

$$\Omega_k = \frac{2\alpha + s^2}{2} \Omega_k^{(0)} - \frac{1}{2} (s_k n_n + n_n s_n + s_n s_n) \Omega_n^{(0)}, \quad \Omega_k = \Omega_k^{(0)} +$$

$$+ \frac{1}{2(1+\alpha)} [s^2 \Omega_k^{(0)} - (s_k + s^2 n_k) (n_n \Omega_n^{(0)} + s_n \Omega_n^{(0)}) + (1 + \alpha + s^2) n_k n_n \Omega_n^{(0)}]; \quad (7б)$$

$$\Omega_k^* = (\alpha^2 - 1) \Omega_k^{(0)}, \quad \Omega_k = \Omega_k^{(0)}, \quad (7в)$$

где приняты обозначения $\alpha = s_n n_n$, $s^2 = s_n s_n$.

Задаваясь видами \hat{K} и \hat{g} из (6), не представляет труда уточнить величину \mathbf{B}^* , а также провести анализ всех законов наследования для точечных, линейных дефектов и их плотностей, которые приводятся в работах [1-5]. Это позволит более определенно представить себе характер наследования дефектов при конкретных бездиффузионных превращениях или при гидростатическом сжатии высоким и сверхвысоким давлением произвольно анизотропного тела, содержащего дефекты.

Полученные результаты совместно с данными работ [1-5] позволяют построить теорию формирования гетерофазной структуры при фазовых превращениях в реальных твердых телах. Основные контуры такой теории и следствия из нее предложены в работах [7, 8]. Указанные принципы наследования дисклинации позволяют количественно рассмотреть эффект наследования дисклинации при двойниковании, обсуждаемый в работе [9].

Л и т е р а т у р а

- [1] Стрельцов В. А. ФТТ, 1985, т. 27, № 6, с. 1718—1722.
- [2] Стрельцов В. А. ФТТ, 1985, т. 27, № 12, с. 3713—3715.
- [3] Стрельцов В. А. ФММ, 1987, т. 63, № 1, с. 17—23.
- [4] Стрельцов В. А. ФММ, 1987, т. 64, № 4, с. 672—678.
- [5] Streltsov V. A. Phys. St. Sol. (a), 1985, vol. 91, N 1, p. 89—98.
- [6] Лихачев В. А., Хайров Р. Ю. Введение в теорию дисклинаций. Л., 1975. 184 с.
- [7] Стрельцов В. А. УФЖ, 1987, т. 32, № 9, с. 1420—1426.
- [8] Стрельцов В. А. ФТТ, 1986, т. 28, № 12, с. 3728—3731.
- [9] Рыбин В. В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 222 с.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
29 марта 1988 г.
В окончательной редакции
22 июня 1988 г.

РОЛЬ МНОВОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ В АСИММЕТРИИ КАРТИН КАНАЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ОТ НЕЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

В. В. Макаров, Н. Н. Петров

Асимметрия дифракции рентгеновских лучей на нецентросимметричных кристаллах (т. е. различие интенсивностей рефлексов hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$) известна уже давно и широко используется для определения полярности бинарных соединений (см., например, [1-3]). В случае дифракции электронов аналогичные эффекты наблюдались в просвечивающей микроскопии при больших энергиях [4].

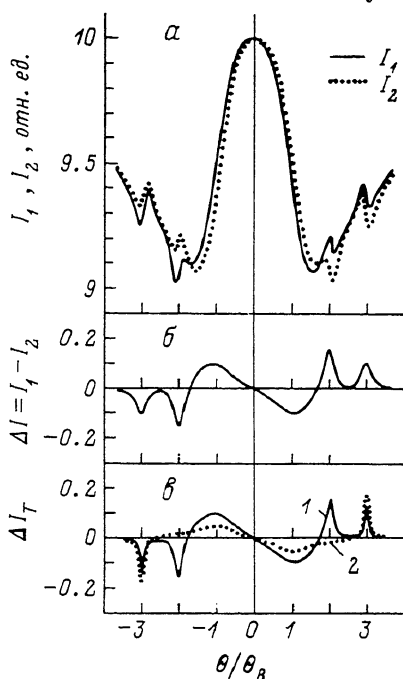
Недавно связанная с нецентросимметричностью асимметрия была обнаружена также и в картинах каналирования электронов (ККЭ) на моно-

кристаллах SiC при энергиях $E=2\div 10$ кэВ [5]. Выполненный в этой работе расчет в двухволновом приближении динамической теории дифракции показал, что для плоскостей $\{0001\}$, так же как и в случае дифракции рентгеновских лучей, эффект должен наблюдаться только на нечетных порядках дифракции. Этот результат является следствием того, что для указанных плоскостей расстояние между атомами разного сорта составляет $1/4$ периода решетки; он справедлив и для плоскостей $\{111\}$ в кристаллах со структурой цинковой обманки. Однако в то время как в случае рентгеновской дифракции это правило подтверждено на опыте и для кристаллов SiC [3], и для соединений A_3B_5 [1, 2], экспериментальные данные [5] не давали оснований считать, что оно выполняется и в случае картин каналирования электронов.

Для выяснения этого вопроса мы провели детальные исследования структуры ККЭ на кристаллах SiC и GaAs. Использовалась усовершенствованная методика измерений, позволяющая выделять линии, определенным образом ориентированные на ККЭ, на фоне других деталей картины. С этой целью в процессе записи ориентационного профиля интенсивности неупругого отражения I при медленном изменении угла падения θ осуществлялось быстрое качание луча в плоскости, ориентированной под заданным углом к направлению записи, и усреднение сигнала

Зависимости интенсивности неупругого отражения I от приведенного угла падения θ/θ_B электронного пучка для систематических рядов 0001 и 000 $\bar{1}$ кристалла SiC при $E=10$ кэВ (а) и функции, определяющие асимметрию этих зависимостей.

б — эксперимент, в — теоретический расчет.



по периоду качания (изменение θ в двух плоскостях производилось с помощью магнитной отклоняющей системы при неподвижном образце). В результате при установке плоскости быстрого качания, например, параллельно направлению линий систематического ряда отражений на регистрируемой зависимости $I(\theta)$ фиксируются только амплитуды линий этого ряда. Измерения проводились в различных участках ККЭ при $E=2\div 10$ кэВ. Ориентация кристаллов SiC, так же как и в [5], была $10\bar{1}0$, а GaAs — 110 .

Типичный результат для трех порядков дифракции систематических рядов 0001 и 000 $\bar{1}$ вне центра ККЭ, полученный на образце SiC при $E=10$ кэВ, представлен на рисунке, а. По оси абсцисс отложен нормированный угол падения θ/θ_B , θ_B — угол Брэгга для отражения 0001 (1.37°). Кривые I_1, I_2 соответствуют двум положениям кристалла, отличающимся поворотом на 180° вокруг нормали к поверхности. На рисунке, б построена разность ординат ΔI кривых а, характеризующая асимметрию этих кривых. Как видно, асимметрия наблюдается на всех порядках дифракции, причем наибольшую величину она имеет при $\theta/\theta_B=2$, т. е. там, где, согласно двухволновому расчету [5], эффект должен вообще отсутствовать.

Аналогичная картина наблюдалась и на кристаллах GaAs. Хотя в этом случае за счет близости атомных номеров Ga и As величина асимметрии мала, она остается вполне обнаружимой. Измеренное различие в интенсивностях пиков 111 и $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ при $E=8\div 10$ кэВ составило $\approx 4\%$, для 222 и $2\bar{2}\bar{2} \approx 5\%$, для третьего порядка $\approx 3\%$.

Поскольку использованное в [5] теоретическое приближение является довольно грубым, мы провели более точный многоволновой расчет зависимостей $I(\theta)$ для систематического ряда отражений 0001 в SiC с помощью развитой в [6] модели, основанной на вычислении распределения плотности дифракционного волнового поля $|\Psi|^2(x, z)$ по объему кристалла с учетом взаимодействия блоховских волн и их поглощения (x — направление, перпендикулярное атомным плоскостям, на которых происходит дифракция; z — направление внутренней нормали к поверхности). При этом использовался разработанный нами метод приближенных вычислений, позволяющий в рассматриваемом нецентросимметричном случае избежать необходимости применения комплексной матрицы. Для первого и третьего порядков дифракции учитывались четыре отражения (соответственно 0, $\pm g$, $2g$ и 0, g , $2g$, $3g$), для второго — пять (0, $\pm g$, $\pm 2g$).

Результаты вычислений асимметричной добавки $\Delta I_T(\theta/\theta_B)$ (в тех же единицах, что и на рисунке, *a*, *b*) построены на рисунке, *в* (кривая 1); там же приведен и результат двухволнового расчета (кривая 2). Видно, что увеличение числа рассматриваемых отражений приводит к появлению пика при $\theta/\theta_B=2$, причем абсолютные величины ΔI_T хорошо согласуются с экспериментом во всем диапазоне θ/θ_B .

Физический смысл появления эффекта на втором порядке дифракции в многоволновом случае заключается в следующем. В двухволновом приближении распределение $|\Psi|^2(x)$ имеет только одну пространственную гармонику с периодом d/n (d — период решетки, n — порядок дифракции); при этом структура решения такова, что «запрет» на асимметрию возникает при условии, что расстояние между атомами разного сорта ($d/4$) равно или кратно половине периода этой гармоники, т. е. при четных n . В многоволновом же случае при дифракции любого порядка имеется набор гармоник с периодами d , $d/2$, $d/3$, . . . , $d/(k-1)$ (k — число учитываемых отражений), т. е. всегда присутствуют нечетные пространственные гармоники, на которые «запрет» не распространяется. Заметим, что возникновением набора гармоник в многоволновом случае объясняется и появление кинематически запрещенных линий 222 в ККЭ кристаллов с решеткой алмаза.

Таким образом, приведенные в работе экспериментальные данные, качественно отличающиеся как от случая рентгеновской дифракции, так и от результата, даваемого двухволновым приближением динамической теории, можно рассматривать как еще один пример специфики многоволновой дифракции электронов в кристаллах в дополнение к таким известным чисто многоволновым эффектам, как, например, упомянувшееся выше появление «запрещенных» линий на ККЭ кристаллов со структурой алмаза или как эффект критического напряжения. Следует отметить также, что результаты данной работы указывают на неприменимость для ККЭ сформулированных в [4, с. 216] принципов возможности наблюдения эффектов асимметрии в нецентросимметричных структурах при электронной дифракции напросвет. Это связано с тем, что в случае ККЭ регистрируются не дифрагированные пучки, а электроны, испытавшие некогерентное рассеяние на большой угол.

Л и т е р а т у р а

- [1] White J. G., Roth W. C. J. Appl. Phys., 1959, vol. 30, N 6, p. 946—947.
- [2] Warekois E. P., Metzger P. H. J. Appl. Phys., 1959, vol. 30, N 7, p. 960—962.
- [3] Brack K. J. Appl. Phys., 1965, vol. 36, N 11, p. 3560—3562.
- [4] Томас Г., Гориндж М. Дж. Просвечивающая электронная микроскопия материалов. М.: Наука, 1983. 320 с.
- [5] Макаров В. В., Подсвилов О. А. Письма в ЖТФ, 1986, т. 12, № 8, с. 501—505.
- [6] Reimer L., Heilers U., Saliger G. Scanning, 1986, vol. 8, N 3, p. 101—118.

Ленинградский политехнический институт им. М. И. Калинина
Ленинград

Поступило в Редакцию
24 июня 1988 г.