Известия НАН Армении, Физика, т.35, №6, с.320-327 (2000)

УДК 548.732

РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ПРИ СКОЛЬЗЯЩЕЙ ГЕОМЕТРИИ НА ПОВЕРХНОСТНОЙ АКУСТИЧЕСКОЙ ВОЛНЕ

А.Р. МКРТЧЯН¹, Л.В. ЛЕВОНЯН², А.В. ПЕТРОСЯН¹, У. ВАН БЮРК³, В. МАТЦ⁴

¹) Институт прикладных проблем физики НАН Армении

²) Ереванский государственный университет

3) Мюнхенский политехнический институт, Германия

4) Центр научных исследований Розендорфа, Германия

(Поступила в редакцию 11 августа 2000 г.)

Рассмотрено рассеяние рентгеновских лучей при скользящей геометрии на кристалле при возбуждении поверхностной акустической волны, направленной перпендикулярно вектору дифракции. Найдена интенсивность волнового поля на конечном расстоянии кристалл – детектор. Показано, что поверхностная акустическая волна уменьшает величину основного пика интенсивности зеркально-отраженной дифрагированной волны и увеличивает интенсивность сателлитов. При увеличении скользящего угла наблюдения основной пик интенсивности зеркально-дифрагированной волны расщепляется.

Введение

Дифракция рентгеновских лучей от монокристалла при симметричной лауэвской геометрии с зеркальным отражением, т.е. в ситуации, когда падающий и дифрагированный пучки образуют малые скользящие углы с поверхностью кристалла, впервые рассмотрена в [1]. Развитие теории дифракции в данной геометрии проведено в [2]. Эта схема дифракции в [3] изучалась в условиях малого отклонения отражающих плоскостей от симметричного расположения и было показано, что отклонения порядка одной угловой минуты уже приводят к изменениям интенсивности на 10%. Как показано в [4], именно такие разориентации могут образоваться поперечным компонентом поверхностной акустической волны (ПАВ) в кристалле, направленной вдоль вектора дифракции. Измененный ПАВ-ом рельеф кристалла в этом случае приводит к Лауэ-Брэгтовским переходам, что существенным образом отражается на форме профилей коэффициента отражения в зависимости от амплитуды ПАВ.

В данной работе рассматривается рассеяние рентгеновских лучей в скользящей геометрии на кристалле при возбуждении ПАВ, направленной перпендикулярно вектору дифракции.

Постановка задачи и основные формулы

На свободной поверхности кристалла возбуждаемые ПАВ, как известно [5], являются волнами Рэлея с вертикальной поляризацией. Предположим, что положения колеблющихся атомов описываются вектором смещения u(r,t), компоненты которого в поле стоячей волны имеют следующий вид:

$$u_x = 0; \ u_y = u_1 e^{-\beta x} \sin\left(\frac{2\pi y}{\lambda_{us}}\right) \sin \omega t; \ u_x = u_0 e^{-\beta x} \sin\left(\frac{2\pi y}{\lambda_{us}}\right) \sin \omega t,$$
 (1)

где u_1 и u_0 – продольная и поперечная компоненты (согласно [5] $u_1 < u_0$), λ_{us} и ω – длина и частота ПАВ, β – фактор, характеризующий затухание ПАВ с ростом глубины в кристалле. Координатная ось выбрана таким образом, чтобы свободная поверхность кристалла являлась плоскостью z = 0, ось z направлена в глубь кристалла. Вектор дифракции h направлен по оси x (рис.1): $h_x = 2K_0 \sin \theta_B$; $h_y = 0$; $h_z = 0$. $K_0 = 2\pi / \lambda$ – волновое число в вакууме, θ_B – угол Брэгта для волны с длиной λ .



Рис.1. Схема дифракции рентгеновских лучей в скользящей геометрии. Пунктирными линиями обозначены границы освещенной области кристалла. Пусть падающая монохроматическая волна имеет амплитуду E_0 , волновой вектор K₀ с отражающими плоскостями составляет угол θ_B , а с поверхностью кристалла при отсутствии ПАВ – малый угол скольжения Φ_0 , сравнимый с критическим углом $\Phi_c = \sqrt{|\chi|} \sim 10^{-3} (\chi -$ комплексная поляризуемость кристалла).

В этой геометрии, как отмечено в [1,2], наряду с зеркально-отраженной волной, образуется также зеркально-отраженная дифрагированная волна (ЗДВ), амплитуду которой обозначим через E_h^s , с волновым вектором K_h^s . Локальные углы, которые образуют эти волны с поверхностью кристалла, обозначим через Φ'_0 и Φ'_h :

$$\Phi'_0 = \Phi'_h = \Phi_0 - \frac{2\pi u_0}{\lambda_{us}} \cos \theta_B \cos \frac{2\pi y}{\lambda_{us}} \sin \omega t .$$
(2)

Как следует из (1), hu = 0, т.е. рассматриваемые смещения не приводят к отклонению от условия Брэгта. В таком случае ЗДВ будет чувствительна лишь к смещениям, обусловленным изменениями микрорельефа поверхности кристалла.

Будем считать, что характеристики ПАВ таковы, что выполняется приближение

$$\gamma_0 = \frac{2\pi u_0}{\lambda_{\mu\sigma}} \cos \theta_B \le 10^{-3} \,. \tag{3}$$

Волновой вектор ЗДВ имеет компоненты

$$K_{h}^{s} = K_{0} \left(\sin \theta_{B}; \cos \theta_{B} - \frac{\Phi_{h}^{2}}{2 \cos \theta_{B}}; -\Phi_{h} \right), \tag{4}$$

где $\Phi_h = \Phi_0 - 2\gamma_0 \cos\left(\frac{2\pi y}{\lambda_{us}}\right) \sin \omega t$.

Проследим за распространением ЗДВ. Волновое поле в точке г' запишется (см., например, [6]) в виде

$$\widetilde{E}_{h}^{s}(\mathbf{r}',t) = \frac{K_{0}}{2\pi i} \iint_{S} E_{h}^{s}(\mathbf{r},t) \frac{e^{iK_{h}^{s}\mathbf{r}+iK_{0}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \cos\beta(\mathbf{r},\mathbf{r}',t)dS , \qquad (5)$$

где S – рельеф кристалла при наличии ПАВ, точки г и г' имеют координаты

$$\mathbf{r} = (x, y, u_z); \qquad \mathbf{r}' = (L\sin\theta_B + x'; \ L\cos\theta_B + y'; \ z'). \tag{6}$$

L - расстояние кристалл-детектор, так что

322

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{(L\sin\theta_B + \mathbf{x}' - \mathbf{x})^2 + (L\cos\theta_B + \mathbf{y}' - \mathbf{y})^2 + (\mathbf{z}' - \mathbf{u}_z)^2} .$$
(7)

 $\beta(r, r', t)$ – угол, который образует вектор r - r' с внешней нормалью к поверхности S в точке r в момент времени t:

$$\cos\beta(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = -\frac{z'-u_z}{L} + \gamma_0 \cos\left(\frac{2\pi y}{\lambda_{ux}}\right)\sin\omega t .$$
(8)

Введем угол наблюдения φ , определяемый $\varphi = -z'/L$. Естественно предположить, что φ также порядка Φ_c , то есть $\varphi \sim 10^{-3}$. Допустим, что x, y, x', y' – величины порядка $L\varphi$. Поскольку для рассматриваемого случая $|u_x| \ll L\varphi$, то (8) можно записать в виде

$$\cos \beta(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \varphi + \gamma_0 \cos\left(\frac{2\pi y}{\lambda_{us}}\right) \sin \omega t .$$
(9)

Следует отметить, что формула (5) выводится в предположении $LK_0 \cos \beta(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) >> 1$ [6,7], что равносильно условию $K_0L(\varphi - \gamma_0) >> 1$, которое выполняется практически, если $\varphi > \gamma_0$.

В (5) для вычисления амплитуды $E_h^s(\mathbf{r},t)$ на поверхности кристалла можно воспользоваться плосковолновым приближением теории [2] для локальных значений Φ'_0 и Φ'_h , как это предлежено в [4]:

$$E_{h}^{x} = \Phi_{0}^{\prime} \frac{\sqrt{\Phi_{0}^{\prime 2} + \chi_{0} - \chi_{h}} - \sqrt{\Phi_{0}^{\prime 2} + \chi_{0} + \chi_{h}}}{\left(\sqrt{\Phi_{0}^{\prime 2} + \chi_{0} - \chi_{h}} + \Phi_{0}^{\prime}\right) \left(\sqrt{\Phi_{0}^{\prime 2} + \chi_{0} + \chi_{h}} + \Phi_{0}^{\prime}\right)} E_{0}.$$
(10)

Для дальнейшего упрощения расчетов введем координату ρ , указывающую расстояние точки г на поверхности кристалла от направления K_0 , проходящего через начало координат 0: $\rho = x \cos \theta_B +$ $+y \sin \theta_B$ (рис.2). Пусть плоскость наблюдения перпендикулярна K_h^s . Тогда координаты x' и y' удовлетворяют условию $x' \sin \theta_B + y' \cos \theta_B = 0$, так что для r' введем координату ξ : $x' \cos \theta_B - y' \sin \theta_B = \xi \cos 2\theta_B$. Таким образом, на плоскости наблюдения вектор r' определяется парой координат φ и ξ : $r' = r'(\varphi, \xi)$. Тогда вместо (7) имеем:

$$\left|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right| = L - \mathrm{tg}\theta_B(\rho + d) + \frac{1}{2L}(\rho - a)^2 + \frac{L}{2}\varphi^2 + u_z\varphi + \frac{\mathrm{tg}\theta_B}{2}(\rho + d)\left(\frac{(\rho - a)^2}{L^2} + \varphi^2\right), (11)$$

где $a = 2y \sin \theta_B + \xi \cos 2\theta_B$, $d = y \frac{\cos 2\theta_B}{\sin \theta_B}$.

Для фазы К ^{*} г получаем

$$\mathbf{K}_{h}^{s} \mathbf{r} = \mathbf{K}_{0} \left[\rho \operatorname{tg} \theta_{\beta} + y \frac{\cos 2\theta_{\beta}}{\cos \theta_{\beta}} - \frac{(\Phi_{0} - 2\gamma)^{2}}{2 \cos \theta_{\beta}} y - (\Phi_{0} - 2\gamma) u_{z} \right], \quad (12)$$

где
$$\gamma = \gamma_0 \cos\left(\frac{2\pi y}{\lambda_{ur}}\right) \sin \omega t.$$



Рис.2. Схема дифракции и регистрации рентгеновских лучей при скользящей геометрии (вид сверху).

Подставляя (11) и (12) в (5) и проведя интегрирование по ρ , предварительно пренебрегая только членом, содержащим ρ^3 в фазе, для усредненной по времени интенсивности в безразмерных координатах $y \rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_{us}} y$, $\xi \rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_{us}} \xi$, $t \rightarrow \omega t$, получаем окончательно

$$I_{h}^{s}(\varphi,\xi) = \frac{\lambda_{hs}^{2}}{8\pi^{3}\lambda L\cos^{2}\theta_{B}} \int_{0}^{2\pi} dt \left| \int_{y_{min}}^{y_{max}} dy E_{h}^{s}(y,t)(\varphi + \gamma_{0}\cos y\sin t) \times \exp\left(i\Omega\left\{ \left[\varphi^{2} - \left(\Phi_{0} - 2\gamma_{0}\cos y\sin t\right)^{2} \right] y + \right] \right\} \right]$$
(13)

$$+2\gamma_0 \sin y \sin t(\varphi - \Phi_0 + 2\gamma_0 \cos y \sin t) - b(y + c\xi)^3 \bigg\} \bigg)^{-},$$

где
$$\Omega = \frac{\lambda_{us}}{2\cos\theta_B\lambda}$$
, $b = \frac{2\lambda_{us}^2\sin^4\theta_B}{\pi^2L^2}$, $c = \frac{\cos 2\theta_B}{2\sin\theta_B}$.

Нетрудно проверить, что если область интегрирования по у содержит много длин ПАВ, то фаза подынтегрального выражения в (13) есть быстроосциллирующая функция:

$$\Psi(y,t) = \Omega\{[\varphi^2 - (\Phi_0 - 2\gamma_0 \cos y \sin t)^2]y + 2\gamma_0 \sin y \sin t \times \\ \times (\varphi - \Phi_0 + 2\gamma_0 \cos y \sin t) - b(y + c\xi)^3.$$
(14)

В этом случае основной вклад в интеграл будут давать стационарные точки, которые, в свою очередь, определяются из стационарного уравнения

$$\frac{\partial \Psi(y_{ct.},t)}{\partial y} = 0.$$
(15)

Вначале проанализируем (13) в случае отсутствия ПАВ, т.е. $\gamma_0 = 0$. Из (14) получаем

$$\Psi(y,t) = \Omega[(\varphi^2 - \Phi_0^2)y - b(y + c\xi)^3].$$
(16)

Решениями уравнения (15) будут две стационарные точки $(y_{cr.})_{1,2} = -c\xi \pm \sqrt{\frac{\varphi^2 - \Phi_0^2}{3b}}$, которые при $\varphi \to \Phi_0$ сливаются в одну точку $y_{cr.} = -c\xi$.

Поскольку в этой точке $\Psi''(y_{ct},t)=0$, а $\Psi''(y_{ct},t)=-6\Omega b$, то лучи при $\varphi \to \Phi_0$ образуют каустическую поверхность [6]. Такой результат естественен, поскольку максимальную интенсивность следовало ожидать именно при $\varphi \to \Phi_0$. Интенсивность волнового поля в этом случае выражается функциями Эйри.



Рис.3. Распределение интенсивности ЗДВ, дифрагированной на одной ПАВ при а) $\varphi = \Phi_0$, для разных значений амплитуд ПАВ $\gamma_0 = m \cdot 10^{-3}$, б) для разных значений φ , амплитуда ПАВ $\gamma_0 = 0.2 \cdot 10^{-3}$.

При наличии ПАВ аналитическое решение уравнения (15) невозможно. Однако, при $\gamma_0 \ll \Phi_0$ стационарные точки меняются мало и характер дифракционной картины в целом сохраняется.

Отметим, что если область интегрирования содержит малое число ПАВ, то метод стационарной фазы неточен. В этом случае надо пользоваться численным расчетом.

На рис.3а приведены распределение интенсивности ЗДВ, дифрагированной на одной ПАВ при $\varphi \rightarrow \Phi_0$ для разных значений амплитуд, а на рис.36 — то же для разных значений φ и для одного значения амплитуды ПАВ γ_0 . Как видно из рис.3а, ПАВ уменьшает величину основного пика интенсивности ЗДВ и увеличивает интенсивность сателлитов. Интенсивность последних, как это видно из рис.36, имеет тенденцию к возрастанию с увеличением угла φ . С ростом φ основной пик расщепляется. На рис.4 приведены аналогичные распределения для случая, когда в области освещения содержатся две волны ПАВ. В этом случае, как и следует из оптической теории дифракции (см. [7]), если высота основного пика интенсивности ЗДВ при отсутствии ПАВ увеличена в четыре раза, то в зависимости от амплитуды ПАВ это "увеличение" уменьшается. Между двумя минимумами распределения появляется добавочный минимум.



Рис.4. Распределение интенсивности ЗДВ, дифрагированной на двух ПАВ при а) $\varphi = \Phi_0$, для разных значений амплитуд ПАВ $\gamma_0 = m \cdot 10^{-3}$, б) для разных значений φ , амплитуда ПАВ $\gamma_0 = 0.2 \cdot 10^{-3}$.

Таким образом, при разных числах ПАВ, участвующих в дифракции, характер дифракционной картины в основном сохраняется, хотя тонкая структура изображения усложняется с ростом их числа. Вышеизложенное важно иметь в виду при расшифровке рентгенодифракционных картин.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. W.C.Marra, P.Eisenberger and A.Y.Cho. J. Appl. Phys., 50, 6927 (1979).
- 2. A.M.Afanas'ev and M.K.Melkonyan. Acta. Cryst., A 39, 207 (1983).
- P.A.Aleksandrov, A.M.Afanasiev, and S.A.Stepanov. Phys. stat. sol. (a), 86, 143 (1984).
- А.Р.Мкртчян, Л.В.Левонян, А.Г.Мкртчян, А.В.Петросян, М.Брунел, Д.Росшулкин, У. ван Бюрк. Тезисы докладов Второй Национальной Конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов. Москва, ИК РАН, 1999, стр. 209.
- С.В.Бирюков, Ю.В.Гуляев, В.В.Крылов, В.П.Плесский. Поверхностные акустические волны в неоднородных средах. М., Наука, 1991.
- 6. С.Солимено, Б.Крозиньяни, П. Ди Порто. Дифракция и волноводное распространение оптического излучения. М., Мир, 1989.
- 7. М.Борн, Э.Вольф. Основы оптики. М., Наука, 1973.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ՑՐՈՒՄԸ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ԱԿՈՒՍՏԻԿ ԱԼԻՔԻ ՎՐԱ ՍԱՀՔԻ ՓՈՔՐ ԱՆԿՅՈՒՆՆԵՐԻ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ա.Ռ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Լ.Վ ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Ա.Ո. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, ՈՒ. ՎԱՆ ԲՅՈՒՐԿ, Վ. ՄԱՏՅ

Դիտարկված է բյուրեղում դիֆրակցիայի վեկտորին ուղղահայաց ուղղությամբ գրգոված մակերևույթային ակուստիկ ալիքի վրա ռենտգենյան ճառագայթների ցրումը սահքի փոքր անկյունների դեպքում։ Որոշված է ալիքային դաշտի ինտենսիվությունը բյուրեղից դետեկտոր վերջավոր հեռավորության վրա։ Յույց է տրված, որ մակերևույթային ակուստիկ ալիքի ազդեցությամբ փոքրանում է հայելային դիֆրակցված ալիքի հիմնական պիկի ինտենսիվությունը և աճում է սաթելիտների ինտենսիվությունը։ Մահքի դիտարկման անկյան մեծացմանը զուգընթաց հիմնական պիկը ճեղքվում է։

SCATTERING OF X-RAYS ON THE SURFACE ACOUSTIC WAVE IN THE CASE OF GRAZING GEOMETRY

A.R. MKRTCHYAN, L.V. LEVONYAN, A.V. PETROSYAN, U. VAN BURK, W. MATZ

The scattering of X-rays on a crystal is considered in grazing geometry when a surface acoustic wave is excited normal to the diffraction vector. The intensity of wave field at finite distance from crystal to detector is obtained. It is shown that in the presence of surface acoustic wave the magnitude of the main peak of specular reflected diffracted wave intensity decreases and intensity of satellites increases. The main peak of specular reflected diffracted wave intensity is split up as the grazing observation angle increases.