

СТВОРЕННЯ СПРОЩЕНОЇ МОДЕЛІ ДЕФОРМАЦІЙНОЇ ЗАЛЕЖНОСТІ ІНТЕГРАЛЬНОЇ ІНТЕНСИВНОСТІ ДИНАМІЧНОЇ ДИФРАКЦІЇ ІДЕАЛЬНОГО ВИГНУТОГО КРИСТАЛУ

Д. В. Гаврілкін^{1, а}, А. А. Катасонов¹, В. В. Лізунов²

¹Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,
Фізико-технічний інститут

²Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Анотація

В даній роботі запропоновано підхід до створення спрощеної напівфеноменологічної моделі деформаційної залежності (ДЗ) інтегральної інтенсивності динамічної дифракції (ПДД) в кристалах з пружним вигином.

Ключові слова: Дифракція, кристали з пружним вигином, інтенсивність.

Вступ

Властивості сучасних матеріалів визначаються не стільки структурою та параметрами їх ідеальних періодичних ґратниць, що визначаються методами класичної кристалографії, скільки статистичними характеристиками наведених у них на атомному рівні сучасними технологіями мікродефектів, визначення яких у рамках класичної кристалографії не є можливим. Тому, створення нових методів кількісної неруйнувочої діагностики характеристик мікродефектів в кристалах забезпечує можливість контролю і підвищення якості розроблюваних матеріалів, отже, є важливою задачею.

В даній роботі було досліджено вплив умов дифракційного експерименту, зокрема, довжини хвилі випромінювання, рефлексів та інтервалів змін деформацій на деформаційну залежність інтегральної інтенсивності динамічної дифракції ідеальних кристалів з метою подальшої побудови методу діагностики дефектів шляхом забезпечення варіації вказаних умов експерименту послідовно для кожного з типів дефектів їх максимальних внесків у ці залежності.

1. Модель деформаційної залежності інтегральної інтенсивності динамічної дифракції в ідеальних кристалах

Загальний вираз для повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції (ПДД) у вигнутих кристалах з дефектами представлено у вигляді:

$$R_i = R_{ic}(L, \mu_{ds}, \mu^*)D_c(r) + R_{id}(L, \mu_{ds}, \mu^*)D_d(r) \quad (1)$$

де множники R_{ic} та R_{id} описують когерентну та дифузну складові ПДД недеформованого кристалу, а множники $D_c(r)$ та $D_d(r)$ описують відповідні деформаційні залежності, r – радіус кривизни пружного циліндричного вигину, L – показник фактору Кривоглаза, μ_{ds} – коефіцієнт екстинкції когерентної складової ПДД, μ^* – коефіцієнт екстинкції дифузної складової ПДД.

В даній роботі розглянуто перший доданок у виразі (1), який описує когерентно розсіяне випромінювання. Для феноменологічного опису деформаційної залежності доцільно представити цю залежність якомога у більш простому вигляді з мінімально можливою кількістю параметрів. Для “тонких” кристалів множник $D(r)$ формується деформаційною залежністю поглинальної та відбивної здатностей кристалу та може бути записаний у вигляді:

$$D_c(r) = \frac{R_{ib}}{R_{i0}} = (1 + \alpha B(r)T + \beta B(r)^2 T^2) \exp\left(-\gamma \left|\frac{1}{r}\right|^\delta \sqrt{M_0}\right) \quad (2)$$

де R_{ib} – ПДД пружно вигнутого кристалу без мікродефектів, R_{i0} – ПДД невинного ідеального кристалу, α , β , γ , δ – постійні коефіцієнти. У формулі (2):

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_1 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{Hr}|^2 r d},$$

$$T = \frac{\pi t |\chi_{Hr}|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_1}}, M_0 = \frac{\chi_{i0} (1 + \tilde{\beta})}{\sqrt{|\tilde{\beta}|} C |\chi_{Hr}|}$$

де $\tilde{\beta} = \frac{\gamma_0}{\gamma_1}$, ψ – кут між відбивною поверхнею та нормаллю до поверхні кристалу, λ – довжина хвилі рентгенівського випромінювання, $\gamma_0 = \cos(\theta_B + \psi)$, $\gamma_1 = \cos(\theta_B - \psi)$, θ_B – кут Бреґґа, ν – коефіцієнт Пуассона, χ_{Hr} – реальна частина Фур'є-компоненти поляризованості кристалу, χ_{i0} – уявна частина Фур'є-компоненти поляризованості кристалу, C – поляризаційний множник, $d = a \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$, a – стала

^аDanilhvr@gmail.com

гратниці, h, k, l —індекси Мілера, t – товщина кристала [1, 2, 3].

З формули (2) видно, що ДЗ ПДД складається з двох множників, один з яких описує відбивну здатність кристалу та містить доданки, лінійні і квадратичні по ефективній деформації BT , а другий описує поглинання.

Значення коефіцієнтів α, β, γ та δ знаходились шляхом підгонки значень, розрахованих за моделлю [4], до теоретичних значень інтегральної інтенсивності динамічної дифракції ідеального кристалу. Розрахунки деформаційної залежності ПДД для кристалів кремнію різної товщини проводилися для (220) $\text{MoK}\alpha$ - Лауе-рефлексів рентгенівського випромінювання. Результати представлено на рисунку 1, де суцільна лінія – результати розрахунку за теорією [1, 2, 3] для ідеального пружно вигнутого кристалу; штрихова лінія – результати розрахунку за моделлю [4]; пунктирна лінія – деформаційна залежність першого множника моделі [4], який описує відбивну здатність кристалу; штрих-пунктирна лінія – деформаційна залежність другого множника моделі [4], який описує поглинання.

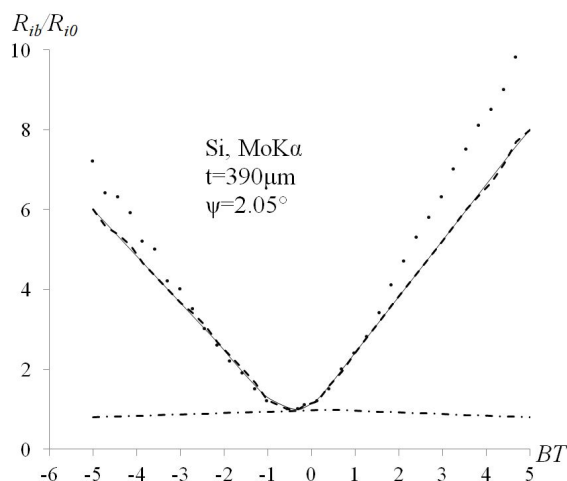


Рис. 1. Нормовані на інтегральну інтенсивність динамічної дифракції невідгнуті ідеального кристалу ДЗ ПДД вигнутого кристалу: випромінювання $\text{MoK}\alpha$ -, товщина кристалу $t = 390$ мкм.

Значення величин параметрів моделі деформаційної залежності інтегральної інтенсивності динамічної дифракції для різних інтервалів зміни ефективної деформації наведено у таблиці 1.

Висновки

В результаті, вдалось замінити складні гіпергеометричні функції строгої теорії деформаційної зале-

Табл. 1. Значення коефіцієнтів $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

BT	α	β	γ	δ
$0 \leq BT \leq 0.4$	0.537	0.913	6	2
$0.5 \leq BT \leq 0.9$	0.513	0.803	2.84	1.67
$1 \leq BT \leq 1.4$	0.48	0.691	1.38	1.45
$1.4 \leq BT \leq 1.8$	0.46	0.625	9	1.25
$1.8 \leq BT \leq 2.2$	0.439	0.553	1.38	1.12
$2.2 \leq BT \leq 2.6$	0.416	0.498	1.38	1.12
$2.6 \leq BT \leq 3$	0.396	0.455	2.62	1
$3 \leq BT \leq 3.4$	0.381	0.417	8.43	0.92
$3.4 \leq BT \leq 3.8$	0.368	0.39	2.38	0.82
$3.8 \leq BT \leq 4.2$	0.356	0.365	1.27	0.77
$4.2 \leq BT \leq 4.6$	0.341	0.34	1.26	0.77
$4.6 \leq BT \leq 5$	0.328	0.319	1.27	0.77

жності інтегральної інтенсивності динамічної дифракції, створеної для ідеальних кристалів, спрощеною моделлю. Для кожного з різних інтервалів ефективної деформації було знайдено чотири параметри, які описують деформаційну залежність інтегральної інтенсивності динамічної дифракції. Встановлено єдиний загальний вигляд деформаційної залежності поглинального множника інтегральної інтенсивності динамічної дифракції, при якому для кожного заданого інтервалу ефективної деформації значення коефіцієнтів поглинального множника ПДД не залежать від товщини кристалу та довжини хвилі випромінювання.

Перелік використаних джерел

1. Chukhovskii F. N., Petrashen P. V. A general dynamical theory of the Laue diffraction from a homogeneously bent crystal // Acta Cryst. A. — 1977. — Vol. 33. — P. 311–319.
2. Н. Чуховский Ф. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. I. Лауэ-дифракция // Металлофизика. — 1980. — Т. 2, № 6. — С. 3–27.
3. Н. Чуховский Ф. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. II. Брэгг-дифракция // Металлофизика. — 1981. — Т. 3, № 5. — С. 3–29.
4. Явление усиления на порядки величины проявления дефектов в картине многократного рассеяния и его дисперсионная природа / В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова и др. // Металлофиз. новейшие технол. — 2014. — Т. 36, № 7. — С. 857–870.