

05;12

## Новый подход в понимании механизмов дифракционного изображения дислокаций в рентгеновской топографии

© Э.В. Суворов, И.А. Смирнова

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл.  
E-mail: suvorov@issp.ac.ru

Поступило в Редакцию 9 июля 2012 г.

Методами численного моделирования и экспериментальной секционной рентгеновской топографии изучены закономерности образования дифракционного изображения дислокаций. Изучение рассеяния рентгеновских лучей на неоднородностях кристаллической решетки представляет интерес по нескольким причинам. Во-первых, контраст дефектов связан с фундаментальной проблемой — развитием динамической теории рассеяния рентгеновского излучения в реальных кристаллах. Во-вторых, знание особенностей дифракции позволяет качественно, а в ряде случаев и количественно, анализировать рентгеновский дифракционный контраст дефектов кристаллической решетки [1-4] (измерять величины деформаций, определять знак и параметры вектора Бюргерса и пр.).

Анализ изображения дислокаций в методах рентгеновской секционной топографии показывает, что механизмы образования изображения сильно зависят от величины градиента функции локальных разориентаций отражающих плоскостей. В представленной работе рассмотрен случай винтовых дислокаций, ориентированных вдоль вектора дифракции с мощностью поля  $(\mathbf{H}\mathbf{b}) > 10$ . Здесь параметр  $\mathbf{H}$  — это вектор обратной решетки для плоскостей с индексами  $(hkl)$  или вектор дифракции,  $\mathbf{b}$  — вектор Бюргерса.

Для теоретического описания рассеяния рентгеновского волнового поля на дислокациях в кристаллах и для моделирования изображений используется система дифференциальных уравнений Такаги–Топена [5,6]:

$$\begin{cases} \partial\psi_0/\partial s_0 = -i\pi K C \chi_{-H} \psi_H, \\ \partial\psi_H/\partial s_H = -i\pi K C \chi_H \psi_0 + i2\pi K \beta_H \psi_H. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь  $\psi_0$  и  $\psi_H$  — амплитуды прошедшей и дифрагированной волн,  $\mathbf{K}$  — волновой вектор ( $K = |\mathbf{K}| = 1/\lambda$ ),  $s_0$  и  $s_H$  — текущие координаты точки  $s$  в плоскости рассеяния в системе координат, осями которой являются векторы  $s_0$  и  $s_H$  — единичные векторы, определяющие направления падающей и рассеянных волн,  $C$  — поляризационный фактор. Функция  $\beta_H$  описывает локальные отклонения отражающих плоскостей от точного условия Брэгга. В общем случае функция локальных разориентаций кристаллографических плоскостей имеет вид

$$\beta_H = -\frac{1}{K} \frac{\partial}{\partial s_H} (\mathbf{H}\mathbf{u}) \tag{2}$$

или в декартовой системе координат

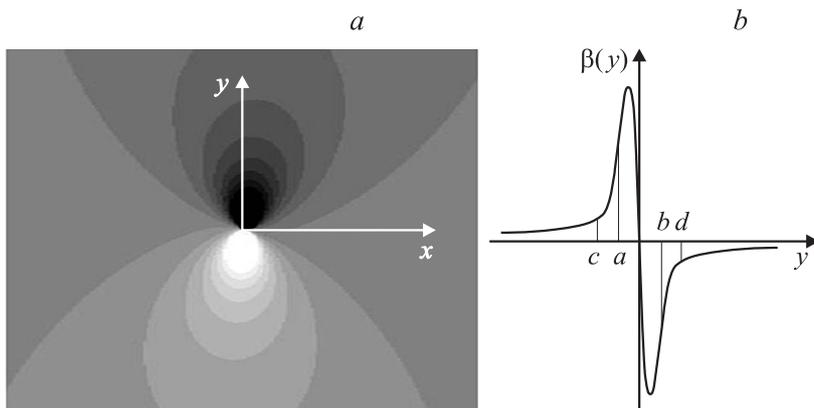
$$\beta(\mathbf{r}) = -\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right) (\mathbf{K}_H\mathbf{u}(\mathbf{r})), \tag{3}$$

здесь  $\mathbf{r}$  — текущий радиус — вектор точки,  $\mathbf{K}_H$  — волновой вектор отражающей плоскости  $\mathbf{H}$  с индексами Миллера  $(hkl)$ ,  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  — векторное поле смещений для данной дислокации. В каждом конкретном случае можно записать более простое выражение. Например, в данном случае это поле локальных разориентаций будет иметь вид

$$\beta(y, z) = \frac{\mathbf{K}_H\mathbf{b}_x}{2\pi} \frac{\text{ctg } \theta y}{y^2 + \text{ctg } \theta z^2}. \tag{4}$$

На рис. 1 показаны вид функции локальных разориентаций кристаллической решетки и сечение этой функции при  $x = 0$ . В областях  $y \geq |[c, d]|$ , где функция локальных разориентаций меняется достаточно медленно на расстояниях экстинкционной длины, рентгеновское волновое поле успевает подстраиваться под изменяющуюся решетку (для описания здесь удобно применять геометрическую оптику рентгеновских лучей), возникает изгиб и смещение траекторий блоховских волн, набегает дополнительная разность фаз, образуются новые интерференционные контуры, изгибаются старые. Таким образом, формируется интерференционная картина на секционной топограмме. Этот механизм формирования динамического изображения был сформулирован В.Л. Инденбомом и описан в работе [7].

Совершенно другие факторы начинают работать в локальных областях, где  $y < |[a, b]|$ , и кристаллическая решетка выходит за пределы

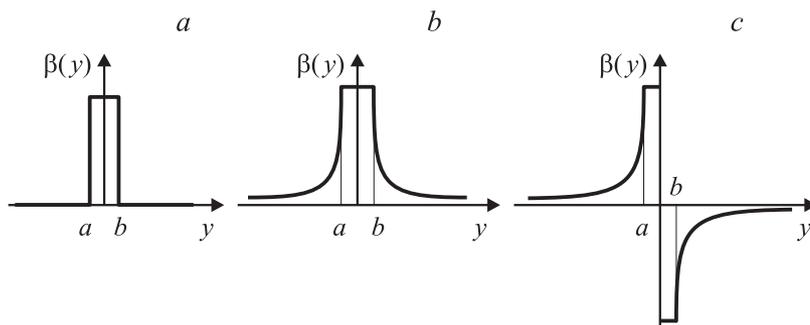


**Рис. 1.** Вид функции локальных разориентаций отражающих плоскостей  $\beta(y, z)$  для винтовой дислокации, расположенной в кристалле параллельно вектору дифракции (a), и сечение этой функции отражающей плоскостью (b).

области отражения. Локальные области кристаллической решетки, находящиеся в отражающем положении, и области, вышедшие за пределы брэгговского отражения, можно разделить условной псевдограницей. Тогда на такой границе должно возникать рассеяние, очень похожее на эффект Бормана–Лемана. Следовательно, здесь наиболее ярко проявляется механизм межветвевое рассеяния (interbranch scattering). Как было показано в работах [7–10], это явление вносит наибольший вклад в формирование дифракционного изображения. В реальной ситуации, конечно, никакой резкой границы нет: кривая отражения — это плавная кривая. Поэтому речь в данном случае может идти лишь о величине рассеянной интенсивности.

В представленной работе методами численного моделирования и экспериментальной секционной топографии исследованы закономерности дифракции рентгеновского излучения в тонком кристалле для случая, когда ось дислокации располагается параллельно вектору дифракции. Компьютерное моделирование проводилось для трех видов функции локальных разориентаций, сечения которых представлены на рис. 2.

Для случая функции локальных разориентаций, изображенной на рис. 2, a, как было показано в работе [8], формируется пятно прямого

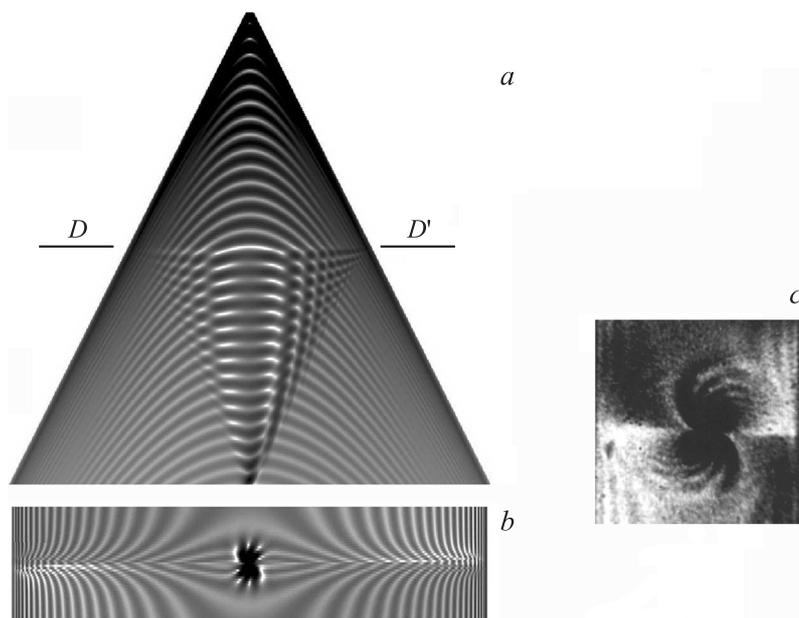


**Рис. 2.** Модели функции локальных разориентаций, использованные для численного моделирования изображения дислокации.

изображения. Это позволяет утверждать, что одним из механизмов формирования прямого изображения является межветвевое рассеяние на псевдогранице раздела  $[a, b]$ . Моделирование проводилось для нескольких значений расстояния  $[a, b]$ . Было показано, что размеры пятна прямого изображения определяются размерами области  $[a, b]$ , где кристалл выходит из отражающего положения. В случае, если область разориентаций не выходит из отражающего положения, прямое изображение может вообще отсутствовать [10].

Анализ треугольника рассеяния для функций локальных разориентаций, приведенных на рис. 2, *b*, показывает, что детали тонкой структуры прямого изображения формируются в результате интерференции множества волн, возникающих вблизи оси дислокации по всему сечению треугольника рассеяния. Взаимодействие цилиндрической области кристалла, вышедшей из отражающего положения, с максимумами волнового поля внутри треугольника рассеяния вызывает межветвевое рассеяние (нормальные и аномальные волны), приводящее к появлению множества дифрагированных лучей в брэгговском направлении. Однако вся интерференционная картина может скрываться за ярким пятном прямого изображения, так как используемая модель функции локальных разориентаций имеет П-образный вид.

Другая картина будет наблюдаться для случая локальной разориентации, представленной на рис. 2, *c*. Здесь треугольник рассеяния пересекается не цилиндром, как в предыдущем случае, а сложной



**Рис. 3.** Результаты численного моделирования структуры волнового поля внутри треугольника рассеяния для винтовой дислокации, расположенной параллельно вектору дифракции ( $DD'$  — ось дислокации, сечение плоскости рассеяния при  $x = 0$ ) для отражения от плоскостей (220) ( $a$ ); соответствующее численное изображение этой дислокации ( $b$ );  $c$  — экспериментальная секционная топограмма винтовой дислокации, отражение (220), излучение  $MoK_{\alpha}$ ,  $(Hb) = 24$ . Масштаб экспериментальной топограммы увеличен для того, чтобы показать детали тонкой структуры прямого изображения.

конусообразной поверхностью. В этой ситуации пятно прямого изображения в зависимости от ориентации конической поверхности может быть меньше области дифракционного изображения. В этом случае должна наблюдаться тонкая структура прямого изображения. Более близкая к реальности картина будет наблюдаться именно в этом случае использования модели локального поля разориентаций, показанного на рис. 2,  $c$ .

На рис. 3 показаны компьютерное моделирование плоскости рассеяния, соответствующая численная секционная топограмма и экс-

периментальное изображение винтовой дислокации с дифракционной мощностью ( $Hb$ ) = 24.

На линиях пересечения различных участков пространственной (трехмерной) функции локальных разориентаций с гиперболическими поверхностями максимумов волнового поля в палатке Бормана будут рождаться новые волновые поля (нормальные и аномальные), распространяющиеся в брэгговском направлении. Эти волны будут проектировать обозначенные выше контуры пересечения на выходную поверхность кристалла, т. е. на основании палатки Бормана и, следовательно, на секционную топограмму.

В реальной ситуации изображение тонкой структуры прямого изображения должно быть двойным, так как в каждой точке пересечений рождается два поля — нормальное и аномальное. Нормальное поле быстро убывает за счет значительного поглощения, и его изображение на экспериментальной топограмме практически отсутствует.

Сопоставление численных и экспериментальных секционных топограмм показывает хорошее согласие теории с экспериментом и, следовательно, подтверждает правильность приведенной выше интерпретации. Изменение знака локальной разориентации при изменении знака переменной  $Y$  на соседних конических поверхностях соответствует изменению знака вектора дифракции. Интерференционная структура в этом случае хорошо видна. Это — двухлепестковая розетка, и ее форма очень похожа на форму тонкой структуры прямого изображения дислокации.

Таким образом, каждая точка сильно искаженной области упругого поля вблизи ядра дислокации, где кристалл выходит из отражающего положения, становится источником нового волнового поля, распространяющегося под дислокацией в новом треугольнике рассеяния, аналогично тому, как происходит рассеяние на границе раздела [11,12]. Это „новое поле“ когерентно с первичным полем, так как порождено им за счет межветвевое рассеяния и, следовательно, интерферирует с первичным волновым полем, образуя наблюдаемое дифракционное изображение дислокации. В результате на выходной поверхности кристалла, т. е. в основании палатки Бормана формируется проекция сечения функции локальных разориентаций, являющаяся результатом пересечения функции (3) с гиперболическими максимумами волнового поля в треугольнике рассеяния. Это и есть прямое изображение дислокации.

**Список литературы**

- [1] *Authier A.* // *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction.* Oxford: Science Publications, 2001. 734 p.
- [2] *Bowen D.K., Bowen D.K., Tanner B.K.* // *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography.* London: Taylor & Francis Group, 1998. 273 p.
- [3] *Azaroff L.V.* // *X-rays diffraction.* New York: McGraw-Hill Book Company, 1974. 617 p.
- [4] *Hirsch P.B., Howie A., Nicholson R.B., Pashley D.W., Whelan M.J.* // *Electron microscopy of thin crystals.* London: Butterworths, 1965. 574 p.
- [5] *Takagi S.* // *J. Phys. Soc. Japan.* 1969. V. 26. N 5. P. 1239.
- [6] *Toupin D.* // *Acta Cryst.* 1967. V. 23. N 1. P. 25.
- [7] *Suvorov E.V., Polovinkina V.I., Nikitenko V.I., Indenbom V.L.* // *Phys. Stat. Sol.* 1974. (a) V. 26. 1. P. 385–395.
- [8] *Suvorov E.V., Smirnova I.A.* // *Phys. Sol. State.* 2010. V. 52. N 12. P. 2325–2329.
- [9] *Suvorov E.V., Smirnova I.A.* // *Phys. Sol. State.* 2010. V. 52. N 12. P. 241–247.
- [10] *Shulpina I.L., Suvorov E.V.* // *Bull. Rus. Ac. Sci.: Physics* 2010. V. 74. N 11. P. 1547–1556.
- [11] *Borrmann G., Lehmann K.* // *Z. Crystallogr.* 1967. V. 5. P. 4–8.
- [12] *Suvorov E.V., Smirnova I.A., Shulakov E.V.* // *J. Surf. Inv. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2005. N 8. P. 67–72.