последние уравнения легко записать в форме, используемой в рентгеновской физике:

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_0(z)}{dz} &= \frac{i\pi}{\lambda\gamma_0} \{ \varphi_0 \psi_0(z) + \varphi_{-g} \psi_g(z) \exp(-ig\mathbf{u}) \}, \\ \frac{d\psi_g(z)}{dz} &= \frac{i\pi}{\lambda\gamma_g} \{ (\varphi_0 - \alpha) \psi_g(z) + \varphi_g \psi_0(z) \exp(ig\mathbf{u}) \}.\end{aligned}\quad (4.61)$$

где $\gamma_{0,g}$ косинусы углов между векторами $\mathbf{k}_{0,g}$ и внутренней нормалью к поверхности кристалла, λ - длина волны падающего излучения, α - параметр отстройки от точного условия Брэгга:

$$\alpha = \frac{(k^2 - k_g^2)}{k^2} \approx -2 \sin 2\vartheta_B (\vartheta - \vartheta_B). \quad (4.62)$$

Эксперименты, основанные на измерениях выхода вторичных γ -квантов, дают полное число гамма-квантов, зарегистрированных детектором. Стандартная формула для выхода вторичного процесса дает

$$N(\vartheta) = \int_0^T dz P(z) \frac{dN}{dz}(z, \vartheta), \quad (4.63)$$

где $\mathbf{P}(z)$ - вероятность для вторичного γ -кванта, испущенного ядром на глубине z , достичь поверхности кристалла. Число нейтронов, поглощенных в слое с толщиной dz , есть

$$\frac{dN}{dz}(z, \vartheta) = \Omega \left\{ |\psi_0(z)|^2 + |\psi_g(z)|^2 + 2\varepsilon \operatorname{Re}(\psi_0^*(z) \psi_g(z) \exp(ig\mathbf{u})) \right\}.$$

Отметим, что число поглощенных нейтронов может быть определено также как разница в интенсивностях входного и выходного потоков для слоя толщиной dz на глубине z , вычисленных на основе уравнений Такаги-Топена. Коэффициенты в (11) определены как:

$$\varepsilon = \frac{\operatorname{Im}(\varphi_0)}{\operatorname{Im}(\varphi_g)}, \quad \Omega = \frac{\operatorname{Im}(\varphi_0)}{8\pi\hbar} = \frac{\mu}{8\pi\hbar k}, \quad \mu = 2\pi \frac{\operatorname{Im}(\varphi_0)}{\lambda}. \quad (4.64)$$

Принимая во внимание большую энергию вторичных γ -квантов функцию глубины выхода $\mathbf{P}(z)$ можно аппроксимировать экспонентой,

$$\mathbf{P}(z) = \exp(-z/L). \quad (4.65)$$

Характерное значение глубины выхода L для энергии гамма кванта 1 МэВ составляет порядка $0.3-5 \text{ см}^{-1}$ и зависит от атомного номера Z .

Ограничимся случаем неискаженного кристалла ($\mathbf{gu} = 0$). Тогда после очевидных вычислений получим следующее выражение для амплитуд прошедшей и дифрагированной волн:

$$\psi_0(z) = \{ A_1 \exp(iKz) + A_2 \exp(-iKz) \} \exp(i\Delta z), \quad (4.66)$$

$$\psi_g(z) = \zeta \{ A_1(K + \delta) \exp(iKz) + A_2(-K + \delta) \exp(-iKz) \} \exp(i\Delta z),$$

где $A_{1,2}$ - амплитуды двух блоховских волн, распространяющихся в кристалле,

$$K = \sqrt{\delta^2 + \frac{\pi^2}{\lambda^2 \gamma_0 \gamma_h} \varphi_g \varphi_{-g}}, \quad \zeta^{-1} = \frac{\pi \varphi_{-g}}{\lambda \gamma_0}, \quad (4.67)$$

$$2(\delta, \Delta) = \frac{\pi}{\lambda \gamma_g} (\varphi_0 - \alpha) \mp \frac{\pi \varphi_0}{\lambda \gamma_0}.$$

Граничные условия в случае дифракции по Лауэ ($\gamma_g > 0$) дают на входной поверхности ($z = 0$):

$$\psi_0(0) = 1, \quad \psi_g(0) = 0 \quad (4.68)$$

дают следующие выражения

$$A_{1,2} = \frac{K \pm \delta}{K}. \quad (4.69)$$

Дифракция по Лауэ. Рассмотрим теперь экспериментальные данные по выходу гамма-квантов при дифракции нейтронов по Лауэ на кристаллах кальцита, полученные Ноулесом [138]. В этих экспериментах два почти совершенных кристалла кальцита были помещены в двухкристальный нейтронный спектрометр в параллельное положение (Рисунок 4.9), а затем были сняты кривые качания и измерена угловая зависимость выхода гамма-излучения за счет радиационного захвата нейтронов ядрами во втором кристалле при помощи NaI сцинтиляционного счетчика, установленного прямо поверх кристалла. Зарегистрированное γ -излучение с энергией 1.93 МэВ соответствовало первому

возбужденному состоянию ядра кальция при реакции $^{40}\text{Ca}(n, \gamma)^{41}\text{Ca}$. Превышение эффекта над фоном составляло -12%.

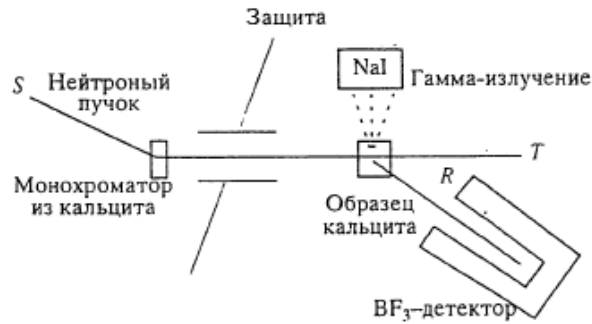


Рисунок 4.9. Схема эксперимента с СНВ.

Здесь следует отметить, что γ -спектрометры, основанные на германиевых детекторах (HPGe), позволяют подавить (в 5 раз) фоновое излучение, образующееся главным образом за счет эффекта Комптона, обладают высоким энергетическим разрешением 1-2 кэВ. Отношение сигнала к фону для них составляет порядка 1500%. Использование таких спектрометров открывает возможности для выделения сигнала от конкретного слоя поверхностных атомов благодаря тому, что энергия излучаемых гамма-квантов точно соответствует ядерному переходу и легко может быть вычтена из фона, даже в случае достаточно слабого сигнала.

Толщина кристалла кальцита в экспериментах Ноулеса составляла $T=5.3$ см (или $\sim 915 \Lambda_{\text{ex}}$), угол Брэгга - 12.42° , $\gamma_0/\gamma_h = 1.07$, длина волны падающих нейтронов составляла 1.3А. Глубина выхода вторичных γ квантов (поглощающихся и рассеивающихся из-за эффекта Комптона, фотоэффекта и образования пар электрон-позитрон при больших энергиях) была $L_\gamma = 1$ см.

Нейтронные восприимчивости кристалла кальцита для отражения (211) равны

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= 3.66 \times 10^{-6} + (1.67 \times 10^{-9})i \\ \varphi_0 = \varphi_g &= 2.245 \times 10^{-6} + (1.03 \times 10^{-9})i. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Ошибка Ноулеса при определении $Re \varphi_g$ привела к уширению расчетного профиля эффекта Бормана по сравнению с наблюдаемым.

На Рисунке 4.10 показаны экспериментальная (пунктир с метками), расчетная (сплошная) и приведенная в статье Ноулеса (пунктир) кривые выхода вторичных γ -квантов в результате радиационного захвата нейтронов.

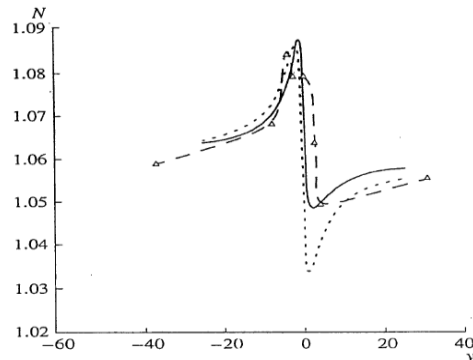


Рисунок 4.10. Экспериментальная (пунктир с метками), расчетная (сплошная) и приведенная в статье (пунктир) кривые выхода вторичных гамма-квантов в результате радиационного захвата нейтронов при дифракции по Лауэ.

В данном разделе рассмотрен случай образования СНВ при дифракционном рассеянии на кристаллах кальцита. В качестве вторичного процесса использовались гамма-кванты, образовавшиеся в результате радиационного захвата нейтронов ядром в результате ядерной реакции $^{40}\text{Ca}(n, \gamma)^{41}\text{Ca}$. Глубина выхода гамма-квантов с характерной энергией 100 кэВ–2 МэВ составляет величину порядка 1–5 см. В случае дифракции по Брэггу кривая качания представляет собой почти идеальный «столик Дарвина», а так как длина экстинкции для характерных нейтронных рефлексов, составляет 50–100 мкм, то в угловой области рефлекса будет наблюдаться «характерный» провал (см. Рисунок 4.10). Объяснение этого эффекта состоит в том, что 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) много меньше, чем глубина проникновения вне

дифракционного отражения (длина поглощения – 10 см), то выход вторичных гамма квантов существенно уменьшается.

В предельном случае, когда мнимая часть поляризуемости стремится к нулю, выход вторичного процесса описывается простой формулой (пунктирная линия на Рисунке 4.10):

$$N = c \left(1 - \frac{y}{1+y^2} \right), \quad (4.71)$$

где $y = \alpha / |Re\varphi_g|$ - известный параметр отстройки, используемый в динамической теории. Очевидно, что асимметрия кривой выхода достаточно хорошо описывается точными формулами с исправленными параметрами. Наблюдаемая достаточно сложная структура кривой выхода может быть объяснена следующими причинами:

- наличием в кристалле системы слегка разориентированных блоков, каждый из которых создает свою «собственную» кривую выхода,
- частичной поляризацией ядер, приводящей к различию в рассеянии нейтронов с разными проекциями спина,
- влиянием диффузной компоненты рассеяния, которая возникает за счет беспорядочного распределения изотопов и неопределенного момента ядра.

Следует отметить, что большое значение мнимой части поляризуемости не связано с сильным поглощением, а определяется в силу оптической теоремы полным сечением рассеяния на ядре.

На Рисунке 4.11а представлены расчетные кривые выхода вторичного процесса с глубиной выхода 2 см в случае дифракции по Брэггу на кристалле кальцита (сплошная линия) и на кристалле отавита, $CdCO_3$, (пунктирная линия). Все остальные параметры: отражение (2, 1,1), толщина кристалла 3.3 см, длина волны нейтронов 1.3 А, те же, что и в случае Лауэ дифракции. Приведенная кривая для отавита (пунктирная линия) отвечает амплитуде выхода уменьшенной

в 100 раз и кроме того значительно сужена, так как угловая переменная y для каждой кривой своя:

$$y_{Cd} = \alpha / |Re\varphi_g^{Cd}|. \quad (4.72)$$

Расчетные кривые качания для тех же кристаллов имеют вид "столика Дарвина" с очень резкими краями (малое поглощение), поэтому здесь мы их не приводим.

Считается, что кадмий является сильным поглотителем нейтронов, поэтому для сравнения был выбран кристалл отавита, структура которого полностью аналогична структуре кальцита, а дифракционные параметры для данного отражения имеют вид (приложение):

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= 4.24 \times 10^{-6} + (2.39 \times 10^{-7})i, \\ \varphi_g = \varphi_{-g} &= 2.72 \times 10^{-6} + (2.39 \times 10^{-7})i. \end{aligned} \quad (4.73)$$

В естественной смеси концентрация резонансного изотопа невелика, и как показывают прямые расчеты существенной вариации кривой выхода вторичных - квантов при замене кальция на кадмий не происходит.

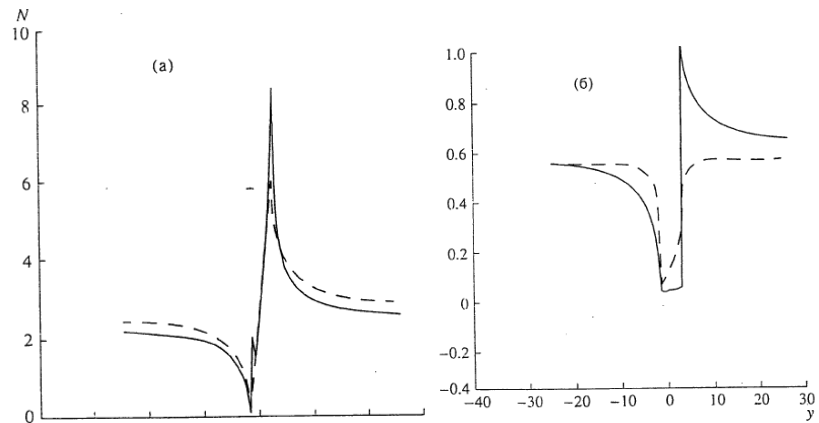


Рисунок 4.11. Кривые выхода вторичного процесса с малой глубиной выхода при дифракции по Брэггу на кристаллах кальцита (сплошная линия) и отавита (пунктирная линия). Кривые выхода вторичного процесса с большой глубиной выхода — вторичные гамма-кванты при дифракции по Брэггу на кристаллах кальцита (сплошная линия) и отавита (пунктирная линия).

На Рисунке 4.11 б показаны угловые зависимости выхода вторичных γ -квантов (глубина выхода 1 см) при дифракции по Брэггу. Сплошная кривая соответствует кристаллу кальцита (амплитуда увеличена в пять раз), пунктирные - отавиту. Параметры кристаллов те же, что и при расчете кривых на Рисунке 4.10а.

Как и было указано, при дифракции по Брэггу в угловой области рефлекса будет наблюдаться “провал” в выходе вторичного процесса с большой глубиной выхода (вторичные γ -кванты, рис. 4.10), а в случае процесса с малой глубиной выхода - выход пропорционален интенсивности нейтронной стоячей волны в атомных плоскостях.

Таким образом, при динамической дифракции тепловых нейтронов практически на любых монокристаллах формируется идеальная стоячая волна, которая может быть использована для определения положения атомов (вернее их ядер), осажденных на поверхность кристалла.

Исследование структуры поверхностных слоев. Произведем простейшие оценки эффективности регистрации вторичного процесса от атомарного слоя поверхностных атомов с площадью $S=1\text{см}^2$. Пусть эффективное сечение захвата нейтрона составляет $\sigma_{np} = 2$ барн (сечение для азота - 1.9 барн), т.е. при попадании нейтрона в область площадью $2 \times 10^{-28} \text{ м}^2$ около ядра происходит испускание протона. Если среднее расстояние между ядрами в слое $d = 5 \text{ \AA}$ и ядра не “затеняют” друг друга, то вероятность испускания протона при попадании 1 нейтрона на 1 см^2 составляет $P = \sigma_{np} S / d^2 = 8 \times 10^{-4}$.

В обычных реакторах на тепловых нейтронах формируется квазимахвелловской нейтронный спектр с температурой порядка 400 К, плотностью потока нейтронов 10^{14} н/с см^2 и угловой расходимостью пучка $20''$. Пусть после кристалла-монокроматора плотность потока нейтронов уменьшится до $N = 10^9 \text{ н/с м}^2$, тогда выход вторичных протонов составит величину, которая легко может быть зарегистрирована даже при малых толщинах слоя $NP = 8 \times 10^5 \text{ п/с}$.

В последнее время особый интерес вызывают исследования высокоорганизованных тонких органических пленок, осажденных на металлические (Ag, Ni) и полупроводниковые (Si, Ge) монокристаллы в сверхвысоком вакууме, в рамках техники Ленгмюра-Блоджетт и т.д. Обычным способом изучения их структуры является NEXAFS и фотоэмиссия с использованием синхротронного излучения.

Большая часть органических пленок содержит атомы азота, например DCNQI (dicyano-quinone- dimine) и TCNQ (tetracyano-quinodimethane), поэтому для исследования структурного положения атомов азота было бы целесообразным использовать в качестве вторичного процесса ядерную реакцию, $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$, с выходом в виде протонов. Учитывая то, что все протоны, испускаемые образцом, можно однозначно приписать ядрам азота, и то, что интенсивность процесса пропорциональна интенсивности стоячей волны над поверхностью кристалла, точность определения положения атома будет определяться размером его ядра.

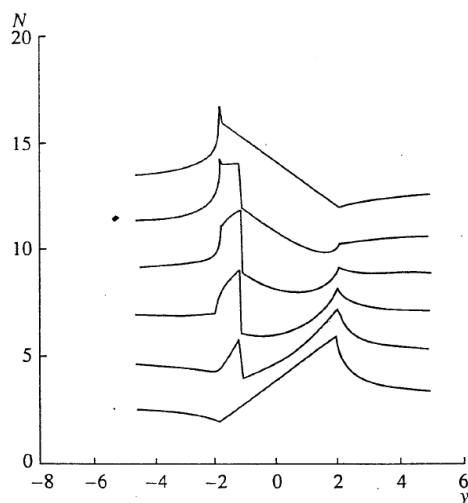


Рисунок 4.12. Угловые зависимости выхода вторичных протонов от слоя органических молекул на поверхности кристалла кальцита при дифракции по Брэггу.

На Рисунке 4.12 представлены угловые зависимости выхода вторичных протонов (интенсивности стоячей нейтронной волны) при расположении слоя

атомов на расстоянии $x = \frac{d(n-1)}{10}$, $n = 1 - 6$, от поверхности кристалла кальцита в случае симметричной дифракции по Брэггу, d - межплоскостное расстояние (период стоячей волны). Видно, что в предельном случае, когда поверхностный атом занимает позицию атома кристалла ($x = 0$) кривая выхода вторичного процесса совпадает с выходом от атомов кристаллической матрицы.

Таким образом, как и в случае стоячих рентгеновских волн, кривая выхода вторичного процесса под воздействием нейтронной стоячей волны проявляет уникальную чувствительность к положению атома над поверхностью кристалла, что открывает новые возможности для развития метода стоячих нейтронных волн.

В данном разделе представлено теоретическое обоснование метода стоячих нейтронных волн, позволяющего визуализировать формирование в исследуемом кристалле стоячей волны. Имеющиеся экспериментальные данные позволяют заключить, что в данных экспериментах нейтроны наглядно проявляют свою волновую природу. Для их описания можно использовать хорошо разработанные рентгеновские методы. Однако в отличие от рентгеновских лучей нейтроны обладают спином и сильно взаимодействуют с ядром, что позволяет исследовать как магнитные, так и чисто ядерные эффекты. Причем взаимодействие нейтронов с веществом может проявляться в широкой гамме вторичных процессов: - испускание ядром гамма-квантов, альфа-, бета- частиц и протонов, формирование конверсионных электронов и флуоресцентного излучения электронными оболочками.

4.3 ТЕПЛОВОЕ ДИФФУЗНОЕ РАССЕЙАНИЕ ПРИ УСЛОВИИ СУЩЕСТВОВАНИЯ СТОЯЧЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ В КОЛЕБЛЮЩЕМСЯ КРИСТАЛЛЕ

Использование дополнительной модуляции кристаллической решетки под воздействием УЗ позволяет существенно расширить возможности стандартного метода СРВ благодаря одновременной регистрации дифракционных кривых и кривых выхода вторичного процесса (теплого диффузного излучения (ТДР)) от основного рефлекса и от всего набора сателлитов.

Известно, что возможности для исследования теплового диффузного рассеяния (ТДР) существенно расширяются в условиях рентгеновской динамической дифракции, когда в результате интерференции падающей и отраженной волн в кристалле формируется пространственно-периодическая стоячая рентгеновская волна (СРВ). За счет модуляции поля на атомах, формирующих кристаллическую решетку, при изменении угла падения существенно меняется и интенсивность диффузно рассеянного излучения. Известно, что метод СРВ активно применяется в классических экспериментах с детектированием флуоресценции и фотоэлектронов, возникших в результате фотоэффекта. И связано это с тем, что интенсивность вторичных неупруго рассеянных фотонов - значительно меньше и измерить его значительно сложнее, чем в случае выхода фотоэлектронов или характеристической флуоресценции. Известно, что существование стоячей рентгеновской волны в кристалле проявляет себя в обычном рентгеновском эксперименте через аномальную угловую зависимость поглощения (эффект аномальной прохождения в случае дифракции Лауэ) и через незначительную асимметрию кривой отражения в случае дифракции по Брэггу.

Между тем самый прямой и естественный метод практического наблюдения СРВ - это регистрация теплового диффузного рассеяния (ТДР), хотя поперечное

сечение данного процесса относительно малое по сравнению с сечением фотоэлектрического поглощения. Обычно в экспериментах, связанных с регистрацией выхода вторичного излучения, и в частности ТДР, соотношение между глубиной выхода вторичного излучения L , и глубиной проникновения рентгена в кристалл (длина исчезновения Λ) играют решающую роль. Однако в колеблющемся кристалле появляется третий параметр - длина волны ультразвука λ_s , который позволяет изменять длины экстинкции при дифракции на основном рефлексе и сателлитах. Колеблющийся кристалл можно представить в виде набора слоев с различными межплоскостными расстояниями (Рисунок 4.13). Каждый из таких слоев генерирует свои дополнительные рефлекссы (сателлиты), которые вместе с основным рефлексом могут быть использованы для структурных исследований образца.

Рассмотрим случай высокочастотной УЗВ, когда сверхзвуковая длина волны намного меньше, чем длина экстинкции для данного отражения. В этом случае угловое расстояние между смежными сателлитами достаточно большое и угловые области дифракционного отражения не пересекаются.

В случае дифракции по Брэггу в двухволновом приближении волновое поле в кристалле может быть представлено в виде

$$E(\mathbf{r}) = E_0(z) \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + E_h(z) \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}), \quad (4.74)$$

где \mathbf{k}_0 – волновой вектор в направлении падающей волны инцидента, \mathbf{k}_h - в направлении дифракционной волны. Пусть пьезопреобразователь прикреплен к выходной поверхности кристалла так, что в нем возбуждаются продольные УЗВ, с волновым вектором, направленным вдоль нормали к кристаллической поверхности (ось z). Тогда волна, отраженная от входной поверхности формирует УЗ поле стоячей волны, которое может быть записано в форме:

$$\mathbf{u} = \mathbf{w} \cos K_s z, \mathbf{w} = \mathbf{w}_0 \cos \omega t, \quad (4.75)$$

где \mathbf{w}_0 , ω , K_s - амплитуда, частота и волновой вектор ультразвуковых колебаний, соответственно.

Амплитуды $E_{0,h}(z)$ определяются из системы уравнений Такаги-Топена

$$\begin{aligned} \frac{dE_0}{dz}(z) &= i \frac{\pi}{\lambda \gamma_0} [\chi_{00} E_0 + \chi_{0h} E_h \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u})], \\ \frac{dE_h}{dz}(z) &= i \frac{\pi}{\lambda |\gamma_h|} [\chi_{h0} E_0 \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) + (\chi_{hh} - \alpha) E_h], \end{aligned} \quad (4.76)$$

где \mathbf{h} - вектор обратной решетки, $\gamma_{0,h} = \cos(\mathbf{k}_0, \mathbf{n})$, \mathbf{n} - нормаль к кристаллической поверхности, $\alpha = ((k_h)^2 - (k_0)^2)/(k_0)^2$ - угловая отстройка от точного Брэгговского угла, χ_{0h} - компонента Фурье тензора поляризуемости невозмущенного кристалла.

УЗ смещения приводят к изменению Фурье компоненте поляризуемости, которую теперь можно записать в виде ряда

$$\chi_h^d = \chi_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \chi_h^{(n)} \exp(in K_s z), \chi_h^{(n)} = (-i)^n J_n(\mathbf{h}\mathbf{w}) \chi_h, \quad (4.77)$$

где $J_n(\mathbf{h}\mathbf{w})$ - является функцией Бесселя действительного аргумента, а каждый член в бесконечной сумме соответствует сателлиту с вектором дифракции $\mathbf{h} + n\mathbf{K}_s$. При небольших значения $\mathbf{h}\mathbf{w}$ можно ограничиться рассмотрением только главного рефлекса ($n = 0$) и сателлитов первого порядка ($n = \pm 1$). В приближении не влияющих друг на друга сателлитов волновое поле внутри кристалла, в котором возбужден высокочастотный ультразвук, может быть представлено в виде ряда, аналогичного (4.77)

$$E_g = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_g^n \exp(in K_s z), \quad (4.78)$$

где индексы $\mathbf{g} = 0$, \mathbf{h} соответствуют падающей и дифрагированной волне. Подставляя это выражение в уравнения Такаги-Топена и опуская быстро

осциллирующие члены, мы получим систему уравнений с постоянными коэффициентами для описания дифракционного рассеяния на отдельном сателлите

$$\begin{aligned}\frac{d E_0^0}{dz}(z) &= i \frac{\pi}{\lambda \gamma_0} \left[\chi_{00} E_0^0 + \chi_{-h}^{(n)} E_h^n \right], \\ \frac{d E_h^n}{dz}(z) &= i \frac{\pi}{\lambda |\gamma_h|} \left[\chi_h^{(n)} E_0^0 + (\chi_{hh} - \alpha_n) E_h^n \right],\end{aligned}\quad (4.79)$$

так как вблизи сателлита можно пренебречь остальными гармониками в разложении (4.78).

Здесь мы использовали для поляризуемости n -го сателлита выражение

$$\chi_h^{(n)} = \chi_{h0} J_n(\mathbf{h}\mathbf{w}) (-i)^n, \quad (4.80)$$

для отклонения от точного Брэгговского угла

$$\alpha_n = \frac{((\mathbf{k}_h + n \mathbf{K}_s)^2 - (k_0)^2)}{(k_0)^2} \approx \alpha + n K_s \frac{\lambda \gamma_0}{\pi}. \quad (4.81)$$

Из (4.79) легко получить выражения для амплитуд прошедшей и дифрагированной волн

$$\begin{aligned}E_0^0(z) &= [C_{1n} \exp(iK_n z) + C_{2n} \exp(-iK_n z)] \exp(i\Delta_0^n z), \\ E_h^n(z) &= [C_{1n}(K_n + \delta_n) \exp(iK_n z) + C_{2n}(\delta_n - K_n) \exp(-iK_n z)] \xi_n \exp(i\Delta_h^n z),\end{aligned}\quad (4.82)$$

где $C_{1,2n}$ - амплитуды возбуждения, отвечающие новым блоховским волнам, $\pm K_n$ волновые вектора этих блоховских волн

$$K_n = \sqrt{\delta_n^2 - \frac{\pi^2}{\lambda^2 \gamma_0 \gamma_h} (\chi_{h0}^{(n)})^2}. \quad (4.83)$$

Нами были введены следующие обозначения

$$\Delta_0^n = \delta_n + \frac{\pi}{\lambda \gamma_0} \chi_{00}, \Delta_h^n = -\delta_n + \frac{\pi(\chi_{hh} - \alpha_n)}{\lambda \gamma_h}, \quad (4.84)$$

$$\xi_n = \frac{\lambda\gamma_0}{\pi\chi_{0h}^n}, 2\delta_n = \frac{\pi(\chi_{hh}-\alpha_n)}{\lambda\gamma_h} - \frac{\pi(\chi_{00})}{\lambda\gamma_h}. \quad (4.85)$$

Для случая дифракции по Брэггу для амплитуд возбуждения граничные условия на входной ($z = 0$) и выходной ($z = T$) поверхностях дают

$$E_0^0(z = 0) = 1, E_h^n(z = T) = 0,$$

откуда

$$\frac{1}{C_{1,2n}} = \frac{K_n \pm \delta_n}{K_n \mp \delta_n} \exp(\pm 2K_n T) + 1. \quad (4.86)$$

Для достаточно толстого кристалла из-за условия $Im(K_n T) \gg 1$ амплитуды возбуждения могут быть написаны в форме:

$$C_{1n} = \Theta[Im(K_n)], C_{2n} = 1 - C_{1n}, \quad (4.87)$$

где Θ - функция Хевисайда, равная единице при положительном аргументе и нулю в противоположном случае.

Нужно отметить, что период УЗВ слабо зависит от порядка сателлита n , потому что вектор дифракции намного больше, чем волновой вектор ультразвуковой волны K_s . В тоже время параметр, который сильно меняется при переходе от одного сателлита к другому - это длина экстинкции. Так, измерение выхода ТДР при дифракционном рассеянии в окрестности разных сателлитов позволяет существенно менять соотношение глубины выхода вторичного излучения и длины экстинкции.

В условиях существования стоячей рентгеновской волны выход теплового диффузного излучения описывается известным выражением

$$\aleph(TDS) = \int_0^L dz P_{TDS} \{ \text{Im}\chi_{00} |E_0(z)|^2 + \text{Im}\chi_{hh} |E_h(z)|^2 + 2\text{Re}\{ \text{Im}\chi_{0h} E_0(z)^* E_h(z) \exp(ihu) \} \} =$$

$$\aleph_0 + \aleph_h + \aleph_{0h}, \quad (4.88)$$

где $P_{TDS} = \exp(-\frac{z}{L})$ является функцией выхода ТДР, L - глубина выхода ТДР. Первый член описывает вклад прошедшей волны в ТДР, второй - вклад дифрагированной волны, а третий связан с интерференцией прошедшей и дифрагированной волн.

Мнимая часть поляризуемости кристалла, связанная с рассеянием фононов имеет вид

$$\text{Im}\chi^{ik}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_h) = \frac{\pi r_0^2 k_B T}{k V_0 M} \ln\left(\frac{q_{max}}{q_{min}}\right) P^{ik}(\mathbf{k}_g) F^*(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_g) F(\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_g) \left\{ \frac{1}{c_+^2} \frac{(k_0 - k_g)(k_h - k_g)}{k^2} + \frac{1}{c_-^2} \frac{[(k_0 - k_g)k_g][(k_h - k_g)k_g]}{k^2} \right\}, \quad (4.89)$$

где $\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$ - волновой вектор неупруго рассеянной волны, r_0 - классический радиус электрона, $P^{ik}(\mathbf{k}_g) = \delta^{ik} - k_g^i k_g^j / k^2$ фактор поляризации, $\ln\left(\frac{q_{max}}{q_{min}}\right)$ описывает логарифмическое расхождение при малых q , q_{max} - величина импульса отсечения, примерно равная фотонному импульсу,

$$F^*(\mathbf{k}_0) = \sum_j f_j(\mathbf{k}_0) \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_j) \exp(-W_j(\mathbf{k}_0))$$

- структурный фактор, M и V_0 - масса и объем элементарной ячейки. Здесь мы ввели обозначение

$$\frac{1}{c_+^2} = \frac{1}{c_t^2} + \frac{1}{c_l^2}, \quad \frac{1}{c_-^2} = \frac{1}{c_t^2} - \frac{1}{c_l^2}, \quad (4.90)$$

где c_t и c_l - скорости звука поперечной и продольной звуковой волн, соответственно. Отметим, что сильное динамическое рассеяние происходит на системе плоскостей с вектором дифракции \mathbf{H} , а неупругое рассеяние на тепловых фононах вблизи системы плоскостей с вектором \mathbf{G} .

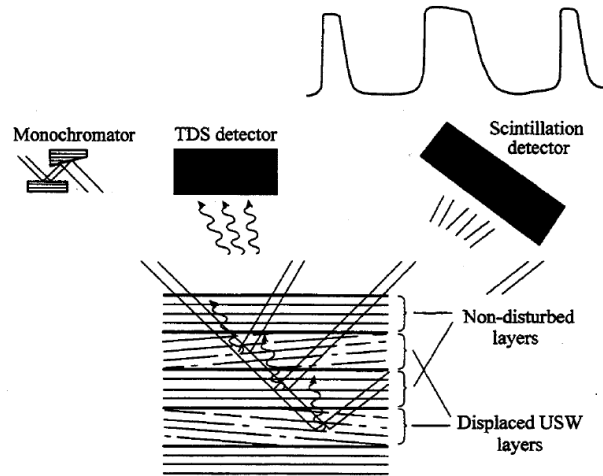


Рисунок 4.13. Схема образования CPB при дифракции на слегка отклоненных УЗ волной отражающих плоскостях, показаны детекторы ТДР и упруго рассеянного излучения.

В приближении независимых спутников выхода ТДР вблизи n -ого отражения получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned} \aleph_0(TDS) &= \text{Im}\chi_{00}\{|C_{1n}|^2 d_{nm}^+ + |C_{2n}|^2 d_{nm}^-\}, \\ \aleph_n(TDS) &= \text{Im}\chi_{hh}\{|C_{1n}|^2 |(K_n + \delta_n)\xi_n|^2 d_{nm}^+ + |C_{2n}|^2 |(-K_n + \delta_n)\xi_n|^2 d_{nm}^-\}, \\ \aleph_{0h}(TDS) &= \\ 2\text{Im}\chi_{hh}|J_l(hw)|\{|C_{1n}|^2 \text{Re}((K_n + \delta_n)\xi_n t_{nm}^+) + |C_{2n}|^2 \text{Re}((-K_n + \delta_n)\xi_n t_{nm}^-)\}, \end{aligned} \quad (4.91)$$

где множители d_{nm}^\pm, t_{nm}^\pm возникают в результате интегрирования по глубине выхода из кристалла

$$d_{nm}^\pm = \frac{1}{L^{-1} \pm [Im [K_n] + Im [K_m] - i(n-m)K_s]} \quad (4.92)$$

$$t_{nm}^\pm = \frac{1}{L^{-1} \pm [Im [K_n] + Im [K_m] - i(n+l-m)K_s]}$$

Представленный формализм позволяет учесть даже относительно малые вклады спутников более высокого порядка.

На Рисунке 4.14 приведены результаты расчетов угловых зависимостей кривых отражения и выхода ТДР для спутников и данные эксперимента,

которые хорошо совпадают. В случае основного рефлекса на кривой выхода ТДР возникают особенности, связанные с модуляцией поляризуемости для данного рефлекса ($\sim J_0(\mathbf{hw})$) и изменениями коэффициента поглощения на краях столика Дарвина.

Как видно из представленных расчетов, кривая выхода ТДР вблизи основного рефлекса слабо зависит от амплитуды ультразвуковой волны и почти совпадает с кривой выхода невозмущенного кристалла.

Важная особенность представленного подхода состоит в том, что описывается поведение кривых выхода ТДР для всех отражений одновременно. Из-за того, что измеряются значения, усредненные за период колебаний, кривые выхода ТДР от сателлитов размываются. Однако при использовании импульсного излучения источников синхронного излучения (СИ) в режиме стробоскопических экспериментов появляется возможность наблюдать рассеяние на «как бы» статичной сверхрешетке, $\mathbf{w}_* = \mathbf{w}_0 \cos \omega t_*$.

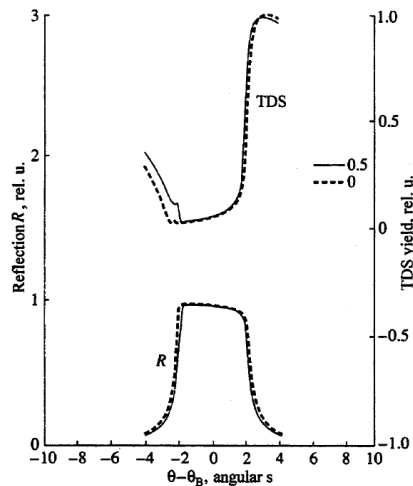


Рисунок 4.14. Кривая выхода ТДР (в у.е.) и кривая дифракционного отражения для основного рефлекса, отражение (911) для неискаженного кристалла (пунктир) и кристалла с УЗ колебаниями с амплитудой $hw=0.5$ (сплошная линия).

Описанный формализм может быть применен и для того, чтобы решить обратную проблему: определения амплитуды УЗВ, используя изменения в кривых выхода ГДР.

4.4 ПЬЕЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ С ВОЗБУЖДЕННЫМИ КОЛЕБАНИЯМИ КАК ЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ СКОЛЬЗЯЩЕГО ПАДЕНИЯ

Широкое применение синхротронного излучения (СИ) и рентгеновских лазеров на свободных электронах дало дополнительный толчок к развитию рентгеновской оптики: изогнутый кристалл-монокроматор встречается практически на каждом синхротронном канале. Главной причиной популярности схемы с дифракцией на изогнутых кристаллах, является возможность эффективного контроля за деформациями при изгибе, а также теория, позволяющая детально описать распространение пучков рентгеновского излучения в деформированных кристаллах. В этой связи весьма перспективной кажется идея управления положением дифракционных плоскостей в кристалле при помощи ультразвука. Несмотря на довольно сложную структуру акустических волн в кристалле, определяемую его симметрией, формой и условиями возбуждения, акустическое поле можно представить в виде суперпозиции конечного числа собственных колебаний. Меняя напряжение, подаваемое на пьезопреобразователь, легко изменить амплитуду ультразвуковой волны. Для того, чтобы изменить длину волны ультразвуковых колебаний следует лишь выбрать подходящий резонанс. Таким образом, исследователь получает возможность менять свойства кристалла не механическим способом, как при изгибе кристалла, а электрическим. Скорость такого изменения определяется фактически скоростью распространения звука в данном кристалле, что при размере кристалла в 500 мкм и скорости звука $c_s = 5 \cdot 10^5$ м/с дает $\tau = 1$ нс. Кроме

того, наложение нескольких акустических сигналов открывает широкие возможности для пространственного и временного изменения положения отражающих плоскостей кристалла. Способ, которым ультразвук влияет на дифракционные свойства кристалла, отличается от акустооптического взаимодействия. Воздействие на рентгеновский пучок происходит не в результате классического рассеяния на фононах, а за счет искажения равновесного положения отражающих плоскостей в кристалле. Именно поэтому вне условий дифракции УЗ (кроме продольных колебаний, меняющих плотность образца) никак не влияет на рассеяние рентгеновского излучения.

Благодаря тому, что энергия фотона (1-10 кэВ) много больше энергии фонона (около 0.01 эВ), а скорость света много больше скорости звука в твердом теле, рентгеновский импульс дифракционно рассеивается «как бы» на статически искаженных УЗ плоскостях кристалла. До последнего времени основные публикации на тему использования УЗ были связаны со стробоскопией и исследованиям по временной модуляции синхротронного Мессбауэровского излучения (см. Главу 3). Широкое распространение импульсных рентгеновских источников – рентгеновских лазеров на свободных электронах и востребованность экспериментов с временным разрешением до 10 фс заставляет по-новому взглянуть на использование кристаллов с УЗ сверхрешетками. Обычно синхротронное излучение имеет вид коротких импульсов (около 0.2 нс), разделенных во времени промежутками порядка 0.1-10 мкс (в зависимости от режима работы источника СИ), что позволяет эффективно перестраивать кристаллическую решетку за время между импульсами.

Ограничимся случаями симметричной дифракции по Лауэ и Брэггу и возбуждения поперечных объемных акустических колебаний, поле которых имеет вид стоячей волны, образовавшейся в результате отражения от противоположных граней кристалла (Рисунок 4.15)

$$\mathbf{u}_s = w \mathbf{e}_z \cos(\omega_s t) \cos(K_s x) . \quad (4.93)$$

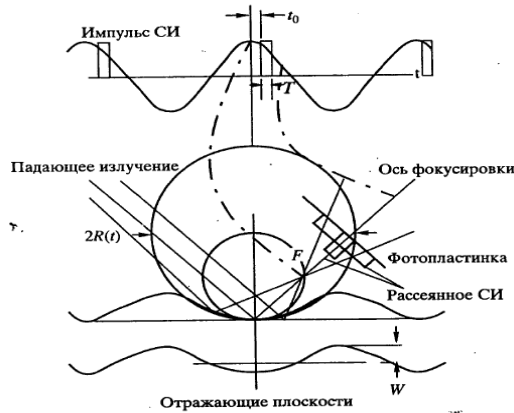


Рисунок 4.15. Схема стробоскопического эксперимента с колеблющимся кристаллом, фокусирующим за счет изгиба отражающих плоскостей.

Пусть в результате решения уравнений Такаги-Топена (ТТ) нам стала известна амплитуда дифрагированной волны на выходной (случай Лауэ) или входной (случай Брэгга) поверхностях кристалла $E_h(\mathbf{r}_e)$. Согласно принципу Гюйгенса-Френеля дифрагированная волна в точке с координатами \mathbf{r}_p в вакууме пропорциональна свертке амплитуды дифрагированной волны по выходной поверхности кристалла (\mathbf{r}_e) с функцией Грина в вакууме ($G_0 |\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e| = \exp(ikr)/r$)

$$E_h(\mathbf{r}_p) \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}_p) = \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3 \mathbf{r}_e E_h(\mathbf{r}_e) \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}_e) G(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e). \quad (4.94)$$

Пусть в плоскости дифракции (\mathbf{x}, z) координаты точки наблюдения имеют вид $\mathbf{r}_p = R_h(\cos(\Phi_h), \sin(\Phi_h))$, тогда с учетом изгиба поверхности (минимум вблизи начала координат) функцию Грина на выходной поверхности кристалла можно представить в следующем виде:

$$\exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}_e) G_0(|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e|) \sim \exp(ikR_h) \frac{1}{R_h} \exp(i\beta x_e - i\alpha x_e^2), \quad (4.95)$$

где

$$\alpha = k \cos^2(\Phi_h) / 2R_h, \beta = k(\sin \theta - \sin \Phi_h) \sim k \cos \theta (\theta - \Phi_h) .$$

Выше были рассмотрены случаи взаимодействия рентгеновского излучения с колеблющимися кристаллами, в которых был возбужден высокочастотный ультразвук ($\Lambda_{ext} > \lambda_s$), или в случае рентгеноакустического резонанса $\Lambda_{ext} = \lambda_s$. Здесь Λ_{ext} - длина экстинкции, λ_s - длины волны ультразвука.

Значительный интерес с точки зрения развития рентгеновской оптики также имеет случай низкочастотного ультразвука ($\Lambda_{ext} < \lambda_s$), при котором картина волнового поля в кристалле наиболее близка к аналогичной в упруго изогнутом кристалле.

Учитывая достаточно малый поперечный размер падающего на кристалл рентгеновского пучка по сравнению с длиной экстинкции и длиной ультразвука, мы можем использовать так называемое “колонковое” приближение, т.е. считать, что падающий пучок рассеивается в области, где смещение фиксировано.

Пусть падающая на поверхность кристалла волна имеет следующую зависимость от времени

$$E_0(x, 0) = \exp(ipx)F(t), \quad F(t) = \theta(t - \{t_0 + nP\}) - \theta(t - \{t_0 + \tau + nP\}),$$

$$p = \sin \theta(\theta - \Phi_h), \tag{4.96}$$

где τ - длительность пучка падающего излучения во времени, t_0 - сдвиг пучка относительно акустической волны, n - номер импульса, P - интервал времени между импульсами.

Тогда, решая систему уравнений ТТ, и принимая во внимание граничные условия в случае Лауэ ($E_0(p, 0) = F(t)$, $E_h(p, 0) = 0$), получаем на выходной поверхности кристалла (толщина кристалла l)

$$E_h^L(p, l) = F(t)\delta_+ f^L, \quad f^L = i \delta_0 \exp(i\delta_0 l) \frac{\sin(Q_L l)}{2Q_L \cos \theta}, \tag{4.97}$$

где

$$Q_L = \frac{1}{\cos \theta} \sqrt{p^2 \sin^2 \theta + \delta_+ \delta_-}, \delta_0 = \frac{k\chi_0}{2}, \delta_{\pm} = \frac{k\chi_{\pm h}}{2} \exp(\mp i h u), \quad (4.98)$$

а в случае Брэгга ($E_0(p, 0) = 1, E_h(p, T) = 0$)

$$E_h^B(p, 0) = F(t) \delta_+ f^B, f^B = C_1 b_1 + C_2 b_2, \quad (4.99)$$

где

$$Q_B = \frac{1}{\sin \theta} \sqrt{(p \cos \theta + \delta_0)^2 - \delta_+ \delta_-}, C_{1,2} = \frac{b_{2,1}}{b_2 - b_1 \exp(2i Q_B l)}, \quad (4.100)$$

$$b_{1,2} = \frac{1}{p \cos \theta + \delta_0 \mp \sin \theta Q_B}.$$

Использование временной структуры. Из приведенных выше формул следует, что амплитуда дифрагированной волны на выходе из кристалла пропорциональна δ_+ и фазовому множителю $\exp(i h u_z)$. Заметим, что аналогичный результат получается и при использовании кинематического приближения.

Вблизи пучности можно использовать разложение акустического волнового поля, тогда фазовый множитель приобретает вид (Рисунок 4.15)

$$\exp(i h u_z) = \exp(i \Phi(t)) \exp(-i h x^2 / R(t)), \quad (4.101)$$

где радиус кривизны имеет вид

$$R(t) = h_z w \cos \omega_s t. \quad (4.102)$$

За половину периода колебаний радиус кривизны меняется от бесконечности (несфокусированный пучок) до минимального значения:

$$R_{min} = 2/wK_s^2, \quad (4.103)$$

а затем вообще становится отрицательным, что соответствует выпуклой и расфокусирующей поверхности.

После подстановки получившегося решения в формулу Гюйгенса получаем:

$$E_h(\mathbf{r}_p) = F(t) \exp(i\Phi(t)) \frac{\exp(-ik R_h)}{R_h} I, \quad (4.104)$$

где

$$I = \frac{\pi}{\sqrt{a-h/R(t)}} \exp\left(-i \frac{\beta^2}{4(a-h/R(t))}\right). \quad (4.105)$$

Тогда интенсивность поля дифрагированной волны в точке r_p имеет вид:

$$I_h(r_p, t) = |f_{L,B}|^2 \frac{F(t)}{R_h(a-h/R(t))}. \quad (4.106)$$

Интересно отметить, что предложенная методика является развитием стробоскопической техники, когда частота ультразвуковых колебаний в точности совпадает с частотой рентгеновских импульсов, $P = T$. Тогда рентгеновский пучок будет все время рассеиваться одинаково искаженными отражающими плоскостями и дифрагированное излучение будет как бы накапливаться в точке фокуса за много периодов акустических колебаний.

Положение точки фокуса определяется как точка с максимальным значением интенсивности дифрагированной волны:

$$R_h = R(t) \cos \Phi_h^2 / \sin \theta. \quad (4.107)$$

Сингулярность в точке фокуса связана с разложением фазы с точностью до квадратичных членов, учет следующих членов разложения снимает расходимость.

Если вернуться к анализу рассеяния пучков СИ, то можно считать, что длительность импульса СИ очень мала по сравнению с периодом акустической волны, то функцию $F(t)$ можно заменить на дельта функцию и максимальная интенсивность оказывается пропорциональной:

$$I_h^M(r_p, t) = \frac{|f_{L,B}|^2}{R_h(a-h/R(t_0+nP))}. \quad (4.108)$$

Из (4.108) следует, что рентгеновский импульс с определенной разницей

фаз (приходящий во время $t_0 + nP$) будет сфокусирован в строго определенном положении $R(t_0 + nP)$. Дальнейший анализ зависит от соотношения между периодом акустических колебаний T и временным интервалом между импульсами СИ P . Предположим, что за период ультразвуковых колебаний на кристалл падает N импульсов СИ, $NP = T$, каждый из которых будет сфокусирован на своем расстоянии $R(t_0 + nP)$. Разместив линейный детектор (или пиксельный 2D детектор) перпендикулярно оси фокусировки на определенном расстоянии, можно добиться фокусировки излучения от одного импульса и расфокусировки всех остальных.

Таким образом, при помощи колеблющегося кристалла можно трансформировать временную структуру сигнала в пространственную.

Колеблющийся кристалл можно использовать и для анализа временной структуры задержанных сигналов, например, мессбауэровского излучения. В этом случае функцию $F(t)$ следует заменить на

$$F^n(t) = \sum_i a_i \exp(-\gamma_i t), \quad (4.109)$$

где суммирование производится по всем элементам тонкой структуры. Зафиксировав желаемый сдвиг по времени между ультразвуком и задержанным рентгеновским сигналом, можно проанализировать временную структуру сигнала, падающего на кристалл.

Одним из возможных применений этого эффекта являются литография и томография. Вместо того, чтобы механически перемещать образец в постоянном пучке излучения, можно менять свойства самого пучка, возбуждая то или иное ультразвуковое колебание в рассеивающем кристалле.

ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПОД СКОЛЬЗЯЩИМИ УГЛАМИ ПАДЕНИЯ ОТ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ.

Хорошо известно, что эффективное управление пучками мягкого

рентгеновского излучения возможно либо при помощи многослойных структур, либо при использовании зеркал скользящего падения.

При использовании многослойных систем основной проблемой является создание искусственной периодической структуры с периодом, сравнимым с длиной волны падающего излучения. При этом налагаются строгие ограничения на шероховатость, плотности и толщины чередующихся слоев. Между тем при возбуждении в кристалле продольных акустических колебаний в веществе также возникают периодические колебания плотности, которые также могут использоваться для «дифракционного» отражения мягких рентгеновских лучей. В настоящее время известны методики возбуждения так называемых сверхвысокочастотных ультразвуковых колебаний (microwave ultrasonics) с частотой выше 1 ГГц и длиной волны меньше, чем 10^{-7} м. Таким образом, период ультразвуковой решетки составляет всего несколько тысяч межатомных расстояний и сравним по величине с твердотельными многослойными структурами. С точки зрения возможных применений мягкого рентгеновского излучения наиболее интересная спектральная область лежит в пределах 10-100 нм. Соответствующее условие Брэгга

$$2\lambda_s \sin \theta = n\lambda \quad (4.110)$$

для возможных «ультразвуковых» рефлексов, показывает, что они будут расположены в угловой области вблизи полного внешнего отражения и могут быть обнаружены при использовании обычных рефлектометрических методик. Рассмотрим отражение мягкого рентгеновского излучения с длиной волны 9.54 А от монокристалла Ag, в котором возбуждены продольные ультразвуковые колебания вида

$$\mathbf{u}_s = w\mathbf{e}_z \cos(\omega_s t) \cos(K_s x). \quad (4.111)$$

Рентгеновская диэлектрическая проницаемость для выбранной длины волн имеет вид

$$\varepsilon = 1 - \delta + i\gamma, \quad (4.112)$$

где для серебра $\delta_{Ag} = 57.0 \cdot 10^{-3}$, $\gamma_{Ag} = 5.66 \cdot 10^{-3}$.

Продольная УЗВ создает в кристалле чередующиеся области сжатия и разрежения, т.е. фактически слоистую структуру из слоев с повышенной и пониженной электронной плотностью.

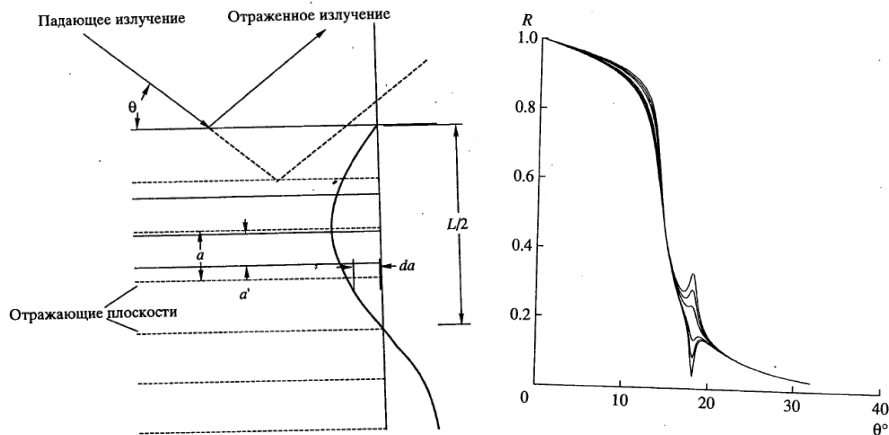


Рисунок 4.14. а) Геометрия рассеяния на колеблющемся кристалле. б) Расчетные зависимости коэффициента отражения колеблющегося кристалла от угла скольжения для $Ag K\alpha$ излучения.

Модуляция электронной плотности под воздействием УЗ колебаний приводит к возникновению особенностей в области полного внешнего отражения (ПВО). На кривой отражения наблюдаются нескольких рефлексов (Рисунок 4.16).

Рассмотрим вариацию электронной плотности в кубике с фиксированной стороной l внутри колеблющегося кристалла. Пусть кристалл вырезан так, что его атомные плоскости совпадают с направлением распространения УЗВ, тогда межплоскостное расстояние будет периодической функцией времени и координаты z . Если изначальное значение межплоскостного расстояния a , то благодаря ультразвуковой деформации оно становится равным (Рисунок 4. 16):

$$a' = a + \frac{\partial}{\partial z} u_s + \dots \sim a(1 - wK_s \sin K_s z). \quad (4.113)$$

Здесь и в дальнейшем мы предполагаем ультразвуковые деформации

достаточно малы. Отметим, что ультразвуковые деформации, не приводящие к механическому разрушению кристалла, имеют порядок $\varepsilon = wK_s \approx 10^{-2}$.

Соответственно кубик с теми же размерами содержит уже N' атомных плоскостей

$$N' = Na/a' = N/(1 - wK_s \sin K_s z). \quad (4.114)$$

Известно, что электрическая восприимчивость в рентгеновском диапазоне пропорциональна средней плотности электронов, следовательно, диэлектрическая проницаемость кристалла с продольными колебаниями будет иметь вид:

$$\epsilon' = 1 - \frac{\delta + i\gamma}{1 - wK_s \sin K_s z} \sim \epsilon - (\delta + i\gamma)wK_s \sin K_s z. \quad (4.115)$$

Перейдем теперь к описанию свойств рентгеновского излучения, распространяющегося в колеблющемся кристалле. В силу того что все параметры задачи зависят только от координаты z , исходная система уравнений Максвелла распадается на две независимые системы $s(H_{x,z}, E_y)$ $p(E_{x,z}, H_y)$ -поляризаций. Здесь и далее через $H_{x,z}, E_y$ обозначаются соответствующие компоненты вектора напряженности магнитного и электрического поля. Решение уравнений Максвелла будем искать в виде

$$\check{E}_z = E_z \exp(ik x \cos \theta) \exp(-i\omega t), \quad (4.116)$$

где $k = \omega/c$ - волновой вектор излучения, падающего под углом θ к поверхности, ω - частота.

Ниже мы ограничимся рассмотрением p поляризованного излучения, для которого уравнения Максвелла сводятся к системе

$$\begin{aligned} \frac{d(\epsilon_s E_z)}{dz} + ik \cos \theta \epsilon_s E_x &= 0, \quad \frac{dE_x}{dz} - ik \cos \theta E_z = ik H_z, \\ k \cos \theta H_y &= -k E_z, \quad \frac{dH_y}{dz} = ik \epsilon_s E_x. \end{aligned} \quad (4.117)$$

Из (4.117) легко получить уравнение (Матье) относительно одной из компонент электромагнитного поля, например E_z :

$$\frac{d^2 E_z}{dz^2} + (k_0^2 - \sigma \sin K_s z) E_z = 0, \quad (4.118)$$

где обозначено

$$\sigma = -k_0^2 k^2 w K_s (\delta + i\gamma), k_0^2 = k^2 (\epsilon - \cos^2 \theta). \quad (4.119)$$

Наиболее интересен с физической точки зрения случай так называемого резонанса, когда выполнено условие

$$n K_s = 2 \operatorname{Re}(k_0), \quad (4.120)$$

которое переходит в условие Вульфа-Брэгга при пренебрежении эффектами рефракции ($\epsilon = 1$). Интересуясь областью вблизи резонанса будем искать решение уравнения (4.118) в кристалле в виде суммы прошедшей и отраженной волн (метод медленных амплитуд”)

$$E_z = A_+ \exp(ik_0 z) + A_- \exp(-ik_0 z). \quad (4.121)$$

Тогда, пренебрегая вторыми производными от амплитуд A и усредняя по быстрым осцилляциям получим систему уравнений:

$$\frac{dA_+}{dz} = \rho A_- \exp(-i(2k_0 - K_s)z), \frac{dA_-}{dz} = \rho A_+ \exp(i(2k_0 - K_s)z), \quad (4.122)$$

где $\rho = \sigma/4k_0$.

Следует отметить, что значение диэлектрической постоянной в граничных условиях совпадает с диэлектрической постоянной кристалла без колебания, так как пучности акустического поля находятся как раз на границах пластинки.

Результаты расчетов коэффициента отражения представлены для кристалла Ag в зависимости от угла скольжения θ представлены на Рисунке 4.14. В кристалле возбуждены продольные ультразвуковые колебания с длиной волны

$$\lambda_s = 5 \lambda = 47.7 \text{ А.}$$

Приведены шесть кривых, отвечающих ультразвуковой деформации

$$w K_s = 2m \cdot 10^{-2}, m = \pm 1.3.$$

Видно, что на кривой отражения при положительных значениях деформации возникает провал, увеличивающийся с ростом амплитуды ультразву-

ковой волны, а при отрицательных наоборот возникает рефлекс. Такая осциллирующая особенность связана с тем, что ультразвуковая сверхрешетка все время “дышит”. Особенность возникает при падении излучения под углом $\theta_B = 15^\circ$, определяемым из условия Брэгга (4.120). Исходя из последних формул, легко рассчитать угловую ширину отражения

$$\Delta\theta_B = \frac{wK_s\delta}{2\sin 2\Delta\theta_B}, \quad (4.123)$$

которая оказывается равной от 0.34 до 2.04°.

Легко установить, что разрешающая способность при отражении от колеблющегося кристалла может быть достаточно большой, хотя амплитуда возникающего пика почти всегда мала из-за малости ультразвуковой деформации.

Полученные результаты показывают, что возникающая в колеблющемся кристалле модуляция электронной плотности слишком мала для того, чтобы сформировать сильное брэгговское отражение. Однако, колеблющийся кристалл предоставляет уникальные возможности для быстрой перестройки сверхрешетки за счет изменения напряжения и частоты, подаваемой на пьезопреобразователь.

ГЛАВА 5. НАНОТРУБКИ : КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА И ДРУГИЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОСТРУКТУР

5.1 ВКЛАД РАЗМЕРНЫХ, ТЕМПЕРАТУРНЫХ И ХИМИЧЕСКИХ АСПЕКТОВ В УПРУГИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, ТЕМПЕРАТУРУ ДЕБАЯ, ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ДРУГИЕ ПАРАМЕТРЫ НАНОСТРУКТУР

Обычно для характеристики механических свойств материалов используются «объемные» параметры, такие как эластичность, расширяемость, акустическая скорость передачи, температура Дебая, теплоемкость и теплопроводность, модуль Юнга Y . Традиционно эти параметры рассматриваются как постоянные в данном температурном диапазоне и не зависящие от формы образца. Однако эти параметры связаны с химическими связями внутри вещества. Соответственно при переходе к одномерным и двумерным структурам и наночастицам роль атомов, относящихся к поверхности, возрастает, число химических связей на атом уменьшается, появляются незанятые электронные орбитали, которые существенно меняют механические свойства вещества. Особым случаем здесь являются углеродные нанотрубки и графен с полностью скомпенсированными химическими связями за счет sp^2 гибридизации, несмотря на то, что для одностенных нанотрубок все атомы становятся поверхностными.

Обычно считается, что модули Юнга растут с ростом температуры плавления вещества T_m . Между тем, для большинства неорганических наноматериалов и T_m , и модули Юнга увеличиваются с переходом в низкоразмерное состояние: это справедливо для Si наносфер, [141], Ag нанопроволок, [142], кварцевых кристаллов для пьезогенераторов, [143], Si_3N_4 нанолент [144], нанесенных на поверхность TiCrN и TiAlN, [145], AlSi нанолент, [146], ZnO нанопроволок, [147], и нанолент [148].

Однако есть и противоположная тенденция, представленная (0001)-ориентированными ZnO нанолентами и проводами, которые показывают более низкое значение модуля, варьирующийся от 29 ± 8 , [149], до 38-100 ГПа, [150 - 151], что сравнимо со значением для объемного материала ZnO в 140 ГПа.

Атомно силовая акустическая микроскопия (АСАМ) показывает, [152], что модули нанокристаллических Ni пленок с толщиной 50-800 нм ниже, чем у объемных материалов. Данные атомно силовой микроскопии (АСМ) при комнатной температуре, [153], показывают, что модули Юнга органических пленок, нанесенных при 450 К, уменьшаются с уменьшением их толщины. Модули Юнга для нано-кантеливеров из Cr, [154], и Sr, [155], и нанополос ZnS, [156], как показывают измерения, также существенно уменьшаются с уменьшением диаметра. Противоположную тенденцию показывают аморфные нанопроволоки из Si, [157], золота, [158], и серебра, [159], которые не меняют свои характеристики в пределах погрешности измерений. Поэтому, по-видимому, результаты измерений для одних тех же материалов Ni, Ag, ZnO, Si значений модулей Y в большей степени зависят от условий эксперимента и методов выращивания.

С другой стороны упругие модули обычно падают, когда температура повышается, [160], как в случае наногранулированного алюминия, [161], и алмазных пленок, [162]. При более высоких температурах коэффициенты, описывающие изгиб, и модули Юнга алмазных пленок значительно меньше (около $2/3$ от начального значения до скалывания). Вообще изгибные коэффициенты и остальные параметры для кремниевых органических материалов также резко уменьшаются с ростом температуры [163].

В литературе существуют многочисленные попытки описать изменение упругих характеристик в рамках моделей нелинейного отклика [164], поверхностной реконструкции [165], поверхностных деформаций [166-167] и

напряжений [145,147, 168]. Тем не менее, понимание причин зависимости модулей твердых тел и нанообъектов (коэффициентов расширения, модулей Юнга, и теплоемкости и др.) от размера, температуры и природы химической связи на атомарном уровне пока не достигнуто. Отдельные вычисления в рамках метода молекулярной динамики, [169], показывают, что именно поверхностные атомы играют важную роль в определении механических характеристик нанообъектов.

В связи с этим моделирование и предсказание свойств разного рода нано- и мета- материалов на основании простых аналитических выражений было бы весьма желательно. В работе было показано, что метод, основанный на анализе связи- порядка – длины химической связи и корреляционных механизмов (BOLS), [170-172], позволяет удовлетворительно описать характерные упругие, размерные, температурные изменения в наноматериалах и устранить некоторую разногласию в экспериментальных данных.

Разорванные связи и корреляционные механизмы BOLS. Ключевой идеей корреляционных механизмов (BOLS), [170-172], является утверждение, что разорванные связи поверхностных атомов делают оставшиеся нескомпенсированные связи (с энергией E_i и длиной связи d_i) короче, $d_i = c_i d$, и сильнее, $E_i = c_i^{-m} E$, по сравнению со связями в объеме ($c_i < 1$). Здесь

$$c_i(z_i) = 2\{1 + \exp([12 - z_i]/8z_i)\}^{-1}$$

коэффициент сжатия связей в отдельном z_i слое ($i=1$ – самый верхний слой), индекс m относится к виду химической связи. Энергия связи приблизительно равна

$$E_i = \mu_{1i} T_m + \mu_{2i},$$

где μ_1 - коэффициент «теплоемкости» связи, а μ_2 связан с энергией, необходимой для ионизации атома в расплавленном состоянии. При этом коэффициент μ_1 повторяет универсальную Дебаевскую зависимость от

температуры. В результате разрыва связи образуются локальные вариации плотности распределения заряда, массы и энергии, меняется гамильтониан системы, «атомная когерентность» системы и электронная аффинность (разность между уровнем в вакууме и зоне проводимости) и другие характеристики, связанные с большим числом атомов, на которые влияет поверхность. Взаимное влияние атомной когерентности, которая определяет точку плавления материала, и плотности механической энергии в поверхностном слое влияют на величину упругих модулей, коэффициенты расширения и других механических параметров среды.

Индукцированное изменением длины связи сжатие потенциальной ямы, в которой движутся коллективизированные электроны, существенно влияет на транспортные свойства и динамику электронов, фононов и оптических фотонов.

Температурная зависимость модулей Юнга и упругой деформации.

Температурная зависимость локального стресса P_i , модулей Юнга Y_i для отдельной i -ой связи может быть представлена как

$$\begin{aligned} P_i(z, m, T) &= -\frac{\partial u(r, m, T)}{\partial V} \Big|_{d_i} \sim \alpha \frac{E_i(z, T)}{d_i^3(z, T)}, \\ Y_i(z, m, T) &= -V \frac{\partial P(r, m, T)}{\partial V} \Big|_{d_i} \sim \beta \frac{E_i(z, T)}{d_i^3(z, T)}, \end{aligned} \quad (5.1)$$

где $u(r, m, T)$ – межатомный парный потенциал, V – объем, $d(z, T)$, $E_i(z, T)$ - отвечают координационной и температурной зависимости длины связи и энергии связи.

$$d_i(z, T) = d_0 c_i \left(1 + \int_0^T dt \alpha_i(t) \right) \cong d_0 c_i (1 + \alpha_i T) \Big|_{\alpha_i T \ll 1} \approx d_0 c_i,$$

$$E_i(z, T) = c_i^{-m} E_b - \int_0^T dt \mu_{1i}(t) \cong \Big|_{T \gg \theta_D} = c_i^{-m} E_b - \mu_{1i} T = \mu_{2i} + \mu_{1i} (T_{mi} - T),$$

где $\alpha_i(t)$ - температурно зависимый коэффициент расширения, T_{mi} - локальная температура точки плавления. μ_{1i} - остается постоянным при

температурах выше температуры Дебая, поэтому зависимости можно представить в виде

$$Y_i(z, m, T) = -V \frac{\partial P(r, m, T)}{\partial V} \Big|_{d_i} \sim \beta \frac{E_i(z, T)}{d_i^3(z, T)}, \quad (5.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} P_i(z, m, T) \\ Y_i(z, m, T) \end{array} \right\} \propto \left\{ \begin{array}{l} \frac{\int_T^{T_{mi}} dt \mu_{1i}(t)}{d_i(1+\alpha_i T)^3} \cong \frac{\mu_{1i}(T_{mi}-T)}{d_i(1+\alpha_i T)^3} \Big|_{T \gg \theta_D} \text{ вычисления по Борну} \\ \frac{\mu_{2i} + \int_T^{T_{mi}} dt \mu_{1i}(t)}{d_i(1+\alpha_i T)^3} \cong \frac{\mu_{2i} + \mu_{1i}(T_{mi}-T)}{d_i(1+\alpha_i T)^3} \Big|_{T \gg \theta_D} \text{ вычисления по BOLS} \end{array} \right\}.$$

Согласно критерию плавления по Борну, [263], механические коэффициенты исчезают, когда твердое тело плавится. Измерения, [264-265], показали, что сдвиговые коэффициенты сплавов падают от объемного значения почти до нуля при T_{mi} .

Если критерий Борна справедлив, то латентное тепло при атомизации не дает вклад в механическую прочность системы. Так как упругие модули отличны от нуля и в жидкой, и газовой фазе, в чем можно убедиться на примере ненулевой скорости звука для них, то критерий Борна является лишь грубым приближением. Однако для удобства описания мы можем определить температуру отсечки, при которой механическая прочность стремится к нулю.

Более точно Y_i, P_i вычисляются на основании межатомного потенциала $u_i(r, t, m)$. Однако, выбор точной формы этого потенциала представляется сложной задачей, даже без учета вариации Y_i, P_i из-за поверхности. С другой стороны, исходя из размерных эффектов, Y_i, P_i - должны быть пропорциональными энергии на единицу объема.

Аналитические соображения по изменению модулей Юнга с температурой долгое время были предметом дискуссий, [177]. Особенности трудности возникали при описании изменений параметров атомных связей. В [178-179] были предложены эмпирические выражения для таких зависимостей. Позднее в

[180], исходя из формализма негармонических колебаний решетки, были предложены аналитические выражения, которые можно сравнить с приведенными здесь выражениями ($c_i=1$)

$$\frac{\Delta Y(T)}{Y_0} \propto \left\{ \begin{array}{l} -AT \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right) \approx AA(T_0 - T) \text{ вычисления, [177 - 179],} \\ -BT F\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = -BU(T) \text{ вычисления, [177 - 180],} \\ \frac{1}{(1+\alpha_i T)^3} \left(1 - \frac{\int_0^T dt \mu_{1i}(t)}{E_b(0)}\right) - 1 \approx \frac{E_b(0) - \mu_{1i}T}{E_b(0)(1+\alpha_i T)^3} - 1 \cong \frac{U(T)}{E_b(0)} \text{ по BOLS} \end{array} \right\},$$

где A, B, T_0 некоторые константы, μ_{1i} — удельная теплоемкость по Дебаю, а внутренняя энергия $U(T)$ совпадает в первом приближении с

$$U(T) = TF\left(\frac{T}{\theta_D}\right) = 3\theta_D \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \int_0^{\theta_D/T} dx \mu_{1i}(t) \sim \mu_{1i}T$$

Зависимость от размера. Принимая во внимание тот факт, что T_{mi} пропорциональна атомной энергии связи

$$T_{mi} \propto z_i E_{mi}$$

легко вывести уравнение для энергии связи

$$T_{mi}/T_m = z_i E_{mi}/z_b E_b = z_{ib} c_i^{-m} = 1 + \Delta,$$

где Δ — отклонение от атомной когерентности, $z_i/z_b = z_{ib}$ — нормализованное координатное число (в полностью скоординированных системах $z_{ib} = 12$), [181]. Принимая во внимание соотношения

$$E_{mi} = E_b c_i^{-m} = \mu_{1i} T_{mi} + \mu_{2i} = c_i^{-m} (\mu_1 T_m + \mu_2)$$

$$T_{mi} = z_{ib} c_i^{-m} T_m = (1 + \Delta) T_m,$$

можно вывести

$$\mu_{1i} = z_{ib} \mu_1, \mu_{2i} = c_i^{-m} \mu_2.$$

Относительное изменение Y и обратной величины β (пропорциональной коэффициенту расширения) при $T \gg \theta_D$ может быть упрощено до

$$\begin{aligned} \delta Y (m, z_i, T) &= \frac{Y (m, z_i, T)}{Y (m, z_i, T_0)} - 1 = c_i^{-m} \frac{\mu_{1i}(T_{mi}-T)+\mu_{2i}}{\mu_1(T_m-T)+\mu_2} - 1 \\ &= c_i^{-(3+m)} \frac{T_m - \frac{T}{1+\Delta_i} + \mu_{2i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} - 1 = c_i^{-(3+m)} \left(1 + \frac{T_0 - \frac{T}{1+\Delta_i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} \right) - 1, \\ \delta \beta (m, z_i, T) &= \frac{\beta (m, z_i, T)}{\beta (m, z_i, T_0)} - 1 = c_i^{-(3+m)} \left(\frac{T_m - \frac{T}{1+\Delta_i} + \mu_{2i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} \right)^{-1} - 1 = \\ &= c_i^{-(3+m)} \left(1 - \frac{T_0 - \frac{T}{1+\Delta_i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} \right) - 1. \end{aligned}$$

Учитывая изменение конфигурации «валентные – остовные» электроны, основные характеристики связи (m), формы и размера (τ, K_j) и температуры (T) зависимость относительного изменения модуля Юнга принимает вид –

$$\frac{\Delta Y (m, K_j, T)}{Y (m, \infty, T_0)} = \sum_{i \leq 3} \gamma_{ij} \delta Y (m, z_i, T),$$

$$\delta Y (m, z_i, T) = \left\{ \begin{array}{ll} c_i^{-(3+m)} \frac{T_m - \frac{T}{1+\Delta_i} + \mu_{2i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} - 1 & (T \neq T_0, K_j \neq \infty) \\ \frac{T_m - T}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} & (T \neq T_0, K_j = \infty) \\ c_i^{-(3+m)} \left(1 + \frac{T_0 \Delta_i}{(T_m - T_0 + \mu_{2i})(1+\Delta_i)} \right) - 1 & (T = T_0, K_j \neq \infty) \\ 0 & (T = T_0, K_j = \infty) \end{array} \right\},$$

$$\gamma_{ij} = \frac{N_i}{N_j} = \tau c_i / K_j \leq 1. \quad (5.3)$$

Тот же самый подход применим и при рассмотрении коэффициента расширения. Здесь γ_{ij} – объем или отношение числа связей между атомной поверхностью i - го поверхностного слоя толщины d_i и всей наноструктуры с числом связей K_j . K_j – будучи обезразмеренным параметром, является числом атомов, которые можно выложить вдоль радиуса сферической квантовой точки, или числом атомов в поперечной сечении в случае тонкой пластинки. Уравнение (5.3) дает представление о влиянии несоординированных атомов в поверхностном

слое на относительное изменение механических свойств. В то же время вклад аналогичных по структуре атомов во внутренней части системы остается объемным. По сравнению с аналитическими выражениями для обратных отношений Холла-Петча, [182], уравнения (5.3) определяют внутреннее изменение модулей или других показателей, не включая при этом эффекты накопления дислокаций и эффекты, связанные с деформациями из-за инденторов, дополнительными напряжениями, уровнями нагружения и т.д., сопровождаемыми тесты на микротвердость, [183].

Температура Дебая. Температура Дебая, определяемая через частоту Дебая как $\theta_D = \hbar\omega_D/k_B$, в модели теплоемкости Дебая является основным параметром, определяющим динамику тепловых процессов.

Когда размерность образца уменьшается или температура измерений меняется, θ_D больше не является константой, меняясь в зависимости от размера объекта, [184-187], и температуры тестирования, [188-191].

Результаты вычислений, [184], показывают, что зависимость θ_D от размера следует из конечного значения частоты колебаний и поверхностных напряжений, особенно если размер образца меньше, чем 20 нм. Используя результаты измерения спектров рентгеновского поглощения и EXAFS, Балерна и Мобилио, [185], подтвердили данную тенденцию, [184].

Вычисления температурной зависимости θ_D для некоторых FCC и BCC металлических образцов, [188], показали, что θ_D уменьшается, когда температура увеличивается благодаря зависимости от температуры упругих постоянных материала и скорости звука.

Однако остается противоречие в зависимости от T_M изначально не зависящего от T параметра θ_D . Мнение одних исследователей основано на том, что θ_D зависит линейно с T_M , [188], другие предполагают зависимость в виде $\sqrt{T_M}$ согласно критерию таяния по Линдеману, [192].

Температура Дебая θ_D может быть получена из математического выражения для нормировки плотности фононных состояний

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = kN_A,$$

где N_A – полное число вибрационных мод, что приводит к соотношению

$$\omega_D \sim v_s^{1/k} \sqrt{n} \sim v_s (d^{-k})^{1/k} = v_s/d,$$

где $v_s = \sqrt{Y/\rho} \sim \sqrt{Y} d^{3/2}$ – скорость звука в среде, k – фрактальная размерность ($k=1$ – для нанопроволок, $k=2$ для тонких пластинок, и $k=3$ для объемных материалов). Так как температура Дебая определена как $\theta_D = \hbar\omega_D/k_B$, нормализованное выражение для θ_D имеет вид

$$\frac{\theta_D(z_i, m, T)}{\theta_D(z_b, m, T_0)} = \frac{\omega_D(z_i, m, T)}{\omega_D(z_b, m, T_0)} = \frac{v_s(z_i, m, T)}{v_s(z_b, m, T_0)} \frac{d_0}{d_i} = \left(c_i \frac{Y(z_i, m, T)}{Y(z_b, m, T_0)} \right)^{1/2}. \quad (5.4)$$

Совмещая (5.1) и (5.4), немедленно получаем

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\theta_D(K_j, m, T)}{\theta_D(\infty, m, T_0)} &= \sum_{i \leq 3} \frac{\tau c_i}{K_j} \left\{ c_i^{-(1+m/2)} \left[\frac{T_m - \frac{T}{1+\Delta_i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} \right]^{1/2} - 1 \right\} \\ &= \sum_{i \leq 3} \frac{\tau c_i}{K_j} \left\{ c_i^{-(1+m/2)} \left[1 + \frac{T_0 - \frac{T}{1+\Delta_i}}{T_m - T_0 + \mu_{2i}} \right]^{1/2} - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Видно, что выражение (5.5) имеет квадратичную зависимость $(T_m - T)^{1/2}$ для объемных материалов ($\Delta_i = 0, c_i = 1$ – если игнорировать поверхностные эффекты), что отличается от линейной, [188], или корневой зависимости $\theta_D \sim \sqrt{T_m}/d$, [192].

Удельная теплоемкость. Удельная теплоемкость – измеряемая физическая величина, которая характеризует способность тела накапливать тепло с изменением температуры образца. Влияние размера тела на удельную теплоемкость недавно привлекло значительное внимание, [193-196]. Новотны, [193], измерил низкотемпературную удельную теплоемкость 2.2-нм и 3.7-нм

свинцовых частиц и наблюдал увеличение теплоемкости ниже 5 К. Лю, [197], продемонстрировал, что удельное тепло наночастиц из металлов или сплавов увеличивается обратно пропорционально размеру образца.

АС микрокалориметрические измерения, [194], показали, что удельная теплоемкость тонких пленок Al с толщиной, варьирующейся от 13.5 до 370 нм, уменьшается с ростом толщины пленки Al. Уменьшение удельной теплоемкости было объяснено повышением поглощения и потерями тепловых волн с определенными волновыми векторами в маленьких объемах. Однако Лю, [195], исследовал влияние размера на удельную теплоемкость тонких пленок Al, используя в своих вычислениях приближение Прашера-Фетана, [188], и пришел к выводу о том, что сокращение фононных состояний - не главная причина, вызывающая размерные эффекты удельной теплоемкости. По его мнению, тонкий слой окиси Al был ответственен за этот эффект. В измерениях Ю и др., [196], удельная теплоемкость уменьшалась с толщиной пленки. Однако удельная теплоемкость увеличивалась с уменьшением толщины пленки, судя по результатам измерений Сонга, [194]. Поэтому вопросы влияния размера и температуры на теплоемкость и температуру Дебая для металлических наноструктур до сих пор остаются нерешенными.

Теплоемкость единичного объема определяется как отношение бесконечно малого количества тепла δE , добавленного к телу, к соответствующему малому увеличению его температуры δT , при условии, что объем сохранен неизменным. В расширенной модели Дебая получаем

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = k^2 R \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^k \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^{k+1} \exp x}{[\exp x - 1]^2} dx, \quad (5.6)$$

где $x = \hbar\omega/k_B T$. Можно показать, что при $k = 3$ уравнение (5.6) переходит в стандартное выражение для модели Дебая. В случае $T \gg \theta_D$ интеграл (5.6) дает

$$\frac{1}{k} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^k.$$

Теплоемкость C_V стремится к kR в соответствии с законом Дюлонга-Пти при $k = 3$. В то же время C_V - стремится к постоянному значению при высоких температурах. Рассмотрение случая теплоемкости при низких температурах менее тривиально. При $T \ll \theta_D$ верхний предел в интеграле (5.6) стремится к бесконечности и интеграл для разных размерностей сводится к

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{k+1} \exp x}{[\exp x - 1]^2} dx \approx 3.290, 7.212 \text{ и } 25.976$$

для $k = 1, 2, 3$. Следовательно, удельная теплоемкость при низких температурах равна

$$C_V = Ak^2 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^k \propto k^2 \theta_D^{-k}, \quad (5.7)$$

где A имеет фиксированное значение при фиксированном τ . Из (5.6) и (5.7) следует, что температура Дебая θ_D оказывает значительное влияние на удельную теплоемкость. Используя ту же модель наноструктуры «поверхностный слой-ядро», можно получить зависимость удельной теплоемкости единичного объема в зависимости от размера, формы и природы химических связей при очень низких температурах

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C_V(K_j, m, T)}{C_V(\infty, m, T_0)} &= \sum_{i \leq 3} \frac{\tau c_i}{K_j} \left\{ c_i^{(1+m/2)k} \left[\frac{1 - \frac{T}{T_m(1+\Delta_i)}}{1 - T_0/T_m} \right]^{-k/2} - 1 \right\} \\ &\approx \sum_{i \leq 3} \frac{\tau c_i}{K_j} \left\{ c_i^{(1+m/2)k} \left[1 - \frac{T_0}{T_m} \right]^{\frac{k}{2}} - 1 \right\} < 0 \quad (T \sim 0). \end{aligned}$$

Так как коэффициент сокращения связи c_i всегда меньше единицы, удельная теплоемкость всегда меньше объемного значения при низких температурах. Кроме того удельная теплоемкость уменьшается обратно пропорционально размерности твердого тела, связанной с параметром K_j . При

температурах, близких к температуре Дебая, удельную теплоемкость можно оценить из уравнений (5.6), где температура Дебая зависит от размера, температуры и природы химической связи согласно (5.5).

Результаты и обсуждение. Используя (5.3) мы можем предсказать зависимость модулей Юнга $x_m \left(\frac{T}{T_m}\right)$ и коэффициента расширения твердого тела в зависимости от размера, температуры и природы химической связи. Для иллюстрации наших вычислений можно выбрать $m = 1$ (для металлов), $m = 2$ (для углерода, 2.56), и 5 для кремния (Si, 4.88), $x_m = 0.25, 0.5, 0.75$ и размерность $\tau = 3$ (для сферы). Рассмотрим случаи $T_0 = 0$ и $T_0 = T$. Для оценки температурной зависимости будем использовать $K_j = 10$ и 50 при фиксированных остальных параметрах. Пусть параметр $\mu_{21} = 0$, так как его уменьшение вряд ли можно идентифицировать.

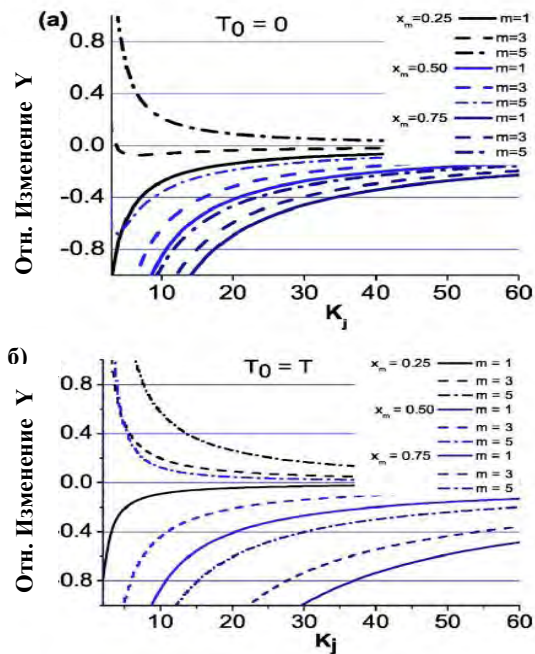


Рисунок 5. 1. Расчетная размерная зависимость модуля Юнга от числа K_j при а) $T_0=0$ и б) $T_0=T$ различной связи природа и значения параметра $x_m (T/T_m)$. Увеличение модуля Юнга происходит при $(x_m, m) = (< 0.25, >3)$ для $T_0=0$ и (x_m, m)

$=(< 0.5, >3)$ для $T_0=T$. Постоянный Y может наблюдаться при пограничных $(T/T_m, m)$ комбинациях.

Параметр K_j в общем случае – это число атомов с нескомпенсированными химическими связями (относящихся к поверхности) к числу атомов с полностью заполненной координационной сферой (относящимися к объему).

На Рисунке 5.1 показано уменьшение или увеличение модулей Юнга в зависимости от размерности образца при различных значениях комбинации параметров (x_m, m) . Например, увеличение Y происходит при $(x_m, m) = (< 0.25, >3)$. Постоянство Y может проявиться при критических комбинациях $(x_m, m) = (\sim 0.25, \sim 3)$. Критические значения определяются нулями уравнения (5.3). Если мы выбираем $T_0 = T$, то рост модуля Y также происходит в случае $(x_m, m) = (< 0.5, >5)$.

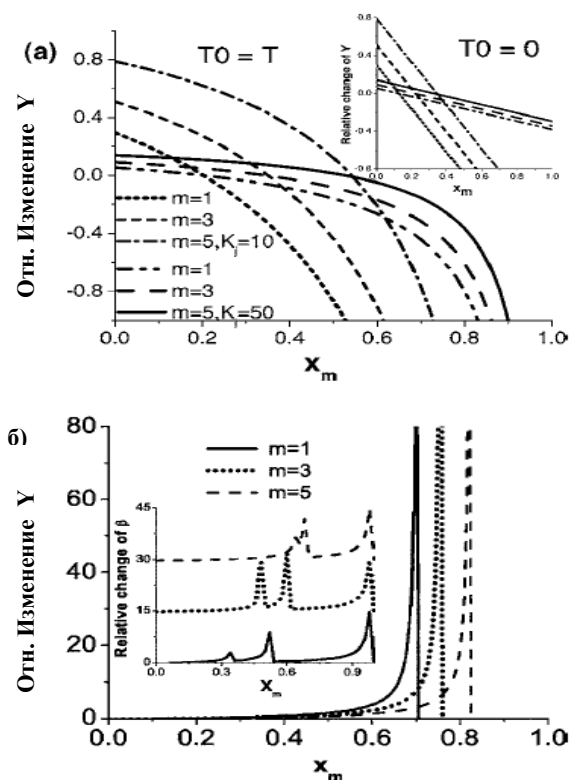


Рисунок 5.2. Зависимость (T/T_m) (а) модуля Юнга и (б) коэффициента расширения сферических нанокapsул с различными значениями m и $T/T_m(x_m)$.

Вставка показывает случай $T_0=0$. Значения Y для меньших m и меньших размеров понижаются быстрее с ростом температуры. Коэффициент расширения приближается к бесконечности в точке плавления.

Однако Y может оказаться постоянным при $(x_m, m) = (0.25, \sim 2)$ и $(0.5, \sim 4)$. Столь противоречивое поведение свидетельствует о том, что модули упругости могут расти или падать в зависимости от условий эксперимента, материала и технологии их создания.

На Рисунке 5.2 показано относительно изменение (а) модуля Юнга и (б) коэффициента расширения для сферических нанокapsул с $K_j = 10$ и различными значениями $m=1,3,5$ в зависимости от температуры T/T_m . Если положить $T_0 = T$, то Y спадает нелинейно с ростом T до T_m . Вставка показывает случай $T_0=0$, при котором Y падает линейно с ростом температуры. Значения Y для меньших m и меньших размеров понижаются быстрее с ростом температуры. При этом коэффициент расширения приближается к бесконечности в точке плавления T_m (K_j). С другой стороны малые «нанообразцы» с меньшими значениями m быстрее расширяются с повышением температуры, чем в других материалы.

На Рисунке 5.3 проведено сравнение результатов вычислений и экспериментальных наблюдений зависимости Y от размера для (а) ZnO и (б) – полимера, измерения при комнатной температуре, и для модулей Y , зависящих от температуры, для (в) - Al_2O_3 и для объемного AlN (г).

Результаты расчетов совпадают с данными эксперимента исключительно хорошо для ZnO нанопроволок ($m = 4, \tau = 2$). Для полимеров результаты предсказаний правильно описывают общее поведение для образцов в виде пленок с ($m = 4, \tau = 1$) с точностью, определяемой точностью определения размеров образца. Согласие данных по температурной зависимости Y при высоких

температурах может быть достигнуто в рамках обсуждаемых моделей. Так в рамках модели Андерсона, T_0 и параметр

$$B = (E_b(0)[1 + \alpha T]^3)^{-1}$$

отвечают критической точке T_0 , в которой зависимость $T - Y$ перестает быть нелинейной и становится линейной, определяемой температурой Дебая. Подход BOLS, введенный здесь, также учитывает температурное расширение, что особенно важно для материалов со значительной температурной зависимостью параметров.

Предсказанные зависимости модулей упругости и коэффициентов расширения от m , K_j , $x_m(K_j)$ описывают большинство наблюдаемых закономерностей. Например, показанное на Рисунке 5.1 падение модуля Y хорошо согласуется с результатами наблюдений для алюминия [$m=1$, $x_m = 300/650 \sim 0.5$], [161], и полимеров $T_g = 300/450 \sim 2/3$, [163]. Коэффициент расширения для наноструктурированных Al-Cu сплавов в «полутвердом» состоянии, [175], и наноструктурированном сапфире Al_2O_3 , [268], и PbS, [180], при комнатной температуре в общем случае уменьшается с уменьшением размера зерен. Значения m составляют для сплавов около 4 или выше, и для этих материалов T/T_m относительно малы. Увеличение коэффициентов сжатия и расширения для наноструктурированных Al_2O_3 и PbS влияет и на модули Юнга. Сверхпластичность таких материалов как медная проволока [$m=1$, $x_m \sim 0.5$], [201], с размером зерен меньше, чем 10 нм в температурном диапазоне $0.5-0.6 T_m$, [202], также хорошо согласуется с результатами вычислений. Рост Y для проволоки ZnO [$m=4$, $x_m \sim 0.25$], [147], и кремниевых наносфер [$m=4.88$, $x_m \sim 1/6$], [141], также описывается теорией при больших m низких x_m .

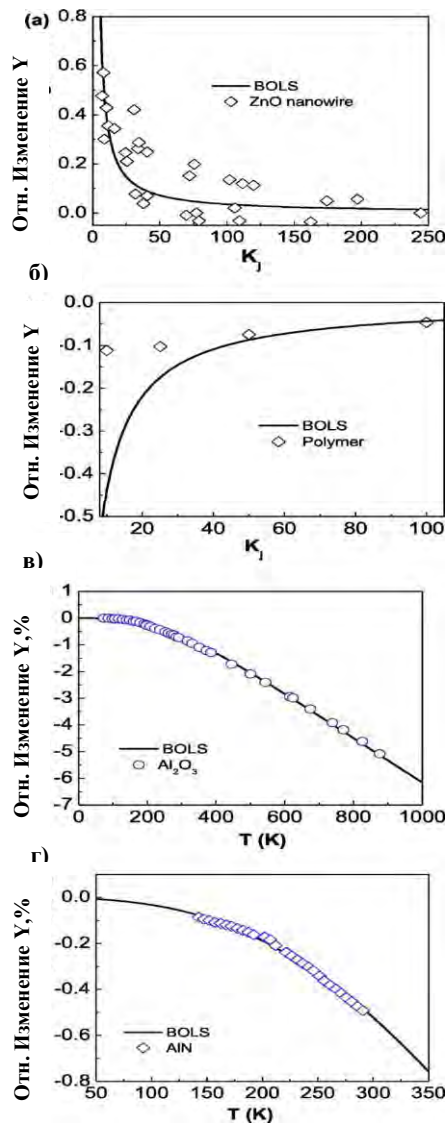


Рисунок 5.3. Зависимость Y от температуры. а) в случае нанопроволоки ZnO, [147], – происходит увеличение; в случае полимеров (б) – снижение, [153]. Для: а) AlN ($T_m = 3273K$, $\theta_D = 1150K$, $E_B = 5.19$ эВ) [160], б) Al_2O_3 ($T_m = 2303K$, $\theta_D = 1045K$, $E_B = 3.9$ эВ), [178]. Здесь θ_D и T_m являются входными параметрами, а энергия связи атомов в объеме E_B – результат расчета.

Тем не менее, имеющиеся расхождения результатов для нанопроволоки ZnO [147-150], кремниевых сфер [141] и полос [155] могут быть связаны с разными значениями x_m , используемыми в расчетах и реализуемыми на эксперименте. Предполагается также, что увеличение модулей Юнга,

наблюдаемое для NiCrN и GaAlN поверхностей, [135], может не наблюдаться при комнатных температурах для металлов с низким T_m , таких как Sn, Pb, Al, Zn, Mg, In.

Предсказания и наблюдаемые результаты температурной зависимости модулей Юнга хорошо совпадают для пленок nanoалмаза, [166], силиконовых пластиков, [163], выращенных методом химического осаждения из паровой фазы CVD, и наноструктурированного магния, [205]. Податливость растет экспоненциально с ростом температуры, стремясь к бесконечности при T_m . Причем сама T_m падает с ростом увеличением размерности материала. Атомарное моделирование, [204], также подтверждает тот факт, что материалы становятся более мягкими как в режиме упругой, так и пластической деформации с увеличением температуры. Для медного композита с размером зерен 300 нм при температуре 200C прочность понижается на 15%, а податливость растет существенно, [205]. С ростом температуры от комнатной до 400C податливость FeCo₂V с размером зерен 100-290 нм растет от 3-13% до 22% с соответствующим изменением прочности. Двусные модули Юнга для Si(111) и Si(100) падают линейно с ростом температуры, [207,208]. При этом для одностенных углеродных нанотрубок [$m=2.56$, $x_m \sim 2/3$], [209], при высоких температурах наблюдается рост суперпластичности на 280%.

Таким образом, подтверждается, что модули Юнга и напряжения растяжения - разные характеристики, несмотря на схожесть поведения с изменением внешних воздействий, что часто наблюдается для таких образцов как полимеры, [210], оксид алюминия, [145], при изменении размерности и температуры.

Отдельные выбросы в экспериментальных данных, особенно в режиме пластической деформации, могут существенно исказить картину, хотя они в основном связаны со слабоконтролируемыми внешними условиями.

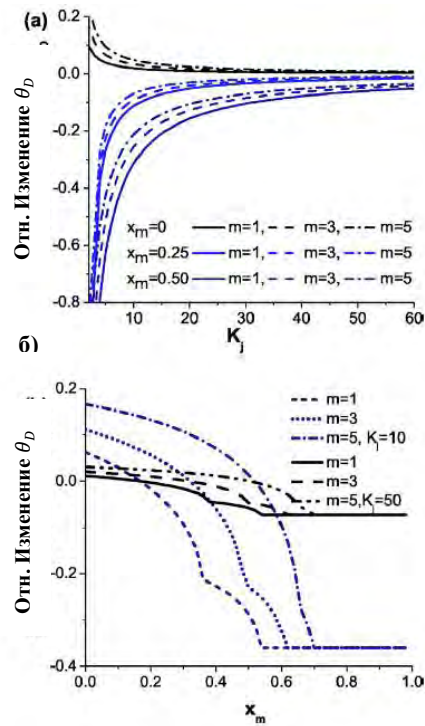


Рисунок 5.4. Предсказанная зависимость температуры Дебая θ_D от а) размерного параметра K_j и б) температурного коэффициента $x_m(T/T_m)$ для связей с различной природой (m). θ_D увеличивается с уменьшением K_j при очень малых температурах и растет с увеличением – для больших температур. Точка перехода отвечает точке плавления двух верхних атомарных слоев наноматериала.

Используя (5.5) можно предсказать зависимость θ_D от размерности K_j , температуры T и особенностей химической связи m . Рисунок 5.4 показывает относительное изменение θ_D для нанопроволок ($\tau = 2, k = 1$) $m = 1, 3, 5$ и $x_m = 0, 0.25, 0.5$. Когда температура измерений намного меньше, чем температура плавления ($x_m \ll 1$), θ_D растет с уменьшением размерности K_j . Причем θ_D растет тем быстрее, чем больше m . С другой стороны θ_D уменьшается с увеличением температуры эксперимента и относительное изменение θ_D больше при меньших значениях m . Детальный анализ Рисунков 5.4а и 5.4б показывает, что при определенных комбинациях (x_m, m) меняется незначительно в зависимости от

размера частиц. На Рисунке 5.4б показаны индуцированные температурой изменения θ_D для нанопроволок ($\tau = 2, k = 1$) с размерными параметрами $K_j = 10$ и 50. Если положить $T = T_0$, то θ_D спадает нелинейно с температурой T вплоть до достижения T_{mi} - локальной температуры плавления i -го атомарного слоя. Две точки перехода для каждой комбинации (m, K_j) подразумевают потерю связей атомов в двух поверхностных атомарных слоях. Более того, вариация θ_D с температурой и размером более выражена для больших m и меньших K_j .

На Рисунке 5.5 показано сравнение результатов вычислений по разным моделям и экспериментальных данных для а) золотых наночастиц, б) Дебаявской температуры, рассчитанной по фактору Дебая-Валлера для Se нанокластеров. Подход Коучмана и Караша, [184], показывает, что изменение температуры Дебая зависит от размера частиц R и максимального волнового вектора фононов, на котором происходит отсечка, K_0 , как

$$\Delta\theta_D = -\frac{3\pi}{8RK_0}\theta_D$$

и не зависит от температуры. Применяя (5.5) с $T_0 = 0.245T_m$ и $T = 0.16T_m$, может быть достигнуто хорошее согласие между результатами вычислений по теории BOLS и теории Коучмана и Караша. Если мы положим $T_0 = 0.224T_m$ и $T = 0.204T_m$, то наша модель достаточно хорошо аппроксимирует результаты Баларна и Мобилио, также показанные на Рисунке 5а. На Рисунке 5б показана предсказываемая BOLS тенденция изменения температуры Дебая с размерностью, причем видно, что наша теория расходится с экспериментом. Однако измерения производились при $T=293\text{K}$, которая выше, чем локальная температура плавления двух первых слоев ($0.224T_m$, для Se $T_m=494\text{K}$), что дает основания предполагать, что данная особенность поведения связана с влиянием внутренних электронных оболочек.

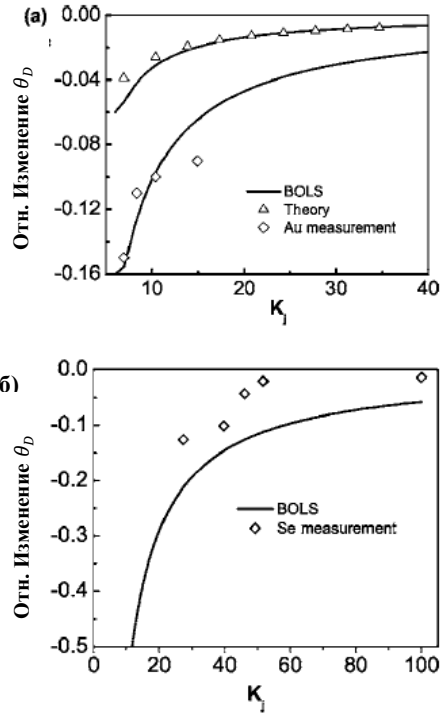


Рисунок 5. 5. Сравнение предсказаний температуры Дебая в рамках модели BOLS. а) в модели Коучмена и Караша ($T_0=0.245T_m$, $T=0.16T_m$, $T_m=1337$ К [179]) с измерениями ($T_0=0.224 T_m$, $T=0.204 T_m$, [185]) для частиц Au и б) частицы Se ($T_0=T=0.6 T_m$, $T_m=494$ К, [186]) .

Как следует из (5.6) теплоемкость однозначно зависит от θ_D и, следовательно, от размерности, температуры и параметров химической связи. На рисунке 5.6 представлены зависимости C_V (в единицах R , R - газовая постоянная) от температуры (T/θ_D) для кремниевых ($m=4.88$) и алюминиевых нанопроволок ($m=1$) разного диаметра $K_j = 5, 10, 20$. Форма кривой C_V похожа на кривую для объемного материала в модели Дебая, но с вызванным размерными эффектами падением во всем температурном диапазоне. Для тех же K_j при заданном T/θ_D спад теплоемкости больше для больших значений m . На Рисунке 5.6б) представлена зависимость C_V / C_{V0} где C_{V0} – объемная теплоемкость при данной температуре в зависимости от K_j при $T=100$ К и 300К для алюминиевых и кремниевых нанопроволок. Теплоемкость уменьшается с

размерным параметром при заданной температуре (исключая случай алюминиевых нанопроволок при комнатной температуре, когда теплоемкость очень близка к своему объемному значению при $K_j > 15$ и несколько увеличивается с уменьшением размера). При постоянном размере уменьшение теплоемкости более существенно при более низких температурах или больших значениях m .

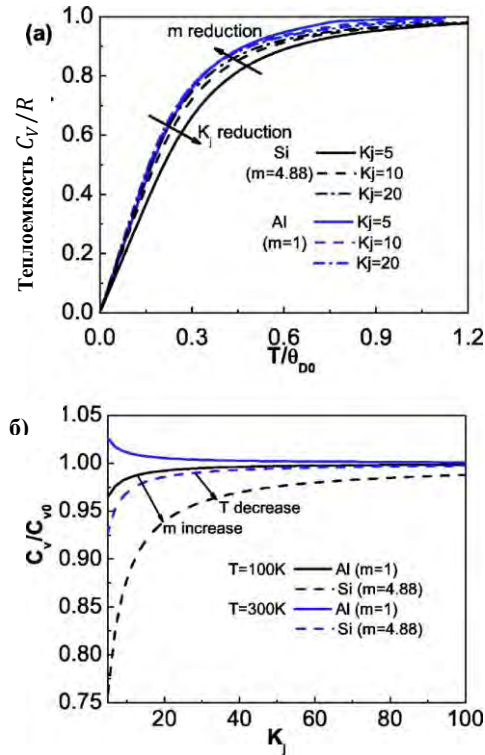


Рисунок 5.6. Зависимость от температуры (T / θ_D) и размера теплоемкости (в единицах R) для кремниевых нанопроволок ($m=4.88$). (а) Для алюминиевых нанопроволок ($m=1$)(б) с $K_j = 5, 10, 20$ и $T=100K$ и $300K$. Теплоемкость стремится к R при очень больших температурах, и уменьшается с уменьшением размера. Падение теплоемкости более явно выражено при больших значениях m при заданном T / θ_D .

Отметим, что при анализе выше мы предполагали $T = T_0$. Если же положить $T_0 = 0$, то общие закономерности поведения теплоемкости сохраняются, но спад по величине будет больше.

Таким образом, выше были получены аналитические выражения для зависимости модулей Юнга и других «констант» от размерности, температуры и особенностей химической связи. Полученные выражения количественно и качественно объясняют почему для одних материалов модуль Y растет, а для других падает с изменением размерности, и почему механическая прочность падает с увеличением температуры. В частности можно указать на то, что

А) модули Юнга наноструктурированных материалов могут падать, расти или оставаться неизменными в зависимости от размерности, температуры и природы связи, или других экспериментальных условий. Важно отметить, что нельзя рассматривать влияние одного параметра в отрыве от всех остальных, что особенно верно в случае малых образцов.

Б) Схожесть зависимости от размера и температуры таких механических параметров как модули Юнга, прочность и модули сдвига, поверхностная энергия связаны с параметрами химической связи в объеме и вблизи поверхности: энергией и длиной связи.

В) Совпадение наблюдаемой и вычисленной температурной зависимости модулей Юнга позволяет получить информацию об энергии связи в объеме способом, который ранее не использовался.

Г) Температура θ_D зависит от T_m скорее как $\sqrt{T_m - T}$, чем T_m или $\sqrt{T_m}$. Приведенное выше решение дает дополнительную информацию о температурной зависимости θ_D , ранее предложенной Линдеманном.

Д) теплоемкость в общем случае падает с уменьшением размера твердых образцов. Уменьшение теплоемкости больше в случае больших значений t при низких температурах.

5.2 ВЛИЯНИЕ ПОТЕРИ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВЯЗЕЙ НА ДИСПЕРСИЮ ФОНОНОВ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КРЕМНИЕВЫХ НАНАПРОВОЛОК.

Полупроводниковые нанопроволоки вызвали огромный интерес у ученых и технологов, прежде всего, из-за их возможных технологических применений. Речь идет, например, о таких нанометровых электрических и тепловых устройствах, как тонкопленочный транзистор (TFT), [206], полевой транзистор (FET), [207], и наносенсоры, [210]. Так как размер таких устройств уменьшается до нескольких нанометров, а плотность элементов растет, эффекты самонагрева и термической устойчивости играют все более важную роль в стабильности работе устройства.

Более глубокое понимание природы теплопроводности полупроводниковых нанопроволок исключительно важно для проектирования и изготовления таких макроустройств, как пьезопреобразователи. Экспериментальные данные показали, что теплопроводность нанопроволок обычно ниже, чем теплопроводность тех же объемных материалов, [209,210], из-за увеличенного рассеяния фононов на границах. Экспериментальные работы, [211–213], численное моделирование, [214,215], и аналитические теории, [216–219], достаточно полно описывают существующие подходы к изучению теплопроводности наноструктур.

Сегодня измерение теплопроводности - вполне стандартная процедура в случае объемных материалов (как и в случае слоистых структур). Однако, измерения для низкоразмерных системы довольно трудные и нечастые. Первое измерение теплопроводности Si нанопроволок с диаметрами, варьирующимися от 22 до 115 нм, было проведено Ли, [210], в температурном диапазоне 20–320 К. Полученные данные о теплопроводности были на два порядка величины меньше по сравнению с объемным кремнием и уменьшались с уменьшением диаметра нанопроволоки.

Подобные результаты были получены Лю и Ашеги, [213], использовавшими для нагрева Джоулево тепло. Измеренная теплопроводность 20 нм кремниевой

тонкой пленки при комнатной температуре составляла приблизительно 15% от объемного значения. Существует ограниченное число экспериментальных результатов по теплопроводности нанопроволок с диаметром меньше, чем 20 нм, причем с достаточно противоречивыми результатами. Метод Монте-Карло, [214], активно применялся для исследования теплопроводности монокристаллической кремниевой нанопроволоки. В результате оказалось, что дисперсионные соотношения, полученные в рамках теории упругости для объемных материалов, справедливы и для фононов, распространяющихся в нанопроволоках, и могут использоваться для оценки теплопроводности нанопроволок с размерами до 100 нм. Используя «объемные» формулы для теплопроводности и дисперсионные соотношениями для объемных акустических фононов вместе с некоторыми простыми моделями (такими как рассеяние с перебросом - Umklapp, примесное и рассеяние на границе) Баландин и Ванг, [218], рассчитали теплопроводность в ряде полупроводниковых нанопроволок. Расчеты показали значительное увеличение скорости релаксации и сильное уменьшение решеточной теплопроводности в квантовых слоистых структурах. Учитывая неравновесное распределение фононов из-за рассеяния на границе, Цзоу и Баландин, [219], вычислили теплопроводность Si нанопроволок с диаметрами, сопоставимыми с свободным пробегом фононов. В [217] вычислили полный набор дисперсионных кривых для фононов, используя атомистическую модель, и затем рассчитали теплопроводность Si нанопроволок. Результаты [217] находятся в хорошем соглашении с экспериментальными данными для проволоки с диаметрами >35 нм. Учитывая эффекты поверхностного рассеяния Лян и Ли, [220], смогли воспроизвести наблюдаемые зависимости, [211]. Недавно, было установлено, что эффект дефицита упорядоченных связей играет важную роль в определении поведения наноструктур, [221]. Поэтому для корректного учета этих новых эффектов в теплопроводности наноструктур, необходимо принимать

во внимание дефицит в упорядочении связей и их изменение в приповерхностных слоях.

Корреляция BOLS и модуль Юнга. Взаимосвязь порядка - длины - силы связи (bond –order- length-strength = BOLS) указывает на то, что сцепление между несоординированными атомами в поверхностных слоях, когда связи становятся короче, а их энергия больше, приводит к локализации и увеличению плотности распределения заряда, энергии и массы в приповерхностном слое. Эти эффекты влияют на гамильтониан всей системы, атомную когерентность и аффинность атомов наноструктуры. Степень влияния зависит от количества «измененных» поверхностных атомов. Когда диаметр нанопроволоки уменьшается, отношение атомов в объеме к поверхностным атомам уменьшается, и эти поверхностные атомы будут иметь большое влияние на свойства материала, как это было продемонстрировано в случае зависимости от размерности механических [212], электрических [213], и тепловых [214] свойств наноструктур.

По определению модуль Юнга равен

$$Y = -v \left. \frac{\partial^2 u(r)}{\partial v^2} \right|_{r=d} \approx \frac{E_{ngi}}{d_i}, \quad (5.8)$$

где v - объем, а $u(r)$ – парный атомный потенциал.

Значение Y растет пропорционально плотности энергии E_{ngi} согласно корреляционным принципам BOLS, [213], при температурах значительно ниже точки плавления. Локальный модуль Юнга поверхностного слоя увеличивается как

$$\frac{E_i}{E_b} = (c_i)^{-(m+3)} \quad (5.9)$$

где i - индекс слоя; $i=1$ для наиболее удаленного слоя, $i=2$ - для второго слоя и $i=3$ для третьего слоя, b – индекс объема. c_i - коэффициент сокращения связи (определяется как отношение длины связи длина в i –ом атомном слое d_i к длине связи в объемном материале d_0). m – подгоночный параметр, который

указывает на природу связи в различных материалах. Например, для кремния, $m = 4.88$, [221]. Сокращение связи внешних слоев отличается от слоя к слою. Однако для того, чтобы упростить анализ, мы будем рассматривать отрелаксировавшую поверхность как однородную оболочку с усредненным значением модуля Юнга E_2 и константы Ламе α_2, μ_2 . В этом случае, у нас есть структура сердцевина- оболочка (Рисунок 5.6), где ядро имеет объемные значения для модуля Юнга E_1 и константы Ламе α_1, μ_1 .

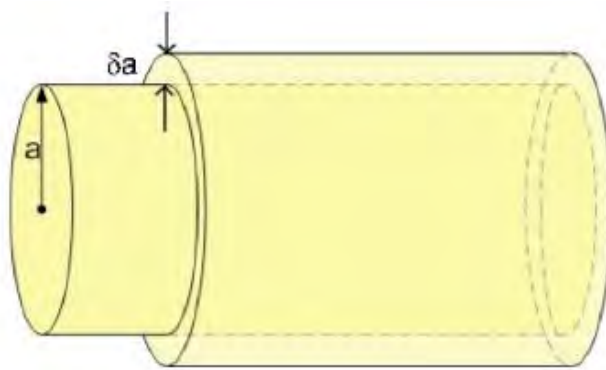


Рисунок 5.6. Схематическая диаграмма основной сердцевины нанопроволоки и поверхностного слоя, содержащего первые три слоя толщиной $\delta a = 1.47$ нм.

Тогда схема структуры с двумя модулями Юнга позволяет написать следующее выражение

$$\frac{E_2}{E_1} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (c_i)^{-(m+3)} . \quad (5.10)$$

В предложенной схеме есть скачок в характеристиках материала при переходе интерфейса сердцевина- оболочка. Критический момент нашего подхода состоит в наложении физического условия непрерывности поля смещений и напряжения (на границе сердцевина- оболочка) в такой системе. Ниже показано,

что это приводит к уравнениям, которые позволяют определить спектр фононов в такой системе с учетом корреляций BOLS.

Дисперсия фононов для цилиндрической нанопроволоки. Вычисление спектра фононов в Si нанопроводах, основанное на атомистической модели с учетом корреляций BOLS, - очень сложная задача. Чтобы упростить вычисления, применим изотропическую упругую модель континуума одновременно и к сердцевине и к оболочке, которые в нашем приближении имеют бесконечную длину. Обозначим радиус сердцевины и толщина оболочки как a и δa , соответственно.

Поперечные и продольные звуковые скорости связаны с материальными константами соотношениями

$$c_{t1,2} = \sqrt{\frac{\mu_{1,2}}{\rho_{1,2}}}, \quad c_{l1,2} = \sqrt{\frac{\alpha_{1,2} + 2\mu_{1,2}}{\rho_{1,2}}}, \quad (5.11)$$

где индексы 1 и 2 относятся к ядру и области оболочки, соответственно. $\rho_{1,2}$ - плотность распределения массы. Согласно модели изотропного континуума Ламе коэффициенты в каждой области связаны с модулями Юнга E и коэффициентом Пуассона γ соотношениями

$$\alpha = \frac{E\gamma}{(1+\gamma)(1-2\gamma)}, \quad \mu = \frac{E}{(1+\gamma)}. \quad (5.12)$$

Предполагая, что соотношение Пуассона γ – одно и то же для области ядра и области оболочки, тогда оба коэффициента Ламе становятся просто пропорциональными модулю Юнга E . В результате константы Ламе для ядра и оболочки удовлетворяют соотношению (см. формулы BOLS (5.11))

$$\frac{\mu_2}{\mu_1} = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} = \frac{E_2}{E_1} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (c_i)^{-(m+3)}. \quad (5.13)$$

Аналогично для скоростей звука имеем

$$\frac{c_{t2,l2}}{c_{t1,l1}} \propto \sqrt{\frac{E_2 \rho_1}{E_1 \rho_2}} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (c_i)^{-\frac{m}{2}}.$$

Направим ось z вдоль проволоки и рассмотрим фундаментальные моды колебаний с частотой ω и волновым вектором \mathbf{q} в z направлении. Как хорошо известно, общее решение для поля смещений $u = (u_r, u_\theta, u_z)$ может быть выражено с помощью трех скалярных функций, которые удовлетворяют дисперсионным уравнениям со скоростями c_t, c_l . Кроме того, в случае цилиндрического нанопровода, каждая из трех скалярных функций может быть разложена в ряд по фундаментальным гармоникам. m -ая гармоника – это решение для области смещения в радиальной системе координат для ядра ($r < a$), которая дается выражением, [225],

$$\begin{aligned} u_r &= iC_l k_{l1} J'_m(k_{l1}r) + iC_t \frac{m}{r} J_m(k_{t1}r) + i\bar{C}_t q a k_{t1} J'_m(k_{t1}r), \\ u_\theta &= -C_l \frac{m}{r} J_m(k_{l1}r) - C_t k_{t1} J'_m(k_{t1}r) - \bar{C}_t \frac{mqa}{r} J_m(k_{t1}r) \quad , \\ u_z &= -C_l q J_m(k_{l1}r) + a\bar{C}_t (k_{t1})^2 J_m(k_{t1}r) . \end{aligned} \quad (5.14)$$

Тогда для m -ой гармоники поля смещений в оболочке имеет вид

$$\begin{aligned} u_r &= \left(iD_l k_{l2} J'_m(k_{l2}r) + iE_l k_{l2} N'_m(k_{l2}r) + iD_t \frac{m}{r} J_m(k_{t2}r) + iE_t \frac{m}{r} N_m(k_{t2}r) + \right. \\ & \left. i\bar{D}_t q a k_{t2} J'_m(k_{t2}r) + i\bar{E}_t q a k_{t2} N'_m(k_{t2}r) \right) \exp(i(m\theta + qz - \omega t)), \\ u_\theta &= \left(-D_l \frac{m}{r} J_m(k_{l2}r) - E_l \frac{m}{r} N_m(k_{l2}r) - D_t k_{t1} J'_m(k_{t1}r) - E_t k_{t1} N'_m(k_{t1}r) - \right. \\ & \left. \bar{D}_t \frac{mqa}{r} J_m(k_{t2}r) - \bar{E}_t \frac{mqa}{r} N_m(k_{t2}r) \right) \exp(i(m\theta + qz - \omega t)) \quad , \\ u_z &= \left(-D_l q J_m(k_{l2}r) - E_l q N_m(k_{l2}r) + a \bar{D}_t (k_{t1})^2 J_m(k_{t1}r) + \right. \\ & \left. a \bar{E}_t (k_{t2})^2 N_m(k_{t2}r) \right) \exp(i(m\theta + qz - \omega t)) . \end{aligned} \quad (5.15)$$

В выше приведенном выражении $m=0,1,2, \dots$, - номер гармоники, J_m, N_m - обычные функции Бесселя и Неймена, и введены коэффициенты, которые должны быть определены из условий сшивки на границе сердцевина – оболочка.

Частота фонона ω и поперечная проекция волновых векторов $k_{t,l1}, k_{t,l2}$ в вышеупомянутом выражении связаны с волновым вектором q формулами

$$k_{t,l1} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c_{t,l1}}\right)^2 - q^2}, k_{t,l2} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c_{t,l2}}\right)^2 - q^2}, \quad (5.16)$$

где $c_{t,l1}, c_{t,l2}$ являются скоростями продольных и поперечные фононов в основном регионе и области оболочки, соответственно. Торсионные (кручивающие) и продольные моды даются уравнениями (5.14) и (5.15) с $m=0$. При $m=1$, (5.14) и (5.15) – определяют изгибные моды.

Как упомянуто выше, мы налагаем условия непрерывности на поле смещения $u = (u_r, u_\theta, u_z)$ и напряжения при переходе интерфейса между сердцевиной и оболочкой, в дополнение к условию свободной границе на внешней части оболочки. Это приводит к следующему уравнению, определяющему спектр фононов с учетом поправок BOLS:

$$\begin{bmatrix} U_1 & -U_2 & -U_3 \\ \mu_1 F_1 & -\mu_2 F_2 & -\mu_2 \bar{F}_2 \\ 0 & -\mu_2 F_2(a + \delta a) & -\mu_2 \bar{F}_2(a + \delta a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \\ E \end{bmatrix} = 0, \quad (5.17)$$

где

$$C = \begin{bmatrix} C_l \\ C_t \\ \bar{C}_t \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} D_l \\ D_t \\ \bar{D}_t \end{bmatrix}, E = \begin{bmatrix} E_l \\ E_t \\ \bar{E}_t \end{bmatrix}. \quad (5.18)$$

Здесь колонки – векторы сформированы из коэффициентов, которые должны быть определены (см. уравнения (5.14) и (5.15)) . 3x3 блочные элементы в матрице (5.17) даны ниже:

$$U_1 = \begin{bmatrix} L_1 & mt_1 & qaT_1 \\ -ml_1 & -T_1 & -mquat_1 \\ -qal_1 & 0 & (k_{t_1}a)^2 t_1 \end{bmatrix},$$

$$U_2 = \begin{bmatrix} L_2 & mt_2 & qaT_2 \\ -ml_2 & -T_2 & -mquat_2 \\ -qal_1 & 0 & (k_{t_2}a)^2 t_1 \end{bmatrix},$$

$$\bar{U}_2 = \begin{bmatrix} \bar{L}_2 & m\bar{t}_2 & qa\bar{T}_2 \\ -m\bar{l}_2 & -\bar{T}_2 & -mqa\bar{t}_2 \\ -qa\bar{l}_1 & 0 & (k_{t_2}a)^2 \bar{t}_1 \end{bmatrix},$$

$$F_1 =$$

$$\begin{bmatrix} -2qaL_1 & mquat_1 & ((k_{t_1}a)^2 - (qa)^2) T_1 \\ -m(l_1 - L_1) & ((k_{t_1}a)^2 - 2m^2)t_1 + 2T_1 & 2mqa(t_1 - T_1) \\ \left((2m^2 + (qa)^2 - (k_{t_1}a)^2) l_1 - 2L_1 \right) & -2m(t_1 - T_1) & 2qa \left[(m^2 - (k_{t_1}a)^2) t_1 - T_1 \right] \end{bmatrix}$$

,

$$F_2 =$$

$$\begin{bmatrix} -2qaL_2 & mquat_2 & ((k_{t_1}a)^2 - (qa)^2) T_2 \\ -m(l_2 - L_2) & ((k_{t_2}a)^2 - 2m^2)t_2 + 2T_2 & 2mqa(t_2 - T_2) \\ \left((2m^2 + (qa)^2 - (k_{t_1}a)^2) l_2 - L_2 \right) & -2m(t_2 - T_2) & 2qa \left[(m^2 - (k_{t_2}a)^2) t_2 - T_2 \right] \end{bmatrix}$$

,

$$\bar{F}_2 =$$

$$\begin{bmatrix} -2qa\bar{L}_2 & mqa\bar{t}_2 & ((k_{t_1}a)^2 - (qa)^2) \bar{T}_2 \\ -m(\bar{l}_2 - \bar{L}_2) & ((k_{t_2}a)^2 - 2m^2)\bar{t}_2 + 2\bar{T}_2 & 2mqa(\bar{t}_2 - \bar{T}_2) \\ \left((2m^2 + (qa)^2 - (k_{t_1}a)^2) \bar{l}_2 - \bar{L}_2 \right) & -2m(\bar{t}_2 - \bar{T}_2) & 2qa \left[(m^2 - (k_{t_2}a)^2) \bar{t}_2 - \bar{T}_2 \right] \end{bmatrix}$$

,

$$F_2(a + \delta a) = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{bmatrix}, \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned}
 Q_{11} &= -2qaL_2(a + \delta a), \\
 Q_{21} &= 2m(l_2(a + \delta a) - L_2(a + \delta a)), \\
 Q_{31} &= \left(2m^2 + q^2(a + \delta a)^2 - (k_{t2}(a + \delta a))^2\right) l_2(a + \delta a) - 2L_2(a + \delta a), \\
 Q_{12} &= -mqa t_2(a + \delta a), \\
 Q_{22} &= \left(-2m^2 + (k_{t2}(a + \delta a))^2\right) t_2(a + \delta a) + 2T_2(a + \delta a), \\
 Q_{32} &= 2m(T_2(a + \delta a) - t_2(a + \delta a)) \\
 Q_{13} &= -\left(q^2(a + \delta a)^2 - (k_{t2}(a + \delta a))^2\right) T_2(a + \delta a), \\
 Q_{23} &= 2mqa(t_2(a + \delta a) - T_2(a + \delta a)) \\
 Q_{33} &= 2qa\left(m^2 - (k_{t2}(a + \delta a))^2\right) t_2(a + \delta a) - T_2(a + \delta a)\dots
 \end{aligned}$$

В приведенных выше выражениях мы определили следующие постоянные

$$\begin{aligned}
 L_1 &= k_{l1}aJ'_m(k_{l1}a), l_1 = J_m(k_{l1}a), \\
 T_1 &= k_{t1}aJ'_m(k_{t1}a), t_1 = J_m(k_{t1}a), \\
 L_2 &= k_{l2}aJ'_m(k_{l2}a), l_2 = J_m(k_{l2}a), \\
 T_2 &= k_{t2}aJ'_m(k_{t2}a), t_2 = J_m(k_{t2}a), \\
 \bar{L}_2 &= k_{l2}aN'_m(k_{l2}a), \bar{l}_2 = N_m(k_{l2}a), \\
 \bar{T}_2 &= k_{t2}aN'_m(k_{t2}a), \bar{t}_2 = N_m(k_{t2}a).
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Первый (второй) ряд матрицы в уравнении (5.17) представляет собой условия непрерывности для смещения (напряжений) в области интерфейса между сердцевинной и оболочкой, третий ряд соответствует условию нулевых напряжений на внешней поверхности оболочки. Теперь мы готовы обсудить различные моды спектра фононов.

При $m=0$ (нулевая гармоника), система (5.17) расщепляется на две системы, относящиеся к скручивающим и продольным модам. Уравнение, описывающее скручивающие моды дается уравнением (5.17),

$$\begin{bmatrix} -T_1 & T_2 & \bar{T}_2 \\ -\mu_1((k_{t1}a)^2 t_1 + 2T_1) & -\mu_2((k_{t2}a)^2 t_2 + 2T_2) & -\mu_2((k_{t2}a)^2 \bar{t}_2 + 2\bar{T}_2) \\ 0 & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ D_1 \\ E_1 \end{bmatrix} = 0,$$

$$A_{32} = -\mu_2((k_{t2}(a + \delta a))^2 t_2(a + \delta a) + 2T_2(a + \delta a)),$$

$$A_{33} = -\mu_2((k_{t2}(a + \delta a))^2 \bar{t}_2(a + \delta a) + 2\bar{T}_2(a + \delta a)).$$

Определение всех колебаний, относящихся к скручивающим модам по уравнению (5.18) достаточно трудоемкое занятие. Однако в предельном случае $a \gg \delta a$, который практически отвечает экспериментальной ситуации, линейное приближение для (5.18) упрощает вычисления. Раскрывая детерминант матрицы в (5.11) до величин первой степени по $\delta a/a$, мы получаем следующее уравнение:

$$H(\omega) + G(\omega) \left(\frac{\delta a}{a} \right) = 0, \quad (5.21)$$

где

$$H(\omega) = \mu_1 \{ (k_{t1}a)^2 J_0(k_{t1}a) - 2(k_{t1}a) J_1(k_{t1}a) \},$$

$$G(\omega) = -\mu_2(k_{t1}a)(k_{t2}a)^2 J_1(k_{t1}a) .$$

Здесь проще использовать подход теории возмущений для решения системы уравнений (5.21). Если ω_α ($\alpha = 1, 2, 3, \dots$) частоты скручивающих колебаний, полученные в отсутствие модификации постоянных из-за BOLS (т.е., $H(\omega_\alpha) = 0$), тогда в линейном приближении для частоты фононов с учетом BOLS получаем выражение в следующей форме:

$$\omega = \omega_\alpha + P_\alpha \left(\frac{\delta a}{a} \right), \quad (5.22)$$

где P_α - линейный коэффициент, который должен быть определен. Подстановка уравнений (5.22) в (5.21), дает следующее аналитическое выражение для поперечных мод

$$H(\omega) + H'(\omega)P_\alpha \left(\frac{\delta a}{a} \right) + G(\omega) \left(\frac{\delta a}{a} \right) = 0, \quad (5.23)$$

или

$$P_{\alpha} = -[G(\omega)/H'(\omega)] \left(\frac{\delta a}{a} \right). \quad (5.24)$$

Аналогичным образом спектр продольных мод может быть получен из (5.17) при $m=0$.

Частоты фононов для продольных мод также определяются выражениями типа (5.22) и (5.23), но с заменой матриц $H(\omega), G(\omega)$ на соответствующие детерминанты матриц с размерностью 9×9 .

Таким образом, уравнений (5.22) и (5.23) позволяют вычислить закон дисперсии для мод, относящихся к скручивающим, продольным, и изгибным колебаниям с учетом влияния BOLS.

Вычисление теплопроводности. В диффузионном режиме распространения фононов, коэффициент теплопроводности полупроводниковых нанопроволок с диаметром a может быть представлен в виде суммы по всем фононным ветвям

$$k(T) = \frac{1}{\pi a^2} \sum_{\alpha} \int_{\omega_{\alpha}^i}^{\omega_{\alpha}^f} v(\alpha, \omega) \tau(\omega) \frac{h\omega}{2\pi} \frac{df}{dT} d\omega \quad (5.25)$$

где $f = 1/\{\exp(\frac{h\omega}{kT}) - 1\}$ - функция Бозона-Эйнштейна, $\tau(\omega)$ - время свободного пробега фононов. Минго, [216,217], использовал это выражение для того, чтобы вычислить теплопроводность нанопроволок (без учета BOLS эффектов) с усредненной групповой скоростью $\langle v_z(\omega) \rangle = \sum_{\alpha} v(\alpha, \omega)/N_b(\alpha)$, которая была получена из полного набора дисперсионных соотношений, основанных на атомистической модели Si проводов. Как обсуждалось выше, мы предлагаем использовать приближение изотропного упругого континуума для получения аналитических выражений для различных фононных ветвей и соответствующих групповых скоростей фононов $v(\alpha, \omega) = \frac{d\omega_{\alpha}}{dq}$. Для удобства

численного интегрирования заменим переменную ω на $x = \hbar\omega/kT$. Тогда (5.25) может быть явно переписано в виде

$$k(T) = \frac{1}{\pi a^2} \frac{k^2}{\hbar^3} T \sum_{\alpha} \int_{\omega_{\alpha}^i}^{\omega_{\alpha}^f} \frac{d\omega_{\alpha}}{dq} \tau(x) \frac{x^2 \exp(x)}{2\pi} / \{\exp(x) - 1\}^2 dx . \quad (5.26)$$

Самый неопределенный параметр в (5.26) – это время свободного пробега фонона, которое может зависеть от частоты, температуры и размера системы, [214,217,226]. Предполагая, что интерференцией процессов рассеяния можно пренебречь, тогда время жизни фононов определяется правилом Маттиссена, подобное случаю проводимости

$$\tau^{-1}(\omega) = \tau_B^{-1}(\omega) + \tau_i^{-1}(\omega) + \tau_U^{-1}(\omega) \quad (5.27)$$

где $\tau_B(\omega), \tau_i(\omega), \tau_U(\omega)$ отвечают граничному рассеянию, примесному рассеянию и процессам переброса (Umklapp), соответственно. Таблица 5.1 содержит некоторые параметры, которые были использованы в наших вычислениях.

ТАБЛИЦА 5.1. Толщина оболочки , константы Ламе, скорости фононов и параметры, относящиеся к различным рассеивающим механизмам.

Толщина оболочки	$\delta a = 1.47$ нм
константы Ламе	$\frac{\mu_2}{\mu_1} = 1.8793$
Коэффициент сжатия связи	$c_i(z_i) = 2(1 + \exp[(12 - z_i)/8z_i])^{-1}$, [223,224].
скорость	$c_t = 4650$ м/с, $c_l = 8410$ м/с, $v_0 = 7400$ м/с
Механизм рассеяния	Подгоночный параметр
Рассеяние на границах	$\tau_B^{-1}(\omega) = D/v_0$ ([311],[313]), $(v_0)^{-1} = \frac{1}{3}(2(c_t)^{-1} + (c_l)^{-1})$
Umklapp процессы	$\tau_U^{-1}(\omega) = A T \omega^2 \exp(-C/T)$, $A = 1.73$ x

	10^{-11} сек/К [218], (см. также [217], [218], [227], [228]), $C=137.3$ К, [218].
Процессы рассеяния на примеси	$\tau_i^{-1}(\omega) = B\omega^4$, $B = 1.32 \times 10^{-45}$ сек ³ , [218].

Если диаметр $D(2a)$ находится в нанометровом диапазоне, то граничное рассеяние может стать доминирующим фактором при определении времени жизни фона при низких частотах.

Результаты и обсуждение. Рисунок 5.9 показывает результаты вычисления дисперсионных соотношений для первых 6 ветвей фононных колебаний: а) скручивающие моды, к продольным - б), и в) изгибные моды колебаний для проводов с различными $\delta a/a$. Был рассмотрен случай изменения $\delta a/a$ до 0.15, диаметр цилиндрической нанопроволоки - 22 нм с учетом оболочки в виде трех первых слоев с $\delta a = 1.47$ нм. Для более высоких значений $\delta a/a$, т.е., например, для диаметров < 22 нм, модель упругого континуума не подходит и более сложное атомарное моделирование, [216,217], должно быть применено. Тем не менее, некоторые заключения о поведении теплопроводности в этой области можно сделать на основании простой модели изотропного упругого континуума. Как видно из Рисунка 5.9 при увеличении $\delta a/a$, так же как и при уменьшении диаметра цилиндрической нанопроволоки, фононные частоты, относящиеся к скручивающейся моде, уменьшаются для всех ветвей, кроме первой. Для продольных ветвей на Рисунке 5.9 (б), при применении BOLS частота фононов уменьшается за исключением диапазона малых значений волнового вектора q . Увеличение частоты фононов для этого диапазона волновых векторов можно рассматривать как резонансный эффект. Мы находим подобное поведение и для изгибных мод на Рисунке 5.9 с. Наклоны кривых дисперсии фононов для данной упругой модели континуума почти постоянны для достаточно больших волновых

векторов q , что находится в согласии с атомистической моделью, [217]. Из (5.26), мы видим, что теплопроводность примерно пропорционально q_{\max} , когда наклоны кривых - почти постоянны, и следовательно увеличиваются с увеличением q_{\max} .

В принципе правильное значение q_{\max} было бы π/a_z где a_z – параметр периодичности кристалла вдоль направления проволоки, при условии, что упругая модель континуума полностью применима в данной ситуации. Однако вследствие того, что упругая модель – это не очень хорошее приближение для тех фононных ветвей, которые имеют нулевые наклоны в зональной границе, ошибки в вычислении теплопроводности будут вызваны использованием π/a_z вместо q_{\max} . Так как наклон фононных ветвей почти постоянный для достаточно больших волновых векторов q и это было бы только к уменьшения до нуля в малой области около зональной границы π/a_z (примерно на 10% меньше во всем диапазоне, как показано при вычислении дисперсии фононов в [216,217]), ошибки при вычислении теплопроводности из-за выбора q_{\max} равный π/a_z меньше, чем 10%. Другой важный момент состоит в том, что групповая скорость фононов $v(\alpha, \omega) = \frac{d\omega_\alpha}{dq}$ увеличивается для большинства случаев при учете эффектов BOLS. Нанопроволоки с круговым сечением могут быть рассмотрены как волновод с хорошо определенным набором собственных состояний. Однако вопрос о влиянии шероховатости поверхности и других дефектов в нанопроволоке на транспортные явления все еще открыт. Наше исследование раскрывает особенности поведения спектра фононов при учете эффекта BOLS. Кроме того, наш подход применим к случаю нанопроволок, покрытых окисными слоями (например, кремниевой окисью), когда нужно использовать соответствующие измененные упругие константы для описания оболочки.

Различие в частотах фонона в ядре и оболочке из-за эффектов BOLS изменяет спектр фононных колебаний и увеличивает групповую скорость

в системе. Из уравнений (5.22) можно заключить, что эффект BOLS увеличивает теплопроводность в кремниевых нанопроволоках. Такое поведение теплопроводности нанопроволок, вероятно, могло бы быть объяснено присутствием относительно тонкой оболочки, которые “смешивает” собственные состояния идеального ядра и оболочки, и, следовательно, увеличивают общее число каналов для фононного транспорта.

На рисунке 5.9 приведены относительные изменения теплопроводности в зависимости от $\delta k/k$ (то есть, теплопроводности в нанопроволоке с учетом эффектов BOLS по сравнению с нанопроволокой с тем же самым диаметром провода без учета BOLS) и от температуры для первых трех мод. Мы специально разделяем вклады, относящиеся к скручивающим модам, продольным и изгибным, чтобы отличить влияние BOLS эффектов на каждую из них. Мы видим из Рисунка 5.9, что значение теплопроводности на “плато” увеличивается с ростом $\delta a/a$. Это ожидаемое следствие (5.22), в котором член $\frac{\hbar\omega}{2\pi} \frac{df}{dT}$ приближается к константе k_B при достаточно высоких температурах. При этом температура имеет относительно небольшое влияние на время жизни фонона (в чем можно убедиться при использовании параметров A, B, и C из Таблице 5.1). Теплопроводность зависит критически от групповой скорости при достаточно больших температурах. Так как фононная групповая скорость растет с ростом $\delta a/a$, то положение плато также увеличивается с ростом $\delta a/a$.

С другой стороны, данные Рисунка 5.9 показывают, что относительное изменение теплопроводности $\delta k/k$ увеличивается, когда T растет от абсолютного нуля. Это может быть понято так, что при учете эффектов BOLS вариация $\delta a/a$ вызывает понижение частот фононов. Для тех фононных ветвей, которые обладают частотами выше $\frac{kT}{\hbar}$, уменьшение фононных частот из-за BOLS приводит к увеличению наклона кривой $\frac{\hbar\omega}{2\pi} \frac{df}{dT}$. Отсюда следует, что мы должны ожидать

увеличения теплопроводность с ростом T . Этот фактор, вместе с тем фактом, что учет BOLS увеличивает групповую скорость фононов, приводит к выводу о том, что теплопроводность увеличивается быстрее с BOLS, чем без ее учета. Именно поэтому $\delta k/k$ увеличивается, когда T растет от нуля. Так как большое отношение $\delta a/a$ приводит к большему снижению в частотах фононов, все вместе это приводит к тому, что $\delta k/k$ достигает “плато” ранее т.е., при более низкой температуре.

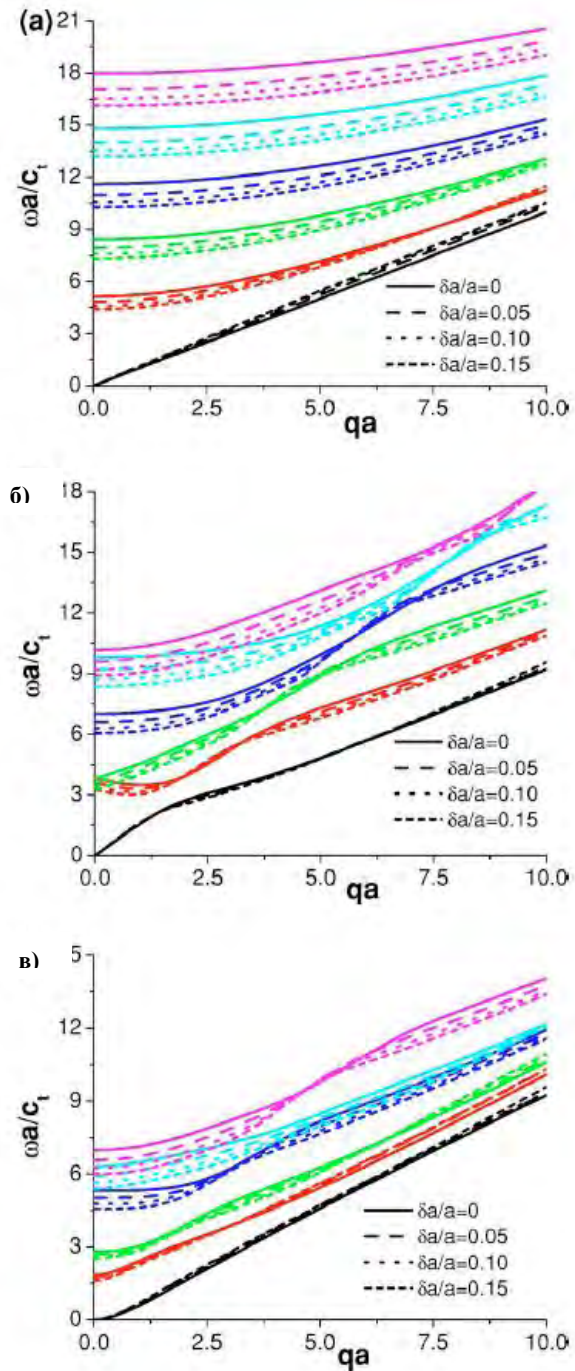


Рисунок 5.8. Первые шесть дисперсионных ветвей для фононов, относящихся а) к скручивающимся модам, б) – продольным модам и в) изгибным модам с $\delta a / a = 0, 0.05, 0.10, \text{ и } 0.15$. Уменьшения частот фононов немного увеличивается с ростом $\delta a / a$ для большинства мод.

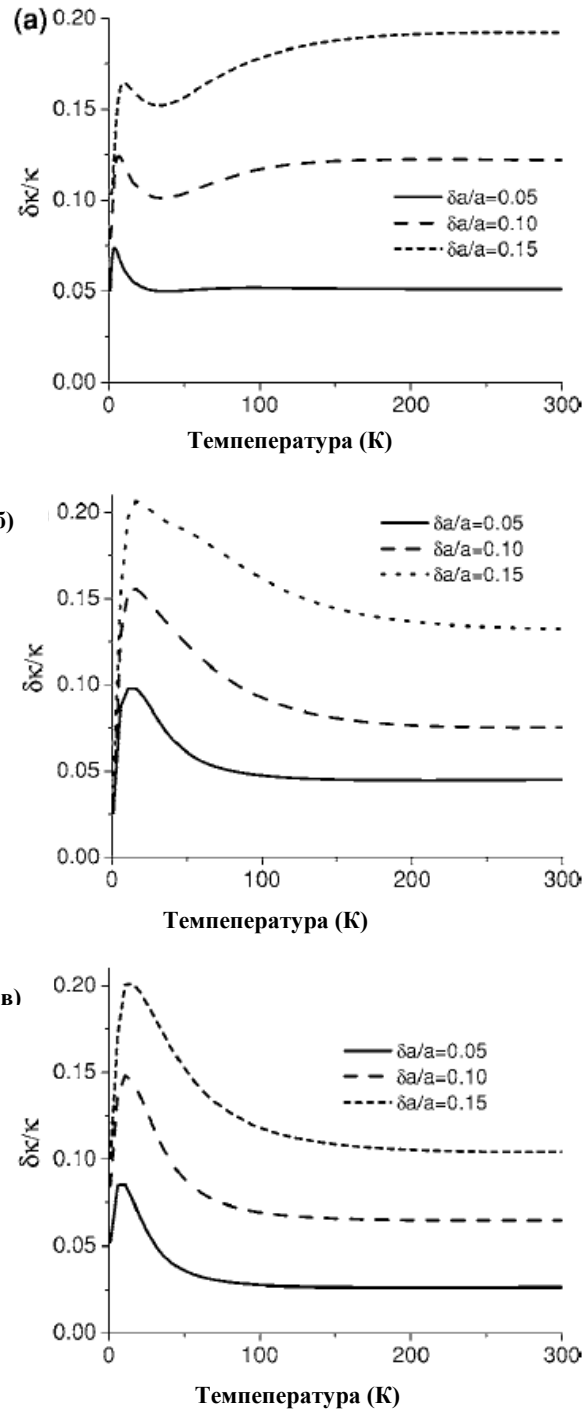


Рисунок 5.9. Температурная зависимость относительного изменения теплопроводность для а) скручивающих мод, б) - продольных мод, и в) изгибных мод для $\delta a/a = 0, 0.05, 0.10, 0.15$.

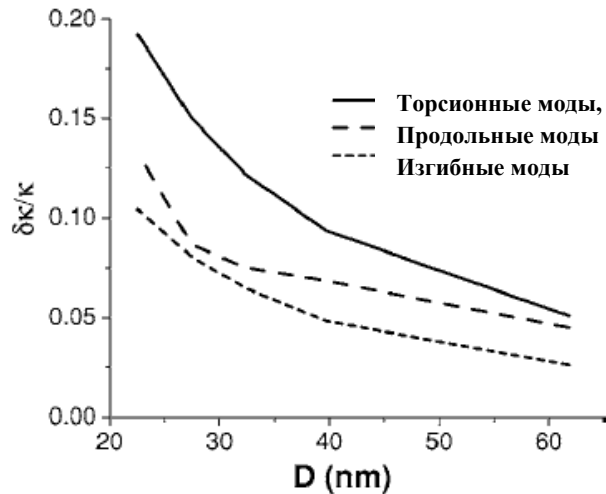


Рисунок 5.10. Зависимость относительного изменения теплопроводности при $T=300$ К для скручивающих мод, продольных и изгибных. Относительное увеличение теплопроводности из-за уменьшения диаметра дает самый большой вклад для скручивающих мод.

На Рисунке 5.10 представлены относительные изменения теплопроводности $\delta k/k$ в зависимости от диаметра кремниевой цилиндрической нанопроволоки. Как ранее обсуждалось, выбор q_{\max} равным π/a_z , приводит меньше чем 10%-й ошибке при расчете теплопроводности. Однако эта суммарная ошибка - почти одинакова для случаев рассмотрения с или без учета BOLS эффекта. Видимо, наш результат показывает, что для проволок большего диаметра, эффект BOLS не очень значительный. С уменьшением диаметра, $\delta k/k$ увеличивается, и увеличение $\delta k/k$ более явное для скручивающих мод.

Когда $D=62$ нм, $\delta k/k$ составляет приблизительно 5% для торсионных мод, 3% для продольных, и приблизительно 2.6% для изгибных мод. С уменьшением диаметра уменьшает, $\delta k/k$ увеличивается. Когда $D=22$ нм, $\delta k/k$ увеличивается на 19%, 13% и 10% для скручивающих, продольных, и изгибных мод, соответственно. Увеличение $\delta k/k$ с уменьшением D может быть объяснено следующим образом: когда диаметр D уменьшается ($\delta a/a$ увеличивается),

частоты фононов тоже увеличиваются. Это делает член $\frac{h\omega}{2\pi} \frac{df}{dT}$, меньше при фиксированных T и из уравнения (5.22) мы также видим уменьшение теплопроводности. Однако эффект BOLS опускает вниз фононные ветви, что приводит к более медленному уменьшению $\frac{h\omega}{2\pi} \frac{df}{dT}$ и следовательно теплопроводности при уменьшении диаметра D . Относительно большое изменение теплопроводности демонстрирует значительный эффект от учета BOLS при вычислении спектра фононов и теплопроводности. Хотя изотропная упругая модель не является очень хорошим приближением для описания коротких длин волн, эта модель достаточно полно раскрывает возможности метода BOLS, который учитывает изменения частот фононов и их групповой скорости.

Таким образом, мы продемонстрировали, что относительное изменение теплопроводности в цилиндрических кремниевых нанопроволоках из-за поверхностных эффектов и болтающихся связей существенно. Эффект BOLS изменяет (увеличивает) модули Юнга поверхностной оболочки нанопроволоки и следовательно увеличивает скорость звука. Для сохранения простоты описания мы использовали упругую модель континуума для структур сердцевина-оболочка, и налагаем условие свободной поверхности на внешней части оболочки. Было найдено, что в большинстве случаев это приводит к уменьшению частот фононов и их групповая скорость увеличивается в присутствии BOLS. Мы также нашли, что эффект BOLS увеличивает теплопроводность. Кроме того, относительное изменение теплопроводности (по сравнению с проволокой того же диаметра без эффектов BOLS) увеличивается с уменьшением диаметра.

Наши результаты демонстрируют, что эффект BOLS должен быть принят во внимание при исследовании фононного транспорта в полупроводниковых наноструктурах.

ГЛАВА 6. ДИФФУЗНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ И РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ. ИНТЕГРАЛЬНАЯ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ НАНОСИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТОВ МНОГОКРАТНОСТИ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ.

В данной главе рассматриваются динамические дифракционные явления, приводящие, с одной стороны, к принципиальным ограничениям рентгеновской диагностики при использовании кинематического приближения, а, с другой стороны, открывают возможности для значительного увеличения информации о структуре дефектов в реальных кристаллах при использовании динамического рассеяния. Новые возможности связаны с тем, что дефекты и другие параметры кристаллов, такие как толщина, существенно влияют на динамическую картину рассеяния. Единая физическая интерпретация всего круга явлений и эффектов динамического и кинематического рассеяния рентгеновских лучей в реальных кристаллах позволила предложить принципиально новые методы неразрушающей диагностики структурного совершенства кристаллических систем. В работе было предложено назвать такой подход – диффузно-динамической комбинированной дифрактометрией (ДДКД), суть которого состоит в многопараметрической диагностике кристаллов с дефектами на основе обработки результатов экспериментов по динамической дифракции, полученных при различных условиях. Следует отметить, что указанный подход связан с использованием в динамической теории метода флуктуационных волн, впервые разработанного М.А. Кривоглазом при построении кинематической теории рассеяния и созданной им классификации дефектов по характеру их влияния на картину рассеяния.

В данной главе изложена обобщенная динамическая теория упругого (брэгговского) и диффузного рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами нескольких типов. Показано, что выражения для дифференциальной и интегральной интенсивности рассеяния определяются характеристиками дефектов в кристаллах как при дифракции на отражение, так и на прохождение. Описаны экстинкционные эффекты, возникающие за счет рассеяния на дефектах, без ограничений на их размеры при когерентном и диффузном рассеяниях; при малой и большой диффузной экстинкции; дифференциального и интегральных коэффициентов и факторов экстинкции, связанных с многократностью рассеяния на флуктуационных отклонениях от периодичности решеток кристаллов. Дан детальный анализ физических закономерностей, лежащих в основе обнаруженной зависимости дифракционной картины от дефектов. Были проанализированы уникальные диагностические возможности предложенной интегральной диффузодинамической комбинированной дифрактометрии (ИДДКД). В частности, были показаны качественно новые возможности многопараметрической диагностики материалов и наноструктур. На основе построенной теории созданы методики ИДДКД, связанные с измерением скачков поглощения вблизи К-края, отклонения от закона Фриделя, деформационных и толщинных зависимостей, а также проведена их экспериментальная апробация.

Одной из важнейших проблем современной науки и технологии является расширение возможностей диагностики на микро и нано уровне. Революционный прорыв в решении проблем визуализации был связан с открытием в 1895 году рентгеновских лучей, которые позволили человеку "видеть" сквозь непрозрачные предметы. В частности, эксперименты по рентгеновскому контрасту поглощения позволили определять поврежденные участки костной ткани, обеспечив существенный прогресс в медицине. Кроме того, дифракция рентгеновских лучей впервые позволила изучать атомную структуру кристаллов, связав геометрию

расположения атомов в решетке с дифракционными рефlekсами. В конечном итоге именно рентгеновские методы, созданные в начале 20 века, сделали из классической кристаллографии, [228], экспериментальную науку, которой она остается и сегодня.

Следует отметить, что классическая кристаллография, существующая уже более ста лет и основанная на кинематической (приближение однократного рассеяния), [229, 230], или динамической (с учетом эффектов многократности рассеяния), [229, 231, 232], теории дифракции лучше всего справляется с определением параметров идеальных кристаллов. В то время как основной интерес представляют точное определение вида и концентрации дефектов в кристаллах и наносистемах, как, впрочем, и диагностика целенаправленно созданные отклонения от периодичности в искусственных сверхструктурах.

Как известно, случайные отклонения от периодичности структуры (например, такие как атомы замещения, кластеры, поля смещений) приводят к генерации диффузного рассеяния, которое и используется для диагностики таких дефектов. Впервые кинематическая теория диффузного рассеяния нейтронов из-за тепловых колебаний атомов в идеальных кристаллах была построена А.И. Ахиезером еще в сороковые годы 20 века, [326]. В пятидесятые годы М.А. Кривоглаз обобщил эту теорию, разработав метод флуктуационных волн для случая кинематического диффузного рассеяния в кристаллах с дефектами произвольного типа, [234], а в шестидесятые годы эти результаты были применены для случая динамической теории и многократного диффузного рассеяния, [233-234].

Кинематическая теория М.А. Кривоглаза брэгговского и диффузного рассеяния в кристаллах с дефектами, вместе с классификацией дефектов по характеру их влияния на дифракционную картину рассеяния, стали теоретической основой для исследований структурных дефектов и их распределений в

кристаллах, [235]. При этом в кинематическом приближении спектр диффузного рассеяния оказывается прямым Фурье-изображением структуры дефектов.

Однако приближение однократного рассеяния, которое положено в основу кинематической теории, существенно ограничивает возможности ее применения. Эта теория хорошо работает в поликристаллах и в сильно искаженных дефектами монокристаллах, но она неприменима, когда размеры кристаллов и областей когерентного рассеяния превышают длину экстинкции. В этих случаях необходимо учитывать эффекты многократности рассеяния, т.е. необходима динамическая теория. Кроме того, кинематическая теория позволяет однозначно определить характеристики дефектов произвольного типа при условии, что этот тип дефектов является преимущественным, а концентрация всех остальных дефектов мала. Когда в кристалле присутствуют в достаточном количестве дефекты разных типов, регистрируемый диффузный сигнал является смесью сигналов от разных дефектов и при использовании кинематического приближения однозначная диагностика такой многопараметрической системы становится невозможной.

Для характеристики монокристаллов и сверхрешеток, содержащих одновременно дефекты разных типов, следует использовать теорию многократного диффузного рассеяния, [235-249], диффузно-динамическую комбинированную дифрактометрию (ДДКД), [250-255]. Эти новые методы неразрушающей структурной диагностики, основанные на динамической дифракции, впервые позволили решить проблему однозначной многопараметрической характеристики наносистем и обеспечили возможность отделения вклада от многих типов дефектов, [253-255].

Радикальное повышение информативности метода при переходе от кинематического описания рассеяния к динамическому обусловлено принципиальными различиями в зависимости брэгговской и диффузной

составляющих от условий дифракции, а также в зависимости удельных вкладов дефектов различного типа.

Такая многопараметрическая количественная диагностика должна быть основана на теоретической модели, адекватно описывающей эксперимент при всех возможных условиях динамической дифракции (геометрии Лауэ и Брэгга, предельные случаи тонкого и толстого кристаллов, спектральные, азимутальные, деформационные зависимости и т.д.). Рассмотрению такой модели, максимально удовлетворяющей указанным требованиям, и посвящена данная глава.

6.1. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕМАТИЧЕСКОЙ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИЙ РАССЕЯНИЯ

Кинематическая картина рассеяния.

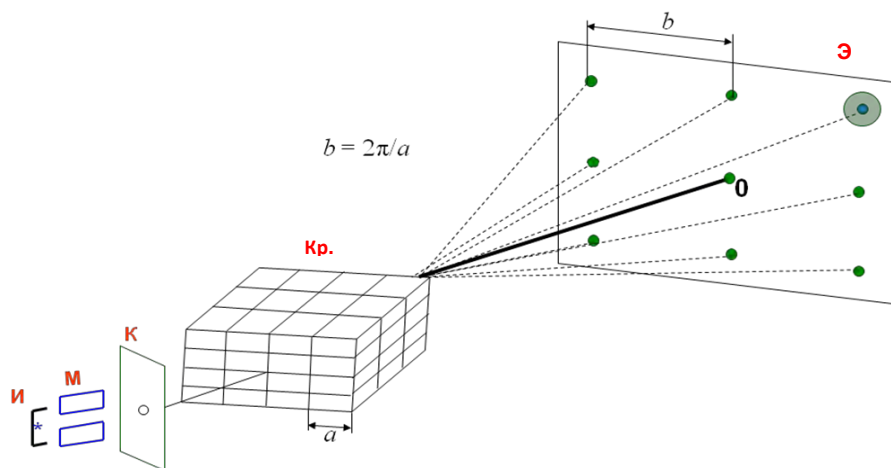


Рисунок 6.1. Схема рассеяния на идеальном кристалле (жирные пятна на экране, размеры и форма которых определяются в кинематической теории только размерами и формой образца) и кристалле с дефектами (в правом верхнем углу жирная точка соответствует распределению в обратном пространстве брэгговской компоненты дифрагированной интенсивности, а более светлое пятно вокруг нее — распределению диффузной составляющей). И – источник, М – монохроматор, К – коллиматор, Кр. – кристалл, Э – экран.

На Рисунке 6.1 приведена схема картины рассеяния в идеальном кристалле и в кристалле с дефектами (в верхнем правом углу экрана). Наиболее ярко различия между кинематической и динамической теориями рассеяния видны на примере интегральных интенсивностей дифрагированного излучения. Кинематическая теория Кривоглаза дает следующие результаты для полной интегральной интенсивности (ПИИ) кристалла с дефектами (R_i) [235,244]:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD}, \quad (6.1)$$

$$R_{iB} = R_{ip} e^{-2L}, \quad (6.2)$$

$$R_{iD} = R_{ip} (1 - e^{-2L}), \quad (6.3)$$

$$R_{ip} = 2CQt/\gamma_0, \quad (6.4)$$

$$Q = (\pi|\chi_{Hr}|)^2/[\lambda \sin(2\theta_B)], \quad (6.5)$$

где R_{ip} – интегральная интенсивность рассеяния в идеальных кристаллах (без дефектов), χ_{Hr} — вещественная часть фурье-компоненты поляризуемости кристалла, θ_B — угол Брэгга, λ — длина волны используемого излучения, t — толщина кристалла, C — поляризационный множитель. Здесь следует особо подчеркнуть, что в выражениях (6.2) и (6.3) для брэгговской (R_{iB}) и диффузной (R_{iD}) составляющих ПИИ, от условий дифракции зависит только множитель R_{ip} , который в силу своей природы не связан со структурой дефектов в кристалле. При этом от структуры дефектов кристаллической решетки зависят лишь множители, в которые входит статический фактор Кривоглаза-Дебая-Валлера ($E = e^{-L}$), определяемый независимо от условий дифракции для каждого рефлекса.

Следующим важным обстоятельством является то, что интегральная интенсивность рассеяния в кристаллах с дефектами характеризуется двумя интегральными параметрами, которые целесообразно ввести следующим образом. Первый параметр – это общая яркость картины (размытого Лауэ-пятна, изображенного в правом верхнем углу на рисунке 6.1), то есть полная интегральная интенсивность отражения R_i , равная сумме брэгговской и

диффузной составляющих (6.1). Для удобства дальнейшего рассмотрения этот параметр целесообразно нормировать на общую яркость картины в идеальном кристалле (R_{ip}). Второй параметр – это удельный вклад диффузной составляющей или соотношение диффузной и брэгговской составляющих (R_{iD}/R_{iB}). Из выражений (6.1)-(6.3) следует, что в кинематической теории неидеальных кристаллов

$$R_i = R_{ip} \text{ или } R_i/R_{ip} = 1, \quad (6.6)$$

$$R_{iD}/R_{iB} = (1 - e^{-2L})/e^{-2L} \approx 2L, \quad (6.7)$$

т.е. для каждого выбранного отражения полная интегральная интенсивность не зависит от степени искаженности кристаллической решетки, а единственным структурночувствительным фактором является второй параметр (R_{iD}/R_{iB}), не зависящий от условий дифракции.

Из выражений (6.6) и (6.7) для этих двух параметров вытекают два закона сохранения кинематической теории. Первый закон сохранения отражает независимость полной интегральной интенсивности R_i (первого параметра) от характеристик структуры дефектов кристалла, когда R_i для кристалла с дефектами остается таким же, как в идеальном кристалле (R_{ip}), и зависит только от условий дифракции. Второй закон кинематической теории указывает на независимость для каждого рефлекса относительного вклада диффузной составляющей (второго параметра) от условий дифракции. Таким образом, в кинематическом случае существует только этот единственный для любых условий дифракции структурночувствительный параметр- фактор Дебая-Валлера.

6.2. ГЕОМЕТРИЯ ЛАУЭ И БРЭГГА, ТОНКИЙ И ТОЛСТЫЙ КРИСТАЛЛ

Дифференциальные отражательные способности. Общие выражения. В рамках динамической теории рассеяния неидеальными кристаллами [244,265-270] необходимо учитывать многократность отражения как

на периодической, так и на флуктуационной частях восприимчивости кристалла. При этом присутствие дефектов в кристалле влияет не только на когерентную компоненту, но, как и в случае кинематической дифракции в неидеальных кристаллах, является причиной возникновения диффузного рассеяния.

Диффузное рассеяние, сформированное при рассеянии волн на искажениях кристаллической решетки, вызванных дефектами, является наиболее чувствительным к дефектной структуре монокристалла. Характер распределения и особенности рассеяния диффузных волн сильно зависят от характеристик того типа дефекта, в результате рассеяния на полях смещения от которого они образовались. В случае дефектов небольших размеров можно ограничиться при рассмотрении интегральных выражений кинематическим, одноволновым приближением для описания диффузной компоненты. При этом процессы перерассеяния диффузных волн на периодической части потенциала не существенны из-за того, что ширина углового распределения таких волн намного больше ширины когерентного пика. При этом направления их распространения для подавляющего большинства диффузных волн существенно отличаются от условия Вульфа – Брэгга. Следовательно, такие волны не принимают участия в динамической дифракции на периодической части потенциала. Однако когда в кристалле присутствуют дефекты больших размеров (соизмеримых или превышающих длину экстинкции), направления распространения таких волн не сильно отличаются от направления, соответствующего точному условию Вульфа – Брэгга, и, следовательно, такие диффузные волны попадают в существенно динамическую область. Поэтому для них должны быть существенными динамические эффекты, даже при рассмотрении интегральных вкладов от них. Согласно вышесказанному в самом общем случае выражение для полной дифференциальной отражательной способности кристалла имеет вид

$$R(\Delta\theta, \Delta\theta') = R_C(\Delta\theta, \Delta\theta') + R_D(\Delta\theta, \Delta\theta')$$

где $R_c(\Delta\theta, \Delta\theta')$ и $R_d(\Delta\theta, \Delta\theta')$ - соответственно когерентная и диффузная компоненты дифференциальной отражательной способности, параметры $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$ являются соответственно отклонением падающего луча от точного условия Вульфа-Брэгга и отклонением дифрагированного луча от узла обратной решетки.

С целью нахождения в рамках динамического рассмотрения выражений для когерентной и диффузной составляющих необходимо сперва определить исходные выражения для амплитуд брэгговского и диффузного волновых полей индукции в кристалле. Пусть на кристалл падает из вакуума плоская гармоническая волна $\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{-i\vec{k}\vec{r} + i\omega t/c}$ (\vec{r} - пространственная координата, t - время, ω и c - соответственно частота и скорость света, E_0 - амплитуда падающей волны.). Такие амплитуды можно найти, решая волновое уравнение

$$\Delta \vec{D}(\vec{r}) + K^2 \vec{D}(\vec{r}) + \text{rot rot}(\chi(\vec{r})\vec{D}(\vec{r})) = 0, \quad (6.8)$$

которое можно получить из системы уравнений Максвелла. Здесь $\vec{D}(\vec{r})$ - индукция волны, $K = 2\pi/\lambda$, λ - длина волны излучения, $\chi(\vec{r})$ - восприимчивость кристалла, умноженная на 4π .

В отличие от идеального кристалла, где восприимчивость есть периодической функцией пространственной координаты и ее можно разложить в ряд Фурье, в кристалле с дефектами $\chi(\vec{r})$ не будет периодической, и вместо ряда Фурье, ее можно представить в виде интеграла Фурье:

$$\chi(\vec{r}) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \chi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \chi_{\vec{G}+\vec{q}} e^{-i(\vec{G}+\vec{q})\vec{r}}, \quad (6.9)$$

где \vec{G} - вектор обратной решетки, умноженный на 2π , \vec{q} - переданный импульс за счет рассеяния на искажениях, вызванных дефектами.

Представляя аналогично восприимчивости индукцию волны $D(\vec{r})$ в виде интеграла Фурье:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \vec{D}_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \vec{D}_{\vec{G}+\vec{q}} e^{-i(\vec{G}+\vec{q})\vec{r}}, \quad (6.10)$$

и подставляя (6.9) и (6.10) в (6.8), для амплитуд волн получим следующую бесконечную систему уравнений, [257],

$$(K^2 - k^2) \vec{D}_k - \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \chi_{\vec{G}+\vec{q}} \vec{k} \times \vec{k} \times \vec{D}_{\vec{k}-\vec{G}-\vec{q}} = 0. \quad (6.11)$$

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции в рамках развитой в [238,239,244] теории возмущений 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):

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0) D_0 + CE \chi_{-H} D_H = - \sum_{\vec{q}} (\delta\chi_{\vec{q}} D_{-\vec{q}} + C \delta\chi_{-\vec{H}+\vec{q}} D_{\vec{H}-\vec{q}}), \quad (6.12)$$

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

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

$$(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0) D_q + CE \chi_{-H} D_{H+q} = -(\delta\chi_{\vec{q}} D_0 + C \delta\chi_{-\vec{H}+\vec{q}} D_{\vec{H}}), \quad (6.13)$$

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

Где ошибки возбуждения определены как:

$$\varepsilon_0 = \frac{K_0 - K}{K} \approx \frac{K_0^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_H = \frac{K_H - K}{K} \approx \frac{K_H^2 - K^2}{2K^2},$$

$$\varepsilon_{0q} = \frac{K_{0q} - K}{K} \approx \frac{K_{0q}^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_{Hq} = \frac{K_{Hq} - K}{K} \approx \frac{K_{Hq}^2 - K^2}{2K^2},$$

и флуктуационная часть Фурье компоненты восприимчивости кристалла задается выражением:

$$\delta\chi_{\vec{G}+\vec{q}} = \chi_{G+q} - \chi_G e^{-L_G} \delta_{0,q} \quad (6.14)$$

где

$$\delta_{0,q} = \begin{cases} 1 & , \text{при } \vec{q} = 0 \\ 0 & , \text{при } \vec{q} \neq 0 \end{cases}$$

где $E = e^{-L_H}$ - статический фактор Дебая Валера, $\chi_0, \chi_{\pm H}$ - Фурье – компоненты восприимчивости кристалла, C -поляризационный множитель ($C=1$ для σ -поляризации, $C = \cos 2\theta_B$ для π -поляризации, где θ_B - угол Брэгга). Выражение (6.14), определяющее фурье – компоненту восприимчивости кристалла с дефектами $\chi_{\vec{G}+\vec{q}}$, которая рассматривается как сумма Фурье-компонент средней восприимчивости $\chi_G e^{-L_G} \delta_{0,q}$ и флуктуационной части восприимчивости $\delta\chi_{\vec{G}+\vec{q}}$, позволяет при решении неоднородных систем (6.12) и (6.13) воспользоваться методом модифицированной теории возмущений, [238,239]. Подставляя решения системы уравнений (6.6) в (6.12) и используя метод модифицированной теории возмущений, получим следующую основную систему уравнений для сильных брэгговских волн:

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00})D_0 + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})D_H = 0, \quad (6.15)$$

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

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены дефектами, определяются выражениями, [234]:

$$\Delta\chi_{00} = -\sum_{\vec{q}} (-2\varepsilon_{0\vec{q}} + \chi_0) V_{00}(\vec{q}) / d(\vec{q}), \quad \Delta\chi_{HH} = -\sum_{\vec{q}} (-2\varepsilon_{H\vec{q}} + \chi_0) V_{HH}(\vec{q}) / d(\vec{q}), \quad (6.16)$$

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

$$d(\vec{q}) = (-2\varepsilon_{0\vec{q}} + \chi_0)(-2\varepsilon_{H\vec{q}} + \chi_0) - C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H} = 0. \quad (6.17)$$

В обобщенном виде (6.16) можно переписать как

$$\Delta\chi_{GG'} = \sum_{\vec{q}} \tilde{f}_{GG'}(\vec{q}) V_{GG'}(\vec{q}) / d(\vec{q}), \quad (6.18)$$

где

$$\tilde{f}_{GG'}(\vec{q}) = \begin{cases} (-2\varepsilon_{G\vec{q}} + \chi_0) & \text{при } G = G' \\ E\chi_{H-2G'} & \text{при } G \neq G' \end{cases}$$

$$V_{GG'}(\vec{q}) = C^2 \delta\chi_{-\vec{q}-\vec{H}+2\vec{G}} \delta\chi_{\vec{q}+\vec{H}-2\vec{G}},$$

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

Для дисперсионных поправок (6.18) справедливы, [234], выражения: $\Delta\chi_{00} \approx \Delta\chi_{HH} \sim \frac{\mu_{ds}}{K}$, где μ_{ds} - коэффициент экстинкции из – за диффузного рассеяния, и $\Delta\chi_{H0} \approx \Delta\chi_{0H} \approx 0$.

Геометрия Брэгга. Решая систему уравнений (6.15) с использованием граничных условий для плоскопараллельной кристаллической пластинки в случае Брэгговской дифракции:

$$D_T(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\vec{K}_0^{\delta}\vec{r}} = E_0 e^{-i\vec{K}\vec{r}} \Big|_{z=0}, \quad D_S(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_H^{\delta} e^{-i\vec{K}_H^{\delta}\vec{r}} = 0 \Big|_{z=t}, \quad D_S(\vec{r}) = E_S(\vec{r}) \Big|_{z=0},$$

$$\vec{K}_0^{\delta} = \vec{K} + K\Delta_{\delta}\vec{n}, \quad \vec{K}_H^{\delta} = \vec{K}_0^{\delta} + \vec{H},$$

здесь $E_S(\vec{r}) = E_H^a e^{-i\vec{K}_H^a\vec{r}}$ - амплитуда дифрагированной волны в вакууме, $\vec{K}_H^a = \vec{K}_H^{\delta} - K\Delta_{\delta}\vec{n}$, t - толщина кристалла, получим следующие выражения для амплитуд проходящей и отраженной когерентных волн:

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} E_0 \frac{B_{\delta'}}{B_1 - B_2}, \quad D_H^{\delta} = c^{(\delta)} D_0^{\delta}, \quad (6.19)$$

где

$$B_{\delta} = c^{(\delta)} e^{-iK\Delta_{\delta}t}, \quad c^{(\delta)} = -\frac{2\gamma_0\Delta_{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}}, \quad \Delta_{\delta} = \frac{1}{2\gamma_0}(\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) - \frac{\lambda}{2\Lambda} \left[y - (-1)^{\delta} \sqrt{y^2 - 1} \right],$$

$$y = -(\alpha - \alpha_0)\sqrt{b}/\sigma, \quad 2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta} + (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta})/b, \quad b = \gamma_0/|\gamma_H|,$$

$$\sigma^2 = (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}),$$

$\Lambda = \lambda|\gamma_H|\sqrt{b}/\sigma$ - длина экстинкции, $\delta = 1,2$, γ_0 и γ_H -направляющие косинусы падающей и дифрагированной волн соответственно, $\alpha = -\Delta\theta \sin 2\theta_B$.

Решение (6.19) показывает, что при падении из вакуума плоской волны в кристалле образуется два сильных динамических волновых поля с амплитудами D_0^1 и D_0^2 , которые представляют слабо и сильно поглощающиеся волны. Такая ситуация возникает из – за того, что максимумы сильно поглощающихся стоячих волн попадают на атомные плоскости, и их поглощение, которое пропорционально восприимчивости в среде, становится значительным. Тогда как максимумы амплитуды второго волнового поля попадают в межплоскостное пространство, и поглощение таких волн значительно слабее.

Таким образом, для когерентной компоненты отражательной способности в геометрии дифракции по Брэггу получим, [234],

$$R_{coh}(\Delta\theta) = \frac{chx_r - \cos x_i}{L_+ chx_r + \sqrt{L_+^2 - 1} shx_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i}, \quad (6.20)$$

$$L_{\pm} = \frac{z^2 + g^2 \pm \left[(z^2 - g^2 + \kappa^2 - 1)^2 + 4(zg - p^2) \right]^{1/2}}{\left[(1 - \kappa^2)^2 + 4p^2 \right]^{1/2}}, \quad x_r = \frac{t}{\Lambda_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left[\left(\sqrt{a^2 + b^2} - a \right) / 2 \right]^{1/2},$$

$$x_i = \frac{t}{\Lambda_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left[\left(\sqrt{a^2 + b^2} + a \right) / 2 \right]^{1/2}, \quad a = \frac{z^2}{1 - \kappa^2} - g^2 - 1, \quad b = \frac{2gz}{(1 - \kappa^2)^{1/2}} - \frac{2p}{(1 - \kappa^2)},$$

$$\Lambda_B = \frac{\lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_H|}}{2\pi C |\chi_{Hr}|}, \quad g = -\frac{(|\chi_{0i}| + \mu_{ds}(\Delta\theta)/K)(1 + |\gamma_H|/\gamma_0)}{2C |\chi_{Hr}| \sqrt{|\gamma_H|/\gamma_0}}, \quad \kappa = \left| \frac{\chi_{Hi}}{\chi_{Hr}} \right|,$$

$$z = -\frac{2\Delta\theta \sin 2\theta_B + |\chi_{0r}|(1 + |\gamma_H|/\gamma_0)}{2C |\chi_{Hr}| \sqrt{|\gamma_H|/\gamma_0}}.$$

где χ_{Hr} и χ_{Hi} -действительная и мнимая части Фурье-компоненты восприимчивости χ_H , χ_{0r} и χ_{0i} -действительная и мнимая части Фурье-компоненты восприимчивости χ_0 .

Нетрудно проследить, что при выполнении условия толстого кристалла, $\mu_0 t \gg 1$ (μ_0 -линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения), выполняется и условие $x_r \gg 1$, что позволяет упростить (6.20). Тогда для

когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности при дифракции по Брэггу получим:

$$R_{coh}(\Delta\theta) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}. \quad (6.21)$$

Диффузно рассеянные волны создаются благодаря рассеянию сильных брэгговских волн на флуктуационных полях статических смещений атомов кристалла, которые вызваны хаотически распределенными микродефектами. Они так же формируют в кристалле динамическое волновое поле. В двухволновом случае амплитуды диффузно рассеянных проходящей и дифрагированной плоских волн $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ (диффузные блоховские волны), удовлетворяют системе неоднородных уравнений (6.13). Эти уравнения описывают процессы многократного перерассеяния диффузных волн $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ на периодической части кристаллического потенциала, а также процессы однократного рассеяния с переходом из сильных брэгговских волн с амплитудами D_0 и D_H в диффузные волны с амплитудами $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$. Для учета процессов двукратного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллического потенциала в диффузных волнах следует сохранить в правой части уравнений (6) все амплитуды $\vec{q}' \neq \vec{q}$, $\vec{q} + \vec{H}$. Затем эти амплитуды можно выразить через D_0 , D_H , $D_{\vec{q}}$, $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ с использованием уравнений (6.11) и подставить в уравнения (6.13). После этого первого итерационного шага коэффициенты при $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ в уравнениях (6.13) получают поправки $\Delta\chi'_{GG'}$, которые полностью совпадают по форме с дисперсионными поправками к волновым векторам сильных брэгговских волн $\Delta\chi_{GG'}$ (6.18), но зависят от углов выхода $\Delta\theta'$:

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_{0q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00})D_q + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H})D_{H+q} &= -(\delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-H+q} D_H), \\ (CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0})D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0 + \Delta\chi'_{HH})D_{Hq} &= -(C\delta\chi_{H+q} D_0 + \delta\chi_q D_H), \end{aligned} \quad (6.22)$$

где ε_{0q} и ε_{Hq} - ошибки возбуждения диффузно рассеянных волн и $\Delta\chi'_{GG'}$ - дисперсионные поправки, учитывающие процессы двукратного диффузного рассеяния. Поправками к коэффициентам при амплитудах D_0 и D_H в правой части системы уравнений (6.22), которые также возникают при выполнении указанного итерационного шага и описывают перерассеяние диффузных волн обратно в сильные брэгговские, обычно пренебрегают как малыми величинами более высокого порядка, [229,239,243,244].

Налагая граничные условия на амплитуды диффузных волн для случая дифракции по Брэггу и преобразуя полученные амплитуды плоских волн на поверхности кристалла в амплитуду диффузного рассеяния в телесный угол в направлении K' , получим следующее выражение для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности кристаллической пластинки, [244],

$$R_{diff}(\Delta\theta) = F_{dyn}\mu_{00}(\Delta\theta)t / \gamma_0,$$

$$\mu_{00}(\Delta\theta) = \mu_{ds}(\Delta\theta)p(\mu_i t), \quad F_{dyn} = 1 + |\zeta'|bR_{coh} + 2\text{Re}(\zeta'c^{(\delta)}), \quad p(\mu_i t) = \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{2\mu_i t},$$

$$\zeta' = \frac{|CE\chi_H + \Delta\chi'_{0H}{}^\delta|}{|CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{H0}{}^\delta|},$$

где μ_i - интерференционный коэффициент поглощения.

Геометрия Лауэ. Для определения дифференциальной отражательной способности в геометрии дифракции по Лауэ, используем соответствующие для этого случая граничные условия для амплитуд проходящей $D_T(\vec{r})$ и дифрагированной $D_S(\vec{r})$ волн:

$$D_T(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_0^\delta e^{-i\vec{k}_0^\delta \vec{r}} = E_0 e^{-i\vec{k}\vec{r}} \Big|_{z=0}, \quad (6.23)$$

$$D_S(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_H^{\delta} e^{-i\vec{k}_H^{\delta} \vec{r}} = 0 \Big|_{z=0}, \quad D_S(\vec{r}) = E_S(\vec{r}) \Big|_{z=t}.$$

Решая (6.15) вместе с (6.23), получим следующие выражения для амплитуд сильных брэгговских волн в кристалле в геометрии дифракции по Лауэ, [242], (здесь следует учесть, что в случае Лауэ – дифракции $\gamma_H = |\gamma_H|$, в отличие от случая дифракции по Брэггу, где $\gamma_H = -|\gamma_H|$):

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} \frac{A_{\delta'}}{A_1 - A_2} E_0, \quad D_H^{\delta} = D_0^{\delta} A_{\delta},$$

$$A_{\delta} = \frac{-2\varepsilon_0^{\delta} + \chi_0 + \chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}}.$$

$$\varepsilon_0^{\delta} = \frac{1}{2} \left(-\alpha + \chi_{0r} - (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)} \right) + i \frac{1}{2} \left(\chi_{0i} - (-1)^{\delta} \frac{C^2 E^2 \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)}} \right).$$

Для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности в геометрии Лауэ будем иметь следующее выражение:

$$R(y) = \frac{|E_H^a|^2}{|E_0|^2} = \frac{1}{|E_0|^2} \left| \sum_{\delta} D_H^{\delta} e^{-iK\Delta_{st}} \right|^2 = \frac{e^{-(\mu_0 + \mu_{ds}(y))l}}{2(1+y^2)} \left(ch \frac{\xi C(\mu_0 + \mu_{ds})l}{\sqrt{1+y^2}} - \cos 2A\sqrt{1+y^2} \right), \quad (6.24)$$

$$\text{где } y = \frac{\Delta\theta \sin 2\theta_B}{CE|\chi_{Hr}|}, \quad A = \frac{\pi C|\chi_{Hr}|l}{\lambda}, \quad \xi = \frac{\chi_{iH}}{\chi_{i0}}, \quad l = \frac{t}{\gamma_0}.$$

Учитывая, что второе слагаемое в (6.24) при выполнении условия толстого кристалла $\mu_0 l \gg 1$ ($\mu_0 = K\chi_{i0}$ - коэффициент фотоэлектрического поглощения) сильно осциллирует, а также то, что при разложении функции $ch(x)$ на экспоненты слагаемое с отрицательной степенью будет пренебрежимо мало, для $R(y)$ в приближении полубесконечного кристалла получим более простое выражение:

$$R(y) = R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)}, \quad (6.25)$$

где $R_p(y) = \frac{1}{4(1+y^2)} e^{-\mu_0 l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}}\right)}$ - когерентная компонента дифференциальной

отражательной способности идеального динамически рассеивающего кристалла при дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла.

Решая систему уравнений для амплитуд диффузно рассеянных волн с граничными условиями, соответствующими геометрии дифракции по Лауэ, для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности в приближении толстого кристалла получим, [243],

$$R_{diff}(\Delta\theta) = \frac{1}{K^2} \int dS_K R_D(\vec{k}), \quad (6.26)$$

$$R_D(\vec{k}) = P_0 \frac{C^2 E^2 K^2 \chi_{Hr}^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2} \sum_{\delta, \tau} |\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_\delta - \chi_0|^2 |\vec{H}^0 \vec{u}(\vec{q})|^2 \Pi_{\delta\tau}, \quad (6.27)$$

$$\Pi_{\delta\tau} = \frac{e^{2Kt \text{Im} \Delta_\delta} - e^{2Kt \text{Im} \Delta'_\tau}}{2Kt \text{Im}(\Delta_\delta - \Delta'_\tau)}, \quad \Delta_\delta = \frac{\varepsilon_0^\delta}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha + \chi_0 - (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}} \right),$$

$$\Delta'_\tau = \frac{\varepsilon_{0q}^\tau}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha' + \chi_0 - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}} \right).$$

где $\alpha' = \Delta\theta' \sin 2\theta_B$, $u_{\vec{q}}$ - компонента Фурье поля смещений от одиночного дефекта.

В приближении тонкого кристалла в геометрии Лауэ диффузная компонента дифференциальной отражательной способности имеет вид:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = \frac{C^2}{P} (1 - E^2) Q l e^{-\mu_0 l} \mu_{ds}(\Delta\theta) e^{-\mu_{ds}(\Delta\theta) l}, \quad (6.28)$$

где $P = \int \mu_{ds}(\Delta\theta) d\theta$, $Q = \frac{(\pi |\chi_{Hr}|)^2}{\lambda \sin(2\theta_B)}$.

Коэффициент экстинкции. Когда в динамически рассеивающем кристалле присутствуют дефекты, искажающие решетку, то кроме статического фактора Дебая – Валлера появляется еще один структурно чувствительный параметр

$\mu_{ds}(\Delta\theta)$, впервые введенный в [235] и, независимо, в [258] (в этой работе выражение для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ получено при условии $\Delta\theta = 0$, где $\Delta\theta$ - угловое отклонение от точного условия Вульфа – Брэгга). Параметр $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ описывает эффективное поглощение или экстинкцию когерентных волн из – за их рассеяния на дефектах и ухода в диффузные волны. В [235,258] выражение для μ_{ds} имеет вид

$$\mu_{ds}(k_0) = cC^2 E^2 m_0 J(k_0), \quad J(k_0) = \frac{1}{\pi} \int dS_{K'} F(\vec{q}), \quad (6.29)$$

где интегрирование в (6.29) проводится по сфере Эвальда вблизи узла обратной решетки, $F(\vec{q}) = |\nu_{\vec{q}}|^2$, $\nu_{\vec{q}} = \vec{H}\vec{u}_{\vec{q}}$, $m_0 = 2\pi v_c \left(\frac{H|\chi_{Hr}|}{2\lambda} \right)^2$, λ - длина волны излучения, K' - волновой вектор диффузно рассеянной плоской волны. В случае сферически симметричных кластеров поле смещения атомов решетки дается выражением

$$\vec{u}(\vec{r}) = A \frac{\vec{r}}{r^3}; \quad \vec{v}(\vec{r}) = A \frac{(\vec{H}\vec{r})}{r^3};$$

откуда для Фурье – компоненты имеем: $\vec{v}_q = \frac{4\pi i A (\vec{H}\vec{q})}{v_c q^2}$.

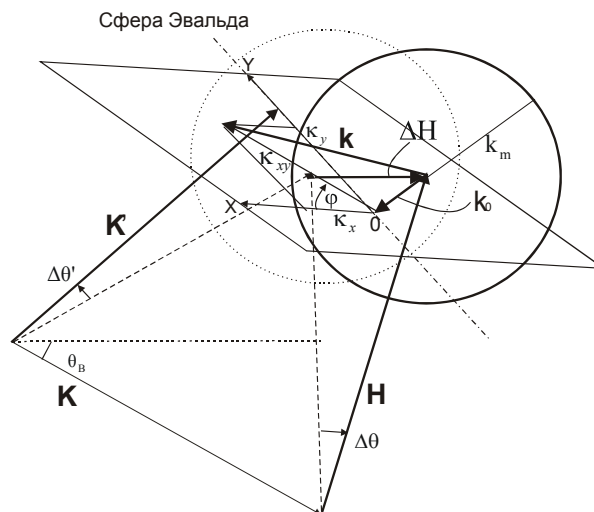


Рисунок 6.2. Схема волновых векторов в геометрии Брэгга.

Поскольку $q \ll K$, то в (6.29) удобно перейти от интегрирования по сфере к интегрированию по плоскости Π , аппроксимирующей сферу Эвальда вблизи узла обратной решетки H (Рисунок 6.2). Переходя в этой плоскости к полярным координатам $\vec{k} = (\kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi, k_0)$, и подставляя в (6.29) $dS_{k'} = \kappa d\kappa d\varphi$, $\vec{H}\vec{q} = Hq \cos \varphi \cos \theta_B$, где θ_B - угол Вульфа – Брэгга, для μ_{ds} в соответствии с [235-237] получим

$$\mu_{ds} = c(C|\chi_H|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{2\nu_c \lambda^2} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m^2}{q_c^2} \quad (6.30)$$

ν_c - объем элементарной ячейки кристалла, c – концентрация дефектов.

Поскольку для хаотически ориентированных дислокационных петель, [257],

$$\langle |\vec{v}_q|^2 \rangle = \left(\frac{\pi R_0^2 b H}{\nu_c} \right)^2 \frac{B_1 + B_2 (\vec{H}^0 \vec{q}^0)^2}{q^2}$$

$\vec{H}^0 = \vec{H}/H$, то можно получить для них:

$$\mu_{ds} = c(C|\chi_H|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{\nu_c \lambda^2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} \cos^2 \theta_B \right) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2} \quad (6.31)$$

где $q_m = \frac{2\pi}{R_{eff}}$ граница раздела между областями диффузного рассеяния Хуаня

и Стокса – Вильсона, $q_c = \frac{2\pi}{\Lambda_\sigma}$ - параметр обрезания со стороны малых q ,

$\Lambda_\sigma = \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_H} |\chi_{Hr}|^{-1}$ - экстинкционная длина, для хаотически ориентированных

дислокационных петель $B_1 = \frac{4}{15} (\pi b R_L^2 / \nu_c)^2$, $B_2 = \beta B_1$, $\beta = \frac{1}{4} (3\nu + 6\nu - 1)(1 - \nu)^{-2}$, b -

модуль вектора Бюргера петли, R_L - радиус петли, ν - коэффициент Пуассона,

$$R_{eff} = \begin{cases} R_L \sqrt{Hb} E, & \text{для дислокационных петель} \\ \sqrt{HA_{cl}} E, & \text{для кластеров} \end{cases}$$

$$A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_p^3, \quad \Gamma = \frac{1}{3}(1 + \nu)(1 - \nu)^{-1}, \quad \varepsilon - \text{деформация на границе кластера, } R_p -$$

радиус кластера.

Выражение (6.30) было получено Дедериксом с целью описания интегральных брэгговских интенсивностей в предположении, что $\mu_{ds}(\Delta\theta) \approx \mu_{ds}(0)$, т.е. является константой вне зависимости от направления падающего луча \vec{K} относительно условию Вульфа – Брэгга. В связи с широким применением метода кривых качания для диагностики реальных кристаллов, а также для учета динамических эффектов в диффузной компоненте отражательной способности, более важным является выражение для μ_{ds} , полученное в [245,244,258], где оно явно зависит от отклонения $\Delta\theta$ направления падающего луча от точного Брэгговского условия. В результате такого отклонения узел обратной решетки H не попадает точно на сферу Эвальда, а отклоняется от нее на величину q_0 (Рисунок 6.2). В этом случае удобно перейти к цилиндрической системе координат $\vec{q} = (\kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi, q_0)$, где $\kappa = \sqrt{q^2 - q_0^2}$, $dS_K = \kappa d\kappa d\varphi$, $\vec{H}_0 = (\cos \theta_B, 0, \sin \theta_B)$, и тогда для (6.22) получается:

$$\mu_{ds}(q_0) = \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{\nu_c \lambda^2} \begin{cases} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + (\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B) q_0^2 \left(\frac{1}{q_c^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| \leq q_c; \\ \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + (\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B) q_0^2 \left(\frac{1}{q_0^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| > q_c. \end{cases} \quad (6.32)$$

Однако в приведенных выше выражениях не учитывался тот факт, что диффузное рассеяние имеет различный характер в двух областях: Хуаня и Стокса – Вильсона, где функция $|v_q|^2$ ведет себя в этих областях соответственно как $\sim \frac{1}{q^2}$ и $\sim \frac{1}{q^4}$, [258]. Позже, в работах [259,260] было учтено различное поведение выражений для интенсивностей диффузного рассеяния в областях Хуаня и Стокса – Вильсона, т. е.

$$|v_q|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2 (\vec{H}^0 \vec{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{1}{q^2} \quad \text{в области Хуаня,} \quad (6.33)$$

$$|v_q|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2 (\vec{H}^0 \vec{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{k_m^2}{q^4} \quad \text{в области Стокса – Вильсона,}$$

где $\vec{q}^0 = \vec{q}/q$. С учетом соотношений получаем (при условии $R_{eff} \ll \Lambda$), [261],

$$J(k_0) = \begin{cases} b_1 \left(1 - \frac{k_0^2}{k_c^2} \right) + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right) + b_3 k_0^2 \left(\frac{1}{2k_m^2} - \frac{1}{k_c^2} \right), & |k_0| \leq k_c \\ b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_0^2} \right) + b_3 \left(\frac{k_0^2}{2k_m^2} - 1 \right), & k_c \leq |k_0| \leq k_m \\ \left(b_2 - \frac{1}{2} b_3 \right) \frac{k_m^2}{k_0^2}, & |k_0| > k_m \end{cases} \quad (6.34)$$

где $k_0 = K \Delta \theta \sin 2\theta_B$, $k_c \equiv q_c$, $k_m = q_m$, $b_1 = B_1 + B_2/3$, $b_2 = B_1 + \frac{1}{2} B_2 \cos^2 \theta_B$,

$b_3 = \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B (1 - 2ig^2 \theta_B)$, для хаотически ориентированных дислокационных петель

$B_1 = \frac{4}{15} (\pi b R_L^2 / v_c)^2$, $B_2 = \beta B_1$, $\beta = \frac{1}{4} (3\nu + 6\nu - 1)(1 - \nu)^{-2}$, для кластеров $B_1 = 0$,

$B_2 = (4\pi A_{cl} / v_c)^2$.

Когда размеры дефектов соизмеримы с глубиной экстинкции Λ , диффузное рассеяние от таких дефектов концентрируется в непосредственной близости к брэгговскому пику, т. е., в области обрезания $k \sim k_c$. Соответственно, используемые выражения для полной интегральной интенсивности (ПИИ), которая представляется суммой когерентной и диффузной компонент интегральной интенсивности рассеяния, с $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ не являются корректными в случае крупных дефектов. В [259,260] был учтен комплексный характер передаваемого импульса $\vec{q} = \vec{k} + i\mu\vec{n}$, что обусловлено учетом многократности

диффузного рассеяния на периодической части восприимчивости и позволило устранить расходимость интеграла (6.29) вблизи узла обратной решетки при $k \rightarrow 0$, и получить аналитические выражения для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$, корректные и в случае крупных дефектов

$$J(k_0) = \begin{cases} J_H(k_0) + J_{H-SW}(k_0) + J_H^*(k_0), & \text{при } |k_0| < k_m \\ J_{SW}(k_0), & \text{при } |k_0| \geq k_m \end{cases}, \quad (6.35)$$

где

$$J_H(k_0) = b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2 + \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right) + (b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2) \left(\frac{1}{k_m^2 + \mu_i^2} - \frac{1}{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{H-SW}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \right), \quad J_{SW}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$b_4 = B_2 \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta_B - 1 \right), \quad J_H^*(k_0) = \text{sgn}(\Delta\theta) \text{sgn}(\varepsilon) b_1 \left(\sqrt{k_m^2 + \mu_i^2} - \sqrt{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

где e – основание натурального логарифма, интерференционный коэффициент поглощения μ_i в геометрии Брэгга при асимптотике $\Delta\theta', \Delta\theta \rightarrow \infty$ имеет вид $\mu_i = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{1 + \gamma_0 / |\gamma_H|}{2}$.

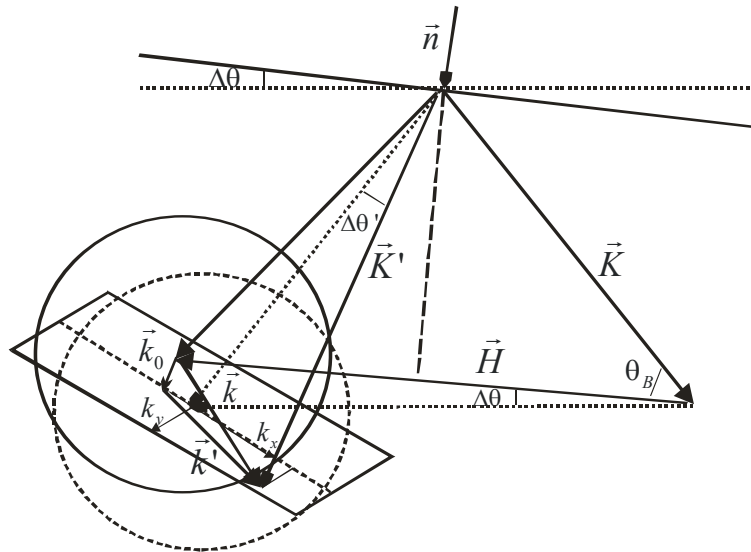


Рисунок 6.3. Схема волновых векторов в обратном пространстве при дифракции по Лауэ.

Рассмотрим выражение для коэффициента экстинкции в геометрии Лауэ (Рисунок 6.3) в случае больших дефектов. При интегрировании в (6.29) разложим волновой вектор диффузно рассеянной волны \vec{k} на составляющие \vec{k}_0 и \vec{k}' таким образом, чтобы $\vec{k}_0 \perp S_{K'}$, а \vec{k}' лежал в плоскости $S_{K'}$. Кроме того, в плоскости интегрирования перейдем к полярным координатам $\vec{k}' = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi)$. Тогда $q^2 = k_0^2 + k'^2 + \mu_i^2$, $\vec{k} = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi, k_0)$, $\vec{H}_0 = (-\sin \theta_B, 0, \cos \theta_B)$. Таким образом, для (6.22) получим:

$$F(\vec{q}) = \left(B_1 + B_2 \frac{k'^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta_B + k_0^2 \cos^2 \theta_B - k_0 k' \cos \varphi \sin 2\theta_B}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2} \right) \frac{1}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2} \quad (6.36)$$

Элемент площади интегрирования в выбранной системе координат будет иметь вид $dS_{K'} = k' dk' d\varphi$. Подставляя (6.36) в (6.29) и выполняя интегрирование, с учетом различного характера рассеяния в областях Хуаня и Стокса – Вильсона для дифференциального коэффициента экстинкции когерентного рассеяния из – за ухода его части в диффузный фон в случае геометрии дифракции по Лауэ получим такие же выражения, как и (6.35), но с коэффициентами b_i в виде

$$b_2 = B_1 + \frac{B_2}{2} \sin^2 \theta_B, \quad b_3 = B_2 \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta_B - \cos^2 \theta_B \right), \quad b_4 = \frac{1}{2} B_2 \sin^2 \theta_B,$$

и с интерференционным коэффициентом поглощения в виде

$$\mu_i = \frac{KCE \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\gamma_0 \sqrt{\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2}},$$

при тех же асимптотиках $\Delta\theta', \Delta\theta \rightarrow \infty$.

В случае нескольких типов дефектов, в том числе и крупных, следует учесть, что при пренебрежении корреляциями в расположении дефектов имеет

место линейная суперпозиция вкладов в величины L_H и $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ от разных типов дефектов, [260,277]:

$$L_H = \sum_{\alpha=1}^n L_H^\alpha; \quad \mu_{ds} = \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^\alpha;$$

где n - количество типов дефектов; α - индекс, обозначающий соответствующий тип дефекта.

Интегральные интенсивности в случае малых эффектов экстинкции.

По мере развития интегральных методов диагностики, возникла необходимость получить выражения для ПИИ, которая является суммой когерентной и диффузной компонент. Динамические экстинкционные эффекты в ПИИ учитываются когерентным и диффузным факторами экстинкции, в результате чего выражения для ПИИ в разных условиях дифракции имеют универсальный вид:

$$R_i = ER_{ip}F_{ds}^{coh} + R_{id}^{kin}F_{ds}^{diff},$$

где R_{ip} - интегральная интенсивность рассеяния для идеального динамически рассеивающего кристалла, - фактор Кривоглаза – Дебая – Валлера, R_{id}^{kin} - диффузная компонента рассеяния в кинематическом приближении, F_{ds}^{coh} и F_{ds}^{diff} - соответственно когерентный и диффузные факторы экстинкции.

В случае малых эффектов экстинкции интегральные интенсивности, которые в общем случае выражаются через интегральные факторы экстинкции, можно выразить через интегральные коэффициенты экстинкции.

Лауэ, тонкий кристалл. Для геометрии дифракции по Лауэ в приближении тонкого кристалла ($\mu_0 l \ll 1$, $l = t / \cos \theta_B$, t - толщина кристалла, μ_0 - линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения) выражение для ПИИ дается выражением, [237,243],

$$R_i = e^{-\mu_0 l} [CQEI_0(h_s)F_{ds}^{coh} + (1 - E^2)QIF_{ds}^{diff}], \quad (6.37)$$

где I_0 - функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента, $h_s = \mu_H ICE$ - динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения. Введенные в (6.37) интегральные факторы экстинкции определены как:

$$F_{ds}^{coh} = \int_{-\infty}^{\infty} R_C(k_0) e^{-\mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1} \quad (6.38)$$

$$F_{ds}^{diff} = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) e^{-\mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (6.39)$$

где R_C - когерентная компонента кривой отражения.

В случае малых эффектов экстинкции из-за диффузного рассеяния ($\mu_{ds}(0)l \ll 1$) факторы (6.38) и (6.39) сводятся к $e^{-\mu_{ds}^0 l}$ и $e^{-\mu^* l}$ соответственно,

$$F_{ds}^{coh} = e^{-\mu_{ds}^0 l} \quad (6.40)$$

$$F_{ds}^{diff} = e^{-\mu^* l} \quad (6.41)$$

где интегральные коэффициенты экстинкции даются выражениями:

$$\mu_{ds}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} R_C(k_0) \mu_{ds}(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1} \quad (6.42)$$

$$\mu^* = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}^2(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (6.43)$$

Поскольку при малых размерах дефектов ширина функции $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ значительно больше, чем $R_C(k_0)$, то последнюю можно рассматривать как δ - функцию, и в результате получим $\mu_{ds}^0 = \mu_{ds}(0)$, а с учетом (6.34) для (6.42) и (6.43) будем иметь:

$$\mu_{ds}^0 = cC^2 m_0 B, \quad (6.44)$$

$$B = b_1 + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right),$$

$$\mu^* = \mu_{ds}^0 f(r_0), \quad (6.45)$$

$$f(r_0) = \begin{cases} (5 + 2r_0 \ln r_0 - 3,8r_0)/(3(1 - \ln r_0)), & \text{для дислокационных петель} \\ (4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0)/(5 - 6 \ln r_0), & \text{для сферических кластеров} \end{cases}$$

где $r_0 = R_0 / \Lambda$, R_0 - радиус дефекта.

Таким образом, ПИИ в геометрии Лауэ, в приближении тонкого кристалла с учетом малых эффектов экстинкции будет иметь вид

$$R_i = e^{-\mu_0 l} [CQEI_0(h_s) e^{-\mu_{ds}^0 l} + (1 - E^2) Ql e^{-\mu^* l}].$$

В случае дефектов больших размеров приближение $\mu_{ds}^0 = \mu_{ds}(0)$ становится не корректным, и для определения коэффициентов экстинкции необходимо интегрировать (6.42), (6.43) с учетом (6.35).

Случай Лауэ, толстый кристалл. Когерентный интегральный фактор экстинкции F_{ds}^{coh} в геометрии дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла согласно (6.25) описывается выражением:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}}\right)} dy}{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) dy}. \quad (6.46)$$

В случае малых эффектов экстинкции будем иметь:

$$F_{ds}^{coh} = e^{-\mu_{ds}^0 l}.$$

В отличие от геометрии дифракции по Брэггу, где характерной особенностью динамической дифракции является эффект полного отражения, в геометрии дифракции по Лауэ наблюдается эффект аномального прохождения рентгеновских лучей. Этот эффект заключается в том, что в малой угловой области в непосредственной близости от угла Брэгга наблюдается значительная интенсивность прошедшего излучения даже в достаточно толстых монокристаллах ($t \gg t_{abs}$, где t_{abs} - глубина абсорбции, обратно пропорциональная

фотоэлектрическому коэффициенту поглощения μ_0), что вызвано существенным интерференционным уменьшением коэффициента поглощения для таких волн.

В случае толстого кристалла диффузное рассеяние от дефектов небольших размеров из – за его широкого углового распределения практически полностью поглощается (кроме малой части , которая попадает в указанный узкий угловой интервал), за исключением небольшого слоя (толщина которого порядка длины абсорбции) на выходной стороне кристалла.

Однако в случае дефектов больших размеров, направления распространения диффузных волн от которых преимущественно попадают в указанный узкий угловой интервал, для диффузного рассеяния также становится существенным эффект аномального прохождения. Следовательно, объем формирования диффузных волн в этом случае значительно больше, чем в случае дефектов небольших размеров. Эта особенность приводит к тому, что при исследовании кристаллов в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла чувствительность к динамическим экстинкционным эффектам в диффузном рассеянии от крупных дефектов значительно возрастает. При этом существенно важными в данном случае являются выражения для интенсивности рассеяния в кристаллах с дефектами больших размеров, диффузное рассеяние от которых имеет преимущественно динамический характер.

Диффузный фактор экстинкции в геометрии Лауэ в толстом кристалле определяется выражением:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{2P_0}{\pi K t} \sum_{\delta, \tau} I_{\delta\tau},$$

$$I_{\delta\tau} = \frac{1}{K^3 \sin 2\theta_B} \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\vec{q}) \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') (e^{2Kt m_\delta(\alpha)} - e^{2Kt m_\tau(\alpha')}) d\vec{k}, \quad (6.47)$$

$$m_\delta(\alpha) = \text{Im} \Delta_\delta(\alpha) = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-|\chi_{0i}| - (-1)^\delta \frac{C^2 E^2 \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)}} \right) - \frac{\mu_{ds}(\alpha)}{2\gamma_0 K}, \quad P_0 = \frac{ctv_c H^2}{16\gamma_0^3 \lambda^2},$$

$$D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{|\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2}.$$

Здесь слагаемые $I_{\delta\tau}$ описывают вклад в интенсивность диффузного рассеяния от сильно ($\tau = 2$) и слабо ($\tau = 1$) поглощающихся диффузных волновых полей, которые сформированы при рассеянии на искажениях кристаллической решетки сильно ($\delta = 2$) и слабо ($\delta = 1$) поглощающихся когерентных волн.

Для определения диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла при малых эффектах экстинкции и малых размерах дефектов в (6.47) перейдем от переменных интегрирования k_x , k_z к переменным $y = (|\vec{K} + \vec{H}| - K)/(KCE\sqrt{\chi_{Hr}\chi_{-Hr}})$, $y' = (|\vec{K}' - \vec{H}'| - K)/(KCE\sqrt{\chi_{Hr}\chi_{-Hr}})$, воспользовавшись соотношениями

$$k_x = ((y' - y) \cos \psi / \operatorname{tg} \theta_B) + (y' + y) \sin \psi \pi / \Lambda, \quad k_z = -(y' - y) \sin \psi / \operatorname{tg} \theta_B + (y' + y) \cos \psi \pi / \Lambda$$

В результате получим

$$F_{ds}^{diff} = \frac{P_0 (KCE |\chi_{Hr}|)^2 (K\Lambda)^2}{16\pi^2 K \sin^2 \theta_B R_{iD}^{kin}} \sum_{\delta, \tau=1,2} I_{\delta\tau}, \quad (6.48)$$

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

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

Множитель $\Pi_{\delta\tau}$ в подинтегральном выражении (6.48) описывает эффект аномального прохождения диффузно рассеянных волн, [242,277], и является резко убывающей функцией переменных y и y' . Множители $f_{\delta\tau}$ в (6.48) представляют собой плавные функции y и y' . Ввиду этого для асимптотической оценки интеграла (6.48) при $\mu_H l \gg 1$ можно воспользоваться методом Лапласа [242,277], согласно которому асимптотика интеграла

$$F(\lambda) = \int_a^b dx f(x) e^{\lambda S(x)}$$

при выполнении условий $\lambda \rightarrow \infty$, $S''(x_0) \neq 0$, $a < x_0 < b$ (x_0 - точка максимума функции $S(x)$) имеет вид

$$F(\lambda) \approx f(x_0) \sqrt{\frac{-2\pi}{\lambda S''(x_0)}} e^{\lambda S(x_0)}.$$

Таким образом, для диффузного фактора экстинкции получим:

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

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

$$F_{ds}^{coh} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (6.49)$$

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

Вообще говоря, выражение (6.49) описывает экстинкционные эффекты в когерентном рассеянии как в приближении тонкого, так и толстого кристаллов. Однако в последнем случае выражение для интегрального когерентного фактора (6.49) можно значительно упростить, вследствие того, что при выполнении условия $\mu_0 t \rightarrow \infty$ справедливо приближение $x_r \rightarrow \infty$. Тогда когерентный фактор экстинкции в геометрии Брэгга в приближении толстого кристалла будет иметь вид:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (6.50)$$

$$\text{где } r(z; t, g, \kappa) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}.$$

Когерентный фактор экстинкции при дифракции на отражение в случае малых эффектов экстинкции дается выражением:

$$F_{ds}^{coh} = 1 - \frac{3\pi s}{4} \quad (6.51)$$

где $s = \frac{(\mu_0 + \mu_{ds}^0)\Lambda E}{\gamma C}$, и должно выполняться условие $s \ll 1$.

Для диффузного фактора экстинкции при учете немалых эффектов экстинкции в геометрии Брэгга будем иметь:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{c\nu}{(2\pi)^3 L_H} \int d\vec{k} |\vec{H}\vec{u}_{\vec{k}}|^2 \frac{1 - e^{-2\mu t}}{2\mu_i t}. \quad (6.52)$$

Полагая, что $\mu_{ds}(0) \ll \mu_0$, и выполняя соответствующие разложения по малому параметру, получим в приближении толстого кристалла:

$$F_{ds}^{diff} \approx \frac{\gamma/2}{(\mu_0 + \mu^*)t}, \quad (6.53)$$

где $\gamma = \frac{1}{1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|}$.

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

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

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 структурночувствительных параметров L_H , μ_{ds}^0 и μ^* .

Интегральные интенсивности в случае больших эффектов экстинкции Лауэ, тонкий кристалл. Интегральный фактор экстинкции F_{ds}^{coh} когерентной составляющей ПИИ в геометрии Лауэ при приближении тонкого кристалла в случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов дается выражением:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{I_{coh}}{R_{ip}} = \int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) e^{-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (6.54)$$

здесь $R(k_0)$ - дифференциальная отражательная способность идеального кристалла с учетом статического фактора Дебая – Валлера. Однако, в отличие от [259], здесь коэффициент эффективного поглощения или экстинкции за счет диффузного рассеяния $\mu_{ds}^{\alpha}(k_0)$ дается выражением (6.35), справедливым и в случае крупных дефектов. Пренебрегая динамическими осцилляциями дифференциальной отражательной способности идеального кристалла при интегрировании, и учитывая, что в таком случае $R(k_0) = \frac{K^2 \sigma_0^2}{2(k_0^2 b + K^2 \sigma_0^2)} e^{-\mu_0 l}$, где

$K = \frac{2\pi}{\lambda}$, λ - длина волны излучения, $\sigma_0^2 = C_j^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}$, для R_{ip} получим

$$R_{ip} = \frac{\pi K \sigma_0}{2\sqrt{b}} e^{-\mu_0 l}.$$

Для рассмотрения интеграла I_{coh} удобно величины $k_{m\alpha}$, разделяющие области Хуаня и Стокса – Вильсона, расположить в порядке возрастания, т. е. $k_{m1} < k_{m2} < k_{m3} < \dots < k_{mn}$, n - количество типов дефектов в кристалле. Учитывая четность подинтегрального выражения, I_{coh} , можно представить следующим образом: первый интеграл берется по интервалу $k_0 \in (0, k_{m1}]$, в этом интервале все $\mu_{ds}^{\alpha}(k_0)$ будут представлены в виде, соответствующем области Хуаня. Вторым интеграл берется по интервалу $k_0 \in (k_{m1}, k_{m2}]$, здесь $\mu_{ds}^1(k_0)$ будет представляться в виде, соответствующем области Стокса – Вильсона, а все остальные $\mu_{ds}^{\alpha}(k_0)$ области Хуаня, и т. д. В интервале $k_0 \in (k_{mn}, \infty)$ все интегралы будут иметь вид, соответствующий области Стокса – Вильсона. Таким образом, для F_{ds}^{coh} получим

$$F_{ds}^{coh} = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma R_{ip}} e^{-\mu_0 l} \left(\sum_{i=0}^{n-1} e^{-\beta_{5i} + \beta_{4i}} \int_{k_{mi}}^{k_{mi+1}} \frac{(k_0^2 + \mu^2)^{\beta_{1i}}}{k_0^2 + A_1^2} e^{-\left(\frac{\beta_{3i} + \beta_{2i}}{k_0^2} k_0^2\right)} dk_0 + 2 \int_{k_{mn}}^{\infty} \frac{e^{-\left(\frac{\beta_{3n}}{k_0^2}\right)}}{k_0^2 + A_1^2} dk_0 \right),$$

где $\beta_{1i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j}$, $\beta_{2i} = \sum_{j=i+1}^n \frac{F_j l b_{3j}}{k_{mj}^2}$, $\beta_{3i} = \sum_{j=1}^i F_j l (b_{2j} - \frac{1}{2} b_{3j}) k_{mj}^2$, $\beta_{4i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{3j}$,

$$\beta_{5i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j} \ln[e(k_{mj}^2 + \mu^2)], \quad A_1^2 = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma}, \quad F_j = c_j C^2 E^2 m_0.$$

Когда эффективные размеры дефектов намного меньше длины экстинкции, распределение диффузного фона, создаваемого такими дефектами, намного шире когерентного пика, т. е., направления распространения определяющего большинства диффузных волн значительно отклоняются от угла Брэгга. Поэтому в этом случае, при определении интегральной интенсивности диффузного фона, можно пренебречь динамическими эффектами в диффузном рассеянии, так как их удельный вклад пренебрежимо мал. Однако когда размеры дефектов соизмеримы с длиной экстинкции, распределение диффузного фона узкое и все диффузно рассеянные волны по направлению распространения не сильно отличаются от когерентных волн, т. е., сосредоточены в существенно динамической области. В таком случае необходимо учитывать динамический характер диффузного рассеяния. При этом диффузная составляющая ПИИ имеет вид:

$$R_{ID} = C^2 (1 - E^2) F_{ds}^{diff} Q l e^{-\mu_0 l}.$$

С учетом динамических эффектов в диффузном рассеянии интегральный фактор экстинкции соответствующей компоненты ПИИ будет даваться выражением:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{I_{diff}}{I_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) e^{-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0 \right]^{-1} \quad (6.55)$$

Здесь следует отметить, что, с другой стороны, справедливо также выражение:

$$I_0 = (1 - E^2)R_{ip}^{kin} \approx R_{ip}^{kin} 2L_H.$$

Учитывая (6.10) и (6.11), для I_0 получим

$$I_0 = \sum_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0 = 2 \sum_{\alpha=1}^n F_{\alpha} \left[b_{2\alpha} \left[3k_{m\alpha} - 2\mu \operatorname{arctg} \left(\frac{k_{m\alpha}}{\mu} \right) \right] - \frac{5k_{m\alpha} b_{3\alpha}}{6} + k_{m\alpha} \left(b_{2\alpha} - \frac{1}{2} b_{3\alpha} \right) \right]$$

Упорядочивая $k_{m\alpha}$ так же, как и при вычислении F_{ds}^{coh} , получим для F_{ds}^{diff} :

$$F_{ds}^{diff} = \frac{2}{I_0} \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} e_i \left[(\beta_{5i} - \beta_{4i}) I_i - \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \frac{\partial I_i}{\partial \beta_{ij}} \right] + \sqrt{\beta_{3n}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\beta_{3n}}}{k_{mn}} \right) \right\},$$

$$\text{где } I_i = \int_{k_{mi}}^{k_{mi+1}} (x^2 + \mu^2)^{\beta_{4i}} e^{-\left(\frac{\beta_{2i} x^2 + \beta_{3i}}{2} + \frac{\beta_{3i}}{x^2}\right)} dx, \quad e_i = e^{-\beta_{5i} + \beta_{4i}}.$$

Лауэ, толстый кристалл. В случае когерентного фактора при больших эффектах экстинкции в геометрии Лауэ будем иметь:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{1}{R_{ip}} \int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l} \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right) dy, \quad (6.56)$$

где $R_{ip} = \frac{B i_0(\mu_H l C)}{\sqrt{2\pi\mu_H l C}} e^{-(\mu_0 - \mu_H C)l}$ - интегральная отражательная способность в

случае Лауэ дифракции в приближении толстого идеального кристалла,

$$B = \frac{\pi C E |\chi_{Hr}|}{2 \sin(2\theta_B)}, \quad i_0(x) = 1 + \frac{1}{8x} + \frac{9}{128x^2} + \dots$$

Для вычисления диффузного фактора экстинкции можно сделать некоторые упрощения:

$$|\Delta'_{\tau} - \Delta_{\delta}|^2 \approx \frac{1}{4\gamma_0^2} \left((\alpha - \alpha') + (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^{\tau} \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right)^2,$$

$$|2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2 \approx (\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2})^2, \quad |\Delta_1 - \Delta_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha^2 + \alpha_0^2),$$

$$|\Delta'_1 - \Delta'_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha'^2 + \alpha_0^2),$$

$$D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{\gamma_0^2}{4} \frac{(\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2})^2 \left((\alpha - \alpha') + (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^{\tau} \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right)^2}{(\alpha^2 + \alpha_0^2)(\alpha'^2 + \alpha_0^2)}$$

Выражение для $\rho_{\delta\tau}(k_0, k')$ можно свести к следующему виду:

$$\rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{1}{2Kt \operatorname{Im}(\Delta_{\delta} - \Delta'_{\tau})} = \left((\mu_{ds}(\alpha) - \mu_{ds}(\alpha')) \mathcal{L} + \frac{\beta_0 Kl}{2} \left(\frac{(-1)^{\delta}}{\sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2}} - \frac{(-1)^{\tau}}{\sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2}} \right) \right)^{-1}$$

Перейдем в (6.47) от интегрирования по $d\vec{k}$ к интегралу по $d\theta d\theta' d\varphi'$, где φ' - угол отклонения диффузно рассеянной волны от плоскости дифракции. Выразим компоненты волнового вектора диффузной волны в вакууме \vec{k} через угловые переменные $\theta, \theta', \varphi'$. Согласно Рисунку 6.3 такая связь будет иметь вид:

$$k_x = K(\theta' + 2\theta \cos^2 \theta_B), \quad k_y = K\varphi', \quad k_z = -K\theta \sin 2\theta_B.$$

Таким образом, при переходе в интеграле (6.40) к угловым переменным, для элемента интегрирования получим:

$$d\vec{k} = dk_x dk_y dk_z = K^3 \sin 2\theta_B d\theta d\theta' d\varphi'$$

В случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов, необходимо также как и в случае когерентной компоненты заменить дифференциальный коэффициент экстинкции на сумму коэффициентов экстинкции от каждого типа дефектов, и кроме того необходимо также заменить выражение для $F(\vec{q})$ на сумму таких выражений от каждого типа дефектов, т.е.:

$$F(\vec{q}) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\vec{q}).$$

Такие замены справедливы из - за того, что величины квадратичные по полям смещений от дефектов складываются аддитивно от разных типов дефектов (при этом предполагается, что парными корреляциями между смещениями от различных типов дефектов можно пренебречь, что справедливо в случае небольшой объемной доли дефектов, когда $c \ll 1$).

Интегрируя (47) по φ' , получим:

$$I_{\delta r} = \int D_{\delta r}(\alpha, \alpha') F(\alpha, \alpha') \rho_{\delta r}(\alpha, \alpha') (e^{2Km_s(\alpha)} - e^{2Km_s(\alpha')}) d\theta d\theta', \quad (6.57)$$

где

$$F(\alpha, \alpha') = \begin{cases} f_H(\sqrt{k_m^2 - k_{\parallel}}) - f_H(0) + f_{SW}(\infty) - f_{SW}(\sqrt{k_m^2 - k_{\parallel}}), & \text{при } |k_{\parallel}| < k_m \\ f_{SW}(\infty) - f_{SW}(0) & \text{при } |k_{\parallel}| \geq k_m \end{cases},$$

$$f_H(x) = \frac{B_2 k_1^2 x}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)} + \frac{B_2 k_1^2 + 2B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^{3/2}} \operatorname{arctg} \left[\frac{x}{\sqrt{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}} \right],$$

$$f_{SW}(x) = \frac{k_m^2}{4K} \left(\frac{(B_2 k_1^2 (5k_{\parallel}^2 + 3x^2 + \mu_i^2) + 4B_1(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2))x}{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^2 (k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)^2} + \frac{3B_2 k_1^2 + 4B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^{5/2}} \operatorname{arctg} \left[\frac{x}{\sqrt{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}} \right] \right)$$

,

$$k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}, \quad k_1 = -k_x \sin \theta_B + k_z \cos \theta_B.$$

Случай Брэгга, тонкий и толстый кристаллы. Для диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Брэгга согласно (6.52) будем иметь:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{1}{2\gamma_0 R_{iD}^{kin}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-2\mu}}{\mu} F_{dyn} \sum_{\alpha} \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0 \quad (6.58)$$

В предельных случаях тонкого и толстого кристаллов экспонента в (6.58) превратится соответственно в 0 и $1 - 2\mu_i t$.

Когерентный и диффузный факторы в геометрии Брэгга нужно находить путем численного интегрирования выражений (6.49), (6.50) и (6.58) для приближений тонкого и толстого кристаллов соответственно. Следует учесть, однако, что факторы экстинкции следует интегрировать с учетом ориентационной зависимости интерференционного коэффициента поглощения в случае присутствия в кристалле больших дефектов, которые существенно влияют на ПИИ, [357].

6.3. МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНОЙ ДИФФУЗНОДИНАМИЧЕСКОЙ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Физические основы метода диффузнодинамической комбинированной дифрактометрии. Анализ приведенных выражений динамической теории рассеяния (6.54)–(6.58) показывает, что, в отличие от кинематической теории (6.1)–(6.7), введенные выше два интегральных параметра картины рассеяния (сумма и отношение диффузной и брэгговской составляющих R_i) при динамической дифракции оба оказываются зависящими как от параметров дефектной структуры, так и от условий дифракции. При этом, выражения (6.54)–(6.58) демонстрируют принципиальное различие в зависимостях брэгговской и диффузной составляющих R_i не только от параметров дефектов, но и от условий дифракции. Таким образом, благодаря учету многократного перерассеяния брэгговской и диффузной составляющих, указанные законы кинематического рассеяния при динамической дифракции нарушаются.

Первый закон кинематической теории, указывающий на то, что первый из параметров (см. первое выражение в (6.6)) зависит только от условий дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции и т.д.) и не зависит от параметров структурного совершенства и сохраняется таким, как в идеальном кристалле, при произвольных отклонениях от периодичности кристаллической решетки можно назвать законом сохранения полной интегральной интенсивности в несовершенных кристаллах. В результате, структурночувствительным интегральным параметром оказывался только второй параметр (6.7), сводящийся в кинематической теории к удвоенному показателю статического фактора Кривоглаза-Дебая-Валлера.

На основе анализа параметра (6.7) М.А. Кривоглаз провел классификацию дефектов кристаллов по характеру их влияния на картину рассеяния, [234]. При этом кинематическая картина рассеяния оказалась Фурье-изображением

кристалла с дефектами, однозначно определяемым независимым от условий дифракции вторым параметром и его распределением в пространстве обратной решетки. Неизменность этого параметра при изменении условий дифракции является неизбежным следствием приближения однократного рассеяния и составляет суть второго закона кинематической теории.

Рисунки 6.4 и 6.5, приведенные в качестве примера, иллюстрируют радикальное изменение при динамической дифракции характера влияния дефектов на интегральную интенсивность рассеяния (первый параметр) в зависимости от радиуса кривизны макроскопического упругого изгиба (r) кристалла, а также изменение характера влияния дефектов на эти деформационные зависимости (ДЗ) при изменении других условий дифракции. А именно, при переходе от предельного случая динамической дифракции в «тонком» кристалле (a), когда наблюдается существенное увеличение полной интегральной интенсивности за счет дефектов относительно идеального кристалла, к предельному случаю «толстого» кристалла (b), когда имеет место ее существенное уменьшение за счет дефектов, [251, 265]. Это обуславливается принципиально различными характерами влияния на брэгговскую и диффузную составляющие таких параметров как радиус кривизны упругого изгиба, толщина кристалла, что иллюстрируется на Рисунке 6.5 и объясняет природу нарушения при динамической дифракции второго закона.

В результате общая яркость динамической картины рассеяния, нормированная на яркость картины для соответствующего идеального кристалла, и зависимости слагающих ее компонент от условий дифракции становятся уникально чувствительными к характеристикам дефектов или параметрам сверхструктуры.

Избирательная чувствительность к дефектам разного типа при изменении условий динамической дифракции, [276,277], была положены в основу создания

комплекса новых, принципиально отсутствующих при кинематическом рассмотрении, интегральных методов ДДКД, [251-253].

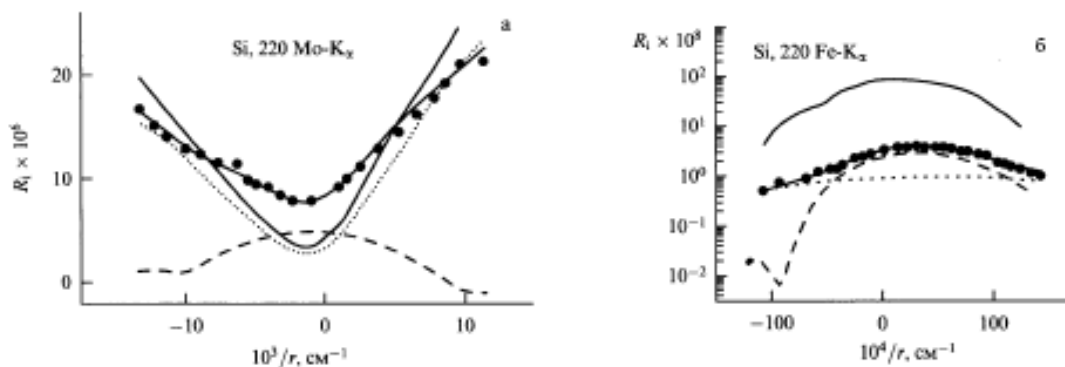


Рисунок 6.4. Теоретические и экспериментальные значения деформационных зависимостей ПИИ неидеального кристалла изображены сплошными жирными линиями и маркерами, соответственно. Пунктирные линии представляют рассчитанные ДЗ когерентной компоненты ПИИ, штриховые — диффузной, а сплошные тонкие линии — ДЗ ПИИ кристалла без дефектов.

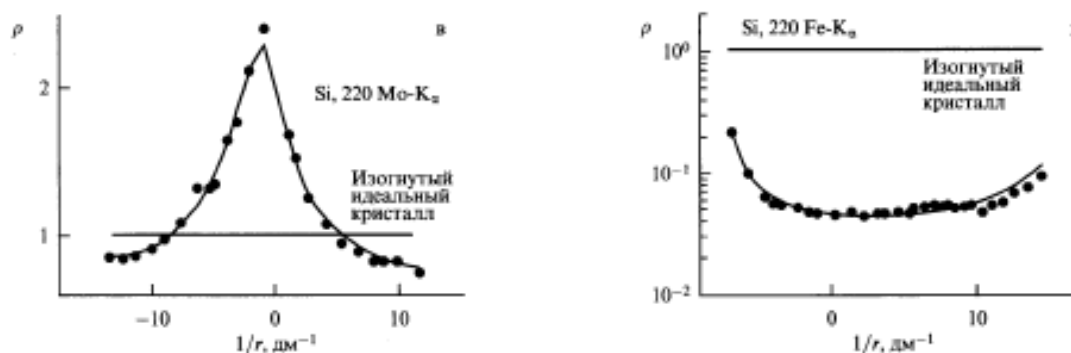


Рисунок 6.5. Рассчитанные (жирные сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) деформационные зависимости нормализованной ПИИ ($\rho = R_i/R_{ip}$) для кристаллов Si с дефектами, а также ДЗ для идеального кристалла (тонкие сплошные линии).

В [250, 251] было показано, что нелинейные эффекты многократности рассеяния обуславливают принципиально различные для брэгговской и

диффузной составляющих динамической картины рассеяния. Различаются также и удельные вклады в картину рассеяния от дефектов разного типа, зависимости их от условий динамической дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции (на прохождение или на отражение), параметра асимметрии отражения, азимутального угла, радиуса кривизны упругого изгиба кристалла и т.д.).

Как показано и проиллюстрировано на Рисунках 6.4 и 6.5, именно эта разница между зависимостями брэгговской и диффузной составляющих и приводит к нарушению при динамической дифракции второго закона кинематической теории. В целом, во-первых, при динамической дифракции оба интегральных параметра динамической картины рассеяния, вводящиеся аналогично (6.6) и (6.7), становятся структурночувствительными. Во-вторых, что более существенно, количество измеряемых экспериментально пар этих параметров теперь равно числу вариантов геометрии динамической дифракции, которые могут быть экспериментально реализованы. Т.е. указанные структурночувствительные параметры становятся многомерными, а сама динамическая картина – многообразной.

Многообразность динамической картины рассеяния иллюстрирует Рисунок 6.6. Для кристалла с фиксированной кристаллической (в том числе и дефектной) структурой для каждого рефлекса кинематическая теория при любых условиях дифракции (в данном случае при изменении толщины кристалла или длины волны излучения) предполагает единую картину рассеяния (Рисунок 6.6*a*). В отличие от кинематики, динамическая картина является многообразной (см. Рисунки 6.6, *a-v*), т.е. сколько разных условий дифракции реализовано – столько для данного рефлекса разных картин рассеяния при неизменной кристаллической структуре может быть получено. Это позволяет при динамической дифракции целенаправленно набрать необходимое количество экспериментальных данных

(независимых уравнений) путем изменении условий дифракции для определения произвольного, в принципе, количества неизвестных характеристик структуры. Именно этот факт позволил создать целый комплекс как интегральных, так и дифференциальных методов диагностики нового поколения (ДДКД), [251-256].

Главной особенностью и преимуществом разработанного метода диагностики (ДДКД) является возможность комбинированной компьютерной обработки результатов экспериментальных измерений параметров картины рассеяния в различных условиях динамической дифракции. Кроме того, можно использовать и различные методики: интегральные, дифференциально-интегральные и дифференциальных, т.е. одно - двух - и трехкристалльные.

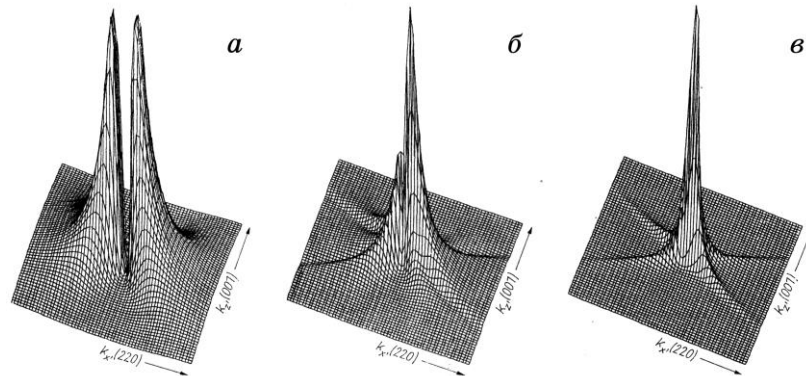


Рисунок 6.6. Радикальное изменение картины диффузного рассеяния (двумерного распределения интенсивности в плоскости рассеяния) от кристалла с фиксированной дефектной структурой за счет изменения условий динамической дифракции (увеличение толщины t кристалла или длины волны излучения) для $\mu_0 t = 0,027$ (а), 1,34 (б) и 5,36 (в), демонстрирующее явление многообразности динамической картины рассеяния.

Основой новых принципов высокоинформативной диагностики, [250-254] является обеспечение возможности экспериментального измерения и теоретического анализа необходимого набора, указанных выше пар не только интегральных параметров, а также характеристик их распределений в пространстве обратной решетки. То есть, речь идет не только о самих

интегральных параметрах, а также и о дифференциально-интегральных и дифференциальных характеристиках распределения этих двух главных параметров динамических картин рассеяния, а именно о распределении в обратном пространстве яркости картины дифракции в целом и ее диффузной составляющей в частности.

Толщинные и спектральные зависимости ПИИ. Установление различий в механизмах формирования брэгговской и диффузной составляющих привело к открытию качественно новых эффектов динамической дифракции, [261, 271, 272].

На Рисунке 6.7 представлены результаты экспериментального подтверждения толщинной зависимости вклада ДР и нарушения закона сохранения ПИИ (маркеры - эксперимент, линии - теория). ПИИ представлена нормированной на ПИИ для идеального кристалла, что в кинематической теории всегда равно единице (см. формулу (6.6)).

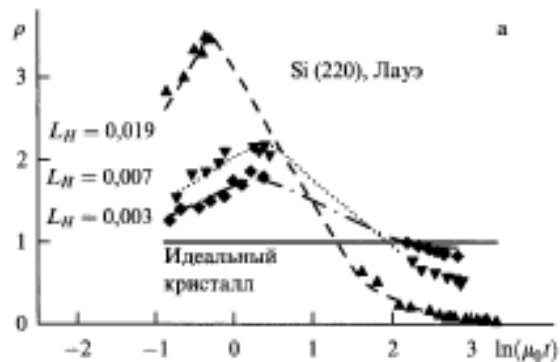


Рисунок 6.7. Зависимости нормированной ПИИ ρ (отношения ПИИ исследуемого реального кристалла R_i к ПИИ для идеального $R_{i\text{perf.}}$) от величины $\mu_0 t$. Линии — результаты расчетов, а маркеры — результаты измерения ПИИ для трех образцов в приближениях тонкого (с использованием MoK_α -излучения, левая часть зависимостей) и толстого кристаллов с использованием CuK_α -излучения и FeK_α -излучения, правая часть зависимостей.

Следует отметить, что на Рисунке 6.7 (и некоторых нижеследующих

графиках) сплошная горизонтальная линия соответствует идеальному кристаллу при динамическом рассмотрении ($R_{i\text{perf}}$) или любому (идеальному и неидеальному) кристаллу в кинематическом случае. В последнем случае ПИИ принципиально не чувствительна к искажениям кристалла.

Из Рисунка 6. 8, где представлены толщинные зависимости удельных вкладов диффузной и когерентной составляющих ПИИ, видно, что именно изменение относительного вклада диффузной составляющей ПИИ (непрерывное с изменением толщины кристалла и дискретное при переходе от приближения тонкого к приближению толстого кристаллов), обусловленное принципиально различным характером толщинных зависимостей составляющих ПИИ, а также изменением этого характера при переходе от предельного случая тонкого кристалла к случаю толстого, определяет ее уникальную чувствительность к дефектам.

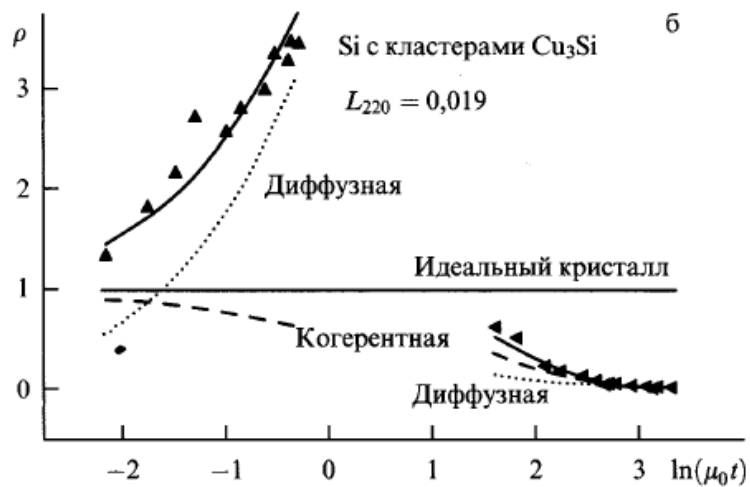


Рисунок 6.8. Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормализованной ПИИ монокристалла Si. Штриховые линии — рассчитанные толщинные зависимости когерентной составляющей, пунктирные линии — диффузной составляющей. Параметры дефектной структуры кристалла: сферические кластеры Cu_3Si с $R = 0,035$ мкм, $\varepsilon = 0,13$ и $c = 9 \cdot 10^{10}$ см⁻³.

На Рисунках 6.9 и 6.10 представлены спектральные зависимости ПИИ

неидеальных кристаллов, служащие экспериментальным подтверждением различной функциональной зависимости (6.2) в приближениях тонкого (область коротких длин волн) и толстого (длинноволновая часть спектра) кристаллов.

Как следует из представленных результатов, при дифракции в геометрии Брэгга эти различия менее ярко выражены, нежели в случае лауэ-дифракции. Но и в этом случае высокая чувствительность динамической дифракции к различным типам дефектов, присутствующим в исследуемых образцах, сохраняется и существенно возрастает с ростом вклада диффузной составляющей при уменьшении длины волны, т.е. увеличении длины абсорбции и, следовательно, объема, в котором формируется диффузное рассеяние.

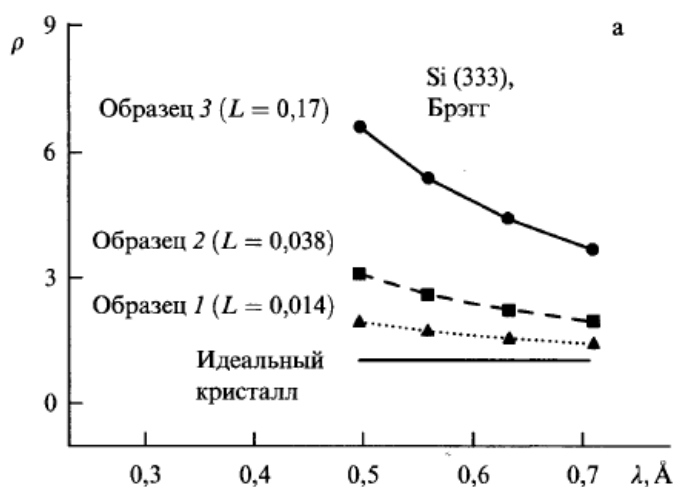


Рисунок 6.9. Зависимость нормированной ПИИ дефектных образцов Si от длины волны излучения в случае брэгг-дифракции. Образцы 1 и 2 были отожжены на воздухе в течение 4 и 6 часов при 1000°C и 1080°C соответственно; образец 3 был отожжен в атмосфере азота в течение 7 часов при 1250°C.

Из вышеприведенных выражений (6.54)–(6.58) динамической теории для брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния и проведенного анализа видно, что они имеют существенно различный характер зависимости от параметров дефектов и, что особо важно, этот характер зависит как от самих

дефектов, так и от условий динамической дифракции (различные геометрии дифракции, случаи тонкого и толстого кристаллов и др.).

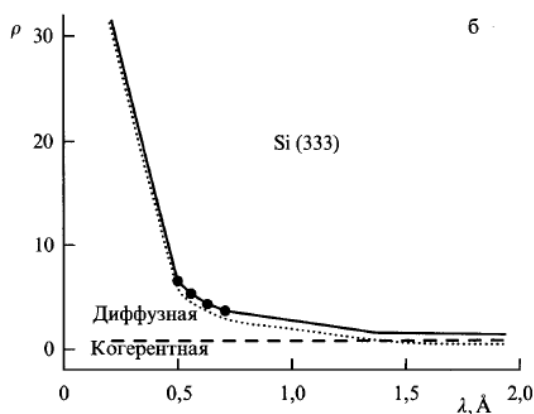


Рисунок 6.10. Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектральная зависимость нормированной ПИИ монокристалла Si. Штриховая линия — рассчитанная спектральная зависимость когерентной составляющей, пунктирная линия — диффузной. Расчеты проводились для следующих параметров динамического рассеяния: $L_H = 0,17$, μ^* , $\mu_0 = 1,1$.

Главный же вывод состоит в том, что зависимости от условий динамической дифракции для брэгговской и диффузной составляющих принципиально различны, следствием чего и являются все отмеченные эффекты и особенности их проявления.

Эффект асимметрии азимутальной зависимости нормированной ПИИ.

Как известно, азимутальные зависимости ПИИ (нормированной на ПИИ идеального кристалла) для различных типов искажений кристаллической решетки являются симметричными относительно поворота на угол 90° . К таким типам искажений кристалла относятся: дефекты кулоновского типа (дислокационные петли, кластеры и пр.) небольших размеров $R \ll \Lambda$, нарушенный поверхностный слой и т.д.

Для исследования вышеуказанной симметрии азимутальной зависимости были измерены азимутальные зависимости для кристалла с дефектами. Объект исследования был вырезан из слитка CZ Si (p-тип проводимости, $\rho \sim 10 \text{ Ом} \times \text{см}$, ось

роста была направлена вдоль оси $\langle 111 \rangle$, концентрации кислорода и углерода были равны $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и 10^{16} см^{-3} , соответственно). Образец был приготовлен в форме пластины, параллельной плоскости (111), толщиной $t=4000 \text{ мкм}$. Нарушения структуры поверхности, возникающие при механической обработке, были удалены путем химико-механической полировки с последующим химическим травлением до глубины $\sim 10 \text{ мкм}$.

Оказалось, что в результате присутствия в этом кристалле дефектов больших размеров (дислокационных петель с радиусом 15 мкм), азимутальная зависимость нормированной ПИИ существенно несимметрична (см. Рисунок 6.11.), тогда как расчеты с учетом формул (6.44), (6.46) дают симметричный результат даже при подстановке в эти выражения параметров больших дефектов. Однако, поскольку размеры дислокационных петель в исследуемом образце превышают длину экстинкции, то указанные формулы уже не дают корректного описания ПИИ, поскольку они выводились в предположении малых дефектов. Это позволило пренебречь процессами перерасеяния диффузных волн на периодической части кристаллического потенциала. Для случая больших дефектов, как упоминалось выше, необходимо использовать выражения (6.50) и (6.58) для расчета ПИИ.

Как оказалось, результат, полученный с использованием обобщенных формул также дает асимметрию азимутальной зависимости нормированной ПИИ и практически совпадает с экспериментом (Рисунок 6.11, сплошная линия).

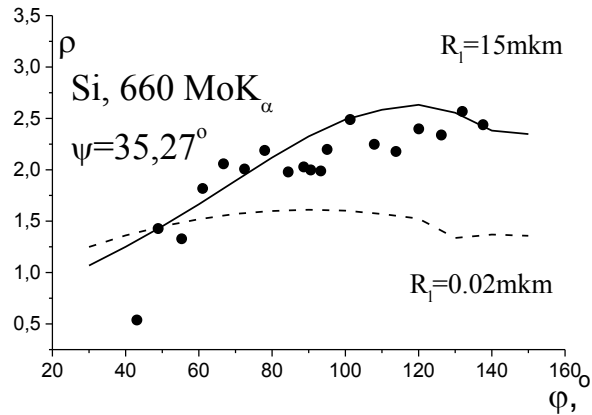


Рисунок 6.11. Экспериментальная (маркеры) и рассчитанная с использованием выражений (6.50), (58) при значениях среднего радиуса дислокационных петель $R = 15$ мкм (сплошная линия) и $R = 0.02$ мкм (штриховая линия) азимутальные зависимости нормированной ПИИ.

Анализируя причины асимметрии азимутальной зависимости было установлено, что этот эффект вызван поведением диффузной компоненты ПИИ.

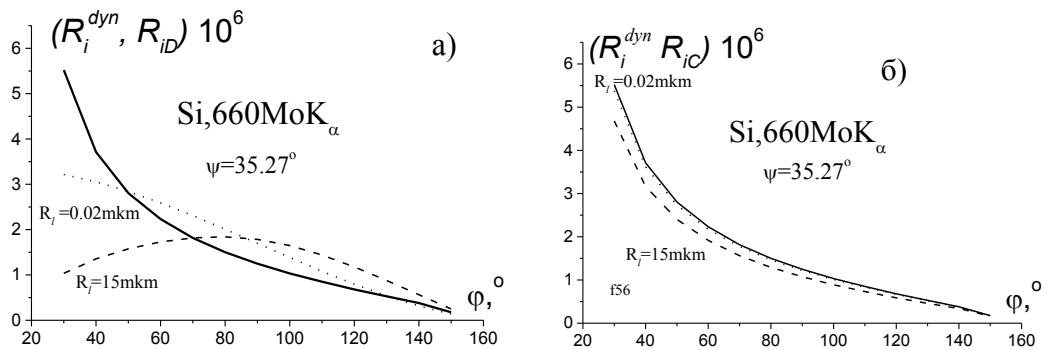


Рисунок 6.12. Рассчитанная азимутальная зависимость ПИИ для идеального кристалла R_i^{dyn} (сплошная линия). Рассчитанные с использованием выражений (6.50), (6.58) азимутальные зависимости а) – диффузной составляющей ПИИ (R_{iD}) и б) – когерентной составляющей ПИИ R_{iC} (штриховая линия и пунктирная).

Таким образом, установлено, что присутствие в кристалле дефектов больших размеров приводит к симметрии азимутальной зависимости

ненормированной диффузной компоненты (в случае малых дефектов она асимметрична), тогда как азимутальная зависимость когерентной компоненты остается асимметричной (подобно случаю идеального кристалла) (см. Рисунок 6.12).

Таким образом, нормируя азимутальную зависимость ПИИ кристалла с дефектами на аналогичную зависимость ПИИ идеального кристалла, получаем симметричную зависимость в случае малых дефектов и несимметричную в случае дефектов больших рамеров. Следовательно, благодаря принципиально различному характеру азимутальной зависимости в случаях малых и больших дефектов, и проявления избирательной чувствительности формы зависимости к большим дефектам появляется возможность определения их параметров. Параметры малых дефектов, в случае если они присутствуют в кристалле, можно определить, используя другие условия дифракции для того же образца.

Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для Лауэ-дифракции в области К-края поглощения. Для изучения диагностических возможностей при указанных условиях необходимо сначала построить соответствующую теоретическую модель. В [358] путем фитирования деформационных зависимостей (ДЗ) ПИИ симметричного 220 лауэ-отражения от монокристалла кремния, измеренных при использовании характеристического FeK_{α} -излучения, получены значения параметров полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами. Полученная на ее основе соответствующая модель для скачка (S) ПИИ вблизи К-края поглощения имеет вид [270]:

$$S=R_i(\lambda_1)/ R_i(\lambda_2), \text{ где } \lambda_1=0.1139\text{нм}, \lambda_2=0.1094\text{нм},$$
$$R_i(\lambda) \equiv R_i = R_{i\text{coh}}[1+(BT\mu_0l)\times 0.074] \times \exp[-(BT\mu_0l)^2\times 0.00604] \quad (6.59)$$
$$+ R_{i\text{dif}}[1+(BT\mu_0l)\times 0.0157] \times \exp[-(BT\mu_0l)^2\times 0.00044],$$

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi \cdot [1 + \gamma_1 \gamma_2 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{Hr}|^2 r d}, \quad T = \frac{\pi t |\chi_{Hr}|}{\lambda \sqrt{\gamma_1 \gamma_2}}, \quad \gamma_1 = \cos(\theta_B + \psi), \quad \gamma_2 = \cos(\theta_B - \psi), \quad r -$$

радиус кривизны цилиндрического изгиба кристалла, $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, $a -$

постоянная решетки, $h, k, l -$ индексы Миллера, $R_{icoh} = ER_{iP} F_{ds}^{coh}$ и $R_{idif} = R_i^{kin} F_{ds}^{dif} -$

соответственно когерентная и диффузная компоненты интегральной интенсивности в неизогнутом кристалле, в которых факторы экстинкции определяются выражениями (6.56) и (6.48) совместно с (6.57), $E -$ фактор Кривоглаза-Дебая-Валлера.

Результаты сравнения расчетов по модели (6.59) при различных значениях параметра асимметрии ψ для отражений $[\bar{2}20]$ и $[\bar{2}20]$ представлены на Рис. 6.13. а), б). Из Рисунка 6.13 видно, что чем больше деформация, тем заметнее отличие ДЗ скачка ПИИ от рассчитанной ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла. Видно, что это является следствием кардинального различия характера ДЗ скачков для когерентной и для диффузной составляющих ПИИ и, видимо, достаточно заметным вкладом диффузной составляющей.

На Рисунке 6.14 показаны результаты расчетов ДЗ скачка ПИИ в кристаллах с дефектами, нормированной на ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла.

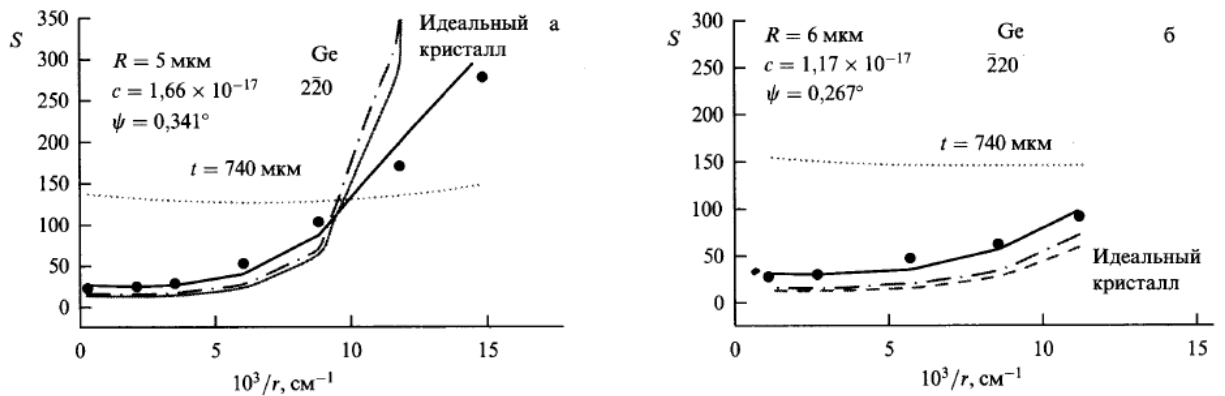


Рисунок 6.13. Рассчитанные (линии) по модели, основанной на формулах (59), и измеренные (маркеры) в работе [266] зависимости скачка ПИИ от

деформации у К-края поглощения для кристалла Ge при значении его толщины $t = 740$ мкм. Сплошные линии – ДЗ скачка ПИИ, штрих – ДЗ скачка ее когерентной составляющей, пунктир – ДЗ скачка ее диффузной составляющей, штрих-пунктир – ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла.

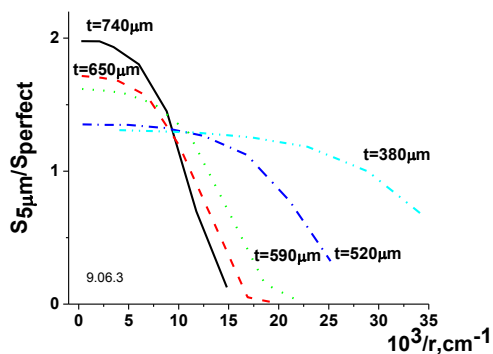


Рисунок 6.14. Рассчитанные по формулам (6.59) нормированные на ДЗ скачка ПИИ в идеальных кристаллах ДЗ величины скачка ПИИ в кристаллах с дефектами при различных толщинах кристаллов.

Из Рисунка 6.14 видно, что чем больше толщина кристалла, тем сильнее влияние дефектов на деформационную зависимость ПИИ. При максимальной толщине кристалла 740 мкм, если в неизогнутом кристалле величина скачка ПИИ из-за наличия дефектов увеличивается в 2 раза, то с увеличением степени изгиба ее чувствительность к дефектам сначала уменьшается до нуля, а затем при дальнейшем росте степени изгиба величина скачка уменьшается на два порядка, а чувствительность к дефектам на два порядка возрастает.

Из Рисунка 6.15 видно, что, несмотря на малый угол наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационная зависимость ПИИ в идеальном кристалле, когерентной составляющей ПИИ и самой ПИИ в кристаллах с дефектами, для коротковолновой границы К-края поглощения резко выражены. Это обусловлено эффектом аномального прохождения, который спадает с уменьшением эффективной толщины ($\mu_0 t$). В то же время из рисунка

6.15 видно, что в связи с малым углом наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационные зависимости когерентной и диффузной составляющих ПИИ для длинноволновой границы К-края поглощения, а также для диффузной составляющей у коротковолновой границы К-края поглощения практически отсутствуют. Это обусловлено изменением результатов конкуренции с изменением $\mu_0 t$ вкладов ДЗ отражающей и поглощающей способностей как для брэгговской, так и для диффузной составляющих в результирующую ДЗ.

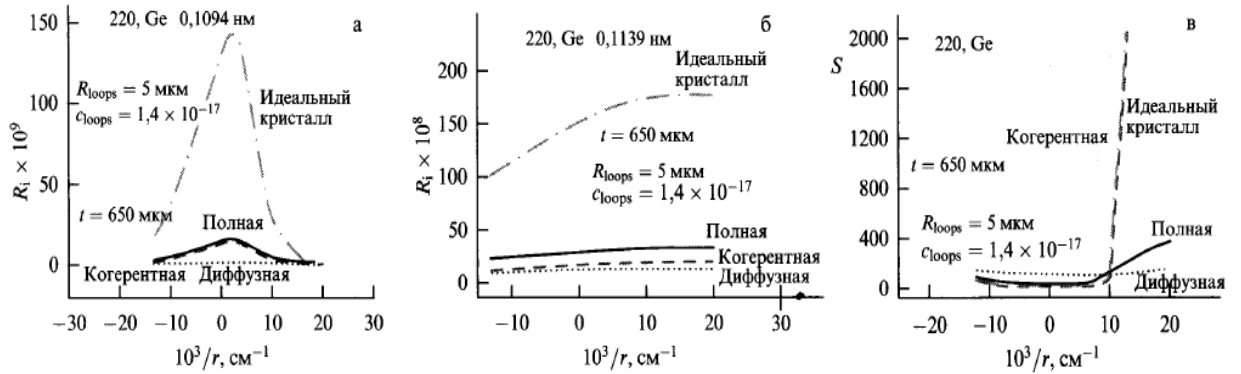


Рисунок 6.15. Рассчитанные по модели, основанной на (6.59), деформационные зависимости ПИИ в идеальных кристаллах, ПИИ в кристаллах с дефектами, ее брэгговской и диффузной составляющих и их скачка в области К-края поглощения при толщине кристалла $t = 650$ мкм

Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в условиях нарушения закона Фриделя. На основе полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами, [265], модель введенного и исследованного в [267] параметра асимметрии ДЗ ПИИ можно представить следующим образом, [281],

$$Y = R_i(+)/ R_i(-),$$

$$R_i(+)= R_{i\text{coh}}[1+(B\Gamma\mu_0l)\times 0.074] \times \exp[-(B\Gamma\mu_0l)^2\times 0.00604] +$$

$$R_{i\text{dif}}[1+(B\Gamma\mu_0l)\times 0.0157] \times \exp[-(B\Gamma\mu_0l)^2\times 0.00044], \quad (6.60)$$

$$R_i(-) = R_{icoh}[1-(B\Gamma\mu_0l)\times 0.074] \times \exp[-(B\Gamma\mu_0l)^2\times 0.00604] + R_{idif}[1-(B\Gamma\mu_0l)\times 0.0157] \times \exp[-(B\Gamma\mu_0l)^2\times 0.00044].$$

Значения среднего радиуса дислокационных петель $R=5\text{мкм}$ и их концентрации $c=1.69 \cdot 10^{-17}$, использованные при построении толщинных зависимостей параметров асимметрии для кристаллов с дефектами, представленных на Рисунке 6.12, близки к значениям параметров дислокационных петель, установленным в [265] путем фитирования деформационных зависимостей скачка ПИИ вблизи К-края поглощения, [266]. Результаты расчетов представлены на Рисунке 6.16.

Из Рисунка 6.16 видно, что для излучения с длиной волны 0.1094нм присутствие дефектов вызывает заметное уменьшение нормированного коэффициента асимметрии. При этом с увеличением толщины кристалла нормированный коэффициент асимметрии становится намного более чувствительным к крупным дефектам, чем к мелким.

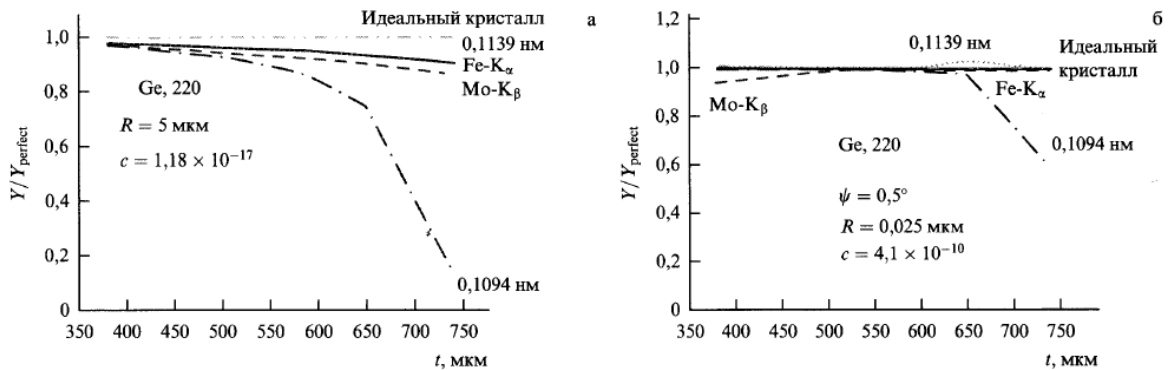


Рисунок 6.16. Рассчитанные зависимости от толщины отношения параметра асимметрии ПИИ $Y = \frac{I_i^{hkl}}{I_i^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}$ кристалла с дефектами (параметры хаотически распределенных в объеме кристалла дислокационных петель (а) средний радиус $R=5\text{мкм}$ и концентрация $c=1.18 \cdot 10^{-17}$, (б) средний радиус $R=0.025\text{мкм}$ и концентрация $c=4.1 \cdot 10^{-10}$) к параметру асимметрии ПИИ для идеального

кристалла Y_{perfect} . Расчеты проведены при $r = \pm 2,4$ м для случаев: излучения с длиной волны 0.1139 нм, (пунктир), излучения с длиной волны 0.1094 нм, (штрих-пунктир), для FeK_α -излучения (сплошная линия), для MoK_β -излучения (штриховая линия), а также ПИИ для идеального кристалла (штрих-двойной пунктир).

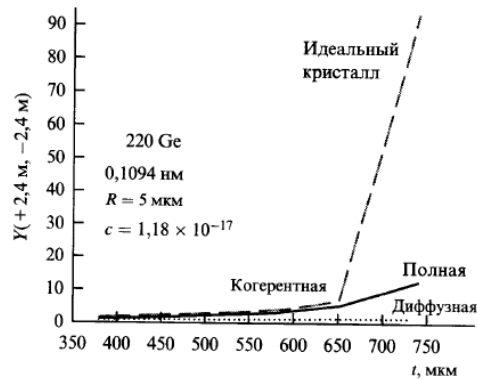


Рисунок 6.17. Рассчитанные зависимости параметра асимметрии $Y = \frac{I_i^{hkl}}{I_i^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}$

от толщины кристалла при $r = \pm 2,4$ м для ПИИ для излучения с длиной волны $\lambda = 0,1094$ нм. Сплошная линия – для ПИИ кристалла с дефектами, штрих – для когерентной составляющей ПИИ, пунктир – для диффузной составляющей ПИИ, штрих-пунктир – для ПИИ в идеальном кристалле.

Из Рисунка 6. 17 видно, что для идеального кристалла Y резко возрастает с толщиной для интенсивности сильно поглощающейся длины волны вблизи К-края поглощения. Следовательно, Y резко уменьшается с толщиной для скачка интенсивностей на К-крае, причем указанное уменьшение тем больше, чем больше степень упругого изгиба образца. Отличие графика зависимости Y или скачка Y вблизи К-края поглощения для ПИИ в кристалле с дефектами от Y для ПИИ в идеальном кристалле (или его нормированных величин) от единицы демонстрирует высокую чувствительность метода к дефектам.

Экспериментальная апробация метода ИДЖД.

Комбинированная обработка приведенных экспериментальных данных по толщинным и деформационным зависимостям ПИИ в описанном выше образце с использованием предложенных теоретических моделей в рамках метода ИДДКД позволила установить характеристики двух типов дефектов. Ими стали крупные дислокационные петли с вектором Бюргерса $|\vec{b}| = a/\sqrt{2}$, $R=5\text{мкм}$, $c=8.85\times 10^{-18}$ и мелкие дислокационные петли с вектором Бюргерса $|\vec{b}| = a/\sqrt{2}$, $R=0.02\text{мкм}$, $c=1.47\times 10^{-10}$. Величина фактора Кривоглаза-Дебая-Валлера $E = e^{-L_n} = 0.998$ больше величины динамического фактора Дебая-Валлера для используемого отражения 220: $e^{-M} = 0.966$, т.е. среднеквадратичные смещения атомов, вызванные присутствием дефектов, меньше тепловых. Это говорит о высоком совершенстве исследуемого монокристалла Ge, что подтверждается полученными малыми концентрациями дефектов. Возможность определения параметров дефектов, создающих столь малые искажения, свидетельствует о высокой структурной чувствительности метода ИДДКД.

В качестве иллюстрации преимуществ комбинированной обработки результатов рентгенодифракционного эксперимента, т.е. методов ИДДКД, ниже в Таблица 6.1, сведены радиусы и концентрации четырех типов дефектов, определенные независимо для каждого эксперимента. При этом речь идет только об одном определяющем типе дефектов и комбинированной обработке данных, полученных в разных условиях динамической дифракции. Параметры дефектов разных типов определялись путем совместной обработки толщинных и деформационных зависимостей ПИИ, полученных в приближениях «толстого» и «тонкого» кристаллов на трехкристальном дифрактометре.

Таблица 6.1. Характеристики (радиусы R и концентрации c) дефектов, определенные при независимой и комбинированной обработке экспериментальных данных, полученных при разных условиях динамической дифракции.

Способ диагностики и	$R_{\text{большие петли}}$, мкм	$c_{\text{большие петли}}$, см ⁻³	$R_{\text{кластеры}}$, мкм; $h_{\text{кластеры}}$, мкм	$c_{\text{кластеры}}$, см ⁻³	$R_{\text{средние петли}}$, мкм	$c_{\text{средние петли}}$, см ⁻³	$R_{\text{малые петли}}$, мкм	$c_{\text{малые петли}}$, см ⁻³
Независимая обработка данных	10±1	0.5÷3.3·10 ³	0.45±0.01; 0.012±0.001	(1.12±0.01)·10 ⁷	0.45±0.01	(2.6±0.1)·10 ⁶	0.001÷ 0.033	7.3·10 ¹⁰ ÷ 7·10 ¹³
Комбинированная обработка (ДДКД)	8±0.8	(5±1)·10 ³	0.45±0.01; 0.012±0.01	(1.12±0.01)·10 ⁷	0.84±0.01	(8.4±1)·10 ⁶	0.035± 0.001	(2±0.1)·10 ¹¹

Как видно из таблицы, при независимой обработке результатов эксперимента в рамках динамической теории рассеяния удается более или менее надежно установить лишь характеристики дефектов средних размеров (дискообразных преципитатов кислорода (кластеров) с высотой h и дислокационных петель среднего радиуса), что объясняется частичной компенсацией вкладов в ПИИ от крупных и мелких дефектов, из-за их различного влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины рассеяния (дефекты с малыми размерами и большой концентрацией преимущественно увеличивают диффузную составляющую, а дефекты больших размеров и малой концентрации преимущественно уменьшают когерентную составляющую). При этом следует напомнить, что кинематическое описание подобных экспериментов в принципе невозможно, из-за рассмотренных выше законов сохранения и, как следствие, абсолютной нечувствительности кинематической картины рассеяния к любым видам искажений кристаллической

решетки на уровне интегральных отражательных способностей неидеальных кристаллов, а также ее низкой информативности (или полной неадекватности в условиях динамической дифракции) на уровне дифференциальных коэффициентов отражения. При комбинированной же обработке экспериментальных данных динамической дифрактометрии в различных условиях дифракции удастся однозначно и с достаточной точностью определить параметры всех четырех типов дефектов, одновременно присутствующих в кристалле, что существенно повышает информативность метода ИДДКД, в том числе, по сравнению с другими динамическими подходами.

Дополнительным преимуществом подхода, использованного выше для определения характеристик нескольких типов дефектов, является применение трехкристальной схемы дифракционного эксперимента. Это позволило в рамках метода ПИИ отдельно измерять интенсивности брэгговских и диффузных волн, т.е. напрямую определять оба структурночувствительных параметра динамической теории.

Следует подчеркнуть, что методы ДДКД позволяют «видеть» примеси с концентрацией меньшей, чем миллионные доли процента и смещения атомов, которые в миллион раз меньше, чем размеры самих атомов. Чувствительность наблюдений методами ДДКД структуры дефектов достигает микронанометров, обеспечивая возможность управляемых технологий даже на микронаноуровне.

В данной главе дано детальное изложение динамической теории для интегральных интенсивностей рассеяния и проведен анализ динамических экстинкционных эффектов как для когерентного, так и для диффузного рассеяния. Детально рассмотрен коэффициент экстинкции из-за диффузного рассеяния в случаях присутствия в кристалле как малых, так и больших дефектов с учетом двух областей рассеяния: Хуаня и Стокса-Вильсона. Представлены выражения для интегральных коэффициентов и факторов экстинкции в случае малых и

больших дефектов при малых эффектах экстинкции . Кроме того, в работе получены выражения для интегральных факторов экстинкции при больших эффектах экстинкции и произвольных размерах дефектов. Рассмотрение указанных случаев проводилось в геометриях дифракции по Лауэ и по Брэггу в приближениях толстого и тонкого кристаллов, в которых протекание дифракционных процессов в когерентной и в диффузной компонентах ПИИ существенно различно, что оговорено в соответствующих разделах.

Такое различие в условиях протекания дифракционных процессов обуславливает различный характер зависимостей компонент ПИИ от параметров эксперимента, таких как длина волны, толщина кристаллов, азимутальный угол и пр. Имея выражения для указанных случаев, а также соответствующие экспериментальные данные, проведение диагностики дефектов нескольких типов в кристаллах становится значительно надежнее и информативнее нежели в случае исследования какого-либо одного условия дифракции. Комбинированное использование различных условий дифракции для одного и того же образца представляет собой новое поколение диагностики, названное диффузодинамической комбинированной дифрактометрией [343,344,371, 372].

В данной работе рассмотрены в качестве примера дефекты кулоновского типа, а именно, дислокационные петли и сферические кластеры. Однако полученные выражения также использовались как базис для построения теоретических моделей в случаях других типов искажений кристаллической решетки, например таких, как упругий изгиб, нарушенный поверхностный слой, неравномерное распределение дефектов с глубиной и т.п., а также для построения динамических моделей в различных гетероструктурах [249].

Таким образом, в настоящей главе изложены теоретические основы для реализации нового метода интегральной диффузодинамической комбинированной дифрактометрии (ИДДКД).

В работе также проведен детальный сравнительный анализ информативных возможностей кинематической и динамической картин рассеяния на основе результатов соответственно кинематической и динамической теорий интегральных интенсивностей рассеяния и распределений интенсивностей в пространстве обратной решетки. Во-первых, установлено, что физической причиной, которая существенно ограничивает информативность кинематической картины рассеяния и описывающей ее теории, оказывается наличие двух интегральных параметров кинематической картины рассеяния и соответственно двух законов сохранения кинематической теории, а именно независимости полной интегральной интенсивности дифракционного отражения (первый параметр) от характеристик дефектов (первый закон) и отсутствия зависимости от условий дифракции удельного вклада в эту интегральную интенсивность ее диффузной составляющей (вторые соответственно параметр и закон сохранения).

Во-вторых, показано, что именно нарушение этих законов при динамической дифракции и ряд следствий из этого составляют физическую природу радикального повышения информативности ДДКД и обеспечивают появление возможности диагностики кристаллов с дефектами нескольких типов и многопараметрических наносистем при переходе от кинематической картины рассеяния к динамической. При динамической дифракции оба из введенных здесь параметров (первый – общая яркость отражения и второй – доля в общей яркости ее диффузной составляющей) становятся структурночувствительными и при этом многопараметрическими, т.е. зависящими от условий дифракции, а динамическая картина рассеяния становится многообразной. То есть для всех экспериментально возможных условий динамической дифракции существуют своя динамическая картина рассеяния и своя пара интегральных параметров (или их распределений в обратном пространстве) этой картины со своим (разным для различных условий дифракции) характером влияния дефектов кристалла как на саму картину

рассеяния в целом, так и на оба ее параметра в отдельности. На этой основе разработаны новые принципы повышения информативности диагностики и обеспечены новые функциональные возможности разработанных методов диффузно-динамической комбинированной дифрактометрии.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложено теоретическое обоснование нового способа управления рентгеновскими пучками при фокусировке в колеблющемся кристалле путем изменения амплитуды ультразвуковых колебаний и выбора соответствующей толщины кристалла. Показано, что возникающие при приклеивании пьезопреобразователей к непьезоэлектрическим кристаллам пространственно ограниченные упругие деформации, могут быть определены рентгеновскими способами.

2. Рассмотрены особенности дифракционного рассеяния Мессбауэровского излучения реальными кристаллами в рамках статистической теории, позволившие связать эффект «плато» на кривой качания кристалла гематита с особенностями интерференции диффузного и когерентного излучения.

3. Впервые рассмотрены модификации методов стоячих нейтронных волн с регистрацией вторичных гамма квантов и стоячих рентгеновских волн в колеблющихся кристаллах - с тепловым диффузным рассеянием. Показано, что информация от нескольких рефлексов- сателлитов с варьируемой ультразвуком длиной экстинкции позволяет повысить эффективность метода стоячих волн.

4. Разработана теория, описывающая механические и колебательные свойства углеродных нанотрубок (УНТ) и кремниевых нанопроводов и нанокомпозитов на их основе в зависимости от их размеров, степени совершенства и геометрии.

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

СПИСОК РАБОТ

1. Chukhovskii F.N., Nosik V.L., Iolin E.M. Dynamical scattering of x-rays in vibrating deformed crystals // JETPh .1993. V. 77. N. 1. P.102-111.
2. Nosik V.L. X-ray acoustic resonance in real crystal// Journal de Physique IV (Colloque C2) supplement au Journal de Physique III.1994. V. 4 . P. 2-225.
3. Nosik V. L. Vibrating Crystals as Elements of the Soft X-ray Optics// Crystallography Reports .1999. V. 44. N. 3, P. 388-399.
4. Grigoryan S. A., Kovalchuk M.V., and Nosik V. L. The Theory of Thermal Diffusion Scattering in Conditions of the Existence of a Standing X-Ray Wave in Oscillating Crystals // Surface Investigation . 2000. V. 15. P. 1141- 1151.
5. Nosik V. L. Statistical Theory of Dynamical Diffraction of Mössbauer Radiation// Crystallography Reports. 2002. V. 47. N. 1, P. 1-16.
6. Cerofolini G.F. , Arena G., Camalleri M., Galati C., Reina S., Renna L., Mascolo D., Nosik V. Strategies for nanoelectronics// Microelectronic Engineering. 2005. V. 81. P. 405–419.
7. Au Yeung T. C., Gu M. X., Sun Chang Q., Chen George C. K., Wong D. W. K., and Nosik V.. Impact of surface bond-order loss on phonon dispersion relations and thermal conductivity of cylindrical Si nanowires // Phys. Rev. B . 2006. 74. P. 155317-155324.

8. Gu M. X., Sun Chang Q., Chen Z., Au Yeung T. C., Li S., Tan C. M., and Nosik V. Size, temperature, and bond nature dependence of elasticity and its derivatives on extensibility, Debye temperature, and heat capacity of nanostructures // Phys. Rev. B .2007. V.75, P. 125403-125409.

9. Shpak A.P., Kovalchuk M.V., Molodkin V.B. , Nosik V.L. et al //Integral multi parameter diffractometry of nanosystems based upon the analysis of diffuse scattering //Advances in Physics of Metals. 2009.V.10, N 3. P. 229-281.

Шпак А.П., Ковальчук М.В., Молодкин В.Б., Носик В.Л. и др. Интегральная многопараметрическая дифрактометрия наносистем на основе эффектов многократности диффузного рассеяния // Успехи физики металлов. 2009. Т. 10, N 3. С. 229-281.

10. Molodkin V. B., Shpak A. P., Kovalchuk M. V., Nosik V. L., and Machulin V. F. Diffuse Dynamic Multiparameter Diffractometry: A Review// Crystallography Reports. 2010. V. 55, N. 7, P. 1122–1134.

11. Gaevskii A. Yu., Molodkin V. B., and Nosik V. L. . X ray Scattering from an Irregular Surface: Two Scale Model// Crystallography Reports .2010.V. 55, N. 7, P. 1135–1144.

12. Молодкин В. Б., Шпак А. П., Ковальчук М. В., Мачулин В. Ф., Носик В. Л. Многопараметрическая кристаллография на основе многообразности картины многократного рассеяния брэгговских и диффузных волн (метод стоячих диффузных волн) //УФН .2011. Т. № 7, С. 681–712.

13. Носик В. Л., Рудакова Е. Б. Перспективы секвенирования биомолекул при транслокации через нанопоры. I. Обзор методов//Кристаллография. 2013. Т.58, №.6. С804-821.

14. Nosik V.L. Formation of photoelectron holograms of crystals excited by synchrotron radiation// Crystallography reports. 2002. V.47. N2. P.165-173.

15. Nosik V.L. Determination of the parameters of rough surfaces from the dynamical X-ray diffraction data// Crystallography reports .2002. V.47. N2. P. 925-933.

16. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Ковальчук М.В., Носик В.Л. и др. Новые диагностические возможности деформационных зависимостей интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в условиях нарушения закона Фриделя // Металлофизика. Новейшие технологии. 2009. Т.31. №8. С. 1041-1049.

17. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Ковальчук М.В., Носик В.Л. и др. Новые диагностические возможности деформационных зависимостей интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в области К-края поглощения// Металлофизика. Новейшие технологии .2009. Т.31. №7. С. 927 - 945.

18. Носик В.Л. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе. 1. Фокусировка в идеальном кристалле. // Кристаллография .1994. Т.39. №4. С. 590-599.

19. Носик В.Л. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе. 11. Фокусировка в упруго изогнутом кристалле// Кристаллография .1994. Т.39. №6. С. 973-982.

20. Носик В.Л. Динамическая фокусировка рентгеновских лучей при рентгеноакустическом резонансе. 111. Фокусировка в вакууме. Кристаллография .1995. Т.40. №5. С. 789-800.

21. Nosik V.L. Statistical Theory of Diffraction of X-Ray and Light Waves in Periodic Substances //Crystallography Reports .2004. Т. 49. № SUPPL. 1. P.C239-251.

22. Nosik V.L., Kovalchuk M.V. X-Ray Optical Elements Based on Vibrating Crystals // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2001. Т. 16. № 1. С. 137-151.

23. Nosik V.L., Kovalchuk M.V. Formation of Neutron Standing waves at Dynamical Diffraction of Thermal Neutrons on Single Crystals// Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2001. V. 16. № 1. P. 189-204.

24. Nosik V.L., Kovalchuk M.V. On the Theory of X-Ray Standing waves in Vibrating Crystals// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. .1998. V. 405. № 2-3. P. 480-486.

25. Kovalchuk M.V., Aleshko-Ozhevskii O.P., Pisarevskii Yu.V., Nosik V.L., Solomko M.A., Suvorov E.V., Smirnova L.A. Investigation of Elastic Deformations in a Vibrating Crystals// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 1998. T. 405. № 2-3. C. 449-453.

26. I. Bukreeva, D. Pelliccia, A. Cedola, A. Sorrentino, F. Scarinci, M. Ilie, M. Fratini, V.E. Asadchikov, V.L. Nosik and S. Lagomarsino. Theoretical Analysis and Experimental Applications of X-ray Waveguides/Short Wavelength Laboratory Sources : Principles and Practices; Eds. Davide Bleiner, John Costello, Francois Dortan, Gerry O'Sullivan, Ladislav Pina, Alan Michette . Oxford/ Royal Society of Chemistry, 2014.-P 452.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. // УФН. 1972. Т. 107. № 2. С. 229-243.
2. Инденбом В.Л., Каганер В.М. // Металлофизика. 1979. Т. 1. № 1. С. 17-67.
3. Baryshevskii V.G., Skadorov V.V. // Phys. Status Solidi B. 1981. V. 108. №2. P. 631-634.
4. Барышевский В.Г., Завтрак С.Т., Скадаров В.В. // Кристаллография. 1983. Т. 28. № 3. С. 442-447.
5. Инденбом В. Л., Чуховский Ф.Н. // Кристаллография. 1971. Т. 16. №6. С. 1101-1109.
6. Афанасьев А.М., Кон В.Г. // ФТТ. Т. 19. № 6. С. 1775-1778.
7. Аристов В.В., Половинкина В.И., Шмытько И.М., Шулако Е.В.// Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 24. № 4. С. 712-717.
8. Инденбом В.Л., Слободецкий И.Ш., Труни К.Г. // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. № 3. С. 1110-1120.
9. Суворов Э.В., Половинкина В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т. 20. № 5. С. 326-337.
10. Сумбаев О.И. Кристалл-дифракционная гамма- спектроскопия. М.: Госатомиздат, 1963. 111с.
11. Блохин М.Л. Методы рентгено-спектральных исследований. М.: ГИФМЛ, 1959. 386 с.
12. Носик ВЛ. // Кристаллография. 1991. Т. 36. С. 1091-1198.
13. Entin I.R. //Phys. Status Solidi B. 1978. V. 90. P. 575-579.
14. Энтин И.Р. // Письма в ЖЭТФ. 1977. Т. 26. С. 392-395.
15. Энтин И.Р. // ФТТ. 1978. Т. 20. С. 1311-1322.
16. Носик В.Л. // Кристаллография. 1993. Т. 38. № 2. С. 44-51.

17. Габриэлян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г. // ЖТФ. 1980. Т. 50. № 8. С. 1641.
18. Indenbom V.L., Kaganer V.M. // Phys. Status Solidi A. 1990. V. 118. P. 71.
19. Nosik V.L. // J. de Phys. IV. Colloq. C2. Suppl. 1994 V. 4. P. C2.
20. Handbook on Synchrotron Radiation / Ed. Koch E.-E. V. 1A. 1983. New York: North-Holland, 1983.
21. Kushnir V.I., Suvorov E.V. // Phys. Status Solidi. 1982. V. 69. P. 483.
22. Chukhovskii F.N., Petrashen' P.V. // Acta Cryst. A 1977. V. 33. P. 311.
23. Дьюлесан Э., Руайе Д. Упругие волны в твердых телах. М.: Наука, 1982. 424 с.
24. Иолин Е.М., Райтман Э.А., Кувалдин Б.В., Золотоябко Э.В. //ЖЭТФ. 1988. Т. 94. В. 5. С. 218.
25. Zolotoyabko E., Panov V. // Acta Cryst. A. 1992. V. 48 P. 225.
26. Носик В.Л. // Кристаллография. 1994. Т. 39. № 4. С.722.
27. Боровский И.Б. // Докл. АН СССР. 1950 Т. 72 С. 487.
28. Гильварг А.Б. // Докл. АН СССР. 1950. Т. 72. С. 489.
29. Bonse U. // Z. fur Physik. 1964. V. 177. S. 529.
30. Bonse U. // Z. fur Physik. 1964. V. 177. S. 385.
31. Габриэлян К. Т., Чуховский Ф. Н., Пискунов Д.И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 3(9). С. 834.
32. Габриэлян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г. // ЖТФ. 1980. Т. 50. № 1. С. 3.
33. Габриэлян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г.// ЖТФ. 1980. Т. 50. №8. С. 1641.
34. Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела. М.: Гостехиздат, 1950. 300 с.

35. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981. 574 с.
36. Chukhovskii F.N., Gabrielyan K.T., Petrashen' P. V. // Acta Cryst. A. 1978. V. 34. P. 610.
37. Chukhovskii F.N., Shtolberg E.V. // Phys. Status Solidi. 1970. V. 41. N3. P. 815.
38. Чуховский Ф.Н., Носик В.Л., Иолин Е.М. // ЖЭТФ. 1993. Т. 104. Т. №1(7). С. 2452.
39. Габриэлян К. Т., Чуховский Ф. Н. // ЖТФ. 1982. Т. 52. № 10. С. 2127.
40. Brugger K. // Phys. Rev. A. 1964. V. 133. P. 1611.
41. Rutherford E., Andrade E. // Philos. Mag. 1914. V.P. 854.
42. Frille M. // Ann. der Phys. 1929. B. 1. S. 483.
43. Du-Mond J., Kirkpatrick H. // Phys. Rev. 1930. V. 2. P. 35, 136.
44. Du-Mond J. // Phys. Rev. 1937. V. 52. P. 872.
45. Johann H. // Z. fur Phys. 1931. B. 69. S. 185.
46. Cauchois J. // C.R. Acad. Sci. 1932. V. 194. P. 1479.
47. Van Hamos L. // Ann. der Phys. 1933. B. 5. S. 17,716.
48. Сумбаев О.И. Кристалл-дифракционные гамма спектрометры. М.: Госатомиздат, 1963. 111 с.
49. Sparks C. J. Jr., Ice G.E., Wong J., Batterman B. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1982. V. 194. P. 73.
50. Batterman B., Berman L. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1983. V. 208. P. 327.
51. Габриэлян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 3(9). С. 834.
52. Шустер А. Введение в теоретическую оптику. М: ОНТИ, 1935. 325 с.
53. Носик В.Л. // Кристаллография. 1994. Т. 39. № 4. С. 590.

54. Носик В.Л. //Кристаллография. 1994. Т. 39. № 6. С. 973.
55. Спенсер У. // Физическая акустика / Под ред. У. Мэзона. М.: Мир, 1973. Т. 5. С. 134.
56. Квардаков В.В., Соменков В.А., Тюгин А.Б. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 48. С. 396.
57. Квардаков В.В., Соменков В.А. // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 4. С. 235.
58. Kohler R., Mohling W., Peibst H. // Phys. Stat. Sol. (b). 1974. V. 61. P. 439.
59. Энтин И.Р.//I ЖЭТФ. 1979. Т. 77. С. 214.
60. Иолин Е.М., Энтин И.Р.// ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С. 1692.
61. Entin I.R. // Phys. Stat Sol. (b). 1985. V. 132. P. 355.
62. Entin I.R.// I Phys. Stat Sol. (a). 1988. V. 106. P. 25.
63. Носик В.Л. // Кристаллография. 1991. Т. 35. С. 1082.
64. Иолин Е.М., Райтман Э.А., Кувалдин Б.В., Золотоябко Э.В. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. Вып. 5. С. 218.
65. Zolotoyabko E., Panov V. // Acta Cryst. A. 1992. V. 48. P. 225.
66. Chukhovskii F.N., Petrashen' P.V. // Acta Cryst. A. 1977. V. 33. P. 311.
67. Balibar F., Chukhovskii F.N., Malgrange C. II Acta Cryst. A. 1989. V. 39. P. 387.
68. Kohler R., Mohling W., and Peibst H.// Phys. Stat. Sol. 61 (1974) 439.
69. Entin I.R. // JETPh .1979. V.77 .P. 214.
70. Iolin E.M. and Entin I.R. // JETPh.1983. V. 85. P.1692.
71. Aleshko-Ozhevskii O.P., Pogosyan A.S., Chukhovskii F.N. et al.// Soviet Kristallographia .1991. V. 39 . P. 159.
72. Nosik V.L. // Soviet Kristallographia.1993. V. 36. P.1096.
73. Iolin E.M., Raitman E.A., Kuvaldin B.V. and Zolotoyabko E.// JETPh.1988. V. 94. P. 218.

74. Zolotoyabko E. and Panov V. // Acta Cryst. 1992. V. B48. P. 225.
75. Chukhovskii F.N., Nosik V.L. and Iolin E.M. // JETPh. 1993. V. 104. P. 2452.
76. Chrupa V.I. // Metallophisika. 1991. V.13. P.49.
77. Афанасьев А.М., Каган Ю. // ЖЭТФ. 1965. Т.48. С. 327.
78. Hannon J.P., Trammell G.T. // Phys. Rev. 1968. V. 169. P. 315.
79. Black P.I., Moon P.B. // Nature. 1960. V. 188. P. 488.
80. Войтовецкий В.К., Корсунский И.Л., Новиков А.И. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т. 11. С. 149.
81. Смирнов Г.В., Семешкина Н.И., Скляревский В.В. и др. // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. С. 2214.
82. Burck U., Smirnov G.V., Mossbauer R.L. et al. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1978. V. 11. P. 2305.
83. Smirnov G.V., Sklyarevskii V.V., Artem'ev A.A. et al. // Phys. Lett. A. 1970. V. 32. P. 532.
84. Burck U., Mossbauer R.L., Gerdau E. et al. // Phys. Rev Lett. 1987. V. 59. P. 355.
85. Ruffer R., Gerdau E., Rutter H.D. et al. // Phys. Rev Lett. 1989. V. 63. P. 2677.
86. Kikuta S., Yoda Y., Hasegawa Y. et al. // Hyp. Int. 1992. V.71. P. 1491
87. Hastings J.B., Siddons D.P., Faigel G. et al. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 2252.
88. Champeney D.C. // Rep. Progr. Phys. 1979. V. 42. № 6. P. 1017.
89. Беляков В. Л. Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры. М.: Наука, 1988. 254С.
90. Андреева М.А., Кузьмин Р.Н. Мессбауэровская гамма-оптика. М.: Изд-во МГУ, 1982. 227 с.

91. Resonant Anomalous X-Ray Scattering // Eds Materlik G. et al. Amsterdam: North Holland Publish., 1994. Pt VI. 408 p.
92. Беляков В.А., Кузьмин Р.Н. Мессбауэрография. Новое в жизни, науке, технике. Сер. Физика. М.: Знание, 1979. № 1. 64 с.
93. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. М.: Физматлит, 2000. Часть 2. 493 с.
94. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Мир, 1975. 398 с.
95. Григорян С. А., Ковальчук М.В., Носик В Л. // **Поверхность. 1999. Т. 8. С. 5.**
96. Bardhan P., Cohen J.B. // Acta Cryst. A. 1976. V. 32. P. 597.
97. Suzuki C.K., Ohno H., Takei H. et al. // Rev. Sci. Instrum. 1992. V. 63. P. 1206.
98. Suzuki C.K., Takei H., Sakai F. et al. // Japan. J. Appl. Phys. 1993. V. 32. P. 3900.
99. Бекон Дж. Дифракция нейтронов. М.: Изд-во иностр. лит., 1967. 256 с
100. Задачи по физике твердого тела // Под ред. Голдсмита Г. М.: Наука, 1976. 431 с.
101. Afanas'ev A.M., Kagan Yu. // Acta Cryst. A. 1967. V. 24. P. 164.
102. Афанасьев А.М., Каган Ю. // ЖЭТФ. 1967. Т. 25. С. 124.
103. Давыдов А.С. Теория атомного ядра. М.: Физматлит, 1958. 611 с.
104. Львов В.С. Нелинейные спиновые волны. М.: Наука, 1987. 272 с.
105. Займан Дж. Модели беспорядка. М.: Мир, 1982. 591 с.
106. Тулин В.А. // Физика низких температур. 1979. Т. 5. С. 965.
107. Браут Р. Фазовые переходы. М.: Мир, 1967. 263 с.
108. Bethe H.A. // Proc. Roy. Soc. A. 1935. V. 216. P. 45.

109. Graph Theory and Theoretical Physics // Ed. Harary F. London: Acad. Press, 1967. 308 p.
110. Kadanoff L.P. // Phase Transitions and Critical Phenomena // Ed. Domb C., Green M.S. London: Acad. Press, 1976. V. 5a. P. 1.
111. Kato N. // Z. Naturforsch. A. 1973. B. 28. S. 604.
112. Kato N. // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. P. 763.
113. Kato N. // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. P. 770.
114. Goodman J.W. Statistical Optics. New York: John Willey and Sons, 1985. 304 p.
115. Zhao J. Ph. D. Thesis. Study of Nuclear-resonant Bragg Scattering from Synthetic 2.2% and 95% Fe⁵⁷ Hematite Single Crystal. Tsukuba, Japan, 1996. 132 p.
116. Yamamoto S., Zhang X.W., Kitamura H. et al. // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. P. 500.
117. Поляков А.М., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. № 2. P. 589.
118. Dederichs P.H. // Phys. Rev. B. 1970. V. 1. P. 1306.
119. Punegov V.I. // Sov. Phys. Solid State. 1991. V. 33(1). P. 136.
120. Bushuev V.A. // Sov. Phys. Solid State. 1989. V. 31. P. 1877.
121. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных сотрудников и инженеров. М.: Наука, 1973. 831 с.
122. Stearns D.G. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. P. 491.
123. Rohrbach A., Singer W. // J. Opt. Soc. Am. 1998. V. A15. P. 2651.
124. Nevot L., Croce R. // Revue Phys. Appl. 1980. V. 15, P. 761.
125. Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff S., Stanley H.B. // Phys. Rev. 1988. V. B38. P. 2297.
126. de Boer D.K.G. // Phys. Rev. 1996. V. B53. P. 6048.

127. Бреховских Л.М.// ЖЭТФ. 1952.Т. 23. С. 275, 289.
128. Elfouhaily T.M., Guerin C.A. //Waves in Random and Complex Media. 2004. V. 14, P. R1.
129. Басс Ф.Г., Фукс И.М. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности (Москва, Наука, 1972. – 424 с.)
130. Воронович А.Г.// ЖЭТФ. 1985.Т. 89, В. 1(7). С. 116.
131. Visser T.D., Carney P.S., Wolf E. //Phys. Lett. A. 1998. V. 249. P. 243.
132. Борн М., Вольф Э.. Основы оптики. М: Наука, 1973. 689с.
133. Мандель Л., Вольф Э.. Оптическая когерентность и квантовая оптика. М: Физматлит. 2000. 896 с.
134. Beckmann P., Spizzichino A. The scattering of electromagnetic waves from rough surfaces. Oxford – London – N.Y.– Paris, Pergamon Press, 1963, 504 p.
135. Ishimaru A. Wave propagation and scattering in random media. Vol. I: Single scattering and transport theory. N.Y., Academic Press, 1978, 576 p.
136. Tolan M., Press W., Brinkop F., Kotthaus J.P.// Phys. Rev.1995. V. B51. P. 2239.
137. Кривоглаз М.А. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наук. думка, 1983, 408 с.
138. Knowles J.W.//Acta Cryst.1956/ V.9. P.61.
139. Dingreville R., Qu J. M., and Cherkaoui M.// J. Mech. Phys. Solids. 2005. V. 53.P. 1827.
- 140 . Gerberich W. W., Mook W. M., Perrey C. R., Carter C. B., Baskes M. I., Mukherjee R., Gidwani A., Heberlein J., Mc-Murry P. H., and Girshick S. L.// J. Mech. Phys. Solids.2003. V. 51. P. 979.
141. Jing G. Y., Duan H. L., Sun X. M., Zhang Z. S., Xu J., Li Y. D., Wang J. X., and Yu D. P.// Phys. Rev. B. 2006. V. 73. P. 235409.

142. Broughton J. Q., Meli C. A., Vashishta P., and Kalia R. K.// Phys. Rev. B.1997.V. **56**. P. 611.
143. Jing G. Y., Ji H., Yang W. Y., Xu J., and Yu D. P.// Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.2006. V. **82**. P. 475.
144. Sun C. Q. et al.// J. Appl. Phys. 2001. V.**90**.P. 2615.
145. Miller R. E. and Shenoy V. B.// Nanotechnology.2000. V. **11**.P. 139.
146. Chen C. Q., Shi Y., Zhang Y. S., Zhu J., and Yan Y. J.// Phys. Rev. Lett. 2006. V.**96**. P. 075505.
147. Kulkarni A. J., Zhou M., and Ke F. J.// Nanotechnology.2005. V.**16**. P. 2749.
148. Song J., Wang X., Riedo E., and Wang Z. L.// Nano Lett. 2005.V. **5**.P. 1954.
149. Bai X. D., Gao P. X., Wang Z. L., and Wang E. G.// Appl. Phys. Lett. 2003. V. **82**.P. 4806.
150. Yum K., Wang Z., Suryavanshi A. P., and Yu M. F.// J. Appl. Phys. 2004. V. **96**.P. 3933.
151. Kopycinska-Muller, Geiss R. H., Muller J., and Hurley D. C. // Nanotechnology. 2005. V. **16**. P. 703.
152. Price W. J., Leigh S. A., Hsu S. M., Patten T. E., and Liu G. Y.// J. Phys. Chem. 2006.V. **A110**.P. 1382.
153. Nilsson S. G., Borrise X., and Montelius L.// Appl. Phys. Lett. 2004. V.**85**.P. 3555.
154. Li X., Ono T., Wang Y., and Esashi M.// Appl. Phys. Lett. 2003. V.**83**.P. 3081.
155. Li X., Wang X., Xiong Q., and Eklund P. C.// Nano Lett. 2005.V. **5**, P. 1982.
156. Gaire C., Ye D. X., Tang F., Picu R. C., Wang G. C., and Lu T. M.// J. Nanosci. Nanotechnol.2005.V. **5**, P.1893.

157. Wu B., Heidelberg A., and Boland J. J.// Nat. Mater. 2005.V.4.P. 525.
158. Wu B., Heidelberg A., Boland J. J., Sader J. E., Sun X., and Li Y.// Nano Lett. 2006. V.6. P. 468.
159. Dodd S. P., Saunders G. A., Cankurtaran M., and James B.// J. Mater. Sci. 2001. V.36.P. 723 .
160. Haque M. A. and Saif M. T. A. // Thin Solid Films.2005. V. 484.P. 364.
161. Szuecs F., Werner M., Sussmann R. S., Pickles C. S. J., and Fecht H. J.// J. Appl. Phys. 1999.V.86.P. 6010.
162. Wu Y. H., McGarry F. J., Zhu B. Z., Keryk J. R., and Katsoulis D. E.// Polym. Eng. Sci. 2005. V. 45.P. 1522.
163. Liang H., Upmanyu M., and Huang H.// Phys. Rev. 2005. V. B71.P. 241403R.
164. Shim H. W. et al.// Appl. Phys. Lett. 2005. V. 86.P. 151912.
165. Cuenot S., Fretigny C., Demoustier-Champagne S., and Nysten B.// Phys. Rev. 2004. B69. P. 165410.
166. Shenoy V. B.// Phys. Rev. 2005. V.B71.P. 094104.
167. Guo J. G. and Zhao Y. P.// J. Appl. Phys. 2005. V. 98.P. 074306.
168. Wu H. A.// Mech. Res. Commun. 2006. V.33.P. 9.
169. Sun C. Q., Shi Y., Li C. M., Li S., and Au T. C. Yeung// Phys. Rev. 2006. B3.P. 075408.
- 170 . Sun C. Q., Pan L. K., Li C. M., and Li S.// Phys. Rev. 2005. V. B72.P. 134301.
171. Sun C. Q. // Prog. Solid State Chem. 2007. V. 35.P. 1.
172. Sun C. Q., Li C. M., Li S., and Tay B. K.// Phys. Rev. 2004. V. B69.P. 245402.
173. Born M.// J. Chem. Phys.1939.V. 7. P. 591.

174. Eskin D. G., Suyitno, and Katgerman L.// Prog. Mater. Sci.2004.V. **49**.P. 629.
175. Campbell J. Castings. Oxford :Butterworth-Heinemann. 1991. 321P.
176. Gysin U., Rast S., Ruff P., Meyer E., Lee D. W., Vettiger P., and Gerber C.// Phys. Rev. 2004. V.**69**.P. 045403.
177. Wachtman J. B., Tefft W. E., Jr., and Lam D. G.// Phys. Rev. 1061. V.**122**.P. 1754.
176. Bruls R. J., Hintzen H. T., de With G., and Metselaar R.// J. Eur. Ceram. Soc. 2001.V. **21**.P. 263.
177. Anderson O. L.// Phys. Rev. 1966 . V .**144**.P. 553.
178. Brazhkin V., Dubrovinskaia N., Nicol M., Novikov N., Riedel R., V. Solozhenko, and Zhao Y.// Nat. Mater. 2004. V. **3**. P. 576.
179. Couchman P. R. and Karasz F. E. // Phys. Lett.1977. V. **62A**.P. 59.
180. Balerna A. and Mobilio S.// Phys. Rev. 1986. V. **B34**.P. 2293.
181. Zhao Y. H. and Lu K. // Phys. Rev.1997. V. **B56**.P. 14330.
182. Yang C. C., Xiao M. X., Li W., and Jiang Q.// Solid State Commun. 2006. V.**139**.P. 148.
183. Blackman M.// Proc. R. Soc. London.1935. Ser. A **148**.P. 365.
184. Killean R. C. G. and Lisher E. J.// J. Phys. 1975. V. **C8**.P. 3510.
185. Peng S. and Grimvall G.// J. Phys. Chem. Solids.1994. V.**55**.P. 707.
186. Martin C. J. and O'Connor D. A.// J. Phys. 1977. V. **C 10**.P. 3521.
187. Lindemann F. A., Phys. Z. 1910. V. **11**.P. 609.
188. Novotny V., Meincke P. P. M., and Watson J. H. P.// Phys. Rev.Lett. 1972. V. **28**.P. 901.
189. Song Q., Zheng C., Xia S., and Chen S.// Microelectron. J. 2004. V. **35**.P. 817.

190. Lu Y., Song Q. L., and Xia S. H.// *Chin. Phys. Lett.* 2005. V. **22**.P. 2346.
191. Yu J., Tan Z. A., Zhang F. T., Wei G. F., and Wang L. D.// *Chin. Phys. Lett.* 2005.V. **22**.P. 2429.
192. Lu K.// *Mater. Sci. Eng.*1996. V. R.**16**.P. 161.
193. Prasher R. S. and Phelan P. E.// *Int. J. Heat Mass Transfer.*1991. V. **42**.P. 1991.
194. Chen B., Penwell D., Benedetti L. R., Jeanloz R., and Kruger M. B.// *Phys. Rev.* 2002. B**66**.P. 144101.
195. Qadri S. B., Yang J., Ratna B. R., Skelton E. F., and Hu J. Z.// *Appl. Phys. Lett.* 1996.V. **69**.P. 2205.
196. Lu L., Sui M. L., and Lu K.// *Science.*2000.V. **287**.P. 1463.
197. Siow K. S., Tay A. A. O., and Oruganti P.// *Mater. Sci. Technol.*2004.V. **20**.P. 285.
198. Ono N., Nowak R. and Miura S.// *Mater. Lett.*2004. V. **58**.P. 39.
199. Schiotz J., Vegge T., Di Tolla F. D., and Jacobsen K. W., *Phys.Rev.*1999. V. B **60**.P. 11971.
200. Krasilnikov N. A., Pakiela Z., Lojkowski W., and Valiev R. Z.// *Solid State Phenom.* 2003. V. **94**.P. 51.
201. Duckham A., Zhang D. Z. , Liang D., Luzin V., Cammarata R. C., Leheny R. L., Chien C. L., and Weihs T. P.// *Acta Mater.* 2003.V. **51**.P. 4083.
202. Kury P. and Horn-von M. // *Rev. Sci. Instrum.* 2004.V.**75**.P. 1357.
203. Burenkov Y. A. and Nikanorov S. P. // *Sov. Phys. Solid State.* 1974. V. **16**.P. 963.
204. Huang J. Y., Chen S., Wang Z. Q., Kempa K., Wang Y. M., Jo S. H., Chen G., Dresselhaus M. S., and Ren Z. F.// *Nature (London).*2006. V. **439**.P. 281.
205. de Deus J. F., Tavares A. C., Lepienski C. M., and Akcelrud L.// *Surf. Coat. Technol.* 2006. V. **201**.P. 3615.

206. Duan X. F., Niu C. M., Sahi V. et al// Nature (London).2003.V. **425**. P. 274.
207. Cui Y., Zhong Z. H., Wang D. L., Wang W. U., and Lieber C. M.// Nano Lett. 2003. V.**3**.P. 149.
208. Hahm J. and Lieber C. M. // Nano Lett.2004.V. **4**.P. 51.
209. Chen C. Q., Shi Y., Zhang Y. S., Zhu J., and Yan Y. J.// Phys. Rev. Lett. . 2006. V. **96**.P. 075505.
210. Li D., Wu Y. Y., Kim P., Shi L., Yang P. D., and Majumdar A.// Appl. Phys. Lett. 2003.V. **83**.P. 2934.
211. Fujii M., Zhang X., Xie H., Ago H., Takahashi K., Ikuta T., Abe H., and Shimizu T.// Phys. Rev. Lett. 2005.V. **95**.P. 065502.
212. Huxtable S. T., Abramson A. R., Tien C. L., and Majumdar A.// Appl. Phys. Lett. 2002. V. **80**.P. 1737.
213. Liu W. J. and Asheghi M.// J. Heat Transfer.2006. V.**128**.P. 75.
214. Chen Y. F., Li D. Y., Lukes J. R., and Majumdar A.// J. Heat Transfer. 2005.V. **127**.P. 1129.
215. Chung J. D., McGaughey A. J. H., and Kaviany M.// ASME J. Heat Transfer.2004. V. **126**.P. 376.
216. Mingo N. and Broido D. A.// Phys. Rev. Lett. 2004.V. **93**.P. 246106.
217. Mingo N. // Phys. Rev. 2003.V.**B68**.P. 113308.
218. Balandin A. and Wang K. L.// Phys. Rev. 1998. V. B **58**.P. 1544.
219. Zou J. and Balandin A.// J. Appl. Phys. 2001.V. **89**.P. 2932.
220. Liang L. H. and Li B.// Phys. Rev. 2006. V.**B73**.P. 153303.
221. Sun C. Q., Prog. Solid State Chem., doi: 10.1016 /j.progsolidstchem.2006.03.001 (2006).
222. Sun C. Q., Li S., and Li C. M.// J. Phys. Chem. 2005.V. **B109**. P. 415.
223. Au Yeung T. C., Sun C. Q., Chiam T. C., R. Ramanathan, Shangguan W. Z., and Kam C. H.// J. Appl. Phys. 2005. V. **98**.P. 104308.

224. Sun C. Q., Li C. M., Bai H. L., and Jiang E. Y.// *Nanotechnology*. 2005.V. **16**.P. 1290.
225. Stroschio M. A., Sirenko Y. M., Yu S., and Kim K. W.// *J. Phys.: Condens. Matter*.1996. V.**8**.P. 2143.
226. Asen-Palmer M., Bartkowski K., Gmelin E., Cardona M., Zhernov A. P., Inyushkin A. V., Taldenkov A., Ozhogin V. I., Itoh K. M., and Haller E. E.// *Phys. Rev.*1977. V. B **56**.P. 9431.
227. Chantrenne P., Barrat J. L., Blasé X., and Gale J. D.// *J. Appl. Phys.* 2005. V. **97**.P. 104318.
228. Wilhelm Conrad Röntgen, Nobel Lectures, Physics 1901-1921. Amsterdam: Elsevier Publishing Company. 1967.
229. Von Laue M., Rontgenstrahlinterferezen. Leipzig: Akademische Verlagsges: 1948. p. 410.
230. Hammond R., *The Basics of Crystallography and Diffraction*. 2nd ed. (London: Oxford University Press: 2001), p. 320.
231. James R. W.// *Solid State Phys.* 1963. V.**15**. P. 55.
232. Batterman B. W. and Cole H.// *Rev. Mod. Phys.*1964. V. **36**.P. 681.
233. Ахиезер А.И., Померанчук И.Я. Некоторые вопросы теории ядра. ОГИЗ. 1948. 689С.
234. Krivoglaz M. A. *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals*. Berlin: Springer.1996. p. 466.
235. Молодкин В. Б. , Тихонова Е. А.// *ФММ*.1967. Т. **24**. № 3.С. 385.
236. Молодкин В. Б.// *ФММ*.1968. Т. **25**. № 3.С. 410.
237. Молодкин В. Б.// *ФММ*.1969. Т. **27**. № 4.С. 582.
238. Молодкин В. Б.// *Металлофиз.* 1980. Т. **2**, № 1.С. 3.
239. Molodkin V. B. // *Phys. Metals*. 1981. V. **3**.P. 615.

240. Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., and Osinovskii M. E. //Phys. Metals. 1984. V. **5**.P. 1.
241. Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., and Osinovskii M. E. //Phys. Metals.1985. V. **5**. P. 847.
242. Kochelab V. V., Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., and Osinovskii M. E.// Phys. Stat. Solidi A.1988. V. **108**. No. 1.P. 67.
243. Даценко Л. И. , Молодкин В. Б., Осиновский М. Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. Киев: Наукова думка. 1988. 200С.
244. Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., Kislovskii E. N., Len E. G. et al.// Phys. Stat. Solidi B.2001. V. **227**. No. 2.P. 429.
245. Olikhovskii S. I., Molodkin V. B., Kislovskii E. N., Len E. G. et al.// Phys. Stat. Solidi B. 2002. V. **231**. No. 1.P. 199.
246. Олиховский С. И., Молодкин В. Б., Кононенко О. С., Катасонов А. А. и др.// Металлофиз. новейшие технол. 2007. Т. **29**, № 7.С. 887.
247. Олиховский С. И., Молодкин В. Б., Кононенко О. С., Катасонов А. А. и др.// Металлофиз. новейшие технол. 2007. Т. **29**, № 9.С. 1225.
248. Олиховский С. И., Молодкин В. Б., Низкова А. И., Кононенко О. С. и др.// Металлофиз. новейшие технол. 2007. Т.**29**. № 10.С. 1333.
249. Молодкин В. Б., Низкова А. И., Шпак А. П., Мачулин В. Ф. и др. Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов. Киев: Академперіодика. 2005. 430С.
250. Molodkin V. B., Kovalchuk M. V., Shpak A. P., Olikhovskii S. I. et al. Dynamical Bragg and Diffuse Scattering Effects and Implications for Diffractometry in the Twenty-First Century. // In Book “Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials”. MOMENTUM PRESS: New Jersey. 2009. p. 401-442.

251. Шпак А. П., Ковальчук М. В., Карнаухов И. М., Молодкин В. В. и др.// Успехи физ. мет. 2008. т. **9**, С. 305–356/

252. Шпак А.П., Ковальчук М.В., Низкова Г.І., Гінько І.В. та ін. “Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів.” (Патент України № 36075. Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.10.2008 р)

253. Багов А.Н., Динаев Ю.А., Дышеков А.А., Оранова Т.И. и др. Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур. Нальчик: Каб.-Балк. Ун-т, 2008. 206 с.

254. Shpak A.P., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kyslovskyy Ye.M. et al// Phys.stat.sol.(a). 2007. V. **204**. No.8.P. 2651.

255. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Fodchuk I.M. at al// Phys. Stat. Solidi A. 2007. V. **204**. No. 8. P. 2606.

256. Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика. Москва: Наука. 1982.386С.

257. Тихонова Е. А.// ФТТ/1967. Т.9, №2.С. 516.

258. Dederichs P. H.// Phys. Rev. B.1970. V. **1**. No.4.P. 1306.

259. Немошкаленко В. В., Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Кисловский Е. Н. и др.// Металлофиз. новейшие технол. 2000. Т. **22**, №2.С. 51.

260. Оліховський С. Й., Кисловський Є. М., Молодкін В. Б., Лень Є. Г. и др.// Металлофиз. новейшие технол. 2000. Т. **22**, №6.С. 3.

261. Барьяхтар В. Г., Гаврилова Е. Н., Молодкин В. Б., Олиховский С. И.// Металлофизика.1992. Т. **14**. №11.С. 68.

262. Nemoshkalenko V. V., Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., Kovalchuk M. V. et al// Nucl. Instrum. and Meth. in Physics Research A.1991. V. **308**. №1.P.294.

263. Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Дмитриев С. В., Лень Е. Г., Первак Е. В.// Металлофиз. новейшие технол. 2006.Т. **28**, №7.С. 953.

264. Молодкин В. Б., Дмитриев С. В., Первак Е. В., Белоцкая А. А., Низкова А. И.// *Металлофиз. новейшие технол.*2006. Т. **28**, №8.С. 1047.
265. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Дмитриев С.В., Первак Е.В. и др.// *Металлофиз. новейшие технол.*2008. Т. **30**, №9.С. 1189.
266. Даценко Л. И., Кисловский Е. Н.// *УФЖ.*1975. Т.**20**, №5.С. 810.
267. Datsenko L.I., Kislovsky E.N., and Prokopenko I.V.//*Ukr. Fiz. Zh.*1977. Т. **22**.С. 513.
268. Молодкин В. Б., Гудзенко Г. И., Олиховский С. И., Осиновский М. Е.// *Металлофизика.*1983. Т. **5**, № 3.С. 10.
269. Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Осиновский М. Е., Гуреев А. Н. и др.// *Металлофизика.*1984. Т. **6**, № 2.С. 18.
270. Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Осиновский М. Е., Гуреев А. Н. и др.// *Металлофизика.*1984. Т. **6**, № 3.С. 105.
271. Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., Osinovskii M. E., Gureev A. N. et al// *Phys. Status Solidi (a).*1985. V. **87**, No. 2.P. 597.
272. Nemoshkalenko V. V., Molodkin V. B., Kislovskii E. N., and Kogut M. T. // *Металлофизика.* 1994. Т. **16**, № 2.С. 48.
273. Шпак А. П., Молодкин В. Б., Низкова А. И.// *УФМ.* 2004. Т. **5**, № 1.С. 51.
274. Низкова А. И., Молодкин В. Б., Московка И. А.// *Металлофиз. новейшие технол.* 2004 .Т. **26**, № 6.С. 783.
275. Шпак А. П., Молодкин В. Б., Низкова А. И.// *Успехи физ. мет.* 2004. Т. **5**, № 1.С. 51.
276. Молодкин В. Б., Немошкаленко В. В., Низкова А. И., Олиховский С. И. и др.// *Металлофиз. новейшие технол.*2000. Т. **22**, № 3.С. 3.
277. Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Дмитриев С. В., Лень Е. Г. и др.// *Металлофиз. новейшие технол.* 2005. Т. **27**, № 12.С. 1659.

278. Molodkin V. B., Olikhovskii S. I., Kislovskii E. N., Vladimirova T. P. et al// Phys. Rev. 2008. V. B **78**.P. 224109.

279. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Ковальчук М.В., Носик В.Л. и др.// Металлофиз. новейшие технол.2009. Т. **31**, №5.С. 607.

280. Шпак А.П., В.Б. Молодкин, М.В. Ковальчук, В.Л. Носик и др.// Металлофиз. новейшие технол. .2009. Т.31. №8. С. 1041-1049.

281. Шпак А.П., Ковальчук М.В., Носик В.Л. , Молодкин В.Б. и др. // Металлофиз. новейшие технол. 2009. Т.31. №7. С. 927 - 945.