

ДИФРАКЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ НЕУПРУГОМ РАССЕЯНИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛАХ LiF

В.А.Бушув, А.В.Лаушкин, Р.Н.Кузьмин, Н.Н.Лобанов

Проведено дифрактометрическое исследование интерференционных линий, образующихся в результате брэгговской дифракции квантов комптоновского, комбинационного и теплового диффузного рассеяния рентгеновского излучения $Mo K_{\alpha}$ в мозаичных кристаллах LiF. Результаты экспериментов объяснены в рамках теории вторичной экстинкции.

Специфика вторичных процессов в кристаллах связана с возможностью дифракции как падающего на кристалл излучения [1 – 3], так и дифракции вторичных излучений, что существенно повышает их информативность. К вторичным процессам относятся, например, неупругое рассеяние (НР) рентгеновских лучей, электронов и нейтронов, флуоресцентное испускание атомами и ядрами, фотоэффект, оже-эффект и конверсия, черенковское излучение и т.п. Дифракция рентгеновского флуоресцентного излучения и неупруго рассеянных электронов приводит в совершенных кристаллах к образованию соответственно линий Косселя и линий Кикучи [4].

Кванты комптоновского (КР) и теплового диффузного рассеяния (ТДР) также могут испытывать брэгговскую дифракцию, т. е. упругое коге-

рентное рассеяние. Такой когерентный вторичный процесс ведет к появлению линий с тонкой структурой в интенсивности НР в направлениях, близких к образующим конусов с осями вдоль векторов обратной решетки и углами полураствора $90^\circ - \theta_B$, где θ_B — угол Брэгга. Так называемые интерференционные комптоновские линии (ИКЛ) наблюдались при рассеянии в мозаичных кристаллах алмаза [5], в деформированных сжатием и облученных нейтронами кристаллах Li F [6]. Интенсивность ИКЛ чувствительна к степени совершенства поверхностного слоя [7]. Теория комптон-эффекта в условиях брэгговской дифракции квантов КР в совершенных и мозаичных кристаллах развита в работах [8, 9].

Фоторегистрация [5 — 7] не позволяет изучать ИКЛ с достаточным угловым разрешением. В настоящей работе впервые проведено дифрактометрическое исследование профиля ИКЛ при рассеянии излучения $Mo K_\alpha$ в кристаллах Li F, а также обнаружены ранее неизвестные линии интерференционного раман-эффекта и интерференционные линии в ТДР.

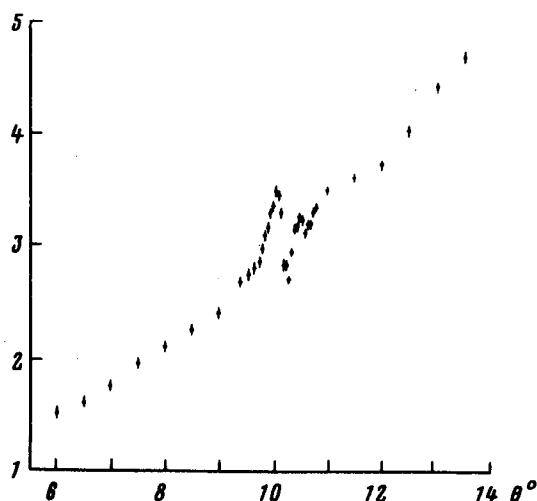
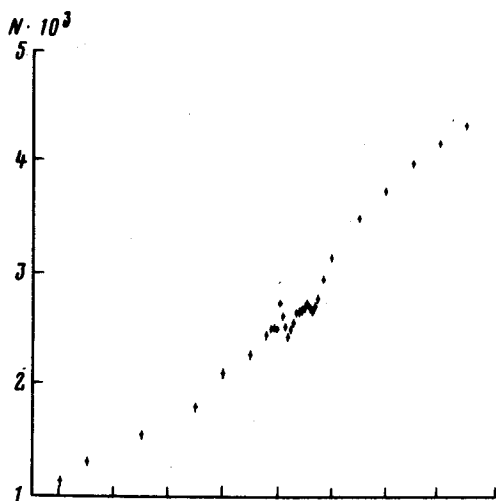
Нами изучались два образца Li F разной степени совершенства. Кристаллы вырезались по плоскостям (100), толщина образцов 2 мм, сечение 3×5 мм². Ширины кривых качания (200) измерялись на двухкристальном спектрометре в геометрии Лауэ и равны $3,5'$ и $11'$ для образцов 1 и 2 соответственно. Образец 2 предварительно облучался тепловыми нейтронами с дозой 10^{18} н/см². Излучение $Mo K_\alpha$ монохроматизировалось отражением от плоскостей (10 $\bar{1}$ 1) изогнутого кварца. Первичный пучок падал вдоль оси [100], его сечение $0,13 \times 1,5$ мм², горизонтальная расходимость $6'$, вертикальная — $1,2^\circ$. Радиус гониометра 143 мм, ширина щели детектора 0,125 мм, что соответствует ее угловой ширине $3'$. Детектор сканировал в экваториальной геометрии с шагом $3'$.

На рисунке представлены результаты измерения интенсивности рассеяния в интервале углов $\theta \sim 6 - 13,5^\circ$. Скорость счета ~ 4 имп/сек. Вблизи угла $\theta_B = 10^\circ 10'$ обнаружены ИКЛ, отвечающие брэгговским отражениям комптоновских квантов от плоскостей (200). Профиль ИКЛ представляет собой две близких линии с черно-белым контрастом, причем более интенсивная линия лежит ближе к первичному пучку.

Из рисунка видно, что с увеличением разориентации блоков мозаики расстояние δ между темной и светлой линиями, а также контраст линий R увеличиваются: $\delta = 9$ и $15'$, $R_{max} = 6\%$ и $R_{max} = 13\%$ для образцов 1 и 2 соответственно. Такое поведение ИКЛ можно объяснить следующим образом. Интенсивность НР $I(\theta) = I_{кр} + I_{ТДР}$ в направлении наблюдения $\theta = \theta_B + \Delta\theta$ из-за дифракции уменьшается на величину IK , где $K(\Delta\theta)$ — коэффициент преобразования в дифракционное направление $\theta_h = -(\theta_B - \Delta\theta)$. Аналогичным образом происходит приток интенсивности $I(\theta_h)K$ за счет дифракционного переброса квантов НР из θ_h в направление наблюдения θ . В итоге контраст интерференционных линий по отношению к некогерентному фону I равен

$$R(\Delta\theta) = (\tilde{I} - I) / I = -2 \Delta\theta (I' / I) K, \quad (1)$$

где $I' = \partial I / \partial \theta$, \tilde{I} — интенсивность НР с учетом дифракции.



Дифрактограммы, снятые при рассеянии излучения Mo K_α ($0,71 \text{ \AA}$) в мозаичных кристаллах Li F . Верхний спектр относится к образцу 1 с шириной кривой качания $3,5^\circ$, нижний — к образцу 2 с шириной 11° .

Используя подход, развитый в рамках теории вторичной экстинкции в [9], для мозаичных кристаллов первого типа получим $K = K_0 / \mu l_e$, где

$$2aK_0 = \frac{y}{a+y} e^{-\mu l} - \left[1 - \frac{a}{a+y} e^{-y\mu l / \cos \theta_B} \right] e^{-\mu l / \cos \theta_B}. \quad (2)$$

Здесь $a = 1 - \cos \theta_B$, l — толщина кристалла, μ — коэффициент поглощения, $y = 2QW/\mu$, Q — коэффициент интегрального отражения на единицу объема, $W(\Delta\theta)$ — функция мозаичного распределения, l_e — эффективная толщина кристалла с учетом поглощения.

Расчеты по формулам (1), (2) хорошо согласуются с наблюдавшимся положением ИКЛ и зависимостью величины контраста и формы линий от мозаичности. Использовались значения $\mu = 3,4 \text{ см}^{-1}$, $Q = 1,6 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1}$, параметром служила ширина Δ мозаичного распределения W , которое считалось гауссовым. Сечения КР и ТДР вычислялись согласно [10, 11], откуда $I^*/I = 6,86$ при $\theta = \theta_B$, что близко к измеренному значению $7 \pm 0,2$. Так как $I^* > 0$, то при $\Delta\theta < 0$ контраст положителен, а при $\Delta\theta > 0$ — отрицателен; с увеличением разориентировки блоков ширина функции K возрастает, поэтому δ и R увеличиваются, что и наблюдалось в эксперименте. Из профилей ИКЛ с учетом поправок на конечные размеры щели и первичного пучка получено, что $\Delta_1 = 4,2^\circ$, $\Delta_2 = 11,6^\circ$. Это в пределах ошибок совпадает с ширинами мозаичного распределения, полученными независимо из кривых качания, что говорит об удовлетворительном выборе модели формирования ИКЛ. Вместе с тем измеренные контрасты ИКЛ оказались более чем на порядок больше рассчитанных, что, по-видимому, объясняется ограниченностью первичного пучка, тогда как соотношения (1), (2) получены в приближении плоских волн.

Обращает на себя внимание черно-белая линия при $\theta_R = 10^\circ 36'$. Ее положение при $\theta_R > \theta_B$ можно объяснить тем, что в спектре НР имеются кванты, смещенные вниз на энергию $(\theta_R - \theta_B) E \text{ ct g } \theta_B = 700 \pm 80 \text{ эВ}$. Этот сдвиг близок к энергии связи 695 эВ К-электронов F^- , поэтому можно сделать вывод об обнаружении интерференционного раман-эффекта при НР с возбуждением К-электронов ионов фтора.

При прохождении линий вблизи рефлексов и пятен ТДР $I_{\text{ТДР}}^* \gg I_{\text{кр}}^*$, поэтому их контраст будет определяться в основном вкладом ТДР. На рентгенограммах нами действительно наблюдались черно-белые интерференционные линии, отчетливо "прорезающие" ореолы ТДР вблизи рефлексов типа (113). При повороте образца 2 вокруг вертикальной оси на угол $\theta_B + \phi$, где $\phi = 1,5^\circ$, на дифрактограмме обнаружено, что пятно ТДР (200) пересекается белой линией с контрастом $R_{\text{max}} = -32\%$. Отрицательный контраст объясняется тем, что $I(\phi) \ll I_{\text{ТДР}}(2\theta_B + \phi)$, поэтому приток квантов из дифракционного направления $\theta_h \approx \phi$ практически отсутствует. При движении вдоль интерференционной линии белый контраст в ТДР постепенно переходит в ИКЛ с черно-белым профилем.

Подобные исследования представляют интерес в связи с тем, что положение и профиль интерференционных линий несут информацию как о кристаллической структуре и ее искажениях, так и о спектре электронных возбуждений. В рассмотренной схеме кристалл-рассеиватель и кристалл-анализатор как бы совмещены в одном образце. При этом энергетическое распределение квантов НР проявляется в распределении интенсивности по углу. Отметим также, что соотношения (1), (2) справедливы и для описания интерференционных линий, которые должны наблюдаться при НР тепловых нейтронов и мозаичных кристаллах.

Литература

- [1] *Аппака S. J.* Phys. Soc. Japan, 1967, 23, 372; 1968, 24, 1332.
 - [2] *Щемелев В.Н., Круглов М.В.* ФТТ, 1972, 14, 3556; 1975, 20, 251.
 - [3] *Афанасьев А.М., Кон В.Г.* ЖЭТФ, 1978, 74, 300.
 - [4] *Каули Дж.* Физика дифракции. М.: Мир, 1979.
 - [5] *Yoneda Y.* J. Phys. Soc. Japan, 1961, 16, 1570.
 - [6] *Телегина И.В., Колонцова Е.В.* Кристаллография, 1969, 14, 707.
 - [7] *Лаушкин А.В., Бушует В.А., Кузьмин Р.Н., Лобанов Н.Н.* ФТТ, 1981, 23, 278.
 - [8] *Бушует В.А., Кузьмин Р.Н.* УФН, 1977, 122, 81.
 - [9] *Бушует В.А., Кузьмин Р.Н.* Кристаллография, 1980, 25, 693.
 - [10] *Palinkas G., Radnai T.* Acta Crystallogr., 1976, A32, 666.
 - [11] *Kashiwase Y., Kainuma Y.* J. Phys. Soc. Japan, 1966, 21, 2663.
-