

УДК 539.27

НЕЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ФАКТОРА ДЕБАЯ—ВАЛЛЕРА ПРИ КОГЕРЕНТНОМ УЛЬТРАЗВУКОВОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

Э. В. Золотоябко, В. Н. Гаврилов

С помощью мёссбауэровской дифракционной техники выделена доля чисто упругого рассеяния I_{el} при динамической дифракции излучения в монокристалле кремния. Обнаружена осциллирующая зависимость I_{el} от амплитуды возбуждаемых в образце акустических колебаний.

Тепловое движение атомов в кристаллах приводит к ослаблению интенсивности брэгговской дифракции, описываемому с помощью фактора Дебая—Валлера (ДВ) [1]

$$f = \exp(-H^2 \langle u_{\mathbf{H}}^2 \rangle), \quad (1)$$

где \mathbf{H} — передаваемый импульс, равный выбранному вектору обратной решетки; $\langle u_{\mathbf{H}}^2 \rangle$ — средний квадрат атомных смещений в направлении \mathbf{H} . Выражение (1) получается при усреднении фазовых множителей рассеянных волн $\langle \exp(i\mathbf{H}\mathbf{u}) \rangle$ по статистическому ансамблю с учетом гауссовского распределения смещений \mathbf{u}

$$\eta(\mathbf{H}\mathbf{u}) \sim \exp[-(\mathbf{H}\mathbf{u})^2/2\langle \mathbf{H}\mathbf{u} \rangle^2]. \quad (2)$$

Для малых смещений $H \langle u_{\mathbf{H}}^2 \rangle^{1/2} \ll 1$

$$f \approx 1 - H^2 \langle u_{\mathbf{H}}^2 \rangle. \quad (3)$$

В ряде задач, связанных с динамической дифракцией на ультразвуковых (УЗ) сверхрешетках, возникает проблема определения фактора ДВ в условиях внешнего возбуждения одной акустической волны с амплитудой \mathbf{w} , частотой ω , волновым вектором \mathbf{k} , смещения \mathbf{u} в которой подчиняются жестким фазовым соотношениям

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{w}}{2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t) + \text{к. с.} = \mathbf{w} \cos(|\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t|). \quad (4)$$

Такая волна модулирует Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости кристалла $\chi_{\mathbf{H}}^0$. Кроме основных узлов \mathbf{H} , в обратной решетке появляются сателлиты $\mathbf{H} \pm n\mathbf{k}$, отвечающие дополнительным Фурье-компонентам поляризуемости (см., например, [2])

$$\chi_{\mathbf{H} \pm n\mathbf{k}} = (-i)^n J_n(\mathbf{H}\mathbf{w}) \chi_{\mathbf{H}}^0, \quad (5)$$

где $J_n(\mathbf{H}\mathbf{w})$ — функция Бесселя n -го порядка. Интенсивность бесфонового (упругого) рассеяния ($n=0$), которую мы будем в дальнейшем отождествлять с фактором ДВ, в динамическом режиме ведет себя как

$$I_{el} \sim |\chi_{\mathbf{H}}| \sim |J_0(\mathbf{H}\mathbf{w})|, \quad (6)$$

т. е. должна осциллировать с ростом УЗ амплитуды \mathbf{w} .

В работе [3] эти качественные соображения подтверждены детальными расчетами спектрального распределения рассеянного излучения в условиях низкочастотного УЗ возбуждения (длина УЗ волны $\lambda = 2\pi/k > \tau$ — длины экстинкции). С помощью теории возмущений найдены собственные значения и собственные функции для блоховских состояний кванта излучения в кристалле, модифицированных за счет взаимодействия с акустическими колебаниями. С учетом граничных условий (геометрия Лауэ) построено волновое поле и вычислены интенсивности упругого I_{el} и неупругого I_{in} рассеяния. Оказалось, что при малых смещениях $Hw < 4/(\Delta k_0 T)^{1/2}$, где $\Delta k_0 = 2\pi/\tau$ — щель между листами «беззвучовой» дисперсионной поверхности, T — толщина кристалла

$$f = \frac{I_{el}(Hw)}{I_{el}(0)} \approx 1 - \frac{(Hw)^2}{2}, \quad (7)$$

$kT \approx 2\pi n$, $k/\Delta k_0 \ll 1$. Выражение (7) полностью коррелирует с классическим определением фактора ДВ (3), поскольку средний квадрат смещений $\langle u^2 \rangle$ в УЗ волне, исходя из (4), равен $w^2/2$. Особенности спектральных распределений в этом пределе, причем и для $\lambda > \tau$, и для $\lambda < \tau$, экспериментально и теоретически исследованы в работе [4].

При $Hw \gg 4/(\Delta k_0 T)^{1/2}$ и $k/\Delta k_0 \ll 1$ можно в однофононном приближении получить замкнутое (не в виде разложения в ряд) выражение для I_{el} , формально справедливое при $Hw > 1$

$$I_{el}(Hw) = I_{el}(0) |J_0(Hw)| \left| \frac{1 + J_1^2/4J_0^2}{(1 + J_1^2/2J_0^2)^{3/2}} \right|, \quad (8)$$

которое практически не отличается от соотношения (6). Формула (8) описывает осциллирующий фактор ДВ $f = I_{el}(Hw)/I_{el}(0)$, обусловленный модуляцией поляризуемости кристалла УЗ колебаниями.

Экспериментальное подтверждение развитых выше представлений осуществлялось с помощью специально поставленных дифракционных измерений. Поскольку в интересующем нас диапазоне УЗ частот $\nu = \omega/2\pi \approx 10 \div 100$ МГц энергетический обмен между излучением и УЗ фононами ничтожно мал (передачи энергии $\Delta E \sim 10^{-7}$ эВ), для выделения чисто упругого рассеяния I_{el} использовалась мёссбауэровская дифракционная спектроскопия [5]. Мёссбауэровский дифрактометр подробно описан в [5, 6]. В качестве источника излучения использовался Co^{57} в хроме активностью 10^{10} Бк. Поглотитель на пути рассеянного пучка — ферроцианид калия. Дифракция γ -квантов осуществлялась на бездислокационном монокристалле кремния диаметром 76 мм и толщиной $T = 342$ мкм, вырезанном перпендикулярно оси [111]. Изучались рефлексy (220) и (440) в геометрии Лауэ. Поперечные УЗ колебания в Si ($k \perp H$, $w \parallel H$) возбуждались с помощью кварцевого пьезопреобразователя (ПП) (Y-срез, основная частота $\nu_0 = 30$ МГц), приклеенного к образцу с помощью жидкой эпоксидной смолы. Для выделения I_{el} измерялись интенсивности дифракции I_R , I_∞ , соответствующие резонансному положению ядерных уровней Fe^{57} в радиоактивном источнике и поглотителе I_R и нерезонансной ситуации I_∞ . Можно показать [5], что при этом

$$I_{el} \sim \Delta I = I_\infty - I_R. \quad (9)$$

Некоторые предварительные измерения параметров УЗ поля и качества образца были выполнены на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3. Падающий пучок MoK_α с размерами 0.5×6 мм проходил через тонкий ПП ($T_p \approx 85$ мкм) и дифрагировал на атомных плоскостях Si. На рис. 1 приводится зависимость интенсивности дифракции (рефлекс (440)) от частоты акустических колебаний ν . Отчетливо проявляется резонансный характер дифракционного отклика на частотах ν_n , удовлетворяющих условию возникновения интенсивных стоячих волн в кремниевой пластине

$$\nu_n n / 2\nu_n = T, \quad (10)$$

где $v_s = 5.1 \cdot 10^5$ см/с — скорость звуковых волн с волновым вектором $k \parallel [111]$ и смещениями $w \parallel [2\bar{2}0]$. Конкретно для данного участка кристалла $\nu_4 = 29.750$, $\nu_5 = 37.190$ МГц. Разница в величине отклика на резонансах $n=4$ и $n=5$ связана с тем, что максимум возбуждения кварцевого ПП находится на частоте $\nu_b = 30$ МГц. Аналогичные результаты получены и для других точек области возбуждения УЗ поля при сканировании пластины Si вместе с ПП под рентгеновским пучком.

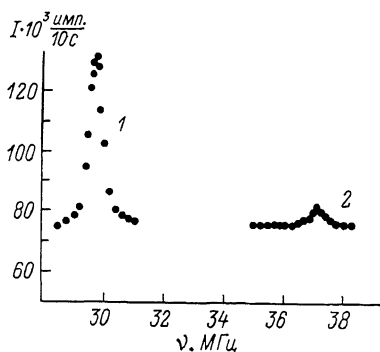


Рис. 1. Дифракционный резонансный отклик кремниевой пластины при УЗ возбуждении. Si ($4\bar{4}0$), $n=4$ (1) и 5 (2).

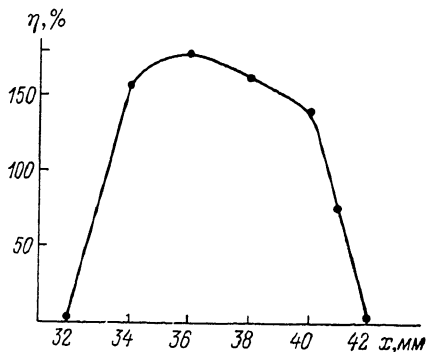


Рис. 2. УЗ добавка интенсивности дифракции рентгеновских лучей при сканировании образца с ПП вдоль диаметра пластины x (в мм). Si ($4\bar{4}0$).

На рис. 2 представлены данные по звуковому эффекту $\eta = [I(V) - I(0)]/I(0)$ (где $V \sim w$ — напряжение на ПП) при $V=9$ В на частоте, соответствующей $n=4$. Координата x по диаметру пластины отсчитывается от ее края. Необходимо иметь в виду, что дальнейшие мёсбауэровские дифракционные эксперименты проводились в условиях широкого падающего пучка, горизонтальный размер которого на входной поверхности Si равен примерно 15 мм. Данные рис. 2 говорят о том, что

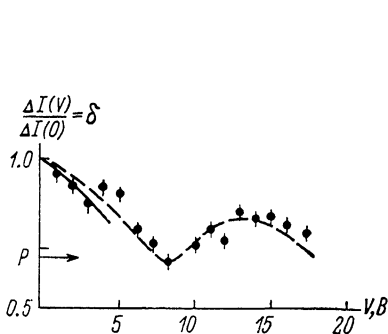


Рис. 3. Осциллирующая зависимость фактора ДВ на рефлексе ($2\bar{2}0$).

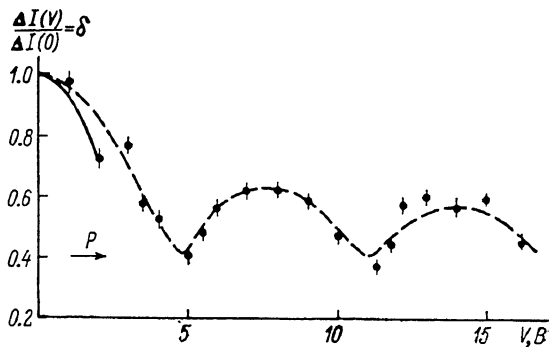


Рис. 4. Осциллирующая зависимость фактора ДВ на рефлексе ($4\bar{4}0$).

область возбуждения УЗ в Si составляет 10 мм в плоскости рассеяния, т. е. часть γ -квантов не должна взаимодействовать с УЗ. С другой стороны, распределение УЗ поля (там, где оно имеется) достаточно однородно. Этот факт является весьма существенным для поиска осцилляций $I_{e1}(Hw)$, поскольку неоднородности w «замазывают» осцилляционные эффекты. После предварительных рентгеновских измерений образец вместе с приклеенным ПП был перенесен на мёсбауэровский дифрактометр.

На рис. 3 изображена зависимость нормированной интенсивности чисто упругого рассеяния $\delta(V) = I_{e1}(V)/I_{e1}(0) = [I_{\infty}(V) - I_R(V)]/[I_{\infty}(0) -$

$-I_R(0)$] от напряжения $V \sim w$ ($v=29.70$ МГц) при дифракции мёссбауэровского излучения на рефлексе (2 $\bar{2}$ 0). Отчетливо проявляется осциллирующее поведение I_{e1} при больших $Hw > 1$ (первый нуль функции Бесселя в районе $V=9$ В соответствует $Hw=2.4$). Заметим, что предсказываемые теорией осцилляции фактора ДВ f ведут себя таким образом, что $f=0$ при $Hw=z_j$, где z_j — нули функции $J_0(Hw)$. На эксперименте зависимость $\delta(V)$ осциллирует относительно некоторого фонового уровня $P=0.67$, поскольку, как уже указывалось, для широкого пучка часть γ -квантов не испытывает при дифракции влияния УЗ колебаний. Штриховая кривая на рис. 3 соответствует выражению (8) (с учетом $P=0.67$), сплошная — (7). Экспериментальные данные достаточно хорошо согласуются с теоретическими расчетами и при малых ($Hw < 1$), и при больших ($Hw > 1$) УЗ смещениях, причем привязка всей кривой (калибровка $V \leftrightarrow w$) осуществляется только в одной точке минимума $\delta(V)$ (которая соотносится с z_1).

Фоновый уровень P можно уменьшить с помощью более тщательной юстировки кристалла с ПП относительно падающего пучка (юстировка, в частности, зависит от рефлекса (hkl)). Поскольку передаваемый импульс для отражения (4 $\bar{4}$ 0) в два раза превышает величину H для (2 $\bar{2}$ 0), то на рис. 4 уже наблюдаются две осцилляции $\delta(V)$ и два минимума, соответствующие двум первым нулям функции Бесселя z_1 и z_2 . Экспериментальные данные для рефлекса (4 $\bar{4}$ 0) также хорошо согласуются с расчетами по формулам (7), (8) (с учетом $P=0.4$).

Таким образом, в этих измерениях впервые наблюдалась осциллирующая зависимость фактора ДВ при динамической дифракции в условиях когерентного УЗ возбуждения.

В заключение заметим, что похожее поведение вероятности эффекта Мёссбауэра

$$f_M = f_0 J_0^2(Qw), \quad (11)$$

где Q — импульс γ -кванта, для гармонического движения излучающего или поглощающего ядра известно, начиная с классической работы [7], и наблюдалось в мёссбауэровском эксперименте на пропускание [8]. Неэкспоненциальная зависимость обоих факторов (f_M и f) от амплитуды w связана с когерентностью УЗ возбуждения. Тот факт, что в (8) входит $J_c(Hw)$ (а не J_0^2 , как в (11)), обусловлен динамическим характером дифракции, когда интенсивность рассеяния пропорциональна структурному фактору $|F| \sim |\chi_H J_0(Hw)|$.

Авторы благодарят Е. М. Иолина за полезные обсуждения работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Кривоглаз М. А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967. 336 с.
- [2] Entin I. R. Phys. St. Sol. (b), 1985, vol. 132, N 2, p. 355—364.
- [3] Золотоябко Э. В. Препринт Ин-та физики АН Латв.ССР, ЛАФИ-129. Саласпилс, 1988.
- [4] Gavrillov V. N., Zolotoyabko E. V., Iolin E. M. J. Phys. C, 1988, vol. 92, N 2, p. 471—483.
- [5] Золотоябко Э. В., Иолин Е. М. Когерентное рэлеевское рассеяние мёссбауэровского излучения. Рига: Зинатне, 1986. 174 с.
- [6] Золотоябко Э. В., Кувалдин Б. В., Астапкович А. Ю., Козлов Е. Н. Изв. АН ЛатвССР. Сер. физ. и техн. наук, 1977, № 3, с. 53—58.
- [7] Шапиро Ф. Л. УФН, 1960, т. 72, № 4, с. 685—696.
- [8] Мкртчян А. Р., Аракелян А. Р., Арутюнян Г. А., Кочарян Л. А. Письма в ЖЭТФ, 1977, т. 26, № 8, с. 599—603.