

## ВЛИЯНИЕ УПРУГОГО ИЗГИБА И ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛА НА РЕНТГЕНОАКУСТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС

*В.И.Пунегов, К.М.Павлов*

Сыктывкарский государственный университет,  
167001, Сыктывкар, Россия  
(Поступило в Редакцию 9 марта 1994 г.)

Распространяющиеся вдоль брэгговских плоскостей поперечные ультразвуковые колебания с длиной волны  $\lambda_s$ , равной длине периода маятниковых осцилляций  $\tau_p$ , вызывают резонансное подавление аномального прохождения рентгеновских лучей [1]. В работе [2] экспериментально и теоретически исследовано влияние рентгеноакустического резонанса на кривые качания проходящего и дифракционного пучка. Предполагалось, что ультразвуковое возмущение накладывается на совершенный кристалл и, как следствие этого, теоретические кривые качания вычислялись в рамках когерентного приближения. Показана высокая чувствительность рентгеновской дифракции к ультразвуковым колебаниям с длиной волны, близкой к периоду маятниковых осцилляций. Следует при этом иметь в виду, что амплитуда упругой волны ультразвуковых колебаний по величине достаточно мала  $\Delta d/d \propto 10^{-8}$ , где  $\Delta d$  — максимальная деформация гармонического воздействия,  $d$  — межплоскостное расстояние.

Практически все реальные кристаллы содержат дефекты, влияние которых на формирование кривых качания в условиях рентгеноакустического резонанса не исследовано. Ранее сформулированные теории дифракции на гармонической сверхрешетке с дефектами [3-5] относятся к геометрии Брэгга и рассмотрены для случая  $\lambda_s \ll \tau_p$ . В случае Лауэ рассмотрение задачи рентгеновской дифракции в кристалле с дефектами в условиях рентгеноакустического резонанса представляет интерес как с позиций формирования профилей углового распределения когерентно и диффузионно рассеянных интенсивностей, так и с позиций выполнения условия резонанса в неидеальных кристаллах.

В настоящей работе в рамках статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей исследуется влияние дефектов структуры на формирование кривых качания в условиях рентгеноакустического резонанса. В отличие от работы [2], в которой для расчетов теоретических дифракционных кривых использовалось приближение многоволнового рассеяния и требовалось выполнение условия малых деформаций, построенный нами алгоритм расчетов базируется на общих уравнениях дифракции и не требует жестких ограничений на амплитуду модулирующей функции. Более того, алгоритм расчетов имеет структуру, позволяющую вычислять дифракционные спектры от кристаллов с градиентными по глубине распределениями концентрации и размеров дефектов.

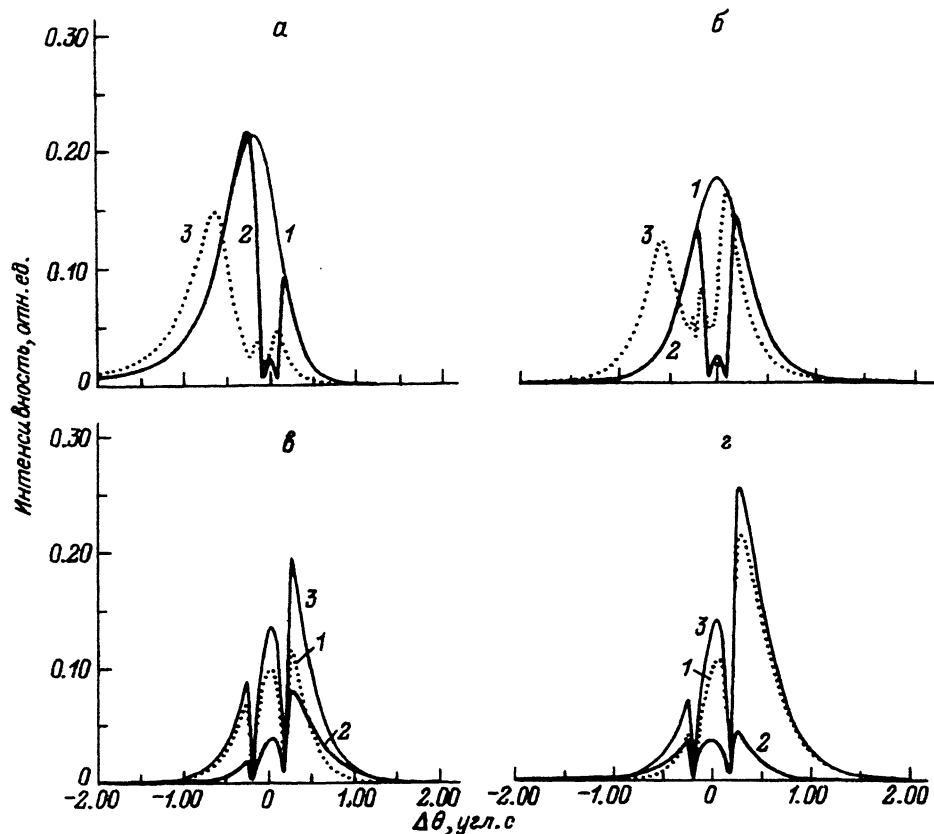


Рис. 1. Кривые качания от совершенного кристалла (а,б) и кристалла с дефектами (в,г) в направлении прохождения (а,в) и дифракции (б,г).

а,б: 1 — недеформированный кристалл, 2 — действие ультразвука, 3 — действие ультразвука и упругого изгиба; в,г — действие ультразвука на кристалл с дефектами, здесь и на рис. 2: 1 — когерентная, 2 — диффузная, 3 — полная интенсивность.

Под действием стоячей упругой волны происходит деформация решетки, в результате вектор атомных смещений можно представить в виде  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \sin(K_s z)$ . Здесь координата  $z$  направлена в глубину кристалла перпендикулярно его поверхности;  $K_s = 2\pi/\lambda_s$ . Амплитуда  $u_0$  зависит от величины деформации решетки и периода модуляции  $|u_0| = \lambda_s \Delta d / (2\pi d)$ . Упругий изгиб кристалла приводит к формированию дополнительного поля атомных смещений  $u_b$  [6]. Наконец, статистически распределенные дефекты вызывают случайные атомные смещения  $\delta u$  [3]. Все эти виды искажений кристаллической структуры учитывались в расчетах.

В качестве исходных параметров вычисления кривых качания использовались экспериментальные результаты [2]: выбрано (220) отражение  $\text{AgK}_\alpha$ -излучения кристалла кремния. Частота ультразвука  $f = 108.97 \text{ МГц}$ , величина скорости поперечных упругих волн в направлении [111]  $v_s = 5.09 \cdot 10^3 \text{ м/с}$  [2,7], что соответствует длине волны  $\lambda_s = 46.71 \text{ мкм}$ . В численном эксперименте учитывалось лишь

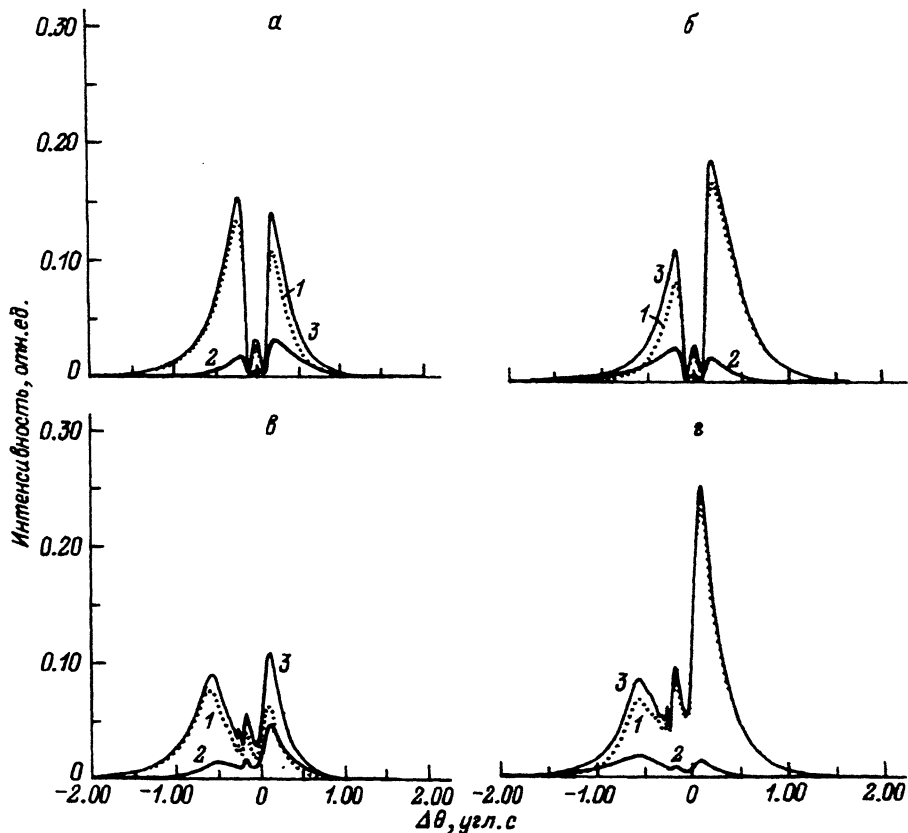


Рис. 2. Кривые качания от кристаллов с дефектами в направлении прохождения (а, в) и дифракции (б, г) в условиях рентгеноакустического резонанса. в, г — упруго изогнутый кристалл.

$\sigma$ -поляризованное излучение, для которого период маятниковых осцилляций совершенного кристалла  $\tau_p = 46.99$  мкм. Так как в условиях рентгеноакустического резонанса кривые качания очень чувствительны к ультразвуковым колебаниям [2], то в расчетах  $\Delta d/d = 0.65 \cdot 10^{-8}$ .

В верхней части рис. 1 представлены теоретические кривые качания проходящего (а) и дифракционного (б) пучков бездефектного кристалла. Сплошной тонкой линией показаны профили кривых качания от совершенного кристалла (при выключенном генераторе ультразвуковых колебаний). Действие ультразвуковой волны сильно изменяет форму кривой качания (сплошная толстая линия) как в направлении прохождения (а), так и в направлении дифракции (б). По своему виду кривые качания хорошо согласуются с экспериментальными результатами [2]. Пунктиром показаны дифракционные кривые при включенном генераторе ультразвука и одновременном изгибе отражающих атомных плоскостей. Здесь и на рис. 2 деформация решетки, вызванная упругим изгибом, достаточно мала и в пересчете на угловой сдвиг

кривой дифракции составляет 0.5 угл.с. Однако даже такая малая деформация заметно влияет на профиль кривой качания.

Вычисление дифракционных кривых от неидеальных кристаллов проводилось с использованием модели дефектов в виде сферических аморфных кластеров [8]. В нижней части рис. 1 помещены кривые качания проходящего ( $\epsilon$ ) и дифракционного ( $\zeta$ ) пучков кристалла с однородно распределенными дефектами. Радиус кластера  $R_0 = 1.0$  мкм, концентрация дефектов  $c_0 = 0.482 \cdot 10^{-10}$  см<sup>-3</sup>, что соответствует значению статического фактора Дебая-Валлера  $E = 0.98$ . Остальные параметры соответствуют кривым верхней части рис. 1. Нетрудно видеть, что наличие дефектов существенно изменяет форму кривой качания (ср. кривые 2 ( $a, b$ ) с кривыми 3 ( $\epsilon, \zeta$ )). Такое сильное различие обусловлено двумя причинами. Во-первых, на вид кривой качания заметное влияние оказывает угловое распределение диффузно рассеянных волн, во-вторых, изменяется профиль когерентно рассеянной интенсивности из-за увеличения периода маятниковых осцилляций в кристалле с дефектами ( $\tau_p = 47.95$  мкм). Последнее обстоятельство практически выводит дифракцию из условия рентгеноакустического резонанса, и начинает формироваться сателлитная структура кривой качания. Аналогом такого эффекта может служить, например, уменьшение длины волны ультразвука в совершенном кристалле [2].

С другой стороны, исследуя дифракцию в кристалле с дефектами ( $E = 0.99$ ,  $R_0 = 1.0$  мкм), можно подобрать такую частоту ультразвука ( $f = 107.84$  МГц), при которой будет выполняться условие, близкое к резонансному (рис. 2). Форму резонансной кривой приобретает не только когерентная составляющая (кривая 1), но и диффузно рассеянная интенсивность (кривая 2). Упругий изгиб кристалла заметно влияет на угловое распределение как когерентно, так и диффузно рассеянной интенсивности (рис. 2,  $\epsilon, \zeta$ ).

Итак, такие искажения кристаллической структуры как упругий изгиб и наличие микродефектов имеют существенное значение при исследовании явления рентгеновской дифракции в условиях рентгеноакустического резонанса.

#### Список литературы

- [1] Энтин И.Р. // Письма в ЖЭТФ. 1977. Т. 26. Вып. 5. С. 392-395.
- [2] Entin I.R., Assur K.P. // Acta Cryst. A. 1981. Vol. 37. P. 769-774.
- [3] Пунегов В.И. // ФТТ. 1990. Т. 32. Вып. 8. С. 2476-2479.
- [4] Пунегов В.И. // ЖТФ. 1990. Т. 60. Вып. 10. С. 82-87.
- [5] Пунегов В.И., Павлов К.М. // Кристаллография. 1993. Т. 38. № 5. С. 34-42.
- [6] Чуховский Ф.Н. // Металлофизика. 1980. Т. 2. № 6. С. 3-27.
- [7] Блаустанов Ф.Ф., Бондаренко В.С., Перемолова Н.В. и др. Акустические кристаллы. 1982. 632 с.
- [8] Пунегов В.И., Павлов К.М. // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. Вып. 12. С. 60-64.