

Физика

УДК 548.733

П.А.БЕЗИРГАНЯН, Л.Г.ГАСПАРЯН, В.П.МКРТЧЯН

**ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В
ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ МОНОКРИСТАЛЛОВ**

Исследован поток энергии в приповерхностных слоях монокристаллов при симметричном и асимметричном брэгговских отражениях. Показано, что часть дифрагированной энергии при симметричном брэгговском отражении течет по отражающим плоскостям. В асимметричном случае, так как отражающие плоскости расположены под углом относительно поверхности входа, в приповерхностных слоях потока не возникает.

Интерес к физике поверхности кристаллов в последнее время растет все возрастающими темпами, что обусловлено научными и практическими значениями поверхностных явлений. Часто применение кристаллов предпринимается в зависимости от свойства (свойства и структуры) их приповерхностных тонких слоев. Поэтому исследование структурного состояния (несовершенств) приповерхностных тонких слоев кристаллов является актуальной задачей физики твердого тела вообще и материаловедения — в частности. Среди многочисленных методов исследований структурных недостатков тонких приповерхностных слоев кристаллов, как и в случае толстых, самыми эффективными являются рентгенодифракционные методы. Однако чувствительность обычных рентгенодифракционных методов резко падает с уменьшением толщины исследуемого слоя, поэтому разработаны специальные рентгенодифракционные светосильные методы, дающие возможность исследовать очень тонкие (толщина даже порядка десятка ангстрем) слои [1,2]. Для однозначной интерпретации рентгенодифракционных картин, полученных от тонких приповерхностных слоев кристаллов, полезно более детальное исследование потока энергии волн в них, дифрагированных по Брэггу. Такие исследования важны с точки зрения выяснения вопроса о так называемых приповерхностных волнах [3—5].

**§I. Некоторые особенности динамической дифракции
рентгеновских лучей при геометрии Брэгга**

Для дальнейшего изложения целесообразно предварительно вспомнить некоторые отличительные черты брэгговской динамической дифракции рентгеновских лучей. Как известно [6], угловая область брэгговского отражения может быть разбита на три участка: на первом участке, в котором угловой параметр меньше отрицательной единицы ($p < -1$) и нормаль N_1 входной поверхности пересекается с дисперсионной поверхностью D_1D_1' (рис.1), может возбуждаться только первое поле, так как распространение второго поля на этом угловом участке в кристалле приведет к бесконечному возрастанию энергии. В третьей области, где

угловой параметр p больше единицы ($p > 1$) и нормаль N_2 входной поверхности пересекается с дисперсионной поверхностью D_2D_2 , может возбуждаться только второе поле, так как на этом участке, наоборот, распространение первого поля приводит к бесконечному возрастанию энергии этого поля. На втором участке, где угловой параметр меняется в пределах $-1 \leq p \leq +1$ и нормали входной поверхности не пересекаются с дисперсионными поверхностями, не может возбуждаться первое поле. Здесь экстинкция приводит к бесконечному возрастанию энергии первого поля, поэтому на втором участке возбуждается только второе поле. На втором участке экстинкция приведет к полному отражению падающей энергии. На первом и третьем угловых участках экстинкция равна нулю, поэтому в них полное отражение не получается. Общая энергия дифрагированных волн на угловом участке полного отражения течет по отражающим плоскостям — по приповерхностному слою [6,7]. Конечно, все это строго верно только для толстых кристаллов. В тонких кристаллах на всех этих угловых участках оба поля в какой-то мере возбуждаются и интерференционная картина осложняется.

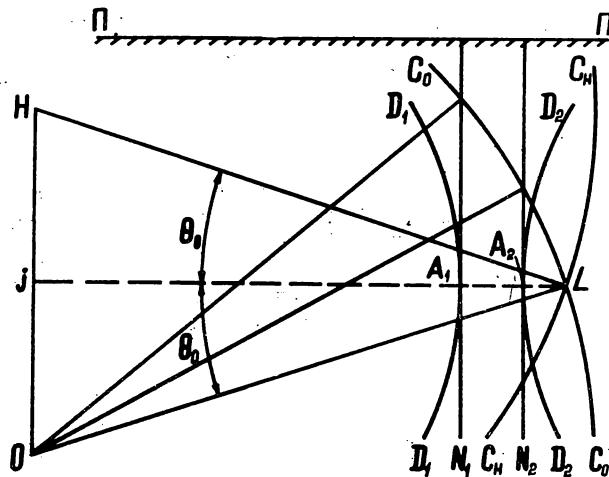


Рис.1.

Стоит здесь напомнить, что при отражении сдвиг фаз между первичной и отраженной волнами на разных угловых участках происходит по-разному. На первом участке ($p < -1$) этот сдвиг фаз равен нулю, на втором участке ($-1 \leq p \leq 1$) меняется от нуля до π в зависимости от значения p , на третьем участке он равен π .

Вспомним и то, что даже при симметричном отражении угловой центр участка полного отражения отличается от точного угла Брегга, определяемого условием $2ds\sin\theta = n\lambda$ кинематического отражения и отличается тем больше, чем больше параметр асимметрии. При Лауз геометрии центр угловой области отражения совпадает с точным углом Брегга, а при крайне асимметричных отражениях он может значительно отличаться от угла θ_0 [8].

§2. Исследование потока энергии дифрагированных волн в кристаллах

Строго говоря, полное отражение при брэгговской геометрии получается только в том случае, когда бесконечным фронтом плоская волна падает на непоглощающий кристалл, входная поверхность которого неограничена, а толщина (размеры кристалла в направлении нормали входной поверхности) гораздо больше, чем экстинкционная длина. Границные условия

$$D_{01} + D_{02} = D_0^i; \quad D_{h1} + D_{h2} = D_h^i, \quad (1)$$

приводящие к полному отражению, строго говоря, неверны для случая ограниченного кристалла и ограниченного фронта падающей волны. В (1) величины D_{01} и D_{h1} — амплитуды волн первого поля, D_{02} и D_{h2} — амплитуды волн второго поля, D_0^i и D_h^i — амплитуды первичной и отраженной волн соответственно.

Как уже отмечалось в первом параграфе, на угловом участке полного отражения общая энергия дифрагированных волн течет по отражающим плоскостям (по приповерхностным слоям кристалла), в результате чего полное отражение в ограниченных кристаллах, по-видимому, не получается. Для выяснения этого вопроса исследуем дифракцию рентгеновских лучей в ограниченных кристаллах при брэгговской геометрии.

Когда первичный лентообразный пучок рентгеновских лучей падает на кристалл, отражающие плоскости которого параллельны входной поверхности, как это показано на рис.2, то в толстом кристалле на втором угловом участке (в области полного отражения) первое поле не возбуждается, и условия (1) примут следующий вид:

$$D_{02} = D_0^i; \quad D_{h2} = D_h^i. \quad (2)$$

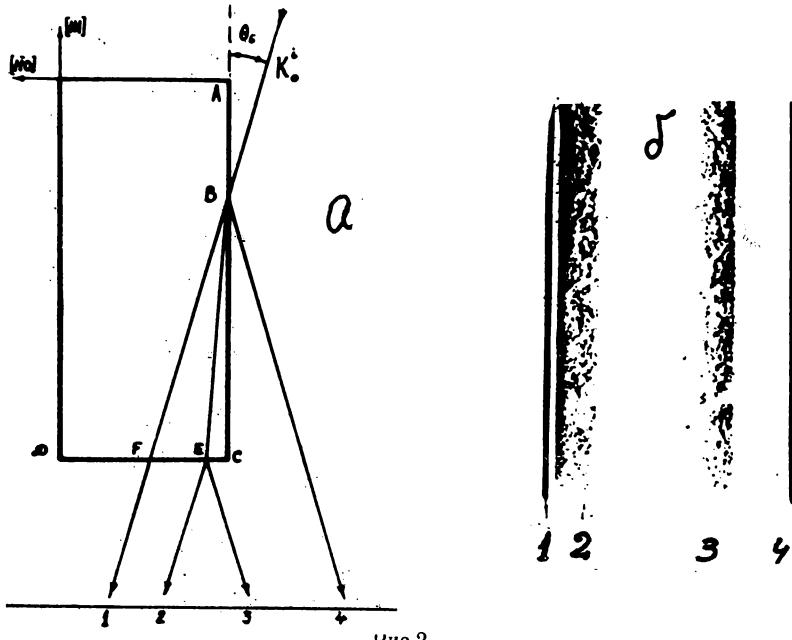


Рис.2.

Более того, дифрагированные волны на экстинкционной длине

быстро затухают и получается полное отражение, т.е. возникает только отраженная волна с амплитудой D'_h .

§2.1. Формирование потока энергии в кристаллах

Величина и направление среднего по времени потока энергии электромагнитной волны рентгеновского диапазона длин волн определяется реальной частью выражения

$$S = \frac{c}{4\pi} (D \cdot H),$$

вектор индукции, а H — напряженность магнитного поля, c — скорость света.

В интерференционном поле для определения общего потока энергии в рассматриваемой точке необходимо пользоваться суммарными значениями D и H интерферирующих волн в этой точке. Общий поток определяется векторной суммой потоков в зоне наложения интерферирующих волн.

В недифрагирующей среде размеры зоны наложения (размеры поля интерференции) волн определяются только размерами области пересечения их первичных направлений, после выхода из этой области волны продолжают распространяться в прежних направлениях. В дифрагирующих средах в результате многократных отражений зона наложения не ограничивается областью пересечения первичных направлений: она расширяется, и взаимодействие волн продолжается до их выхода из среды. Таким образом, в недифрагирующей среде поток энергии направлен по биссектрисе угла между направлениями распространения интерферирующих волн только в зоне наложения этих волн, а в дифрагирующей среде он сохраняет это направление до выхода из среды. Здесь недифрагирующими средой мы считаем все некристаллические среды и также кристаллы, которые ориентированы вне отражения относительно данных первичных волн.

§2.2. Экспериментальные исследования потоков энергии волн, дифрагированных по Бреггу

В работах [9,10] были исследованы потоки энергии волн, дифрагированных по Лауз в параллелепипедальных и клинообразных кристаллах, уточнение которых было направлено по нормали входной поверхности. В данной работе исследуется этот вопрос для волн, дифрагированных в этих кристаллах по Бреггу.

Рассмотрим случай, показанный на рис.2. Узкий пучок (лентообразный) рентгеновских лучей K_0 падает на параллелепипедальный кремниевый кристалл, отражающие плоскости (110) которого параллельны входной поверхности. Для получения отражения (220) первичный пучок излучения MoK_{α} падает на отражающие плоскости под углом скольжения

$\theta = 10^{\circ}38'$. Кристалл имел длину $AC = 12 \text{ мм}$, точка падения отстоит от точки А на расстоянии $AB = 2 \text{ мм}$, а от точки С на расстоянии $BC = 10 \text{ мм}$. При такой геометрии кристаллом формируются четыре пучка: 1;2;3 и 4 (рис.2а,б). Появление пучков 1 и 4 обычное явление: пучок 1 представляет след коротких волн, не участвующих в отражении и имеющих малый коэффициент поглощения; пучок 4 является результатом отражения (220) по Бреггу. Вызывает определенный интерес появление пучков 2 и 3, которые выходят из точки Е, отстоящей от точки С на расстоянии $EC = 200 \text{ мкм}$. Во-первых, необходимо было убедиться в том, что пучки 2 и 3 выходят из торца DC кристалла. В этом легко убедились следующим образом: отшлифовав торец DC в пучках 2 и 3, обнаружили следы шлифовки (см. рис.2б, следы 2 и 3). Во-вторых, было необходимо

убедиться в том, что пучки 2 и 3 на самом деле выходят из точки Е, а не из точки F, из которой выходит пучок 1. В этом убедились измерением расстояния пучков 1—3 от пучка 4, более того, убедились и в том, что от точки F излучение MoK_{α} , не могло выходить, так как на расстоянии BF фактор поглощения $\mu t = 15$, выход же из точки Е возможен, так как в слое BE это излучение поглощается аномально мало (эффект Бормана). Таким образом часть энергии падающего пучка в точке В несколько углубляется в кристалл и в приповерхностном слое течет по отражающим плоскостям BC и в окрестностях точки Е выходит из кристалла в направлении падения и отражения. Как видно из рис.2б, интенсивность пучков 1 (первичного) и 4 (отраженного) гораздо больше, чем интенсивность пучков 2 и 3 (аномально проходящие пучки).

Таким образом наши исследования показали, что, строго говоря, при брэгговской геометрии полного отражения ограниченных первичных пучков не происходит: небольшая часть энергии течет в приповерхностных слоях по отражающим плоскостям и выходит из торцевой поверхности ограниченного кристалла в направлениях падения и отражения (Лауз дифракция).

Поток энергии был исследован и при асимметричном брэгговском отражении (рис.3.). Как показано на рис.3, угол между отражающими плоскостями AE и поверхностью входа FB равен 10° . Расстояния между точкой падения N и точками F и B равны соответственно: $NF = 10 \text{мм}$, $NB = 10 \text{мм}$. На рис.3а показан ход лучей при асимметричном отражении: первичный пучок K_0^i падает на поверхность входа в точке N, в результате чего получаются четыре пучка: 1 (продолжение первичного пучка), 4 (отраженный пучок) и пучки 2 и 3, которые выходят из кристалла в точке С. Для доказательства того, что пучки 2 и 3 выходят из точки С,

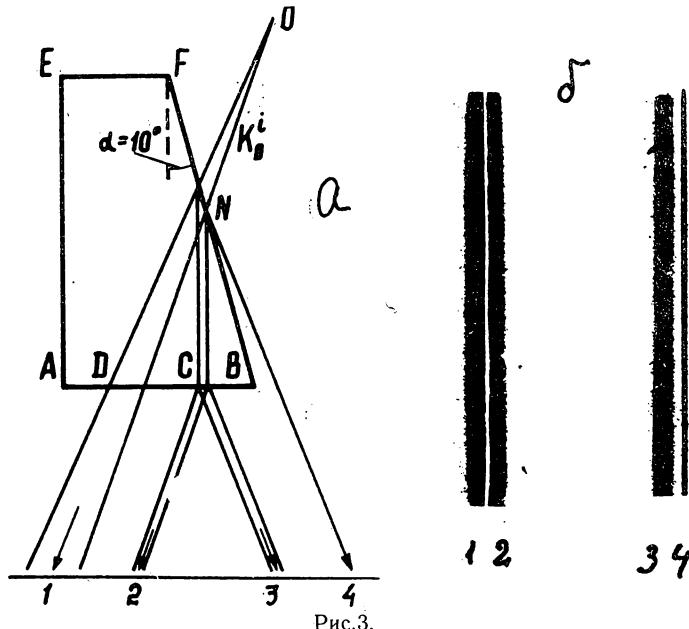


Рис.3.

а не из точки Д, мы поступили таким же образом, как в предыдущем случае — в случае симметричного отражения.

Итак, при асимметричном брэгговском случае, как и в симметричном, часть дифрагированной энергии течет по отражающим плоскостям. В асимметричном случае, так как отражающие плоскости расположены под углом относительно поверхности входа, в приповерхностных слоях

входа
волн
немо-
ное с
иссле-
пада-

Кафед

1. Афа
в иссл.
2. Анд
3. Анд
волны
4. Ан-
ти-
и
5. Пет
при от
6. Йап
7. Бат
Phys.,
8. Без
в оби
9. Asl
inside
techn
10. Ас-
inside
—Gr

2բրլ
է տրի
մի և
անդր
զուգի
առաջ

asy
that
alor
off-
enti

потока не возникает.

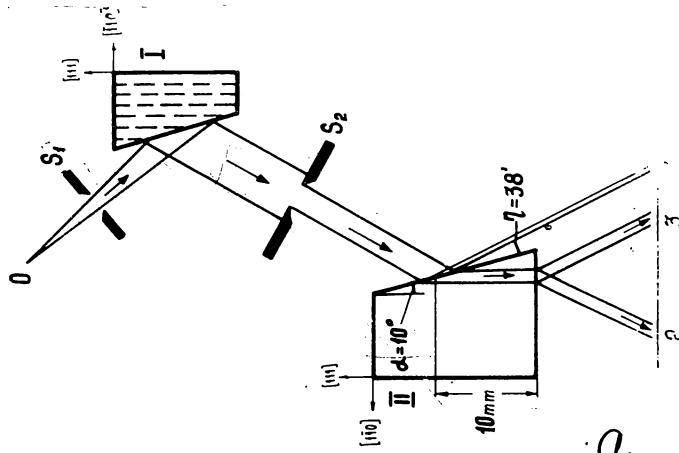


Рис.4.

Интересно исследовать поток энергии и с помощью двухкристальной системы, первый кристалл которой является монохроматором с асимметричным отражением, а второй — исследуемый кристалл (рис.4а). Как видно из рис.4а, 2б и 5а, б, при монохроматическом падающем пучке как

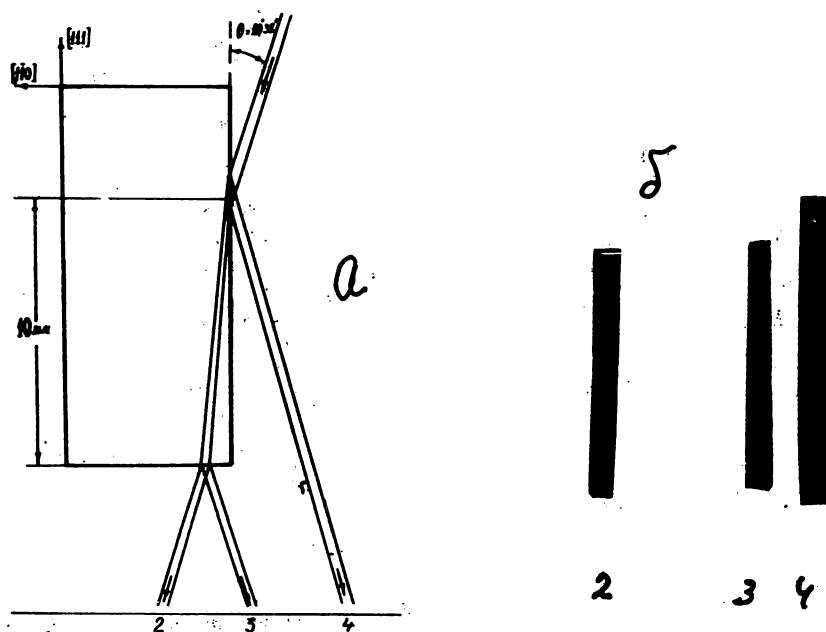


Рис.5.

в случае симметричной, так и асимметрической брэгговской геометрии первые пучки отсутствуют, что и следовало ожидать. Из этих рисунков также более четко видно, что часть (небольшая) энергии дифрагированных волн течет по отражающим плоскостям: при симметричном отражении часть энергии течет по приповерхностному слою поверхности входа, а при асимметричном отражении по сравнительно глубоким слоям в зависимости от места расположения точки падения В на поверхность

входа. Как видно из рис.2б,3б и 5б, поперечные сечения дифрагированных волн при монохроматичном падающем пучке больше, чем в случае немонохроматичного падающего пучка. Это обусловлено тем, что поперечное сечение монохроматичного падающего пучка на поверхности входа исследуемого кристалла было больше, чем в случае немонохроматичного падающего пучка.

Кафедра ФТТ

Поступила 31.12.1988.

ЛИТЕРАТУРА

1. Афанасьев А.М., Александров А.П., Имамов Р.И. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. М.:Наука, 1986.
2. Андреев А.В. Рентгеновская оптика поверхности. — УФН, 1985, т.145, вып.1, с.113.
3. Андреев А.В., Ковьев Э.В., Матвеев Ю.А., Пономарев Ю.В. Рентгеновские поверхностные волны. — Письма в ЖЭТФ, 1982, т.35, вып.10, с.412.
4. Андреев А.В., Ковьев Э.К. Рентгеновские поверхностные волны. Новые возможности. — Изв. АН СССР, Физика, 1983, т.47, с. 1984.
5. Петрашень П.В., Ковьев Э.К., Чуховский Ф.Н., Дегтярев Ю.Д. Малоугловое рассеяние при отражении рентгеновских лучей от поверхности твердого тела. — ФТТ, 1983, т. 25, с. 1211.
6. James R.W. The dynamical theory of X-ray diffraction. — Phys.stat. solidi, 1963, v.15, p.53.
7. Batterman B.W. Cole H. Dynamical diffraction of X-rays by perfect crystals. — Rev. of Mod. Phys., 1964, v. 36, p.681.
8. Безирганин П.А., Алладжян Г.М. Исследование отклонения от закона Вульфа-Брэгга в общем случае. — Изв. Арм. ССР, 1976, т. XI, вып.4, с. 273.
9. Aslanian V.G., Bezirganiyan H.P., Bezirganiyan R.H. Interference pattern of X-ray waves inside the crystal and its image in vacuum in double - field approximation(I). — Cryst. Res. technol., 1988, v. 23 № 5, г. 683-690.
10. Aslanian V.G., Bezirganiyan H.P., Bezirganiyan R.H. Interference pattern of X-ray waves inside the crystal and its image in vacuum in double-field approximation (II). — Cryst. Res. Technol., 1988, v. 6, p.775 — 761

Ամփոփում

Հետազոտված է Էներգիայի հոսքը միաբյուրեղների մերձմակերևութային շերտերում սիմետրիկ և ասիմետրիկ բրեզյան անդրադարձումների դեպքում: Ցույց է տրված, որ սիմետրիկ բրեզյան անդրադարձման դեպքում դիֆրակցված էներգիայի մի մասը հոսում է բյուրեղի մերձմակերևութային շերտերով, իսկ ասիմետրիկ անդրադարձման դեպքում անդրադարձնող հարթությունների մուտքի մակերևույթին զուգահեռ չլինելու պատճառով մերձմակերևութային շերտերում էներգիայի հոսք չի առաջանում:

SUMMARY

The energy flow in single crystal off-surface layers in symmetric and asymmetric Bragg reflections has been investigated. It has been shown, that in the symmetric Bragg reflection some of the diffracted energy flows along the reflecting planes. In the symmetric case there is no flow in the off-surface layers since the reflecting planes are arranged at an angle to the entrance surface.