

ОСОБЕННОСТИ ДИФРАКЦИИ СФЕРИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ НА МАЛОУГЛОВОЙ ГРАНИЦЕ КРУЧЕНИЯ, ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА

Л.В. ЛЕВОНЯН, А.М. МАНУКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 29 мая 2024 г.)

Исследовано дифракционное поведение малоугловой границы кручения, при облучении кристалла рентгеновским точечным источником. Показано, что при фокусировке излучения внутри кристалла, благодаря дислокационной структуре дефектной стенки, вертикальную расходимость можно настолько уменьшить, чтобы размеры фокуса в этом направлении были значительно меньше, чем в горизонтальном. Это обстоятельство может быть использовано при создании рентгенооптических элементов.

1. Введение

Дислокационная структура малоугловой границы кручения хорошо известна [1–3]. Согласно существующей модели, она образована сеткой из двух взаимно перпендикулярных массивов винтовых дислокаций и представляет собой двумерную сверхрешетку (СР). Чистая граница наклона образована периодическим массивом краевых дислокаций и представляет собой одномерную СР. При малых углах разориентации блоков период СР определяется соотношением

$$z_0 = b/\Delta\theta, \quad (1)$$

где b – модуль вектора Бюргерса, $\Delta\theta$ – угол разориентации блоков.

При $\Delta\theta < 10^\circ$ граница называется малоугловой, а при $\Delta\theta > 10^\circ$ большеугловой. Только малоугловая граница хорошо описывается дислокационной моделью. Малоугловые границы образуются в результате роста кристаллов, пластической деформации, полигонизации, эпитаксиального роста и т.д.

В работах [4–6] методом молекулярной динамики исследованы влияние разориентации границ зерен кручения на зарождение трещин, ударная деформация и откол бикристаллов меди с границами кручения, механизм миграции границ наклона в ГЦК-металлах. В работе [7] дана оценка распространения дислокаций через малоугловые границы зерен наклона и кручения в объемноцентрированном кубическом железе.

В работах [8, 9] проведено исследование двухволновой дифракции рентгеновских лучей в кристалле с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла.

Настоящая работа посвящена дифракции сферической рентгеновской волны на малоугловой границе кручения, перпендикулярной поверхности кристалла.

2. Дифракция на малоугловой границе кручения

Рассмотрим дифракцию сферической рентгеновской волны на кристалле с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла, при геометрии Лауэ (рис.1).

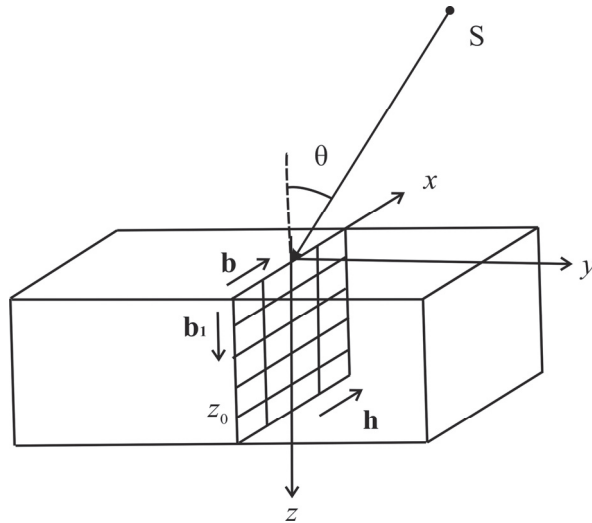


Рис.1. Взаимное расположение точечного источника рентгеновских лучей S и кристалла с малоугловой границей кручения: $\mathbf{h}$ – вектор дифракции, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{b}_1$ – векторы Бюргерса

Поскольку в этой геометрии $\mathbf{h}\mathbf{b}_1 = 0$, то дислокации с вектором Бюргерса, перпендикулярным поверхности кристалла, невидимы, и задача отображения дислокационной стенки сводится к отображению одномерной СР с вектором Бюргерса $\mathbf{b}$.

Характерной особенностью дифракции рентгеновских лучей на одномерных СР является наличие сателлитов вокруг основного дифракционного максимума. При $z_0 \ll \bar{\Lambda}$ (z_0 – период СР, $\bar{\Lambda}$ – усредненная по периоду СР экстинкционная длина кристалла) дифракционная картина представляет собой систему непрерывающихся сателлитов, угловое расстояние между которыми обратно пропорционально периоду СР.

В работе [8] рассмотрена двухволновая дифракция рентгеновских лучей в кристалле с чистой малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла, в геометрии Лауэ при $z_0 \ll \bar{\Lambda}$. В этом случае для угла разориентации блоков из (1) получаем

$$\Delta\theta \gg b/\bar{\Lambda}. \quad (2)$$

Для рентгеновских лучей $\bar{\Lambda}$ порядка 5–50 мкм, поэтому условие (2) означает, что $\Delta\theta \gg 10^{-4} - 10^{-5}$ радиан, и данная теория справедлива при $10^{-4} < \Delta\theta < 10^{-1}$ радиан.

В работе [8] показано, что при малом периоде, в пределах m -го сателлита, СР можно рассматривать как идеальный кристалл с модифицированным структурным фактором:

$$F_{hm} = |M_m| F_h, \quad (3)$$

где m – номер дифракционного максимума (сателлита) и M_m – сверхструктурный фактор СР.

Значение сверхструктурного фактора основного максимума кристалла с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла, имеет следующий вид [8]:

$$M_{0,n} = \exp(-\pi n y / z_0), \quad (4)$$

где $n = \mathbf{h} \mathbf{b} \text{sign}(y/z_0)$.

По обе стороны границы амплитуда деформации экспоненциально уменьшается, поэтому эффективная толщина дислокационной стенки порядка периода СР. Таким образом, поле смещений дислокационной стенки короткодействующее, поскольку вклады одиночных дислокаций частично компенсируют друг друга.

В работах [10, 11] рассмотрено рентгенодифракционное изображение дефекта упаковки, перпендикулярного поверхности кристалла, в геометрии Лауэ. Были выявлены явления зеркального и полного внутреннего отражения от дефекта, волноводного распространения поля вдоль дефекта. Учет дифракционных явлений в вакууме, даже при однородном освещении кристалла, проведенный в работе [12], прибавляет к отмеченным явлениям также эффект дифракционной фокусировки излучения за кристаллом – в вакууме.

Как известно [13], при дифракции сферической рентгеновской волны на СР в геометрии Лауэ имеет место явление фокусировки слабопоглощаемой моды дифрагированного волнового поля как внутри кристалла, так и за кристаллом – в вакууме. Интенсивность дифрагированной волны на глубине z внутри кристалла вблизи фокальной области для симметричного случая Лауэ, когда отражающие атомные плоскости соответствуют плоскостям $x = \text{const}$, приближенно выражается следующей формулой:

$$I_h(x, z) = \frac{\exp\left(-\frac{\mu z}{\cos \theta} \left(1 - C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}}\right)\right)}{4L\Gamma \left(\left(\frac{L}{\Gamma} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{|\chi_{hr}|}\right)^2\right)^{1/2}} \exp\left(-\pi \frac{zC|\chi_{hi}|}{\lambda \cos \theta} \frac{x^2 \text{ctg}^2 \theta}{\left(\frac{L}{\Gamma} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{|\chi_{hr}|}\right)^2}\right), \quad (5)$$

где λ – длина падающей волны, L – расстояние между точечным источником и кристаллом, θ – угол Брэгга, $\mu = 2\pi\chi_{0i}/\lambda$ – коэффициент линейного поглощения рентгеновских лучей в кристалле, χ_0 и χ_h – коэффициенты Фурье комплексной поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$, C – фактор поляризуемости ($C=1$ для σ -поляризации и $C=\cos 2\theta$ для π -поляризации). Величина Γ определяется следующим образом:

$$\Gamma = \frac{\sin \theta \sin 2\theta}{C|\chi_{hr}|}. \quad (6)$$

Согласно формуле (5), с учетом (3) и (4) для интенсивности дифрагированной волны вблизи фокальной области в случае кристалла с малоугловой границей кручения получаем:

$$I_h(x, y, z) = \frac{\exp(-\pi n y / z_0) \exp\left(-\frac{\mu z}{\cos \theta} \left(1 - C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}} \exp(-\pi n y / z_0)\right)\right)}{4L\Gamma \left(\left(\frac{L}{\Gamma} \exp(-\pi n y / z_0) - z\right)^2 + \left(z \left|\frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}}\right|\right)^2\right)^{1/2}} \times \exp\left[-\pi \frac{zC|\chi_{hi}|}{\lambda \cos \theta} \exp(-\pi n y / z_0) - \frac{x^2 \operatorname{ctg}^2 \theta}{\left(\frac{L}{\Gamma} \exp(-\pi n y / z_0) - z\right)^2 + \left(z \left|\frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}}\right|\right)^2}\right]. \quad (7)$$

Как видно из выражения (7), интенсивность дифрагированной волны максимальна на плоскости дефекта $y = 0$ и быстро уменьшается в обе стороны от дефекта.

Рассмотрим изменение условий фокусировки, обусловленное наличием дислокационной стенки. В плоскости дефекта ($y = 0$) фокусировка происходит на глубине $z_F = L/\Gamma$, как и в случае идеального кристалла, поскольку $M_{0,n} = 1$ (4). При $y \neq 0$ условие фокусировки меняется на

$$\frac{L}{\Gamma} \exp(-\pi n y / z_0) - z = 0, \quad (8)$$

и вблизи фокальной области фокусировка возможна и на меньших, чем z_F глубинах.

Согласно (8), на глубине $z > z_F$ дифрагированное излучение больше не фокусируется. В этом случае пучок, распространяясь в кристалле, уширяется и ослабевает.

В работе [9] показано, что кинематическая ширина интенсивности

$$\Delta y = (\pi |n|)^{-1} z_0 \ln 2 = (\pi h \Delta \theta)^{-1} \ln 2 \quad (9)$$

меньше периода z_0 , т.е. излучение распространяется по более узкому «каналу», чем толщина дислокационной стенки. Получается, что излучение претерпевает полное внутреннее отражение от областей, границы которых удовлетворяют уравнению (8). Из формулы (9) также видно, что увеличение разориентации блоков приводит к сужению «канала».

На рис.2 приведены графики распределения интенсивности дифрагированной волны в зависимости от координат x и y . Численные расчеты проведены для кремния с границей кручения при излучении CuK_α при $n = 2$.

Как видно из рисунков, по оси y полуширина значительно меньше, чем по оси x . Как известно, при дифракции сферической рентгеновской волны в однородном кристалле получается не точечная, а линейная фокусировка, что обусловлено плоской симметрией атомных отражающих плоскостей. Поэтому получение точечной фокусировки очень важно для создания рентгенооптических

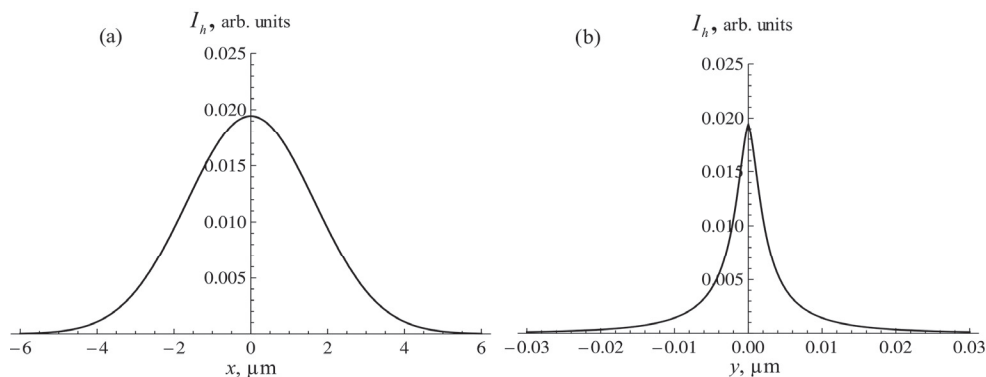


Рис.2. Распределение интенсивности дифрагированного пучка на глубине $z = z_F$: (a) зависимость интенсивности от координаты x и (b) зависимость интенсивности от координаты y .

элементов, таких как рентгеновская линза, рентгеновский микроскоп и т.д.

На рис.3 представлен график зависимости интенсивности дифрагированной волны на глубине $z = 0.8z_F$.

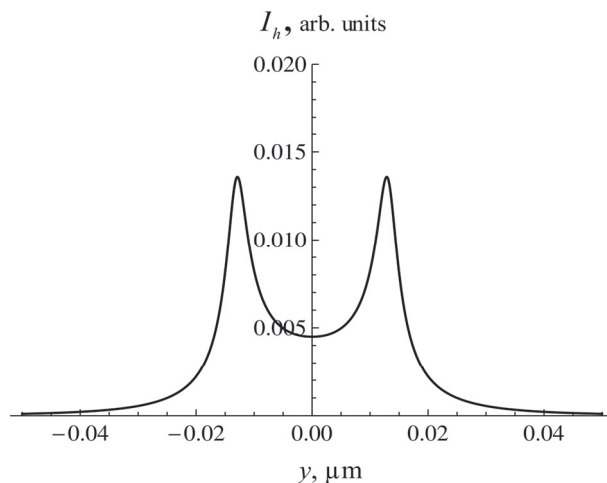


Рис.3. Распределение интенсивности дифрагированного пучка в зависимости от координаты y на глубине $z = 0.8z_F$.

Эффект увеличения интенсивности в узкой области между фокусами свидетельствует о волноводном характере распространения поля.

В геометрии Лауэ есть проблема с ограничением вертикальной расходимости, которая обычно на порядок больше горизонтальной. Поэтому полученные в работе результаты очень важны, поскольку дают возможность для получения рентгеновских пучков, вертикальная расходимость которых, наоборот, гораздо меньше горизонтальной.

3. Заключение

В работе показано, что при дифракции сферической рентгеновской волны на кристалле с малоугловой границей кручения интенсивность дифрагированной волны вблизи фокальной области максимальна на плоскости дефекта и быстро

уменьшается в обе стороны от дефекта. При этом наличие дислокационной стенки приводит к изменению условий фокусировки. Правда, в плоскости дефекта ($y = 0$) фокусировка происходит на глубине $z_F = L/\Gamma$, как и в случае идеального кристалла. Однако при $y \neq 0$ в кристалле с малоугловой границей кручения волна фокусируется еще и на глубинах, меньших z_F . При $z > z_F$ дифрагированное излучение уширяется и ослабевает. Фактически, излучение претерпевает полное внутреннее отражение от областей, симметричных относительно дислокационной стенки.

На примере дислокационной малоугловой границы кручения показана возможность управления рентгеновскими пучками. Показано, что можно получить фокусное пятно, вертикальные размеры которого порядка субмикрона, а также возможно создание двух когерентных источников излучения субмикронных размеров на близком, регулируемом согласно (8), расстоянии.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J.P. Hirsh, J. Lothe.** Theory of Dislocations. New York, McGraw-Hill, 1968.
2. **А.А. Русаков.** Рентгенография металлов. Москва, Атомиздат, 1977.
3. **А.Н. Орлов.** Введение в теорию дефектов в кристаллах. Москва, Высшая школа, 1983.
4. **C. Cui, X. Gong, F. Xia, W. Xu, L. Chen.** Engineering Fracture Mechanics, **243**, 107509 (2021).
5. **X. Long, X. Liu, W. Zhang, Y. Peng, G. Wang.** Computational Materials, **173**, 109411 (2020).
6. **G. Poletaev, Ir. Zorya, R. Rakitin.** Computational Materials Science, **148**, 184 (2018).
7. **M. Wakeda, T. Ohmura.** Computational Materials Science, **228**, 112335 (2023).
8. **D.M. Vardanyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A43**, 316 (1987).
9. **D.M. Vardanyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A43**, 322 (1987).
10. **В.Л. Инденбом, Ф.Н. Чуховский.** Кристаллография, **19**, 35 (1974).
11. **В.Л. Инденбом, И.Ш. Слободецкий.** Кристаллография, **19**, 42 (1974).
12. **Л.В. Левонян, М.К. Балян.** Межвузовский сборник научных трудов. Физика, №8–9, 71 (1987).
13. **Л.В. Левонян, А.М. Манукян.** Известия НАН Армении, Физика, **51**, 95 (2016).

FEATURES OF SPHERICAL X-RAY WAVE DIFFRACTION BY A LOW ANGLE TWIST BOUNDARY PERPENDICULAR TO THE CRYSTAL SURFACE

L.V. LEVONYAN, H.M. MANUKYAN

The diffraction behavior of a low-angle twist boundary was studied when the crystal was irradiated with an X-ray point source. It is shown that when radiation focused inside a crystal, thanks to the dislocation structure of the defect wall, the vertical divergence can be reduced so much that the size of the focus in this direction is significantly smaller than in the horizontal direction. This circumstance can be used to create X-ray optical elements.