

05;08

О расщеплении пиков кривой качания кристалла, промодулированного поверхностной акустической волной

© В.И. Пунегов

Сыктывкарский государственный университет

E-mail: punegov@syktsu.ru

Поступило в Редакцию 23 апреля 2003 г.

В кинематическом приближении разработана теория рассеяния рентгеновских лучей на кристалле, промодулированного поверхностной акустической волной применительно к двух- и трехкристальной дифрактометрии. В рамках теории дается физическая интерпретация обнаруженного экспериментально эффекта расщепления сателлитных пиков на кривых качания.

Возрастающий интерес к исследованиям дифракции рентгеновского и жесткого синхротронного излучения на кристаллах, промодулированных поверхностной акустической волной, вызван возможностью использования акустоэлектронных приборов в современных видах связи. В работе [1] экспериментально обнаружен эффект расщепления основного и сателлитных пиков на кривой качания от кристалла, приповерхностный слой которого подвергнут ультразвуковому воздействию. Однако теоретическое обоснование этого эффекта, основанное на модели брэгговских отражений от „семейства псевдоплоскостей“ [1], является ошибочным. Сомнительными являются также численные расчеты, из которых следует, что рентгеновское излучение не проникает в глубь кристалла и не выходит на его поверхность, а распространяется в приповерхностном слое на глубине, равной приблизительно половине волны ультразвука. Поэтому цель настоящей заметки показать, что обнаруженный в [1] эффект расщепления пиков носит интерференционный характер и связан с градиентом затухания амплитуды модуляции в глубь кристалла.

Для того чтобы не усложнять физическую трактовку полученных результатов, воспользуемся формализмом наиболее общей кинематической теории рассеяния, применимой к трехкристальной рентгеновской

дифрактометрии [2]. Кроме того, такое приближение вполне справедливо в случае сильных деформаций кристаллической решетки.

Полагая, что размеры фронта падающей на кристалл рентгеновской волны много больше толщины исследуемого слоя, для амплитудного коэффициента отражения можно записать следующее выражение:

$$E_h(q_x, q_z) = i\sigma_h f \int_0^l dz \exp[(iq_z - \mu)z] \Phi(q_x, z), \quad (1)$$

где μ — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения, l — толщина деформированного слоя, f — статический фактор Дебая–Валлера, $\Phi(q_x, z)$ — фурье-преобразование поля атомных смещений $\Phi(x, z) = \exp(-ihu(x, z))$. Остальные обозначения являются общепринятыми и приведены, например, в [2].

Пусть атомные смещения $\mathbf{u}(x, z)$ в исследуемом слое являются периодической функцией в латеральном направлении, при этом $\mathbf{u}(x + \Lambda, z) = \mathbf{u}(x, z)$, где Λ — период модуляции. Тогда функция $\Phi(x, z)$ представима в виде ряда Фурье: $\Phi(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m(z) \exp(-itkx)$, где $\kappa = 2\pi/\Lambda$ — волновое число латеральной модуляции. Фурье-коэффициенты $B_m(z) = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \exp[i(hu(\varphi/\kappa, z) + m\varphi)] d\varphi$ в общем случае описывают любую периодическую в латеральном направлении деформацию кристаллической решетки. Зависимость коэффициентов от z указывает на изменение амплитуды модуляции в глубь деформированного слоя. Если периодическая модуляция имеет вид гармонической функции, а именно $u(x, z) = u_0(z) \sin(\kappa x)$, Фурье-коэффициенты $B_m(z) = J_m(hu_0(z))$ являются функциями Бесселя m -го порядка. Выражение для углового распределения дифракционной интенсивности может быть записано в виде

$$I_h(q_x, q_z) = |\sigma_h|^2 f^2 (2\pi)^{-1} \times \left| \int_0^l dz \exp[(iq_z - \mu)z] \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(hu_0(z)) D(q_x - m\kappa) \right|^2. \quad (2)$$

Здесь $D(q_x - m\kappa) = 2\pi\delta(q_x - m\kappa)$ — для неограниченного фронта падающей рентгеновской волны и $|D(q_x - m\kappa)| = \sin((q_x - m\kappa)L_x)/(q_x - m\kappa)$ — для рентгеновской засветки поверхности кристалла шириной L_x .

В случае неограниченного фронта падающей на кристалл плоской рентгеновской волны регистрация интенсивности рассеяния от латерально-модулированного слоя возможна лишь для трехкристалльной схемы в режиме q_z -сканирования в угловых положениях сателлитных максимумов ($q_x = mk, m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$):

$$I_h^{(m)}(q_z) = |\sigma_h|^2 f^2 (2\pi)^{-1} \left| \int_0^l dz \exp[(iq_z - \mu)z] J_m(hu_0(z)) \right|^2. \quad (3)$$

Для регистрации интенсивности рассеяния трехкристалльной схемой в режиме q_x -сканирования требуются условие ограниченности фронта падающей рентгеновской волны или наличие расходимости рентгеновского пучка. При этих же условиях двухкристалльный дифрактометр с широкой апертурой детектора имеет возможность фиксировать интегральную интенсивность рассеяния. Кривая качания для двухкристалльной схемы вычисляется интегрированием (2)

$$I_h(\eta) = \int I_h(q_x, -\eta + \text{ctg } \vartheta \cdot q_x) dq_x, \quad (4)$$

где η — угловой параметр, обычно используемый в рамках двухкристалльной геометрии [2], θ — угол между поверхностью кристалла и направлением выходящей из кристалла дифракционной волны. Отметим также, что соотношение (2) с учетом свертки с аппаратурной функцией позволяет вычислять карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве [2].

Из решений (3) непосредственно следует, что поведение кривых дифракционного отражения сателлитных пиков полностью зависит от множителя в подынтегральном выражении $J_m(hu_0(z))$. Если амплитуда модуляции постоянна по глубине всего слоя, то этот множитель не зависит от координаты z , следовательно не влияет на форму профиля кривой дифракционного отражения. Поэтому все сателлитные максимумы, включая основной пик ($m = 0$), по виду должны соответствовать кинематическим кривым отражения от совершенного кристалла. Поскольку в этом случае имеет место формирование „семейства брэгговских псевдоплоскостей“, объяснение расщепления пиков в рамках модели, принятой в работе [1], является беспочвенным. Единственной причиной искажения профиля кривой отражения служит вариация рассеивающей

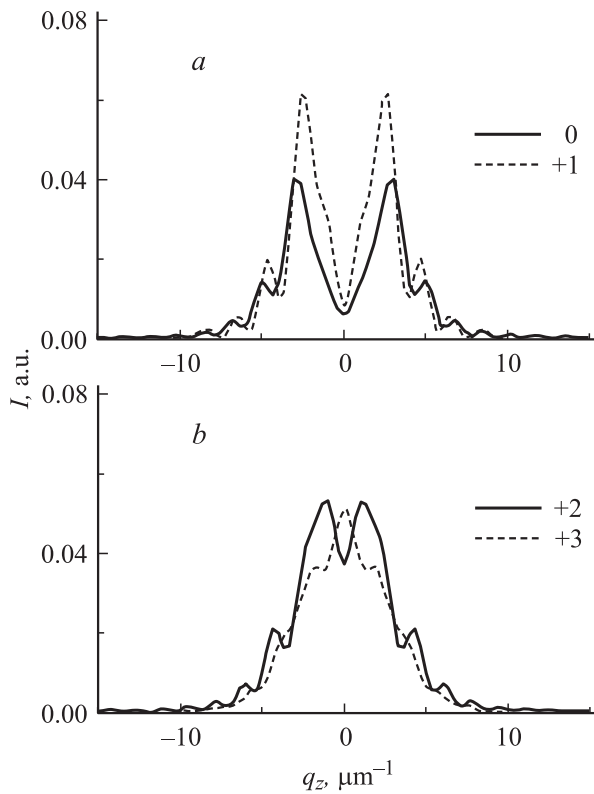


Рис. 1. Дифракционные кривые спутных пиков в режиме q_z -сканирования для неоднородной (a, b) и однородной (c, d) амплитуды латеральной модуляции. В рамках указаны порядковые номера спутных максимумов.

способности по глубине кристалла, вызванная градиентом деформации решетки. При этом в объеме кристалла характерным образом изменяются фазы рентгеновских волн, отраженных от различных участков (слоев) с разной деформацией кристаллической решетки. В некотором смысле данная трактовка имеет сходство с методом „фазовых слоев“, разработанным для кристаллов с постоянным градиентом деформации решетки по глубине нарушенного слоя [3]. В качестве иллюстрации

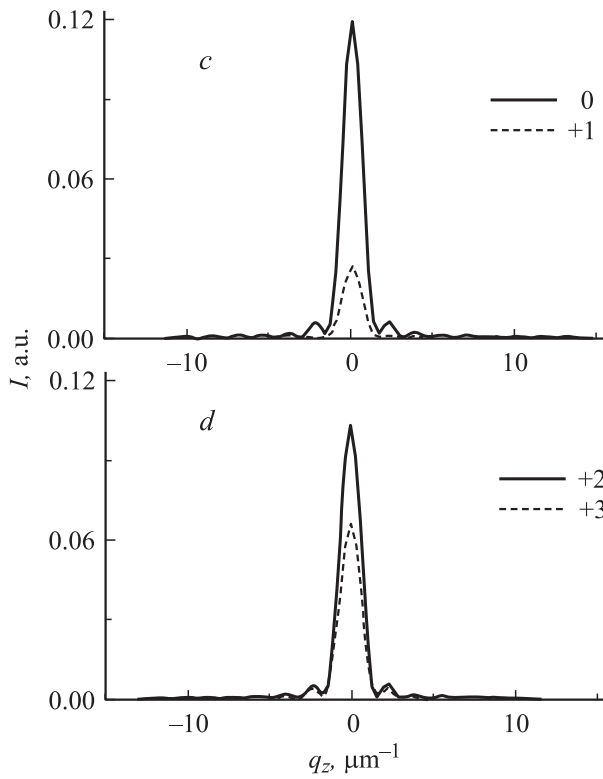


Рис. 1 (продолжение).

вышизложенного теоретического обоснования приведем результаты численных расчетов. Все расчеты выполнены для $[104]$ отражения от кристалла LiNbO_3 σ -поляризованного синхротронного излучения с длиной волны $\lambda = 0.062 \text{ nm}$. Длина ультразвуковой волны $\Lambda = 4 \mu\text{m}$, толщина кристаллического слоя $l = 4 \mu\text{m}$. В расчетах использован экспоненциальный закон затухания по глубине амплитуды модуляции ПАВ: $u_0(z) = u_0 \exp(-z/l_a)$, где l_a — глубина проникновения акустической волны, u_0 — амплитуда модуляции на входной поверхности кристалла. В случае неоднородной по глубине слоя амплитуды модуляции в наших

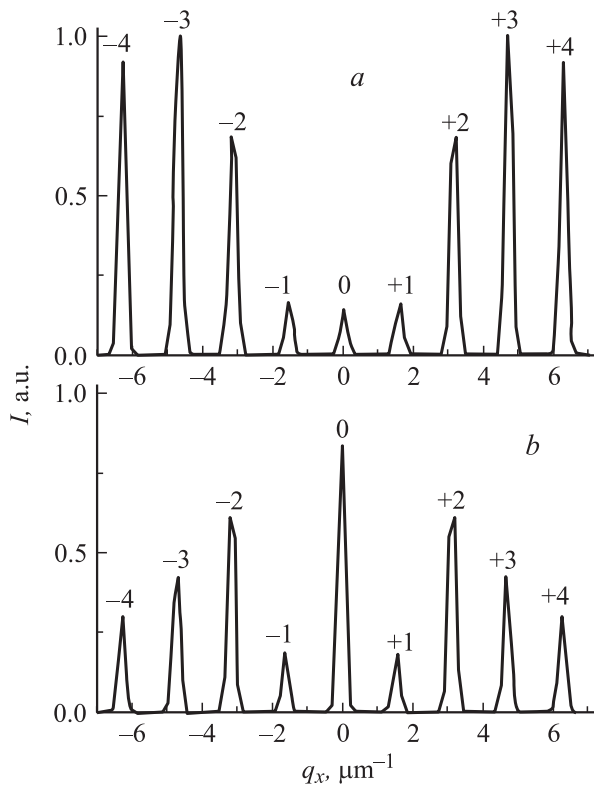


Рис. 2. Дифракционные кривые в режиме q_x — сканирования (трехкристальная схема дифракции) (*a, b*) и кривые качания (двухкристальная схема дифракции) (*c, d*).

расчетах $l_a = 2\mu\text{m}$ и $u_0 = 0.6\text{ nm}$. Амплитуда модуляции становится однородной при $l_a \rightarrow \infty$.

На рис. 1 показаны дифракционные кривые сателлитных пиков в режиме q_z -сканирования для неоднородной (*a, b*) и однородной (*c, d*) по глубине амплитуды латеральной модуляции. Из рисунка видно, что в случае неоднородной модуляции наблюдается расщепление пиков для нулевого, первого и частично второго порядков сателлитных максимумов. Третий сателлит расщепления не испытывает. С другой

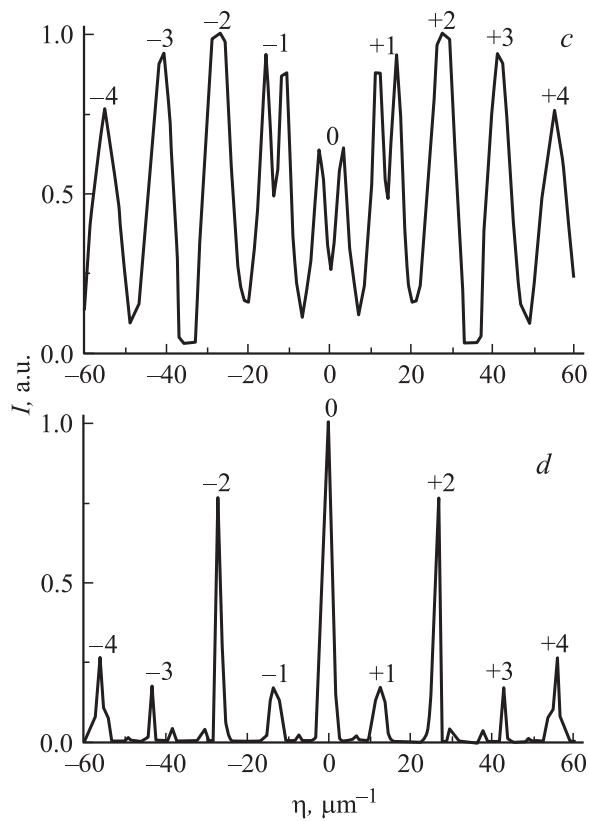


Рис. 2 (продолжение).

стороны, для достаточно сильной однородной деформации ($u_0 = 0.6 \text{ nm}$) расщепления пиков не происходит.

Дифракционные кривые в режиме q_x -сканирования (трехкристальная схема дифракции) и кривые качания (двухкристальная схема дифракции) изображены на рис. 2. Расходимость падающего на кристалл излучения в расчетах составляла $0.2''$. Для трехкристальной схемы в режиме q_x -сканирования (вращение образца) расщепления пиков не наблюдается. С другой стороны, в случае неоднородной

амплитуды модуляции на кривых качания в режиме двухкристалльной дифрактометрии ясно видны провалы в центре главного пика и первых сателлитных максимумов (рис. 2, *c*). Частичное расщепление третьих сателлитных максимумов, зафиксированное в дифракционном спектре q_z -сканирования, в двухкристалльной схеме не проявляется вследствие интегрального характера регистрируемой интенсивности. Однако особенностью двухкристалльной схемы с широкой апертурой детектора является одновременный (интегральный) захват как профиля кривой отражения отдельного сателлита, так и его углового положения в дифракционном спектре.

Таким образом, разработанная теория адекватно описывает эффект расщепления пиков на кривых качания от кристаллов, промодулированных поверхностной акустической волной. Теория может служить для обработки экспериментальных измерений при сильном ультразвуковом воздействии на кристалл и больших градиентах затухания амплитуды акустической волны в глубь образца. При малых амплитудах модуляции и длинах экстинкции, меньших или сравнимых с глубиной проникновения ультразвука в приповерхностную область кристалла, следует использовать динамическую теорию дифракции.

Автор выражает благодарность К.М. Павлову (Monash University, Australia) за обсуждение результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ (грант № E02–3.4–302) и РФФИ (грант № 03–02–16239).

Список литературы

- [1] Щелоков И.А., Рошупкин Д.В., Иржак Д.В. // Рентгеновская оптика-2003. Материалы совещания Нижний Новгород: ИФМ РАН, 2003. С. 279–288.
- [2] Nesterets Ya.I., Punegov V.I. // Acta Cryst. A. 2000. V. 56. N 6. P. 540–548.
- [3] Punegov V.I., Vishnjakov Yu.V. // J. Phys. D; Appl. Phys. 1995. V. 28. N 4A. P. A184–A188.