УДК 539.261

РАРАНСЬКИЙ М.Д., ФОДЧУК І.М., БОБРОВНИК С.В.

МОДЕЛЮВАННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ МУАРОВИХ ЗОБРАЖЕНЬ ДЕФЕКТІВ В КРЕМНІЇ

Представлені основні моменти теорії формування муарових зображень дефектів в трьохкристальній інтерферометрії. Використано ейкональне двохвильове наближення, в якому вектор дифракції є функцією просторових координат і відіграє роль повільно змінного показника заломлення в оптиці.

Рентгенівська інтерферометрія на даний час є дуже потужним засобом дослідження медичних та біологічних зразків у фазовій томографії. При цьому на якість інтерференційних зображень дуже суттєво впливають дефекти структури та макродеформації, які присутні в пластинах інтерферометра [1]. Не менш важливим є врахування розподілу фази в рентгенівських пучках, які інтерферують в аналізаторі інтерферометра. Тому дослідження впливу різноманітних факторів на формування муарових зображень є практично важливим завданням.

Мета даної роботи полягала в теоретичному дослідженні закономірностей і механізмів формування інтерферометричних зображень дефектів в реальних кристалах.

Розглянемо принцип моделювання рентгенівських інтерферограм, який полягає у знаходженні комплексних амплітуд заломленої і дифрагованої хвиль у кожній точці кристалу. Рентгенівські промені спочатку проходять через розчеплювач S, потім по двох шляхах через дзеркало M та інтерферують в аналізаторі A. При цьому принципове значення має різниця фаз, з якими інтерферуючі хвилі приходять на поверхню кристалу-аналізатора. Знаючи її та зміну періодів муарових смуг, можна досліджувати вплив тих чи інших факторів на формування інтерферометричного поля.

Для спрощення розрахунків можна вважати, що після проходження перших пластинок в третьому кристалі аналізаторі накладаються тільки дві плоскі, когерентні хвилі однакової інтенсивності. Тоді муарова картина виникатиме при наступній суперпозиції амплітуд [2]:

$$I_M^I = E_{oh}^I E_{oh}^{I*} = (E_o^{II} + E_h^I)(E_o^{II*} + E_h^{I*}) \qquad (1)$$

$$I_M^{II} = E_{oh}^{II} E_{oh}^{II*} = (E_o^I + E_h^{II})(E_o^{I*} + E_h^{II*}) \qquad (2)$$

Врахуємо те, що в слабо деформованих кристалах амплітуди хвильових полів є повільно змінними і формування муарової картини пов’язано, в основному, із фазовою невідповідністю інтерферуючих в аналізаторі хвильових полів. Це дає змогу використати ейкональне наближення теорії Като [3]. В даній теорії вектор дифракції є функцією просторових координат і відіграє роль повільно змінного показника заломлення в оптиці. В оптиці для середовищ з плавно змінними характеристиками неоднорідностей широко використовується так зване хвильове наближення (розмір неоднорідності L повинен значно перевищувати довжину хвилі λ). В рентгенівському випадку такий критерій має дещо жорсткіші границі. Тут необхідно, щоб $L>\Lambda$, де Λ - екстинкційна довжина. Такий підхід дає змогу виділити в амплітудах E_0 і E_h швидко змінні фазові множники:

$$\hat{E} = \begin{pmatrix} E_0 \\ E_h \end{pmatrix} = e^{iS^+(x,z)}\hat{\Psi}^+(x,z) + e^{iS^-(x,z)}\hat{\Psi}^-(x,z), \qquad (3)$$

де S^+ і S^- два ейконала (фази), які відповідають двом різним листам дисперсійної поверхні, перший з яких пов’язаний з сильним поглинанням випромінювання, а другий - з слабким [3].

Моделюванні картин муару проводилось для загального випадку, коли поле зміщень дефекту складним чином залежить від координат. Для знаходження комплексних амплітуд хвиль на виході з аналізатора можуть бути використані так звані рівняння Такагі для опису розповсюдження рентгенівських променів у деформованому кристалі [3]:

$$(D_S + D)\hat{E} = 0\,. \tag{4}$$

Існування нетривіального нульового розв’язку рівняння $D_S\hat{\psi} = 0$ вимагає, щоб детермінант матриці D_S був рівний нулю, тобто

$$D_S = \begin{pmatrix} -\left(\dfrac{\partial S}{\partial x} + \dfrac{\partial S}{\partial z}\right) & \dfrac{1}{2}\chi_h C \\ \dfrac{1}{2}\chi_h C & \left(\dfrac{\partial S}{\partial x} - \dfrac{\partial S}{\partial z}\right) - 2\alpha(\vec{r}) \end{pmatrix},$$

$$D = \begin{pmatrix} i\left(\dfrac{\partial}{\partial z} + \dfrac{\partial}{\partial x}\right) & 0 \\ 0 & i\left(\dfrac{\partial}{\partial z} - \dfrac{\partial}{\partial x}\right) \end{pmatrix}. \tag{5}$$

В розгорнутому вигляді ця умова для ейконалів S^+ і S^- є рівнянням в частинних похідних першого порядку:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial z} + \alpha(\vec{r})\right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial x} - \alpha(\vec{r})\right)^2 = \tilde{\chi}^2\,, \tag{6}$$

де $\tilde{\chi} = \frac{1}{2}|C|(\chi_h\chi_{\bar{h}})$, $\alpha(\vec{r}) = \alpha_0 - 2\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right)(\vec{H}\vec{u})$, a_0 характеризує розорієнтацію кристалу як цілого, $\vec{H}$ - вектор дифракції, $\vec{u}$ - векторне поле зміщень.

Рівняння (6) аналогічне одномірному релятивістському рівнянню Гамільтона-Якобі для частки масою $\pm\tilde{\chi}$ в деякому змінному зовнішньому полі. Відмінність полягає в тому, що в (5) цей коефіцієнт комплексний $\tilde{\chi} = \chi - i\gamma$ і, як наслідок, траєкторії і ейконал також є комплексними. Фізично це пов’язано із затуханням хвильового поля в кристалі. У випадку довільних χ і γ рівняння (6) представляють собою систему двох нелінійних рівнянь відносно дійсної і уявної частини ейконала $S = s + iq$. Обставина, що для рентгенівських хвиль $s > q$, дозволяє вважати уявну ейкональну частину малою в порівнянні з її дійсною частиною. Використовуючи загальний метод теорії наближень і опускаючи громіздкі проміжні викладки, отримаємо рівняння, які дозволяють однозначно визначити в нульовому і першому наближенні зміну амплітуди поля вздовж траєкторії, якщо відомі початкові значення E_0 і E_h на вхідній поверхні кристалу:

$$\hat{E} \approx \sum_{\delta=1,2} e^{i\frac{\chi_h}{2}S^{(\delta)}} \left(\hat{E}^{(\delta,0)} + \hat{E}^{(\delta,1)}\right)$$

$$E_0 = e^{i\left(\frac{c_h}{2}-\frac{a}{4}\right)}\left[\frac{1}{2}+\frac{i}{4\chi_h}P_1(\alpha,z)\right]+e^{-i\left(\frac{c_h}{2}+\frac{a}{4}\right)}\left[\frac{1}{2}-\frac{i}{4\chi_h}P_1(\alpha,z)\right]+$$

$$+e^{i\left(\frac{c_h}{2}-\frac{a}{4}\right)}\frac{P_2(\alpha,z)}{0.5i\chi_h} - e^{-i\left(\frac{c_h}{2}+\frac{a}{4}\right)}\frac{P_2(a,z)}{0.5ic_h};$$

$$E_h = e^{i\left(\frac{c_h}{2}-\frac{a}{4}\right)}\left[\frac{1}{2}+\frac{i}{4c_h}P_1(a,z)\right] - e^{-i\left(\frac{c_h}{2}+\frac{a}{4}\right)}\left[\frac{1}{2}-\frac{i}{4c_h}P_1(a,z)\right],$$

де $$P_1(a,z) = \frac{a^2}{8}+a'_x z\left(\frac{az}{8}+\frac{a'_x z^2}{24}+i\right)+\frac{ia''_{xx}z^2}{4},$$

$$P_2(a,z) = \frac{i}{4}\left(a + a'_x z\right) \qquad (10)$$

Зауважимо, що перша складова рівняння (10) відповідає зображенню електронного мікроскопу, друга і третя складові, відповідно, відхиленню і фокусуванню (дефокусуванню) променів при їх проходженні через середовище зі змінним показником заломлення.

В загальному випадку, коли поле зміщень дефекту складним чином залежить від координат, фаза, що набігає по одному з шляхів розповсюдження, визначається функцією локальних розорієнтацій, яка не володіє парністю щодо зміни напрямку вектора дифракції.

Таким чином, підставляючи формули (8) і (9) у співвідношення (1) і (2) з врахуванням (10) і (11) отримуємо можливість моделювання інтерферометричних зображень дефектів в аналізаторі трьохкристального рентгенівського інтерферометра.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика.- М.: Наука, 1982.- 390 с.
2. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystals // Phys.Stat.Sol.-1969.-**26**, N5.-P.1239-1253.
3. Kato N. A Theoretical Study of Pendellosung Fringes. PartII. Detailed Discussion Based Upon a Spherical Wave Theory // Acta crystallogr.- 1961.- **14**, part 6.- P.627-636.

SUMMARY

RARANSKY M.D., FODCHUK I.M., BOBROVNIC S.V.

SIMULATING X-RAY MUAR DEFECT'S IMAGES IN Si

Main moments of the theory of formation of the muar defect's images in three cryslal interferometrtyu are submitted. The eikonal two-wave approximation is used. It assumed that diffraction is function of space coordinates and plays a role of a slowly varied refraction parameter in optics.