

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ**

PACS numbers: 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.J-, 61.72.Yx, 68.49.Uv

### **Роль неоднородных деформаций и корреляции приповерхностных дефектов в скользящей дифракции рентгеновского излучения**

А. Ю. Гаевский, И. Э. Голентус, В. Б. Молодкин

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,  
бульв. Акад. Вернадского, 36,  
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

В работе в рамках приближения искажённой волны (distorted wave Born approximation—DWBA) в динамической теории исследовано скользящее рассеяние на кристалле с приповерхностными дефектами типа центров дилатации. Вычислены сечения диффузного рассеяния для брэгговской дифракции на кристаллических плоскостях, перпендикулярных поверхности кристалла. Проанализировано влияние корреляций между дефектами на картину диффузного рассеяния.

У роботі в рамках наближення спотвореної хвилі (distorted wave Born approximation—DWBA) в динамічній теорії досліджено ковзне розсіяння на кристалі з приповерхневими дефектами типу центрів дилатації. Обчислено перерізи дифузного розсіяння для Бреггівської дифракції на кристалічних площинах, перпендикулярних поверхні кристала. Проаналізовано вплив кореляцій між дефектами на картину дифузного розсіяння.

The grazing scattering by a crystal with subsurface dilatation-centre-type defects is investigated within the scope of the distorted wave Born approximation (DWBA) of the dynamical theory. The diffuse scattering cross-sections for Bragg diffraction from crystal planes perpendicular to the crystal surface are calculated. The impact of correlations between defects on the diffuse scattering pattern is analysed.

**Ключевые слова:** рентгеновские лучи, скользящая дифракция, динамическая теория, диффузное рассеяние, приповерхностные дефекты, корреляционная функция.

*(Получено 2 декабря 2013 г.)*

При падении рентгеновских лучей под малыми скользящими углами (в области полного внешнего отражения) велика интенсивность отраженного излучения, а глубина проникновения лучей внутрь кристалла незначительна. Это дает уникальную возможность для исследования приповерхностных слоев твердых тел с помощью скользящего рассеяния. Если исследуемый объект является кристаллом, то благодаря дифракции прошедшей волны на кристаллических плоскостях, перпендикулярных поверхности, появляется дифрагированная отраженная волна [1], которая имеет динамическую природу [2]. На этом эффекте основан метод скользящей дифракции (grazing incidence diffraction—GID), широко применяемый при диагностике приповерхностных слоев и интерфейсов [3, 4]. Результаты GID в идеальных кристаллах в настоящее время обрабатываются как с помощью динамической теории, так и в полукинематическом борновском приближении искаженной волны (distorted wave Born approximation—DWBA). Значительно менее изученными являются вопросы скользящей дифракции в приповерхностных слоях, содержащих дефекты либо неоднородности кристаллической структуры. В одной из первых работ [5], посвященных диффузному рассеянию в геометрии GID, в обычном кинематическом приближении [6] анализировалась диффузная область вдали от когерентного пика на кривой дифракционного отражения (КДО) — область рассеяния Хуаня–Кривоглаза. В то же время несомненный интерес представляет искажение профиля КДО при небольших отклонениях от брэгговских углов (Н-стремней), вызванное наличием дефектов, поскольку, с одной стороны, эта область углов благодаря высоким значениям коэффициента отражения хорошо измеряется экспериментально, а, с другой стороны, она позволяет судить об упругих искажениях на расстояниях, значительно больших периода решетки.

В настоящей работе в рамках динамической теории скользящей дифракции предложен метод расчета диффузной компоненты рассеяния, который является модификацией приближения DWBA на случай полуограниченного дефектного кристалла. Рассмотрены дефекты типа центров дилатации, и в расчетах диффузного рассеяния использованы для атомных смещений точные аналитические решения уравнения упругого равновесия дефектов в полуограниченном кристалле [7]. Отметим, что обычно влияние дефектов на рассеяние рентгеновских лучей рассматривают в рамках модели нарушенного поверхностного слоя [4, 8] с однородной деформацией решетки, выражающейся в изменении межплоскостных расстояний. Однако при вычислении КДО в динамической теории весьма существенным является учет неоднородных деформаций и сил изображения, вызванных влиянием поверхности [9]. Последовательный учет упругих искажений для модели дефектов, расположенных в плоском приповерхностном слое толщиной порядка дли-

ны экстинкции, выполнен в данной работе. Определен вклад двойных и тройных корреляций в модели твердых шаров и вклад корреляций в диффузное рассеяние. Вычислены угловые зависимости интенсивности некогерентного рассеяния при различных способах скользящего сканирования поверхности кристалла.

Предполагалось, что кристаллические плоскости, на которых происходит дифракция по Лауэ, перпендикулярны поверхности кристалла, т.е. вектор дифракции  $\mathbf{H}$  параллелен поверхности [1, 2]. Тогда при малых углах скольжения (углах между падающими лучами и поверхностью) энергия излучения распределяется между тремя типами волн: отраженными, дифрагированными и отраженными дифрагированными. Последние направлены от кристалла (их нормальная компонента противоположна нормальной компоненте падающей волны) и они наиболее информативны для исследования искажений приповерхностного слоя. Среди них имеются когерентные волны (отвечают условию дифракции Брэгга) и некогерентные (диффузные) волны. Интенсивность всех типов волн определялась в результате решения динамической задачи на основе теоремы взаимности и приближения DWBA. В качестве функций нулевого приближения («искаженных» волн) использовались точные решения динамической теории скользящего рассеяния на идеальном кристалле [2, 4]. Амплитуды диффузного рассеяния вычислялись как матричные элементы от флуктуаций диэлектрической восприимчивости  $\delta\chi$  на «искаженных» волнах нулевого приближения:

$$f_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}} = (K^2/4\pi) \int d\mathbf{r} E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \delta\chi(\mathbf{r}) E_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{p}$  — волновые вектора, отвечающие направлению изначально падающей на кристалл плоской волны и плоской волны, падающей на кристалл из той точки, в которой снимается диффузное рассеяние, соответственно.  $E_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ,  $E_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$  — поля, которые возникают в пространстве в результате падения на бездефектный кристалл соответствующих плоских волн. Флуктуации восприимчивости выражались через свои Фурье-компоненты по координате  $\mathbf{q}_{\parallel}$ , параллельной поверхности, следующим образом:

$$\delta\chi(\mathbf{q}_{\parallel}, z) = - \sum_s c_s \sum_{\mathbf{h}_{\parallel}} e^{i(\mathbf{h}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel})z_s} \left[ i\chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z) \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{u}_{\parallel}(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{h}_{\parallel}, z - z_s) + \frac{\partial \chi_0(\mathbf{h}_{\parallel}, z)}{\partial z} u_z(\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{h}_{\parallel}, z - z_s) \right], \quad (2)$$

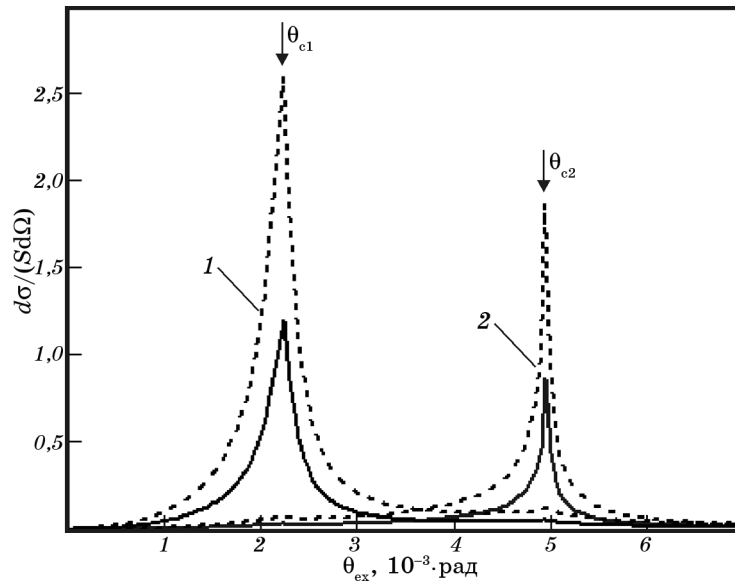
где  $c_s = 0$  либо  $1$  — число заполнения дефектом узла  $s$ . Предполагалось, что дефекты могут располагаться в узлах плоской сетки с координатами  $\rho_s$ , причем  $z_s$  — глубина залегания всех дефектов;

$\chi_0(\mathbf{h}_\parallel, z)$  в (2) — Фурье-компоненты диэлектрической восприимчивости  $\chi_0(\rho, z)$  кристалла без дефектов,  $\mathbf{u}_\parallel(\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{h}_\parallel, z - z_s)$  и  $u_z(\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{h}_\parallel, z - z_s)$  — Фурье-компоненты латеральных и нормальных смещений.

Для компонент поля упругих смещений в рассмотренной модели дефектов типа центров дилатации были найдены аналитические выражения, а в качестве исходных координатных зависимостей смещений были взяты точные формулы поля смещений с учетом сил изображения, полученные в [7]. Корреляционная функция была вычислена согласно модели, в которой дефекты рассматривались как твердые шары, которые не могут проникать друг в друга. Учет двойных и тройных контактов таких шаров приводит к следующей парной корреляционной функции:

$$w(r) = \begin{cases} 0, & r < D_c, \\ 1 + 2 \frac{D_c^2}{S_0} \arccos \frac{r}{2D_c} - \frac{r\sqrt{D_c^2 - r^2/4}}{S_0}, & D_c \leq r < 2D_c, \\ 1, & 2D_c \leq r, \end{cases} \quad (3)$$

где  $D_c$  — эффективный диаметр твердого шара, моделирующего де-

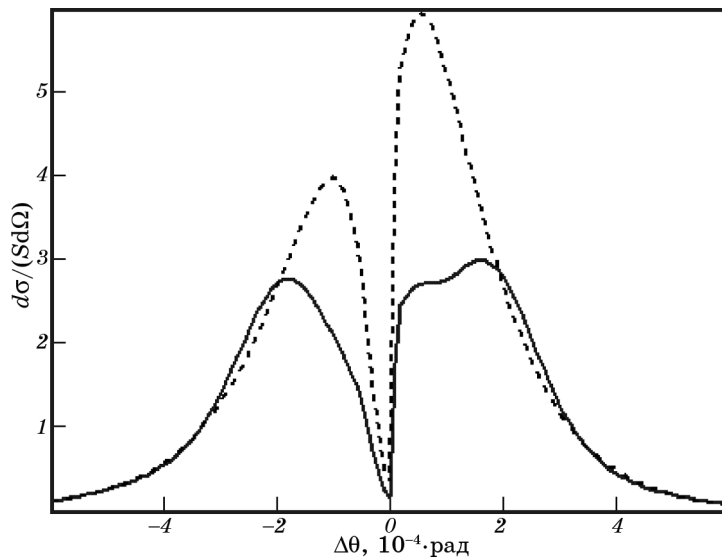


**Рис. 1.** Профили сечения диффузного рассеяния по углу выхода  $\theta_{\text{ex}}$  при фиксированных значениях  $\theta_{\text{in}} = \theta_{c2} = |\chi_0 + \chi_{\text{H}}|^{1/2}$  (кривая 1) и  $\theta_{\text{in}} = \theta_{c1} = |\chi_0 - \chi_{\text{H}}|^{1/2}$  (кривая 2). Штриховая кривая — хаотические дефекты, сплошная кривая — с учетом корреляций.

фект при рассмотрении корреляций,  $S_0$  — площадь, приходящаяся на один дефект в слое дефектов.

Приведем результаты вычислений интенсивности диффузного рассеяния вблизи **H**-стержня. В первой группе расчетов рассматривалось рассеяние монохроматической плоской волны, падающей на кристалл под углом к поверхности  $\theta_{in}$  и под углом Брэгга  $\theta_B$  к дифракционной плоскости. Вычислялась интенсивность дифрагированной отраженной волны вдоль стержня **H** при различных углах выхода  $\theta_{ex}$ . Профили зависимости интенсивности этой волны от  $\theta_{ex}$  при двух значениях угла скольжения  $\theta_{in}$  показаны на рис. 1. Дифференциальное сечение рассеяния приведено в единицах  $[5EV_0/(2\pi)]^2/S_0$  ( $E$  — амплитуда падающей волны,  $V_0$  — изменение объема, связанное с дефектом).

Во второй группе расчетов так же рассматривалось рассеяние волны, падающей на кристалл под углом к поверхности  $\theta_{in}$  и под углом Брэгга  $\theta_B$  к дифракционной плоскости. Однако в отличие от первой группы вычислялась интенсивность дифрагированной отраженной волны вблизи стержня **H** при изменении углового отклонения от этого стержня на величину  $\Delta\theta$  в плоскости, параллельной поверхности кристалла. На рисунке 2, как пример, даны угловые



**Рис. 2.** Распределение по углам  $\Delta\theta$  интенсивности диффузного рассеяния при учете корреляций согласно формуле (3) (сплошная кривая) и без учета корреляций (штриховая кривая). Углы скольжения для падающего и отраженного дифрагированного лучей равны соответственно:  $\theta_{in} = \theta_{c1} = |\chi_0 - \chi_H|^{1/2}$  и  $\theta_{ex} = \theta_c = |\chi_0|^{1/2}$ . Геометрические параметры шаров равны  $S_0 = 1 \text{ мкм}^2$ , отношение  $S_{ball}/S_0 = 0,2$ .

зависимости сечения от  $\Delta\theta$  при фиксированном  $\theta_{\text{in}} = \theta_{\text{c1}} = |\chi_0 - \chi_{\text{H}}|^{1/2}$  для случаев, когда учтены корреляции и когда корреляций нет.

Из рисунков видно, что корреляции приводят к существенному уменьшению величины диффузных пиков. А при сканировании по  $\Delta\theta$  параллельно поверхности образца на кривых диффузного рассеяния возникают побочные максимумы.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА (REFERENCES)

1. A. M. Afanas'ev and M. K. Melkonyan, *Acta Crystallogr. A*, **39**: 207 (1983).
2. A. Yu. Gaevskii, I. E. Golentus, and V. B. Molodkin, *Kristallografiya*, **57**, No. 5: 791 (2012).
3. U. Pietsch, V. Holy, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (New York: Springer Verlag: 2004).
4. A. M. Afanas'ev, P. A. Alexandrov, and R. M. Imamov, *Rentgenodifraktsionnaya Diagnostika Submikronnykh Sloev (X-Ray Diffraction Diagnostics of Submicron Layers)* (Moscow: Nauka: 1989) (in Russian).
5. S. Grothans, G. Wallnar, E. Burkel et al., *Phys. Rev. B*, **39**: 8450 (1989).
6. M. A. Krivoglaz, *Difraktsiya Rentgenovskikh Luchey i Neutronov v Neideal'nykh Kristallakh (X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals)* (Kiev: Naukova dumka: 1983) (in Russian).
7. A. Yu. Gaevskii, *Metallofizika*, **31**, No. 10: 1317 (2009) (in Russian).
8. V. A. Bushuev, *Fizika Tverdogo Tela*, **37**: 249 (1995) (in Russian).
9. V. B. Molodkin, S. I. Olikhonskii, and M. E. Osinovskii, *Metallofizika*, **5**, No. 5: 3 (1983) (in Russian).