

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ОДНОМІРНИХ ДЕФОРМАЦІЙ НА ЕФЕКТ АНОМАЛЬНОГО ПРОХОДЖЕННЯ ДЛЯ ЧОТИРИХВИЛЬОВИХ ДИФРАКЦІЙ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ

Досліджено вплив еквідистантного згину відбиваючих площин на чотирихвильову дифракцію $(220,400,2\bar{2}0)$, для якої характерне підсилення ефекту аномального проходження в ідеальному кристалі. Проведені на основі чисельного розв'язання рівнянь Такагі розрахунки показали, що при певних орієнтаціях вектора \vec{U} по відношенню до \vec{H}_m суттєво посилюється ефект чотирихвильового аномального проходження рентгенівських променів у заломленій або дифрагованих хвилях.

The influence of equidistant bend of reflecting planes on four-beam $(220,400,2\bar{2}0)$ diffraction that characterized by enhancement of unusual transmission effect for ideal crystal was investigated. Calculations carried out on the base of numerical solution of Takagi equations are shown at certain orientations of \vec{U} relative to \vec{H}_m the X-ray four-beam unusual transmission effect is considerably enhanced in transmitted or diffracted wave.

Багатохвильові ефекти динамічного розсіяння рентгенівських променів у реальних кристалах вивчені недостатньо повно, а деякі взагалі не досліджені. Дослідження багатохвильових ефектів представляє значний інтерес, оскільки вони несуть важливу інформацію про оптику рентгенівських променів та фізику кристалів, становлять основу методів визначення недосконалості структури монокристалів, дозволяють суттєво просунутися у розв'язку фазової проблеми [1].

Аналітичні методи аналізу даних ефектів, як правило, не використовуються, оскільки основні рівняння динамічної теорії в багатохвильовому наближенні аналітично не розв'язуються. Тому для здійснення даного аналізу застосовують чисельні методи розв'язку основних рівнянь динамічного розсіяння рентгенівських променів у кристалах, що містять різні спотворення структури.

У даній роботі на основі чисельного розв'язку рівнянь Такагі [2] проведено дослідження впливу еквідистантного згину відбиваючих атомних площин на явище чотирихвильової дифракції.

Вперше питання про посилення аномального проходження для конфігурації $(220,400,2\bar{2}0)$ розглядалося у роботах [3-6], де було встановлено, що при точному положенні відбивання для Ge та $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання мінімальний

коефіцієнт поглинання $\mu_{\min}^{(4)} = 5,2 \text{ см}^{-1}$, тоді як його двоухвильове значення $\mu_{\min}^{(2)} = 16,21 \text{ см}^{-1}$.

Таке зменшення коефіцієнта поглинання свідчить про те, що для даної конфігурації можна очікувати значне підсилення аномального проходження. Проте експериментальними дослідженнями [6] очікуваного підсилення виявити не вдалося.

Вузли оберненої ґратки для конфігурації $(220,400,2\bar{2}0)$ утворюють квадрат і всі відбивання, що беруть участь у дифракції, дозволені. Чотирихвильові маятникові смуги є складними аперіодичними осцилюючими функціями товщини кристалу. Відстані між екстремумами коефіцієнтів відбивання $R_m(\alpha_m^0, z)$ (α_m^0 - кутове відхилення падаючої хвилі від точної умови дифракції, z - координата по глибині кристалу) пов'язані зі степенями збудження хвильових полів, а також з геометрією дисперсійної поверхні [7-9].

Для відповідних перерізів восьмилистової дисперсійної поверхні зберігається попарне розміщення віток, але лише один перетин має площину симетрії, інші ж перетини – несиметричні. Для всіх перетинів дисперсійної поверхні в області точного положення чотирихвильової

дифракції більшість віток перетинає вісь, що проходить між точками Лауе L_a та Лоренца L_0 . Це означає, що тут є не два, як у двохвильовому випадку, хвильових поля, що слабо поглинаються, а не менше трьох, тобто для "товстих" кристалів можна очікувати осциляції інтенсивності хвиль, які пройшли аномально, незалежно від поляризації окремих хвиль.

Аналіз чотирехвильових інтерференційних коефіцієнтів поглинання показує, що існують п'ять хвильових полів, які слабо поглинаються і для яких $\mu_l < 32 \text{ см}^{-1}$. Крім того, їхні кутові залежності мають, як і дисперсійна поверхня, три двічі вироджені хвильові точки, у тому числі і для $\mu_{\min}^{(4)}$. Оскільки $\mu_{\min}^{(4)} < \mu_{\min}^{(2)}$, то повинно спостерігатися підсилення аномального проходження при збудженні відповідних хвильових полів [3,7].

На топограмах ідеального кристала (рис.1) дифрагована лінія (400) слабо помітна, оскільки контраст топограм обирався оптимальним для більш сильних дифрагованих (220) і $(2\bar{2}0)$ хвиль. Область підсилення аномального проходження напрямлена вздовж осі симетрії конфігурації та узгоджується з симетрією дисперсійної поверхні та інтерференційних коефіцієнтів поглинання [7]. Для дифрагованих (220) і $(2\bar{2}0)$ хвиль (рис.1г)

явного підсилення аномального проходження не спостерігається, що узгоджується з відомими теоретичним та експериментальним розподілами.

У випадку чотирехвильової дифракції локальні розорієнтації атомних площин набувають вигляду [2]:

$$\alpha_H = \alpha_H^0 - p_H \cdot \frac{dU_x}{dz},$$

$$\alpha_K = \alpha_K^0 - p_K \cdot \frac{dU_x}{dz},$$

$$\alpha_G = \alpha_G^0 - p_G \cdot \frac{dU_x}{dz}.$$

Для одномірної деформації еквідистантного згину $\vec{U} = (Bz^2, 0, 0)$, $p_H = p \cos(\alpha_H)$, $p_K = p \cos(\alpha_K - \varphi)$, $p_G = p \cos(\alpha_G - \varphi)$, α_m – кути між векторами дифракції \vec{H}_H та \vec{H}_m , φ – кут між \vec{U} і \vec{H}_H , $P = 4B\gamma_0^2\lambda^2 |\vec{H}_m| / \pi$, B – параметр деформації, γ_0 – косинус кута падіння. При цьому $\alpha_m^0 = 2\lambda \cdot [(\vec{H}_m \cdot \vec{e}_1)\Delta\varphi + (\vec{H}_m \cdot \vec{e}_2)\Delta\theta]$, де кути $\Delta\theta$ і $\Delta\varphi$ характеризують відхилення кристала вздовж векторів $\vec{e}_1 = \lambda[\vec{k}_0 \times \vec{n}]$, $\vec{e}_2 = [\vec{e}_1 \times \vec{k}_0]$, \vec{k}_0 – хвильовий вектор, який задовольняє умову точного положення відбивання, \vec{n} – нормаль до поверхні.

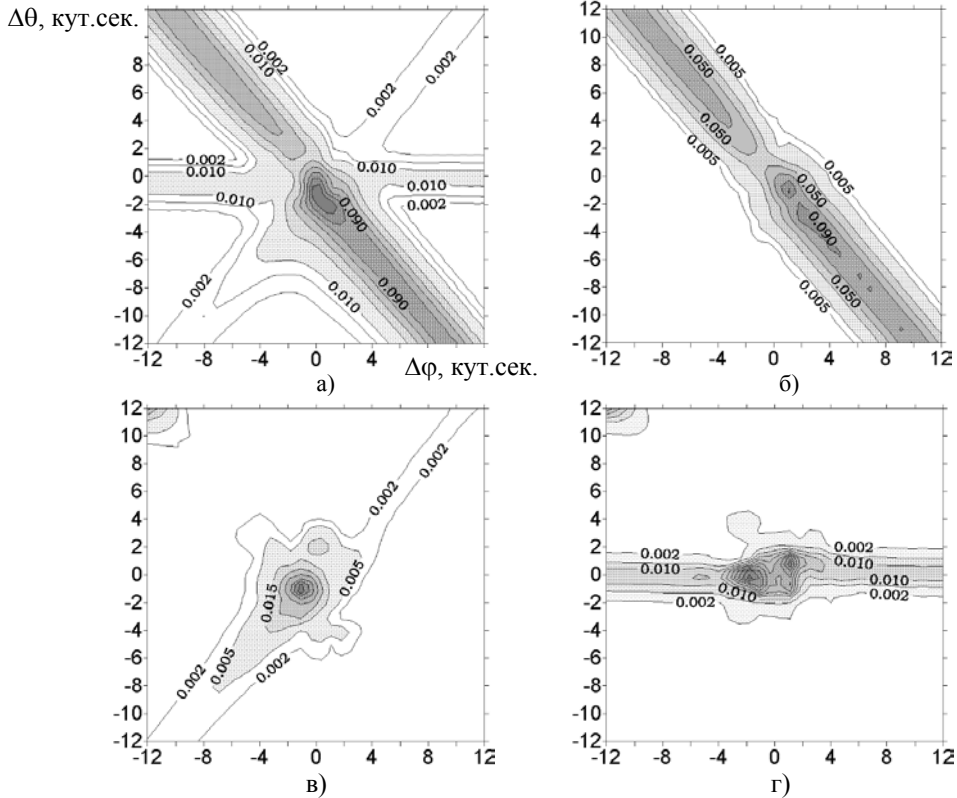


Рис.1. Ідеальний кристала. Чотирехвильова (220, 400, $\bar{2}\bar{2}0$) Лауе дифракція $\text{CuK}\alpha$. (000) (а), (220) (б), (400) (в), ($\bar{2}\bar{2}0$) (г)

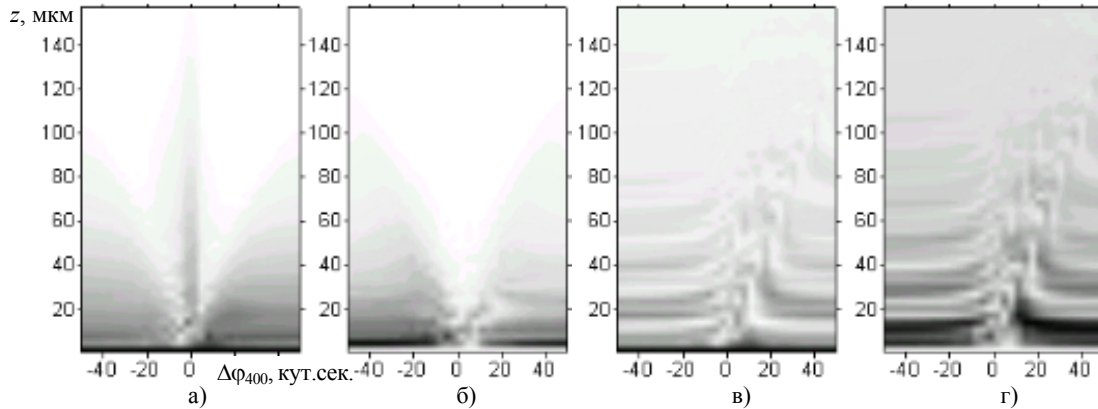


Рис.2. Еквідистантний згин атомних площин, $P=2,5$. Маятникові смуги. Заломлена хвиля (а, в), дифрагована (400) (б, г); $\vec{U} \parallel \vec{H}_{400}$ (а, б), $\vec{U} \perp \vec{H}_{400}$ (в, г).

Напрямок вектора зміщень атомних площин \vec{U} почергово вибирався паралельним до одного з векторів дифракції \vec{H}_m .

Розраховані розподіли товщинних осциляцій інтенсивності $R_m(\Delta\varphi, z)$ ($\Delta\theta=0$) наведені на рис.2, $R_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ – на рис.3,4. Для зручності аналізу ефекту підсилення або пригнічення аномального проходження використаний коефіцієнт $R = R_0^{\text{деф}} / R_0^{\text{ід}}$ ($R_0^{\text{ід}}$, $R_0^{\text{деф}}$ – максимальні інтенсивності чотиривильової області розсіяння в ідеальному та деформованому кристалі).

Для маятникових осциляцій (рис.2) при $\vec{U} \parallel \vec{H}_{400}$ має місце швидке подавлення як двохвильових, так і чотиривильових товщинних осциляцій, а також перекидання інтенсивності з дифрагованої (400) в чотиривильову область заломленої хвилі. Отже, для даної конфігурації можна чекати накладання двох ефектів – аномального поглинання і екстинкційної взаємодії хвильових полів. Порушення фазових співвідношень між дифрагованими хвилями повинно вести до переважаючого впливу того чи іншого ефекту.

У випадку $\vec{U} \perp \vec{H}_{400}$ картина зовсім інша – спостерігається зміщення і розмиття чотиривильової області, порушення симетрії у розподілі інтенсивності в напрямку дії деформації, а також складні затухаючі аперіодичні чотиривильові маятникові осциляції інтенсивності.

На топограмах $R_m(\Delta\varphi, \Delta\theta)$ для всіх напрямків орієнтацій вектора \vec{U} у випадку еквідистантного згину атомних площин із збільшенням параметра деформації P для заломленої хвилі відбувається пригнічення інтенсивності чотиривильової області і двохвильових ліній з різною швидкістю. У той же час для деяких дифрагованих хвиль має

місце посилення ефекту аномального проходження у чотиривильовій області порівняно з ідеальним кристалом. Наприклад, при $\vec{U} \parallel \vec{H}_{220}$ досить помітне посилення аномального проходження (~45%) має ($2\bar{2}0$) дифрагована хвиля і незначне (~5-10%) – (400) хвиля, тоді як заломлена (000) і дифрагована (220) хвилі пригнічуються. Порушується симетрія вихідного розподілу інтенсивності. З'являються розриви між двохвильовими лініями і чотиривильовою областю. При цьому із збільшенням деформації інтенсивність двохвильових областей спадає значно швидше, ніж чотиривильової.

Цікаві особливості впливу еквідистантного згину атомних площин на чотиривильове розсіяння відбуваються при $\vec{U} \parallel \vec{H}_{400}$ і $\vec{U} \perp \vec{H}_{400}$ (рис.3,4)

При $\vec{U} \parallel \vec{H}_{400}$ (рис.3) чотиривильовий ефект аномального проходження зазнає найбільшого підсилення (30-40%, $P=0,1$) для дифрагованої ($2\bar{2}0$) хвилі. Із ростом деформації відбувається асиметричне пригнічення як заломленої (000) хвилі, так і дифрагованих. При цьому двохвильові лінії послаблюються швидко, а багатохвильова область зміщується у напрямку дії сили, розмивається і трансформується.

У випадку $\vec{U} \perp \vec{H}_{400}$ (рис.4) ситуація інша – має місце значне ($\geq 200\%$, $P=0,1$) посилення аномального проходження у чотиривильовій області ($2\bar{2}0$) хвилі і невелике (20-30%, $P=0,5$) для (220) хвилі. З'являються розриви на двохвильових лініях поблизу області багатохвильової дифракції, яка розмивається і зміщується - вздовж (220) лінії у додатню область значень $\Delta\theta$, вздовж ($2\bar{2}0$) – у додатню область значень $\Delta\varphi$, тоді як для (400) - у напрямку дії деформації. Внаслідок

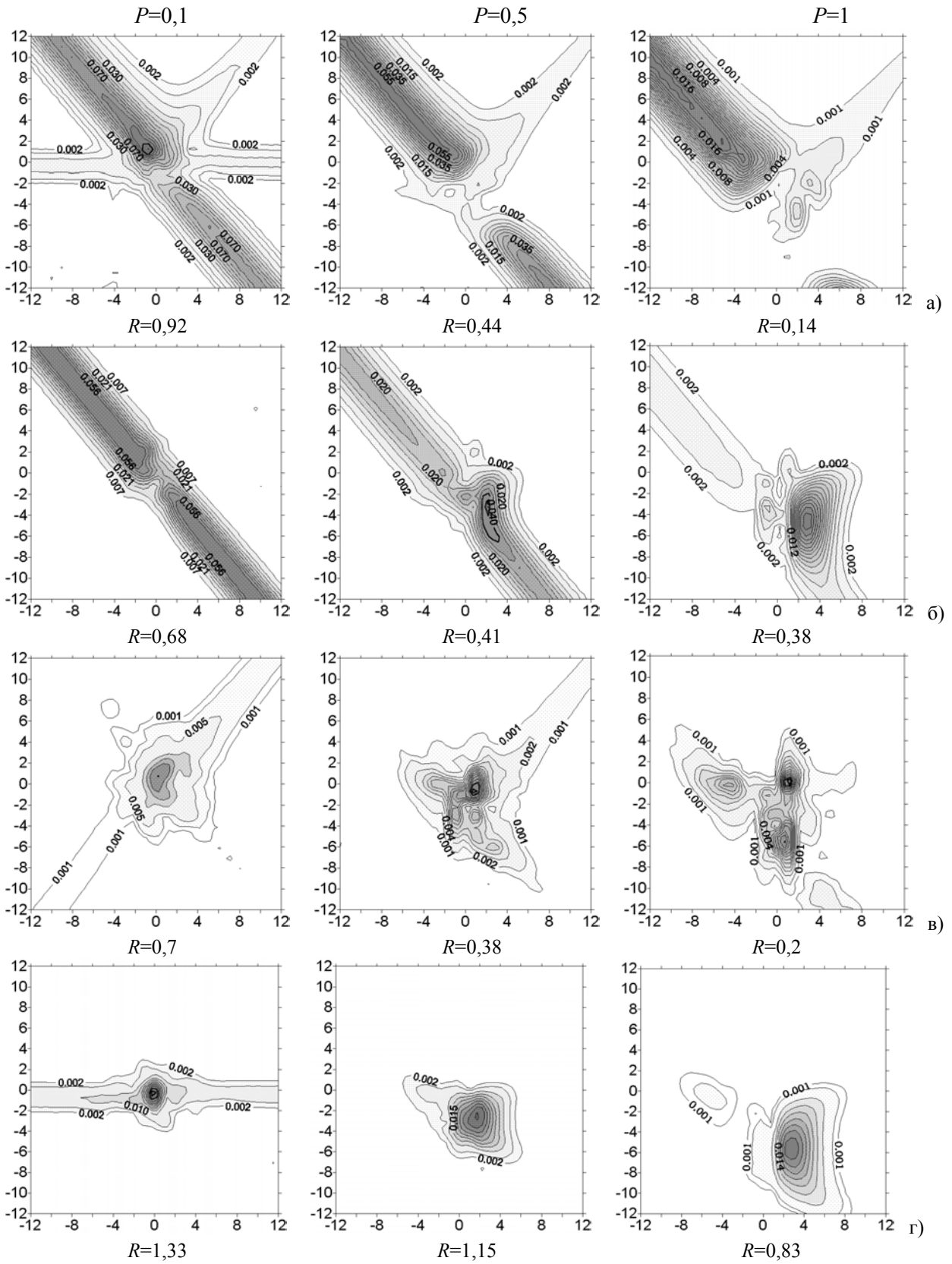


Рис.3. Еквідистантний згин атомних площин, $\bar{U} \parallel \bar{H}_{400} \cdot (000)$ (а), (220) (б), (400) (в), ($\bar{2}\bar{2}0$) (г)

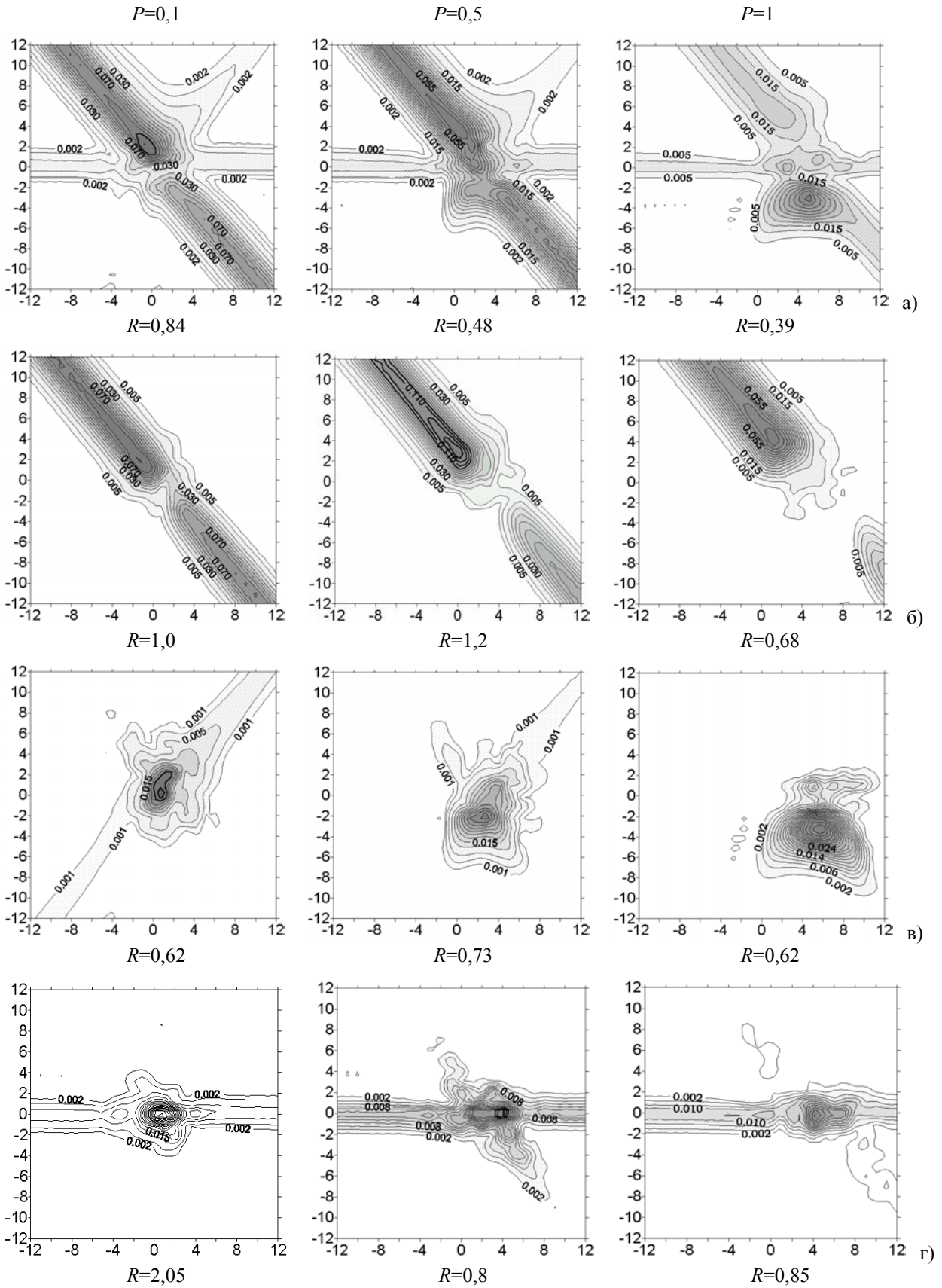


Рис.4. Еквідистантний згин атомних площин, $\bar{U}\perp\bar{H}_{400}$. (000) (а), (220) (б), (400) (в), ($\bar{2}20$) (г)

цього багатохвильова область заломленої хвилі має змінений характер розподілу інтенсивності, сильно розширена і досить чітко виділяється на фоні подавлених двоххвильових ліній.

Із аналізу топограм випливає, що трансформації багатохвильової області і асиметрія пригнічення двоххвильових ліній у випадку еквідистантного згину атомних площин дуже чутливі не тільки до величини деформації, але й до її напрямку.

У випадку $\vec{U} \parallel \vec{H}_{2\bar{2}0}$ зі збільшенням величини P ($2\bar{2}0$) і (400) двоххвильові лінії швидко пригнічуються, а відповідні багатохвильові області зміщуються у напрямку дії сили. Область чотирихвильової дифракції для ($2\bar{2}0$) хвилі дещо посилюється – до 30% при $P=1$.

Такі явища чотирихвильового розсіяння у кристалі з еквідистантним згином атомних площин можна пояснити ефектами перекачування інтенсивності із заломленої хвилі в дифраговані. Отримані теоретичні розподіли інтенсивності спостерігались експериментально [8], з чого можна зробити висновок, що досліджуваний кристал не був досконалим і містив об'ємні поля деформацій.

Згідно з критерієм Евальда, встановлено, що чим більша кривизна дисперсійної поверхні, тим швидше змінюється інтенсивність дифрагованих хвиль, тобто швидше змінюються інтерференційні коефіцієнти поглинання й амплітуди хвиль, а також зменшується область, де $\mu^{(3)} < \mu^{(2)}$, і область локального максимуму інтерференційного коефіцієнта поглинання.

Отже, виявлені ефекти можна повністю пов'язати із відповідним перерізом дисперсійної поверхні, відносним збудженням хвильових мод і асиметрією розподілу коефіцієнтів поглинання. Точка збудження, мігруючи по дисперсійній поверхні, в залежності від її кривизни проходить багатохвильові області з різною швидкістю, а хвильові моди перемішуються з різними фазовими співвідношеннями, що зумовлює різний характер трансформації багатохвильових областей розсіяння.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. - М.: Мир, 1987. - 334 с.
2. Takagi S. Dynamical Theory of Diffraction Applicable to Crystals With any Kind of Small Distortion // Acta crystallogr. - 1962. - **15**, No.12. - P.1311-1312.
3. Borrmann C., Hartwig W. Die Absorbtion der Röntgenstrahlen im Dreistrahlfall der Interferenz // Z. Krystallogr. - 1965. - **121**, No.6. - S.401-409.
4. Joko T., Fukuhara A. Simultaneous diffraction and Borrmann effect // J.Phys.Soc.Jap. - 1967. - **22**, No.2. - P.597-604.
5. Dalisa A.L., Zajac A. Theoretical developments and experiments on the multiple anomalous transmission of X-rays // Phys.Rev. - 1968. - **168**, No.3. - P.859-866.
6. Hildebrandt G. Zum Stand der Untersuchungen von Mehrstrahlfallen der Idealkristalls mit Röntgenstrahlen // Acta Cryst. - 1969. - **A25**, No.12. - S.209-212.
7. Козьмик В.Д., Кшевцекая М.Л., Кшевцекий С.А., Михайлюк И.П., Остапович М.В. Усиление эффекта Бормана при симметричной четырехволновой дифракции рентгеновских лучей. Конфигурация ($2\bar{2}0, 3\bar{1}\bar{1}, 11\bar{1}$) // УФЖ - 1976. - **21**, №5. - С.781-786.
8. Козьмик В. Д., Кшевцекий С.А., Кшевцекая М.Л., Михайлюк И.П., Остапович М.В. Усиление эффекта Бормана при четырехволновой дифракции рентгеновских лучей в Ge. Конфигурация ($220, 400, \bar{2}\bar{2}0$) // Кристаллография. - 1976. - **21**, вып.5. - С.799-806.
9. Кшевцекий С.А., Козьмик В.Д., Михайлюк И.П., Остапович М.В. Маятниковые полосы при четырехволновой дифракции рентгеновских лучей в Ge // УФЖ. - 1976. - **21**, вып.6. - С.994-1000.
10. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А., Рунова Т.К. Влияние обработки граничных поверхностей на многоволновую дифракцию в кристаллах со структурой алмаза // Кристаллография. - 1981. - **26**, вып 6. - С.1320-1322.
11. Раранский Н.Д., Остапович М.В., Фодчук И.М., Остапович В.Н. Трехволновые маятниковые осцилляции в кристаллах с эквидистантно изогнутыми отражающими плоскостями // УФЖ. - 1985. - **30**, №2. - С.310-317.
12. Остапович М.В., Фодчук И.М. Рассеяние плоских рентгеновских волн при трехволновой дифракции ($111, \bar{1}\bar{1}1$) в германии с эквидистантно изогнутыми отражающими плоскостями // УФЖ. - 1985. - **30**, №2. - С.310.