
**ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ
ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ**

УДК 548.732

**ВЛИЯНИЕ ЧАСТОТЫ УЛЬТРАЗВУКА НА ПРОЦЕСС МНГОВОЛНОВОГО
РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛЕ LiNbO_3 ,
ПРОМОДУЛИРОВАННОГО ПОВЕРХНОСТНОЙ АКУСТИЧЕСКОЙ
ВОЛНОЙ**

© 2012 г. В. И. Пунегов, Д. В. Рощупкин*

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар

E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

** Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка*

Поступила в редакцию 15.12.2010 г.

В рамках динамической теории дифракции рентгеновских лучей исследовано влияние многоволнового рассеяния на формирование профилей кривых отражения от кристалла, промодулированного поверхностной акустической волной (ПАВ), в зависимости от частоты ультразвука. Применительно к рентгеновской дифрактометрии проанализирована модель поверхностной волны Релея с учетом поперечных и продольных упругих деформаций. На примере 127° Y -среза кристалла LiNbO_3 установлено, что для ультразвуковых колебаний с частотой более 650 МГц эффектами многоволнового рассеяния можно пренебречь, существенно упрощая процедуру численных расчетов рентгеновской дифракции на кристалле, промодулированном коротковолновой ПАВ. Сравнительный количественный анализ экспериментальных измерений синхротронного рассеяния от 127° Y -среза кристалла LiNbO_3 , промодулированного ПАВ с частотой ультразвуковых колебаний 952 МГц, проведен с учетом и без учета эффектов многоволнового рассеяния. Показано, что временные затраты на численные расчеты можно уменьшить на 2–3 порядка.

ВВЕДЕНИЕ

Приборы на основе поверхностных акустических волн (ПАВ) представляют собой наиболее удобное и эффективное решение для высокочастотных компонент в современных коммуникационных системах благодаря их стабильности, надежности и компактности [1]. Такие приборы находят широкое применение в промышленности, экологии и медицине. Кроме того, ПАВ используется в рентгеновской оптике для создания динамических дифракционных решеток на поверхности кристалла [2].

Из-за большого коэффициента преобразования электрического сигнала в механические колебания кристаллической решетки в акустоэлектронике активно используется сегнетоэлектрический кристалл ниобата лития LiNbO_3 . В этом кристалле амплитуда ПАВ может меняться в широком диапазоне от нуля до нескольких ангстрем за счет изменения амплитуды высокочастотного электрического сигнала, подаваемого на встречно-штыревой преобразователь (ВШП).

Дифракция рентгеновских лучей, обладая высокой чувствительностью к деформациям кристаллической решетки, с успехом применяется

для исследования акустических волн в приповерхностных областях кристаллов [3–18]. Особенности распространения ПАВ в твердотельной среде контролировались методами рентгеновской топографии [3–5], скользящей рентгеновской дифракции [6, 7], двух- и трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии [8–17]. Для описания различных эффектов, сопровождающих рассеяние рентгеновских лучей в кристалле, промодулированном ПАВ, использовались динамическая [11–12, 18] и кинематическая [10, 13, 19] теории дифракции. Метод высокоразрешающей трехосевой (трехкристалльной) дифрактометрии [13–17] позволяет измерять двумерные карты распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки. В [17], используя формализм статистической динамической теории дифракции, получили решения, описывающие когерентное и диффузное рассеяние в кристалле, промодулированном ПАВ. Такой подход дает возможность проводить количественный анализ влияния акустических полей на дифракцию рентгеновских лучей и получать дополнительную информацию, недоступную с использованием других методов.

Уравнения динамической дифракции в кристалле, промодулированном ПАВ, описывают взаимодействие между проходящей и дифрагированной волнами в пределах отдельного дифракционного порядка, а также между дифрагированными волнами разных сателлитов [17]. Поэтому в общем случае рентгеновская дифракция на акустической сверхрешетке представляет собой многоволновое рассеяние.

Задача многоволновой рентгеновской дифракции [20] является более сложной, чем двухволновое приближение. Для количественной оценки углового распределения интенсивности рассеяния в численных расчетах следует учитывать взаимодействие волн разных дифракционных порядков. Это взаимодействие не только уменьшает или увеличивает интенсивности рассеяния, но и влияет на саму форму кривой дифракционного отражения (КДО). Поскольку при определенных условиях распространяющаяся релеевская ПАВ вызывает возникновение нескольких десятков сателлитов [10], численные расчеты углового распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей сильно усложняются как в плане разработки алгоритмов счета, так и временных затрат на вычисления. Следовательно, необходимо искать возможные пути преобразования вычислительной процедуры в задачах рентгеновской дифракции на кристаллах, промодулированных ПАВ. Очевидным шагом такого преобразования является упрощение уравнений, описывающих динамическую дифракцию в акустически промодулированном кристалле. Поэтому требуется исследовать критерии, согласно которым эффектами многоволнового рассеяния при возбуждении ПАВ в кристалле можно пренебречь. Для этого необходимо провести сравнительный количественный анализ расчетных дифракционных спектров в рамках двухволнового приближения и многоволновой рентгеновской дифракции на кристалле, промодулированном поверхностной волной Релея. Решению этой задачи посвящена настоящая работа.

ПОВЕРХНОСТНАЯ ВОЛНА РЕЛЕЯ

Явление поверхностной акустической волны впервые рассмотрено Рэлеем в 1885 г. [21]. Поскольку при любых деформациях напряжение на свободной границе твердого тела равно нулю, а при удалении от границы оно возрастает до некоторой определенной величины, определяемой законом Гука, характер упругих возмущений вблизи границы будет отличаться от возмущений в объеме упругой среды. Граница кристалла лежит в плоскости xOy , а ось z является ее внутренней нормалью, т.е. среда занимает полупространство со значениями $z > 0$. Пусть в кристалле распространяется периодическая упругая волна с частотой f_s .

Общее волновое уравнение для принятой модели среды можно представить в виде $\Delta \mathbf{u} = (1/c^2)\partial^2 \mathbf{u}/\partial t^2$, где \mathbf{u} – любые продольные или сдвиговые смещения, c – соответствующие скорости распространения продольной c_l или поперечной (сдвиговой) c_t упругой волны.

Используя граничные условия, решение для поверхностной волны Релея в самом простом случае (учитываются лишь поперечные упругие волны) можно записать в виде

$$u_z(x, z) = u_z(z) \exp(i(\kappa_r x - \omega_s t)), \quad (1)$$

где $u_z(z) = u_0 \exp(-\mu_{ac} z)$ – поле атомных смещений в глубь кристалла, u_0 – некоторая константа, не зависящая от координат и времени, $\omega_s = 2\pi f_s$, $\kappa_r = 2\pi/\Lambda = \omega_s/c_r$ – волновое число ПАВ и c_r – скорость волны Релея, Λ – длина ультразвуковой волны или период поверхностной модуляции.

Коэффициент затухания $\mu_{ac} = \kappa_r (1 - (c_r^2/c_t^2))^{1/2}$ зависит от величины скоростей релеевской и сдвиговой волны. Скорости распространения волн в среде зависят от упругих констант материала. При этом можно записать приближенное выражение $c_r/c_t = (0.87 + 1.12\nu)/(1 + \nu)$ [22], где ν – коэффициент Пуассона. Частота ультразвуковых колебаний связана с длиной релеевской волны известным соотношением $f_s = c_r/\Lambda$. Заметим также, что коэффициент затухания акустических волн $\mu_{ac} \sim f_s$.

Поскольку решение (1), полученное без учета продольной составляющей упругой деформации, является наиболее простым, то оно чаще всего используется при анализе дифракции рентгеновского излучения на кристаллах, подвергнутых воздействию ПАВ [10]. В действительности при распространении ПАВ возникают продольные упругие смещения, при этом вертикальные атомные смещения зависят от величины скорости продольной волны. Решения для компонент смещений в латеральном $u_x(x, z)$ и вертикальном $u_z(x, z)$ направлениях можно найти в рамках потенциальной теории [22]:

$$u_x(x, z) = u_x(z) \cos(\kappa_r x - \omega_s t), \quad (2)$$

$$u_z(x, z) = u_z(z) \sin(\kappa_r x - \omega_s t), \quad (3)$$

где амплитуды смещений $u_x(z)$ и $u_z(z)$ могут быть записаны в виде суммы двух составляющих:

$$u_x(z) = \sum_{j=1}^2 u_{jx}(z) \quad (4)$$

$$u_z(z) = \sum_{j=1}^2 u_{jz}(z). \quad (5)$$

Стоящие под знаками суммы в (4) и (5) значения параметров

$$u_{1x}(z) = -u_0 \left(1 - (c_r^2/c_\tau^2)\right)^{1/2} \exp(-\mu_1 z), \quad (6)$$

$$u_{2x}(z) = u_0 \exp(-\mu_2 z) \left(1 - (c_r^2/2c_\tau^2)\right) / \left(1 - (c_r^2/c_\tau^2)\right)^{1/2}, \quad (7)$$

$$u_{1z}(z) = u_0 \exp(-\mu_1 z), \quad (8)$$

$$u_{2z}(z) = -u_0 \left(1 - (c_r^2/2c_\tau^2)\right) \exp(-\mu_2 z) \quad (9)$$

экспоненциально уменьшаются в глубь кристалла с коэффициентами затухания $\mu_1 = \kappa_r (1 - (c_r^2/c_\tau^2))^{1/2}$ и $\mu_2 = \kappa_r (1 - (c_r^2/c_l^2))^{1/2}$. Согласно (2) и (3), траектория смещения частиц в поверхностной волне представляет собой эллипс, большая ось которого $u_z(z)$ направлена в глубь кристалла, а малая $u_x(z)$ – параллельна поверхности и ориентирована в направлении распространения ПАВ.

Скорость распространения ультразвуковой волны вдоль оси x для $127^\circ Y$ -среза кристалла LiNbO_3 составляет $c_s = 3808$ м/с, продольная скорость $c_l = \sqrt{c_{11}/\rho} = 6622$ м/с и поперечная скорость $c_\tau = \sqrt{c_{44}/\rho} = 4047$ м/с, где величина $\rho = 4629$ кг м⁻³ – плотность вещества LiNbO_3 [23], упругие константы $c_{11} = 20.3 \times 10^{10}$ Н м⁻² и $c_{44} = 7.58 \times 10^{10}$ Н м⁻² [24].

Для амплитуды $u_0 = 0.1$ нм и длины волны модуляции $\Lambda = 9$ мкм ($f_s = 423$ МГц) на рис. 1 показаны профили компонент смещений $u_x(z)$ и $u_z(z)$ по глубине кристалла LiNbO_3 , а также профили соответствующих параметров, определенных соотношениями (6)–(9).

Из рис. 1 видно, что смещения в направлении распространения ПАВ $u_x(z)$ по величине заметно меньше вертикальных смещений и быстро затухают в глубь кристалла. Кроме того, в рентгенодифракционных экспериментах в симметричной брэгговской геометрии невозможно обнаружить пульсирующие с частотой ультразвука латеральные деформации. И, наконец, поскольку скорость света существенно превышает скорости упругих волн в кристалле, то в рамках рентгеноакустического взаимодействия следует рассматривать дифракцию на мгновенной поверхностной решетке. Все вышесказанное указывает на то, что для анализа рентгеновской дифракции на кристалле, промодулированном ПАВ, в расчет необходимо брать только вертикальную составляющую поля упругих смещений, заданную выражением вида

$$u_z(x, z) = u_z(z) \sin(\kappa_r x), \quad (10)$$

с учетом (5), (8) и (9).

Строго говоря, описание ПАВ требует учета пьезоэлектрических эффектов. Для конкретных

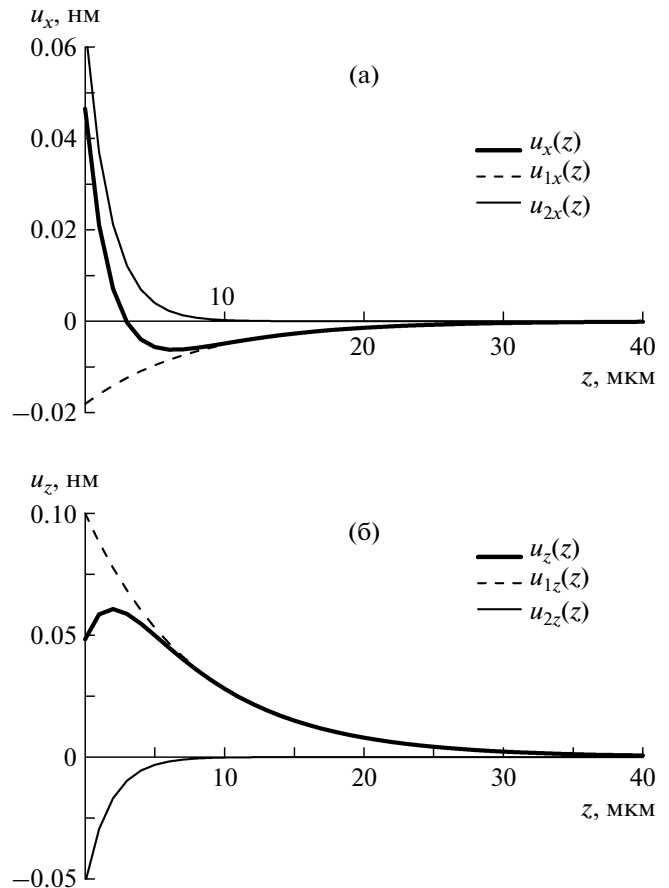


Рис. 1. Профили амплитуд упругих смещений ПАВ по глубине кристалла LiNbO_3 (жирная линия) в латеральном (а) и вертикальном (б) направлениях. $u_0 = 0.1$ нм, $f_s = 423$ МГц.

расчетов требуется дополнительная информация о ВШП, коэффициенте преобразования электрического сигнала в механические колебания кристаллической решетки и т.д. В этом случае в формулу для волнового уравнения упругих полей в среде добавляется электрическая составляющая. В итоге – вместо (5) решение для атомных смещений $u_z(z)$ и электрического потенциала представляется в виде линейной комбинации четырех слагаемых [25]. Характерные параметры этих слагаемых, а также коэффициенты затухания находятся из граничных условий численными методами, что вызывает определенные вычислительные трудности. Вместе с тем структура решения сохраняется в виде (10). Поэтому, если учесть, что амплитуда ПАВ, как правило, линейно зависит от величины входного высокочастотного сигнала на ВШП [15], то для количественного анализа экспериментальных данных вполне достаточно решения (10).

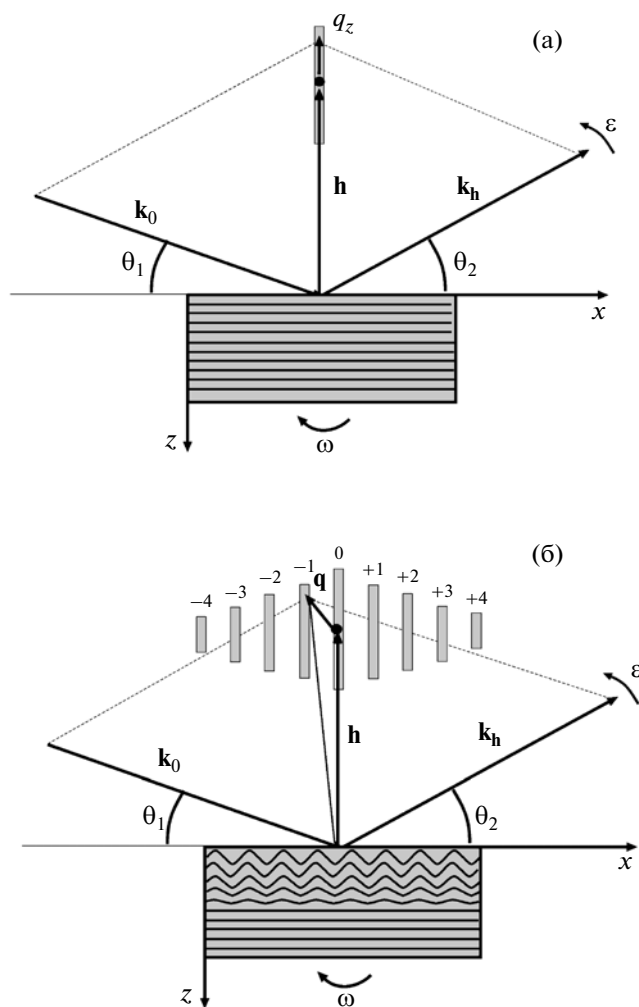


Рис. 2. Схематическое изображение дифракции рентгеновских лучей на кристалле: а – отсутствие модуляции; б – кристалл с ПАВ. Сателлиты изображены в виде серых стержней, параллельных вектору обратной решетки.

УРАВНЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Рассмотрим брэгговскую дифракцию рентгеновских лучей на кристалле, входная поверхность которого параллельна оси x , ось z направлена в глубину кристалла. Схематическое изображение дифракционной геометрии в обратном пространстве представлено на рис. 2а. Пусть $\mathbf{k}_{h,0}$ – волновые векторы дифрагированной и проходящей волны соответственно, \mathbf{h} – вектор обратной решетки отражающих атомных плоскостей, тогда вектор $\mathbf{q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0 - \mathbf{h}$ определяет отклонение вектора дифракции $\mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ от узла обратной решетки. В трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии проекции вектора \mathbf{q} в плоскости дифракции выражаются через угловое отклонение образца ω и анализатора ε как

$$q_x = (2\pi/\lambda)((\sin \theta_1 + \sin \theta_2)\omega - \sin \theta_2\varepsilon),$$

$$q_z = -(2\pi/\lambda)((\cos \theta_1 - \cos \theta_2)\omega + \cos \theta_2\varepsilon),$$

где $\theta_{1,2}$ – углы, определяющие направления падающей и дифрагированной волн относительно входной поверхности кристалла, λ – длина волны рентгеновского излучения в вакууме. На рис. 2а распределение интенсивности рассеяния от кристалла в отсутствие ультразвукового воздействия изображено в виде серого усеченного стержня – crystal truncation rod (CTR).

Известно, что поверхностная акустическая волна приводит к модуляции кристаллической решетки с периодом, равным длине ультразвуковой волны. На кривой качания помимо основного брэгговского пика возникают дополнительные дифракционные порядки (сателлиты) [2]. Эти сателлиты располагаются друг от друга на расстоянии $\kappa_s = 2\pi/\Lambda$ в обратном пространстве, где Λ – длина ультразвуковой волны. На рис. 2б основной максимум и сателлиты изображены в виде серых CTR. Движение вдоль каждой полосы CTR в направлении, параллельном вектору обратной решетки \mathbf{h} , прописывает КДО соответствующего дифракционного порядка в режиме q_z -сканирования ($\theta - 2\theta$ -сканирования).

Процедура получения уравнений, описывающих рентгеновскую дифракцию на латерально модулированном кристалле применительно к трехкристалльной дифрактометрии, подробно изложена в [17]. Показано, что в случае падения на кристалл неограниченной по ширине плоской рентгеновской волны, отличную от нуля амплитуду проходящий и дифрагированный пучки должны иметь при значениях q_x , кратных волновому числу латеральной модуляции κ_s , т.е. при значениях $q_x^{(n)} = n\kappa_s$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – номера дифракционных порядков. В идеальном случае CTR представляет собой достаточно узкие полосы в вертикальном направлении обратного пространства. Однако в реальном эксперименте падающий рентгеновский пучок пространственно ограничен и в отличие от идеальной плоской волны имеет некоторую расходимость. Кроме того, необходимо учитывать аппаратные искажения, возникающие при отражении рентгеновских пучков от монохроматора и анализатора. Ширина CTR в обратном пространстве определяется вышеуказанными факторами.

Система уравнений, описывающая дифракцию рентгеновских лучей от кристалла, промодулированного ПАВ, например, для n -го дифракционного порядка, может быть записана в виде [17]:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_0^n}{\partial z} = ia_0 E_0^n + ia_{-h} f \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(hu_0(z)) E_h^{n+m} \\ -\frac{\partial E_h^n}{\partial z} = i(ba_0 - q_z) E_h^n + ia_h f \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(hu_0(z)) E_0^{n+m}, \end{cases} \quad (11)$$

где $a_0 = \pi\chi_{00}/(\lambda\gamma_0)$, $a_{h,\bar{h}} = C\pi\chi_{h,\bar{h}}/(\lambda\gamma_{h,0})$, $\gamma_{0,h} = \sin\theta_{1,2}$, $b = \gamma_0/\gamma_h$ – фактор асимметрии, C – поляризационный фактор, $\chi_{0,h} = -r_0\lambda^2 F_{0,h}/(\pi V_c)$ – фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, V_c – объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2)$ – классический радиус электрона, e , m – заряд и масса электрона, $F_{0,h}$ – структурные факторы в направлении прохождения и дифракции рентгеновской волны, f – статический фактор Дебая–Валлера, $J_m(hu_0(z))$ – функции Бесселя m -го порядка.

Система уравнений (11) получена для гармонической латеральной модуляции (10). Заметим, что эти уравнения описывают процесс многоволновой дифракции в кристалле с периодически деформированной решеткой вдоль поверхности. Наличие суммы в правой части этих уравнений указывает на то, что для углового положения основного максимума или определенного сателлита, например, с номером n , имеет место не только динамическое взаимодействие проходящей и отраженной волны этого дифракционного порядка, но и взаимодействие с волнами других сателлитов.

Для дифракционного порядка, например, с номером n , можно записать уравнения дифракции в двухволновом приближении:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_0^n}{\partial z} = ia_0 E_0^n + ia_{-h} f J_n(hu_0(z)) E_h^n \\ -\frac{\partial E_h^n}{\partial z} = i(ba_0 - q_z) E_h^n + ia_h f J_n(hu_0(z)) E_0^n. \end{cases} \quad (12)$$

Система (12) по своей структуре совпадает с хорошо известными уравнениями Такаги [26]. Отличие состоит лишь в том, что вместо экспоненциальных множителей поля атомных смещений, присутствующих в уравнениях Такаги, в системе (12) стоят функции Бесселя соответствующих порядков. Именно эти функции, зависящие от градиента затухания ультразвуковой волны в глубь кристалла, отвечают за формирование профиля КДО брэгговского пика и сателлитных максимумов.

Система уравнений (12) преобразуется в нелинейное дифференциальное уравнение типа Риккати, по виду совпадающее с уравнением Топена [27]:

$$i \frac{\partial Q_h^n}{\partial z} = a_{-h} f J_n(hu_0(z)) (Q_h^n)^2 + [a_0(1+b) - q_z] Q_h^n + a_h f J_n(hu_0(z)), \quad (13)$$

где $Q_h^n = E_h^n/E_0^n$. Это уравнение может быть решено численно, например, методом Рунге–Кутты на отрезке, определяющем толщину кристалла.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

На основе уравнений (11) и (13) проведем численное моделирование КДО (q_z -сечения) нулевого, первого и второго сателлитов от 127° Y' -среза кристалла LiNbO_3 в зависимости от амплитуды и длины волны ультразвука. Все вычисления выполнены для (104) отражения σ -поляризованного рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.954 \text{ \AA}$, что соответствует энергии рентгеновских квантов 13 кэВ. Выбор рентгеновского рефлекса и длины рентгеновской волны связан с изложенным далее анализом экспериментальных данных. Угол Брэгга для выбранного отражения составлял 10.036° , межплоскостное расстояние $d_{104} = 2.7363 \text{ \AA}$, фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости $\chi_0 = (-1.0296 + i0.0166) \times 10^{-5}$, $\chi_h = (-0.4668 + i0.0157) \times 10^{-5}$ [23].

В численном моделировании толщина кристалла составляла 100 мкм, при этом расчетная КДО от такой пластины в точности совпадала с дифракционным спектром от модели полубесконечного кристалла. Для того чтобы показать, как влияет частота ультразвука на процесс многоволнового рассеяния на кристалле, промодулированном ПАВ, рассмотрены два случая: А – частота ультразвука $f_s = 423 \text{ МГц}$ (длина волны модуляции $\Lambda = 9 \text{ мкм}$, сателлитные пики в обратном пространстве располагаются друг от друга на расстоянии 0.7 мкм^{-1}) и Б – $f_s = 211 \text{ МГц}$ ($\Lambda = 18 \text{ мкм}$, сателлитные пики в обратном пространстве располагаются друг от друга на расстоянии 0.35 мкм^{-1}). Профили затухания с малой амплитудой поверхностной волны Релея (амплитуда модуляции в (8) и (9) $u_0 = 0.06 \text{ нм}$) для этих случаев показаны на рис. 3. Отметим, что изменение величины амплитуды модуляции не изменяет саму форму профилей затухания. При расчетах КДО на основе системы уравнений (11) учитывалось взаимодействие рентгеновских волн десяти сателлитов.

Сначала рассмотрим случай относительно малой амплитуды модуляции с профилями затухания, изображенными на рис. 3. Кривые дифракционного отражения основного максимума, первого и второго сателлитов в режиме q_z -сканирования показаны на рис. 4. В случае А профиль КДО основного максимума (нулевого дифракционного порядка) без учета эффектов многоволнового рассе-

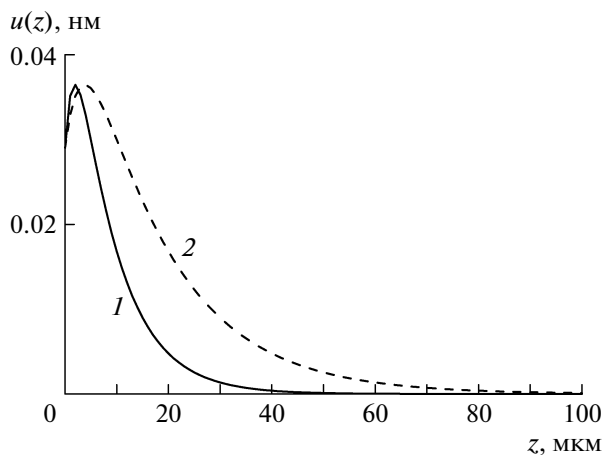


Рис. 3. Профили затухания амплитуды поверхностной волны Релея: 1 – $f_s = 423$ МГц ($\Lambda = 9$ мкм); 2 – $f_s = 211$ МГц ($\Lambda = 18$ мкм), $u_0 = 0.06$ нм.

нения в точности совпадает с кривой Дарвина [28] (рис. 4а). Многоволновое взаимодействие между сателлитами фактически не изменяет центральную часть КДО, однако на «хвостах» появляются всплески интенсивности. Пики первого сателлита по двум алгоритмам расчетов практически совпадают, если не брать во внимание небольшую разницу в интенсивностях (рис. 4б). Наконец, вторые дифракционные порядки полностью совпадают (рис. 4в). Обращает на себя внимание уменьшение ширины профилей КДО и пиковой интенсивности с ростом дифракционного порядка. В рентгеновской дифрактометрии известно, что более узкие пики наблюдаются для менее ярких рефлексов. Поэтому наблюдаемое в численных расчетах сужение дифракционных максимумов с ростом порядкового номера для малых амплитуд модуляции можно объяснить слабым

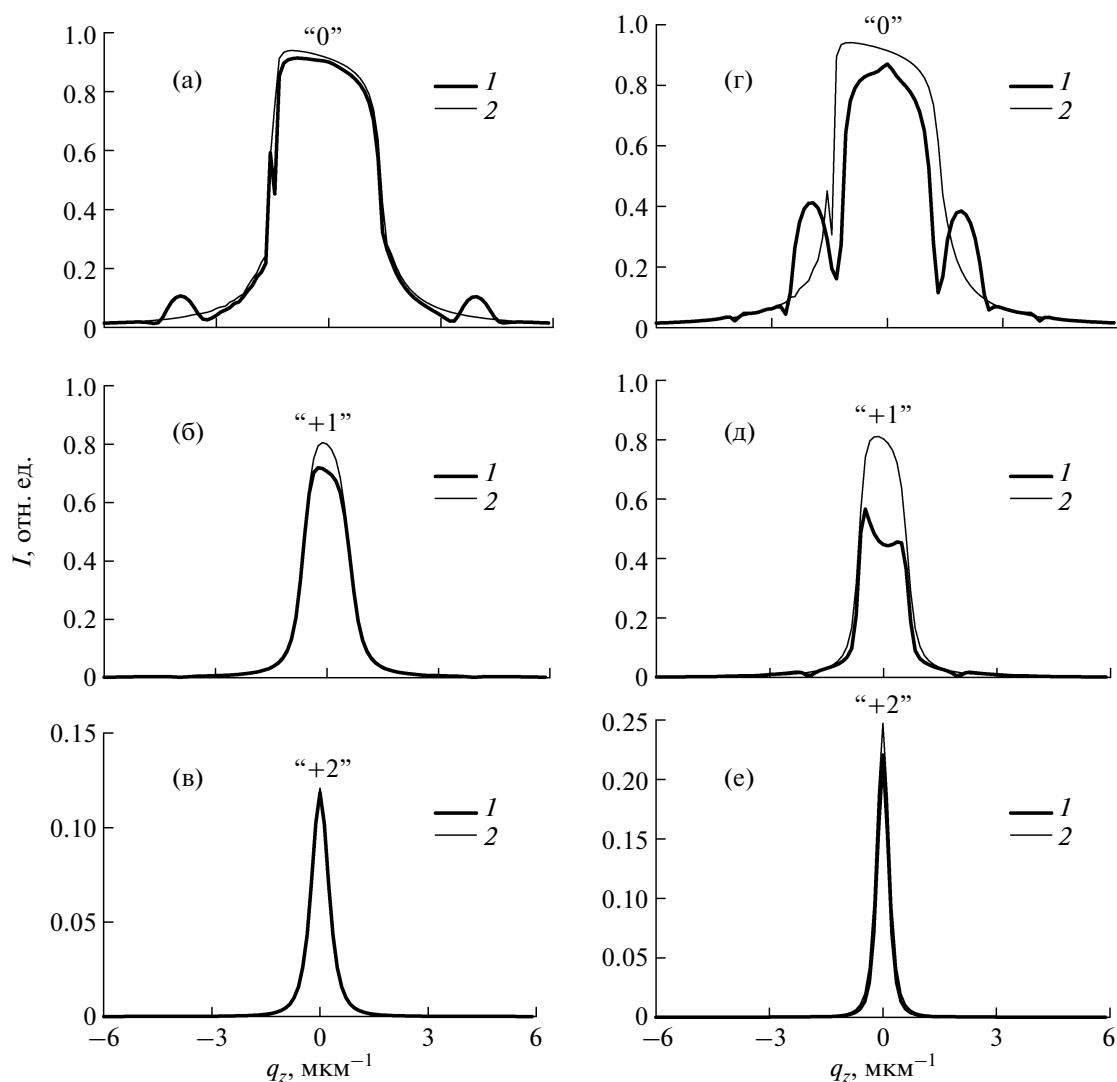


Рис. 4. Кривые дифракционного отражения основного максимума (а, г), первого (б, д) и второго (в, е) сателлитов в случае слабой модуляции кристалла ПАВ, $u_0 = 0.06$ нм с учетом (1) и без учета (2) многоволнового рассеяния; а, б, в – $f_s = 423$ МГц ($\Lambda = 9$ мкм); г, д, е – $f_s = 211$ МГц ($\Lambda = 18$ мкм).

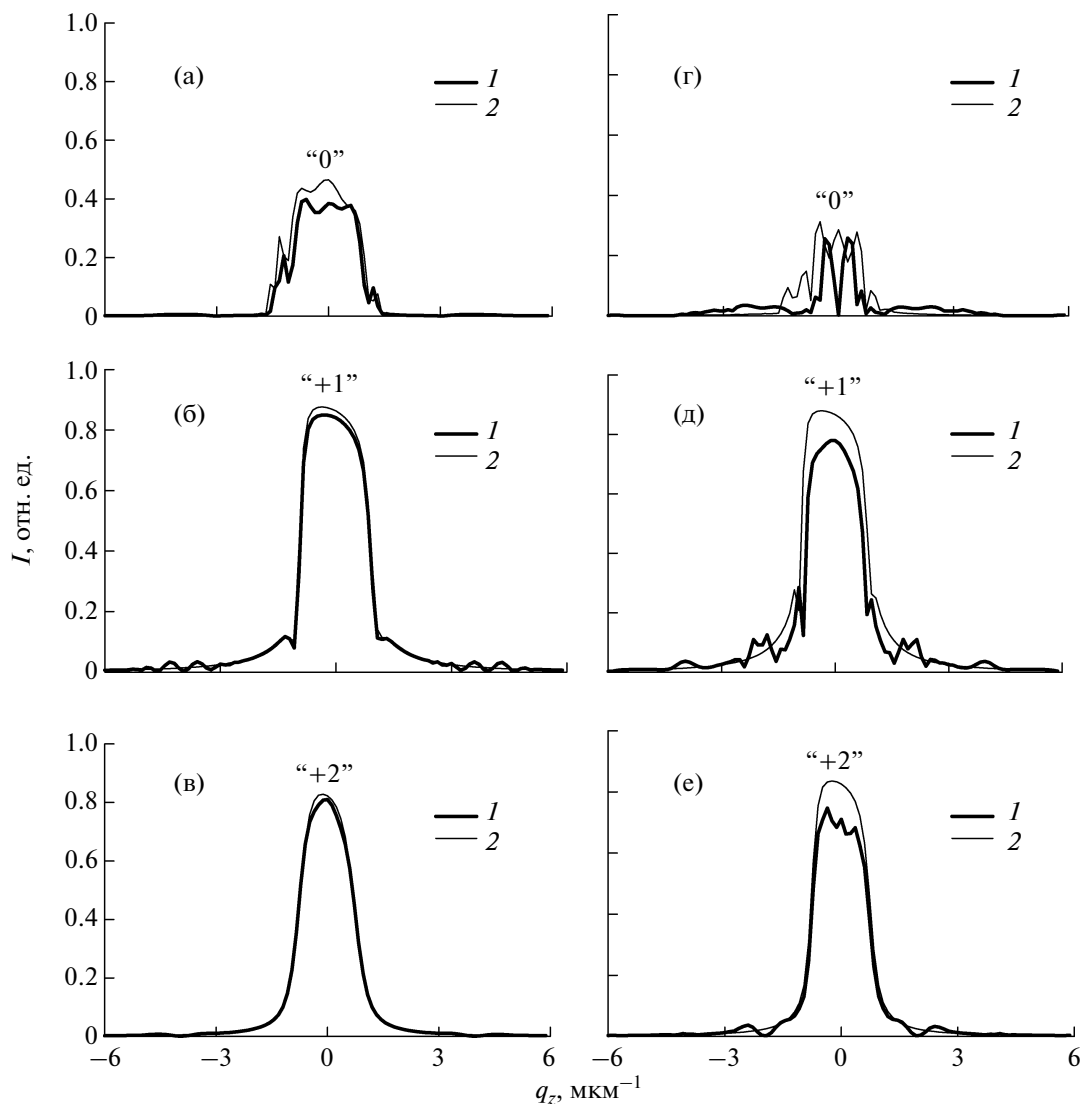


Рис. 5. Кривые дифракционного отражения основного максимума (а, г), первого (б, д) и второго (в, е) спутников в случае сильной модуляции кристалла ПАВ, $u_0 = 0.18$ нм с учетом (1) и без учета (2) многоволнового рассеяния; а, б, в – $f_s = 423$ МГц ($\Lambda = 9$ мкм); г, д, е – $f_s = 211$ МГц ($\Lambda = 18$ мкм).

взаимодействием рентгеновских волн с периодической структурой кристалла.

В случае Б расчеты КДО с учетом и без учета эффектов многоволнового рассеяния существенно различаются. В отсутствие взаимодействия волн соседних спутников форма дарвиновской кривой основного дифракционного пика практически сохраняется, в то время как учет этого взаимодействия изменяет эту форму и расщепляет профиль КДО на три максимума (рис. 4г). Первые дифракционные спутники различаются как по профилю, так и по значению пиковой интенсивности (рис. 4д). Профили следующих дифракционных порядков по виду совпадают, расчеты без учета многоволнового рассеяния показывают более высокую интенсивность (рис. 4е).

Перейдем к случаю сильной модуляции кристалла ($u_0 = 0.18$ нм). Известно, что при больших амплитудах ультразвуковой волны интенсивность нулевого пика может подавляться, вместе с тем растет интенсивность более высоких дифракционных порядков [10]. Кроме того, на профиле КДО появляются интерференционные осцилляции [12, 17, 19]. Эти эффекты визуально проявляются на расчетных кривых отражения от кристаллов, в которых ПАВ создает достаточно большие упругие смещения (рис. 5). При частоте ультразвуковой волны $f_s = 423$ МГц (случай А) изменения в структуре КДО, вызванные пренебрежением эффектами многоволнового рассеяния, проявляются слабо (рис. 5а–5в). Эти изменения заметны для нулевого дифракционного порядка в

верхней части профиля КДО (рис. 5а). Первый (рис. 5б) и второй (рис. 5в) сателлиты по форме совпадают, имеется незначительное расхождение в интенсивностях. Отметим, что в отличие от слабой модуляции, при которой форму кривой Дарвина имеет профиль нулевого максимума (рис. 4а), в случае сильной модуляции такую форму приобретает первый сателлит (рис. 5б), при этом ширина профиля КДО этого сателлита уже.

Для низкочастотного диапазона ультразвуковых колебаний (случай В, $f_s = 211$ МГц) отсутствие многоволнового рассеяния приводит к проявлению более сильных различий в профилях КДО всех дифракционных порядков (рис. 5г–5е). Если учет эффектов многоволнового рассеяния в угловой области нулевого пика приводит к появлению глубокого провала в центре кривой отражения, то пренебрежение этими эффектами, наоборот, вызывает всплеск интенсивности в этой части профиля КДО (рис. 5г). Расчеты на основе (13) показывают, что дифракционные спектры первого (рис. 5д) и второго (рис. 5е) сателлитов имеют форму дарвиновской кривой. Учет многоволнового рассеяния искажает эту форму в виде появления осцилляций на “хвостах” КДО (рис. 5д) или в центре кривой отражения (рис. 5е), при этом искажения сопровождаются уменьшением интенсивности.

Моделирование дифракционных кривых показало, что в численных расчетах динамической дифракции от 127° Y -среза кристалла LiNbO_3 , промодулированного ПАВ, эффектами многоволнового рассеяния можно полностью пренебречь при частотах ультразвука, превышающих 650 МГц. Установлено, что влияние многоволнового рассеяния усиливается с уменьшением частоты акустической волны, т.е. с увеличением периода модуляции. В низкочастотном ультразвуковом диапазоне дифракционные сателлиты располагаются в обратном пространстве так близко друг к другу, что при определенных угловых положениях кристалла “хвосты” КДО соседних порядков накладываются друг на друга, усиливая тем самым эффекты многоволнового рассеяния. Поскольку для малых амплитуд модуляции с ростом номера сателлита профили КДО становятся более узкими, то и влияние эффектов многоволнового рассеяния ослабевает. При больших значениях амплитуды ПАВ также наблюдается уменьшение влияния многоволнового рассеяния из-за сильных деформаций в приповерхностной области кристалла (рис. 4б, 4д и рис. 5б, 5д).

АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Проведенное выше численное моделирование служило инструментом для анализа экспериментальных данных рентгеновской дифракции на

127° Y -срезе кристалла LiNbO_3 . Измерения проведены на источнике синхротронного излучения (СИ) ESRF (Гренобль, Франция) с энергией рентгеновских квантов 13 кэВ. Использовалась схема высокоразрешающего трехкристального рентгеновского дифрактометра на оптической линии ВМ5. Рентгеновское излучение от источника СИ проходило через первичную щель размером 0.1×0.1 мм и падало на двойной кристалл монокроматор $\text{Si}(111)$, от которого излучение попадает на вторую щель таких же размеров, что и первая, и после коллимации дифракционно отражалось от второго монокроматора $\text{Si}(333)$. Полученный таким образом высокомонокроматизированный рентгеновский пучок падал на образец. Дифракционно отразившись от образца, излучение попадало на кристалл-анализатор $\text{Si}(333)$ и далее регистрировалось NaI-сцинтилляционным детектором. В образце 127° Y -среза кристалла LiNbO_3 возбуждалась ПАВ с частотой 952 МГц, которая вызывала модуляцию решетки с периодом $\Lambda \approx 4$ мкм. В данном случае дифракционные сателлиты располагались друг от друга на расстоянии 1.6 мкм^{-1} в обратном пространстве.

Для иллюстрации изложенного выше количественный анализ экспериментальных данных проведен на основе численных расчетов с использованием системы (11) и уравнения (13). Для лучшего соответствия расчетных данных с экспериментальными измерениями учитывалась аппаратная расходимость рентгеновского пучка, которая в переводе на угловые единицы обратного пространства составляла $\Delta q_x \approx 0.2 \text{ мкм}^{-1}$. Расчетная инструментальная функция соответствовала трехкратному симметричному отражению от совершенного кристалла кремния, что существенно уменьшало влияние псевдопика монокроматора. Анализ экспериментальных данных проводился путем моделирования КДО (q_z -сечений) и кривых качания (q_x -сечений) вариацией амплитуды ультразвука u_0 , статического фактора Дебая–Валлера f , а также учитывалось влияние диффузного рассеяния в рамках статистической модели мозаичного кристалла [17]. Наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных данных было получено при значениях $f = 0.85$ и $u_0 = 0.34$ нм.

На рис. 6 представлены расчетные и экспериментальные КДО нулевого пика (а) и первого сателлита (б). Из-за больших упругих смещений амплитуды модуляции на профилях кривых отражения как нулевого, так и первого дифракционного порядка наблюдаются интерференционные провалы. Расчеты, выполненные по двум вычислительным алгоритмам, полностью совпадают. В зависимости от условий численного расчета, связанного с выбором шага вычислений по углам и толщине кристалла, величины амплитуды упру-

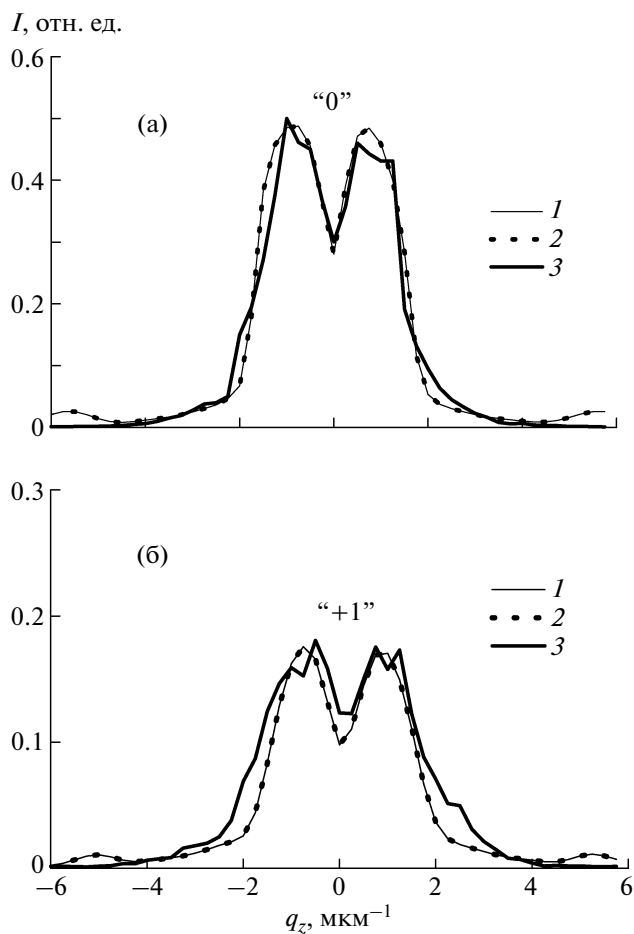


Рис. 6. Кривые дифракционного отражения (q_z -сечения) от кристалла, промодулированного ПАВ. Частота ультразвуковых колебаний 952 МГц: а – основного максимума ($q_x = 0$); б – первого сателлита ($q_x = 1.6 \text{ мкм}^{-1}$): 1 – расчет без учета эффектов многоволнового рассеяния; 2 – расчет с учетом многоволнового рассеяния; 3 – экспериментальная КДО.

гих смещений и учета числа взаимодействующих рентгеновских полей в процессе многоволнового рассеяния, временные затраты вычислений на основе системы (11) превышали на 2–3 порядка по сравнению с численным счетом уравнения (13) методом Рунге–Кутты 4-го порядка.

Для вычислений кривых качания (q_x -сечений) вместо уравнения (13) использовалась система (12), которая совместно с (11) преобразована с учетом конечной ширины волнового фронта падающего излучения и инструментальных функций [17]. Соотношение временных затрат на вычисления по двум методам было таким же, как при расчетах q_z -сечений. На рис. 7 показаны теоретические и экспериментальные q_x -сечения, проходящие через точки провала КДО ($q_z = 0$) и вершины «горбов» КДО ($q_z = 1 \text{ мкм}^{-1}$).

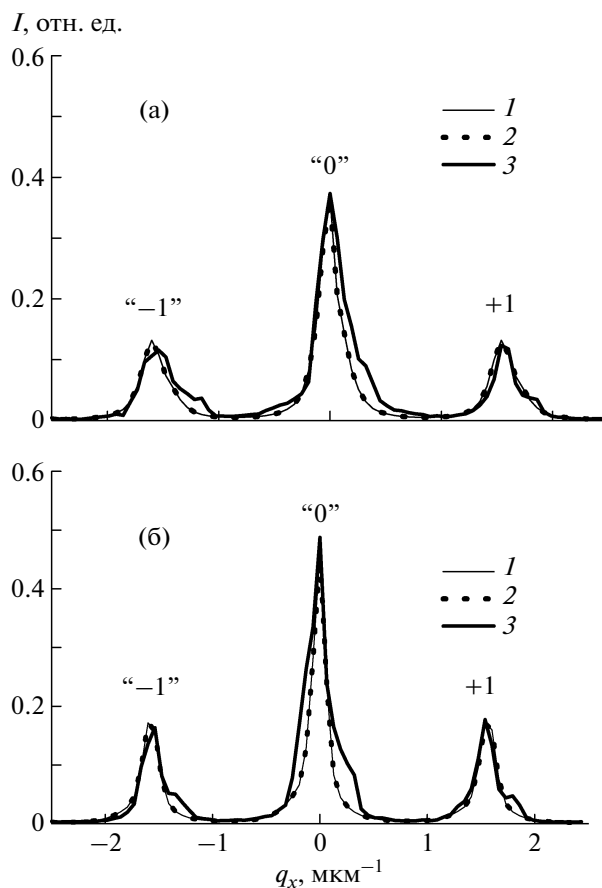


Рис. 7. Кривые качания (q_x -сечения) от кристалла, промодулированного ПАВ. Частота ультразвуковых колебаний 952 МГц: а – сечение через точку провала КДО ($q_z = 0$); б – через точку на вершине «горба» КДО ($q_z = 1 \text{ мкм}^{-1}$): 1 – расчет без учета эффектов многоволнового рассеяния; 2 – с учетом многоволнового рассеяния; 3 – экспериментальная кривая качания.

Таким образом, проведенные численные расчеты показали, что для количественного анализа рентгеновского рассеяния от кристалла, промодулированного ПАВ с частотой ультразвуковых колебаний 952 МГц вполне достаточно использовать двухволновое приближение и вычисления проводить с помощью уравнения (13). Кроме того, отметим, что многократные расчеты динамической дифракции с учетом и без учета многоволнового рассеяния показали, что независимо от величины амплитуды модуляции кривые отражения от кристалла с ПАВ с частотой ультразвука, большей, чем 650 МГц (длиной волны меньше, чем $\Lambda = 6 \text{ мкм}$), идеально совпадали. Указанные количественные характеристики справедливы только для данного кристалла, заданной длины волны рентгеновского излучения и выбранного дифракционного рефлекса. Для других объектов и характеристик рентгеновского излучения необ-

ходимо исследовать свой критерий, при котором можно пренебречь эффектами многоволнового рассеяния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-02-00445-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Campbell C.K.* Surface Acoustic Wave Devices for Mobile and Wireless Communications. Boston: Academic Press, 1998. 631 p.
2. *Erko A., Firsov A., Roshchupkin D.V., Schelokov I.A.* // Modern developments in X-ray and neutron optics. Berlin: Springer, 2008. V. 137. P. 471.
3. *Cerva H., Graeff W.* // Phys. Status Solidi. A. 1984. V. 82. P. 35.
4. *Roshchupkin D.V., Roshchupkina H. D., Irzhak D.V.* // IEEE Trans. Ultrasonic Ferroelectrics, 2005. V. 52. P. 2081.
5. *Shilo D., Zolotoyabko E.* // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 115506 (1–4).
6. *Sauer W., Metzger T.H., Peisl J., Avrahami Y., Zolotoyabko E.* // Physica B. 1998. V. 248. P. 358.
7. *Mkrtychyan A.R., Kocharyan V.R., Levonyan L.V., Khachaturyan G.K.* // Crystallography Reports. 2006. V. 51. P. S44.
8. *Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., Tucoulou R., Buzanov O.A.* // J. Appl. Phys. 2003. V. 94. P. 6692.
9. *Roshchupkin D.V., Erko A.I., Ortega L., Irzhak D.V.* // Appl. Phys. A: Mater. 2009. V. 94. P. 477.
10. *Tucoulou R., de Bergevin F., Mathon O., Roshchupkin D.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 134108.
11. *Tucoulou R., Mathon O., Ferrero C. et al.* // J. Appl. Phys. 2005. V. 97. P. 113505.
12. *Schelokov I.A., Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., Tucoulou R.* // J. Appl. Cryst. 2004. V. 37. P. 52.
13. *Sauer W., Streibl M., Metzger T.H. et al.* // Appl. Phys. Lett. 1999. V. 75. P. 170.
14. *Tucoulou R., Pascal R., Brunel M., Mathon O. et al.* // J. Appl. Cryst. 2000. V. 33. P. 1019.
15. *Иржак Д.В., Рошчупкин Д.В., Тукулу Р., Матон О.* // Поверхность. 2002. № 1. P. 10.
16. *Пунегов В.И., Казаков Д.В., Иржак Д.В. и др.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 6. С. 33.
17. *Punegov V.I., Nesterets Ya.I., Roshchupkin V.D.* // J. Appl. Cryst. 2010. V. 43. P. 520.
18. *Gabrielyan B.G., Aslanian H.A.* // Phys. Status Solidi. A. 1988. V. 108. № 2. P. K85.
19. *Пунегов В.И.* // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. Вып. 19. С. 52.
20. *Чжан Ш.* Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. М: Мир, 1987. 336 с.
21. *Rayleigh L.* // Proc. London Math. Soc. 1885. V. 7. P. 4.
22. *Auld B.A.* Acoustic Fields and Waves in Solids. 2 ed., 1, Malabar, Florida, 1990. 423 p.
23. *Stepanov S.A.* // <http://sergey.gmca.aps.anl.gov>
24. *Kannan T.* Finite Element Analysis of Surface Acoustic Wave Resonators, Master Thesis. University of Saskatchewan, 2006. 115 p.
25. *Campbell J.J., Jones W.R.* // IEEE Trans. Sonics and Ultrasonics. 1968. V. 15. P. 209.
26. *Takagi S.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. V. 27. P. 1239.
27. *Taupin D.* // Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist. 1964. V. 87. P. 469.
28. *Authier A.* Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. New York: Oxford University Press, 2001. 661 p.