

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ  
ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

ТЕОРИЯ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ  
КРИСТАЛЛОМ С ПОРАМИ В ФОРМЕ ТРЕУГОЛЬНОЙ ПРИЗМЫ

© 2013 г. В. И. Пунегов

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар

E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Поступила в редакцию 14.05.2012 г.

Разработана теория диффузного рассеяния (ДР) рентгеновских лучей на кристалле с порами в форме треугольной призмы. В рамках этой модели пор получены решения для статического фактора Дебая–Валлера, собственной корреляционной функции, а также корреляционного объема, характеризующего угловое распределение ДР в обратном пространстве. Проведено численное моделирование карт распределения интенсивности ДР вблизи узла обратной решетки. Показано влияние флуктуаций размера пор на формирование контуров равной интенсивности ДР.

DOI: 10.7868/S0023476113040164

## ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время пористые материалы широко используются в разных областях, в частности в изготовлении светоизлучающих приборов, биохимических сенсоров, датчиков влажности, интерференционных фильтров, оптических волноводов, фотонных кристаллов и т.д. [1].

На морфологию пористых систем, создаваемых методами электрохимической анодизации, сильно влияют структурные и химические характеристики материалов, наличие примеси в них, а также плотность тока, временной режим травления, состав электролита и т.д. Как результат, в кристаллической среде формируются поры разных форм и размеров [2]. В частности, поры в виде прямоугольной [3] и треугольной призмы [4], а также цилиндрической [2] и эллипсоидальной [5] формы наблюдались на снимках электронной микроскопии.

Исследование структурных и физических свойств пористых кристаллов является весьма актуальной задачей. Методы высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии оказались перспективными в задачах диагностики пористых слоев [6–9] и многослойных пористых кристаллов [10].

Поры в кристалле являются источниками диффузного рассеяния (ДР) рентгеновских лучей, угловое распределение которого зависит от формы и размера пор, их пространственной ориентации и структурного порядка. Следовательно, ДР может служить основой для неразрушающей диагностики пористых структур.

До настоящего времени в теории ДР рассматривались модели пор в виде прямоугольного параллелепипеда [7], цилиндрической [8] и сфероидальной формы [11]. Несмотря на то что во многих случаях сечения пор в кристалле имеют

треугольную форму [2], теоретический анализ ДР для модели пор в виде треугольной призмы не проводился.

Целью настоящей работы является развитие теории ДР от кристаллической среды с массивом пор в форме треугольной призмы.

## ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для простоты теоретически исследуется ДР в симметричной брэгговской геометрии. Рассеяние рентгеновских лучей от кристаллов удобно рассматривать в обратном пространстве, поскольку дифракция происходит от атомных плоскостей, перпендикулярных вектору обратной решетки  $\mathbf{h}$ . Обозначим  $\mathbf{k}_{0,h}$  волновые векторы падающего и отраженного рентгеновского пучка. В обратном пространстве угловое распределение интенсивности рассеяния зависит от вектора  $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$ , задающего отклонение вектора рассеяния  $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$  от узла обратной решетки  $\mathbf{h}$ . В трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии проекции вектора  $\mathbf{q}$  в плоскости дифракции выражаются через угловые параметры вращения образца  $\omega$  и анализатора  $\varepsilon$  как

$$q_x = (2\pi/\lambda)(2\omega - \varepsilon)\sin\theta_B,$$

$$q_z = -(2\pi/\lambda)\varepsilon\cos\theta_B.$$

Выражение для интенсивности ДР при однородном распределении пор в кристалле и без учета их пространственной корреляции имеет простой вид

$$I_h^d(q) = |a_h|^2 (1 - f^2) V_0 \tau(q), \quad (1)$$

где  $V_0$  – засвеченный рентгеновским пучком объем кристалла,  $f$  – статический фактор Дебая–Вал-

лера. Величина коэффициента  $a_h = C\pi\chi_h/(\lambda\gamma_h)$  определяется взаимодействием рентгеновского поля с электронной плотностью среды. Здесь  $\gamma_h = |\sin\theta_B|$ ,  $\theta_B$  – угол Брэгга,  $C$  – поляризационный фактор,  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения в вакууме,  $\chi_h = -r_0\lambda^2 F_h/(\pi V_c)$  – фурье-компонента рентгеновской поляризуемости идеальной кристаллической решетки,  $F_h$  – структурный фактор,  $V_c$  – объем элементарной ячейки,  $r_0 = e^2/(mc^2)$  – классический радиус электрона,  $e$ ,  $m$  – заряд и масса электрона.

Соотношение (1) не учитывает динамические эффекты в теории ДР, а именно первичную экстинкцию в интенсивности проходящей рентгеновской волны и вторичную экстинкцию в рассеянии некогерентных рентгеновских волн.

Фактор Дебая–Валлера  $f$ , присутствующий в решении (1), в общем случае может быть представлен в виде произведения  $f = f_p f_s$ , где  $f_p$  вызван отсутствием объема рассеивающего материала, т.е. пористостью кристаллического слоя  $P = 1 - \nu/\nu_0$ , где  $\nu_0$  и  $\nu$  – плотности слоев до и после электрохимического травления. Множитель  $f_s$  характеризует структурные нарушения “скелета” пористой среды, которые могут проявляться в виде микротрещин, локальных деформаций и т.д.

Основным параметром выражения (1), отвечающим за угловое распределение интенсивности ДР, является корреляционный объем

$$\tau(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} g(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{p}). \quad (2)$$

Поры в кристалле нарушают строгий трансляционный порядок в расположении атомов среды, тем самым создают случайные локальные смещения  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  в строгой периодической структуре решетки. Эти локальные нарушения описываются собственной корреляционной функцией (СКФ) Като [12]:

$$g(\mathbf{p}) = \frac{\langle \exp(i\mathbf{h}[\delta\mathbf{u}(\mathbf{p}) - \delta\mathbf{u}(0)]) \rangle - f^2}{1 - f^2}. \quad (3)$$

Распределение случайных смещений  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  определяется размерами и формой пор, а также в зависимости от выбранной модели наличием или отсутствием упругих деформаций в окрестности отдельно взятой поры. Собственную автокорреляционную функцию пор в кристалле можно представить в виде [13, 14]:

$$g(\mathbf{p}) = (1/V_p) \int D(\mathbf{r}) D^*(\mathbf{r} + \mathbf{p}) d\mathbf{r}, \quad (4)$$

где  $V_p$  – объем поры. Функция  $D(\mathbf{r})$  зависит от поля случайных деформаций и описывает локаль-

ные нарушения кристаллической решетки [13, 14]. В рассматриваемом случае эти нарушения вызваны пустотами в кристаллической матрице. Пусть  $c_p$  – концентрация пор в кристаллической матрице, тогда используя  $D(\mathbf{r})$  можно записать выражение для статического фактора Дебая–Валлера

$$f_p = \exp\left(-c_p \int D(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\right). \quad (5)$$

### МОДЕЛЬ ПОР В ФОРМЕ ТРЕУГОЛЬНОЙ ПРИЗМЫ

Рассмотрим ДР в кристалле с порами в виде треугольной призмы. Пусть латеральное сечение вертикально расположенных пор представляет собой равносторонний треугольник со стороной  $a$ , высота пор  $l_z$  (рис. 1).

Для такой модели пор функция  $D(\mathbf{r})$  имеет вид

$$D(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in V_{prism} \\ 0, & \mathbf{r} \notin V_{prism} \end{cases}, \quad (6)$$

где  $V_{prism} = (\sqrt{3}/4)a^2 l_z$  – объем поры в форме треугольной призмы. Подставив (6) в выражение (5), для статического фактора Дебая–Валлера получаем

$$f_p = \exp(-c_p V_{prism}) = \exp(-P). \quad (7)$$

Из (7) следует, что статический фактор кристалла с порами в форме треугольной призмы полно-

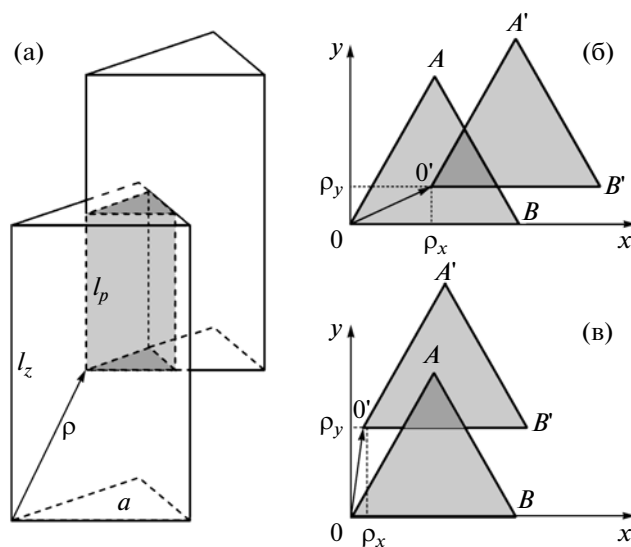


Рис. 1. Модель кристаллической поры в форме правильной треугольной призмы, высота поры  $l_z$ , основание поры – равносторонний треугольник со стороной  $a$ ; а – пересечение двух призм,  $l_p$  – высота фигуры пересечения, б, в – пересечение двух равносторонних треугольников: б –  $|\rho_x| < |\rho_y/\sqrt{3}| \leq a/2$ ; в –  $|\rho_y/\sqrt{3}| < |\rho_x| \leq a$ .

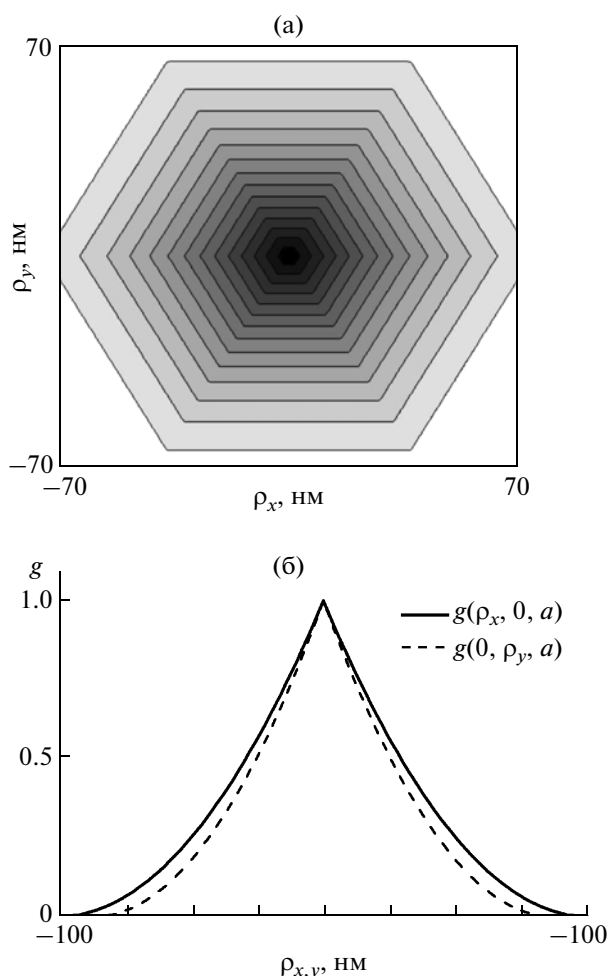


Рис. 2. Двумерная собственная корреляционная функция  $g(\rho_x, \rho_y, 0) = g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a)$  (а) и одномерные функции  $g_{tr}(\rho_x, 0, a)$ ,  $g_{tr}(0, \rho_y, a)$  (б) треугольной призмы. Сторона треугольного основания  $a = 100$  нм, высота призмы  $l_z = 300$  нм.

стью определяется объемной долей пустот в образце.

$$g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = \begin{cases} (1 - (1/a)(|\rho_x| + |\rho_y|/\sqrt{3}))^2, & |\rho_x| < |\rho_y|/\sqrt{3} \leq a/2; \\ (1 - (2/a)|\rho_y|/\sqrt{3})^2, & |\rho_y|/\sqrt{3} < |\rho_x| \leq a \\ 0, & s_p(\rho_x, \rho_y) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

На рис. 2а показана фигура, соответствующая контурам равного значения двумерной СКФ треугольной призмы  $g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a)$ . Длина стороны треугольника  $a = 100$  нм, контуры равного значения СКФ представлены в линейном масштабе, разность величин между соседними линиями равна 0.067.

В методе высокоразрешающей трехкристальной рентгеновской дифрактометрии для анализа ДР большое значение имеют двумерные СКФ  $g(\rho_x, 0, \rho_z) = g_{tr}(\rho_x, 0, a)g_z(\rho_z, l_z)$  и  $g(0, \rho_y, \rho_z) =$

Перейдем к рассмотрению СКФ пористого кристалла  $g(\mathbf{r})$ . Эта функция характеризует вероятность того, что две точки, расположенные на расстоянии  $r$  друг от друга, будут находиться внутри поры. При этом всегда выполняются условия для СКФ:  $g(0) = 1$  и  $g(\infty) = 0$ . На рис. 1 показана геометрическая трактовка СКФ для пор в форме треугольной призмы. Ее суть состоит в том, что СКФ  $g(\rho_x, \rho_y, \rho_z)$  равна отношению объема пересечения двух пор  $v_p = s_p l_p$  к объему треугольной призмы  $V_{prism}$ . Здесь  $s_p = s_p(\rho_x, \rho_y)$  – площадь пересечения двух равнобедренных треугольников, представляющих основания двух треугольных призм (рис. 1б, 1в),  $l_p = l_z - \rho_z$  – длина этого пересечения (рис. 1а). Собственная корреляционная функция пор в форме треугольной призмы может быть записана в виде произведения

$$g(\rho_x, \rho_y, \rho_z) = g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a)g_z(\rho_z, l_z), \quad (8)$$

где

$$g_z(\rho_z, l_z) = \begin{cases} 1 - |\rho_z|/l_z, & |\rho_z| \leq l_z \\ 0 & |\rho_z| > l_z \end{cases} \quad (9)$$

одномерная СКФ, изменяющаяся в вертикальном направлении и зависящая от высоты поры. Далее задача сводится к вычислению двумерной СКФ  $g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = 4s_p(\rho_x, \rho_y)/(\sqrt{3}a^2)$ , определенной в латеральной плоскости с координатами  $\rho_x$  и  $\rho_y$ . Особенностью рассматриваемой модели пор является то, что двумерная СКФ  $g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a)$  ведет себя по-разному в зависимости от геометрии пересечения треугольников (рис. 1б, 1в). Процедура вычислений этой функции для двух возможных случаев рассмотрена в приложении А. В итоге для двумерной СКФ имеет место следующая запись:

$= g_{tr}(0, \rho_y, a)g_z(\rho_z, l_z)$ , определенные в плоскости дифракции  $(x, z)$  или  $(y, z)$  соответственно.

Если для пор, например, квадратного сечения это не имеет принципиального значения, то в случае пор в форме треугольной призмы поведение СКФ зависит от того, как расположены ориентированные поры относительно падающего рентгеновского пучка. Действительно, согласно (9), одномерная СКФ  $g_z(\rho_z, l_z)$  при азимутальном повороте относительно оси  $z$  не изменяется, в то

время как одномерные функции  $g_{ir}(\rho_x, 0, a)$  и  $g_{ir}(0, \rho_y, a)$  ведут себя по-разному:

$$g_{ir}(\rho_x, 0, a) = \begin{cases} (1 - (1/a)|\rho_x|)^2, & |\rho_x| \leq a/2; \\ 1 & |\rho_x| \leq a \\ 0, & |\rho_x| > a, \end{cases} \quad (11)$$

$$g_{ir}(0, \rho_y, a) = \begin{cases} (1 - (1/a)|\rho_y|/\sqrt{3})^2, & |\rho_y|/\sqrt{3} \leq a/2; \\ (1 - (2/a)|\rho_y|/\sqrt{3})^2, & |\rho_y|/\sqrt{3} \leq a \\ 0, & |\rho_y|/\sqrt{3} > a. \end{cases} \quad (12)$$

Поведение одномерных СКФ  $g_{ir}(\rho_x, 0, a)$  и  $g_{ir}(0, \rho_y, a)$  показано на рис. 26. Видно, что функция  $g_{ir}(0, \rho_y, a)$  более быстро спадает с ростом расстояния.

### ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ

Перейдем к рассмотрению ДР кристаллом с треугольным сечением пор. Угловое распределение ДР описывается выражением (1), где все параметры, кроме корреляционного объема  $\tau(\mathbf{q})$ , являются постоянными величинами. Рассмотрим случай, когда в кристалле хаотично распределены поры, одинаковые по размерам, ориентации и форме, при этом пространственная корреляция между соседними порами отсутствует. Пусть присутствующие в формуле (1) постоянные коэффициенты принимают значения, при которых максимальное значение интенсивности диффузного рассеяния равно единице:

$$I_h^d(\mathbf{q}) = \tau(\mathbf{q})/\tau(0), \quad (13)$$

где  $\tau(0)$  – значение корреляционного объема в узле обратной решетки. Используя форму записи СКФ в виде (4), подставляя ее в (2), получаем

$$\tau(\mathbf{q}) = |D(\mathbf{q})|^2 / V_{prism}, \quad (14)$$

где

$$D(\mathbf{q}) = \int D(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (15)$$

фурье-представление функции  $D(\mathbf{r})$ .

В рамках рассматриваемой модели пор решение для корреляционного объема запишется в виде произведения латеральной корреляционной площади  $\tau_{ir}(q_x, q_y)$  и вертикальной корреляционной длины  $\tau_z(q_z)$ :

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_{ir}(q_x, q_y) \tau_z(q_z), \quad (16)$$

где

$$\tau_{ir}(q_x, q_y) = \frac{4S_{ir}}{[p_x^2 - p_y^2]^2} \times \left( 1 + \frac{p_y}{p_x} \sin(p_x) \left( \frac{p_y}{p_x} \sin(p_x) - 2 \sin(p_y) \right) + (\cos(p_x) - 2 \cos(p_y)) \cos(p_x) \right) \quad (17)$$

и

$$\tau(q_z) = l_z |\sin c(p_z)|^2. \quad (18)$$

Здесь  $\sin c(x) = \sin(x)/x$ , а также для удобства введены безразмерные угловые параметры  $p_x = \frac{q_x a}{2}$ ,

$p_y = \frac{\sqrt{3} q_y a}{2}$  и  $p_z = \frac{q_z l_z}{2}$ . Процедура вычисления

корреляционной площади  $\tau_{ir}(q_x, q_y)$  дана в приложении Б.

В узле обратной решетки латеральная корреляционная площадь равна площади равнобедренного треугольника (латеральному сечению треугольной призмы)  $\tau_{ir}(q_x = 0, q_y = 0) = S_{ir}$ , вертикальная корреляционная длина равна высоте треугольной призмы  $\tau_z(q_z = 0) = l_z$ , а корреляционный объем равен объему поры:  $\tau(\mathbf{q} = 0) = V_{prism} = (\sqrt{3}/4) a^2 l_z$ .

Корреляционные длины в латеральной плоскости имеют вид

$$\tau_0(q_x) = \tau(q_x, 0, 0) = S_{ir} \frac{4}{p_x^4} (1 - \cos(p_x))^2, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \tau_0(q_y) &= \tau(0, q_y, 0) = \\ &= S_{ir} \frac{8}{p_y^4} (1 - \cos(p_y) + (p_y)[p_y/2 - \sin(p_y)]). \end{aligned} \quad (20)$$

Следуя (13), запишем выражения для сечений интенсивности ДР  $I_h^d(q_x, 0, 0) = \tau_0(q_x)/S_{ir}$ ,  $I_h^d(0, q_y, 0) = \tau_0(q_y)/S_{ir}$ ,  $I_h^d(0, 0, q_z) = \tau(q_z)/l_z$ .

Уравнения (18)–(20) показывают, что при наличии в кристалле пор одинакового размера угловое распределение интенсивности рассеяния во всех трех направлениях имеет осцилляционный характер, при этом период осцилляций в вертикальном направлении равен  $T_z = 2\pi/l_z$ , в латеральной плоскости вдоль оси  $x - T_x = 2\pi/a$ , вдоль оси  $y - T_y = 2\pi/(\sqrt{3}a)$ .

На рис. 3 показана карта углового распределения интенсивности ДР  $I_h^d(q_x, q_y, 0)$ . Контурной линией равной интенсивности на этой, а также на картах обратного пространства, приведенных ниже, представлены в логарифмическом масштабе, отношение между соседними линиями составляет 0.316. Если угловое распределение ДР вдоль оси  $q_x$

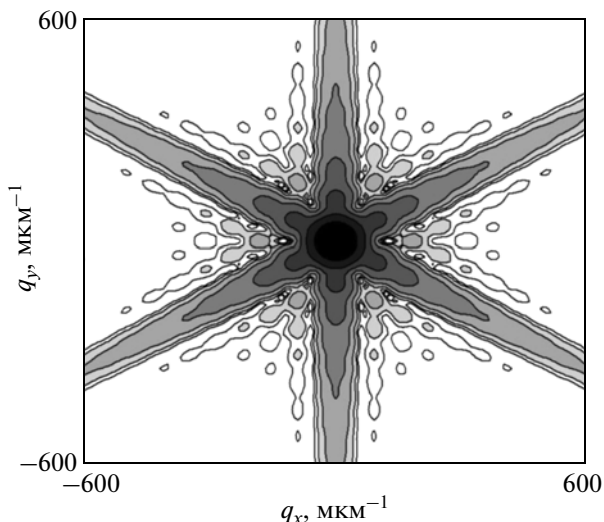


Рис. 3. Карта углового распределения диффузного рассеяния  $I_h^d(q_x, q_y, 0)$  от кристалла с порами в форме треугольной призмы.

имеет резко выраженный осцилляционный характер, что следует из (19), то в перпендикулярном направлении осцилляции сглажены (рис. 3). Такое поведение контуров равной интенсивности ДР объясняется наличием линейных зависимостей наряду с осцилляционными членами в правой части формулы (20). Распределение ДР в латеральной плоскости (рис. 3) имеет гексагональную симметрию и является фурье-образом двумерной СКФ (рис. 2а). Картина ДР имеет структуру пересечения трех полос, вдоль которых сосредоточены максимальные значения интенсивности.

В методе высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии регистрируется интегральная (по одному из латеральных направлений) интенсивность

$$I_h^d(q_x, q_z) = \frac{1}{\tau(0)} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_y \tau(\mathbf{q}) = \frac{\tau(q_x, q_z)}{\tau(0, 0)}. \quad (21)$$

Здесь корреляционные площади для двух азимутальных положений кристалла могут быть записаны как

$$\tau(q_{x,y}, q_z) = \tau(q_z) \int_{-\infty}^{+\infty} dq_{y,x} \tau_{lr}(q_x, q_y) = \tau(q_{x,y}) \tau(q_z). \quad (22)$$

Эти корреляционные площади следует отличать от сечений вида  $\tau(q_x, 0, q_z) = \tau_0(q_x) \tau(q_z)$  и  $\tau(0, q_y, q_z) = \tau_0(q_y) \tau(q_z)$ . На рис. 4 показаны карты распределения интенсивности ДР в обратном пространстве сечений  $I_h^d(q_x, 0, q_z)$  и  $I_h^d(0, q_y, q_z)$  (рис. 4). Отметим, что контуры равной интенсивности сече-

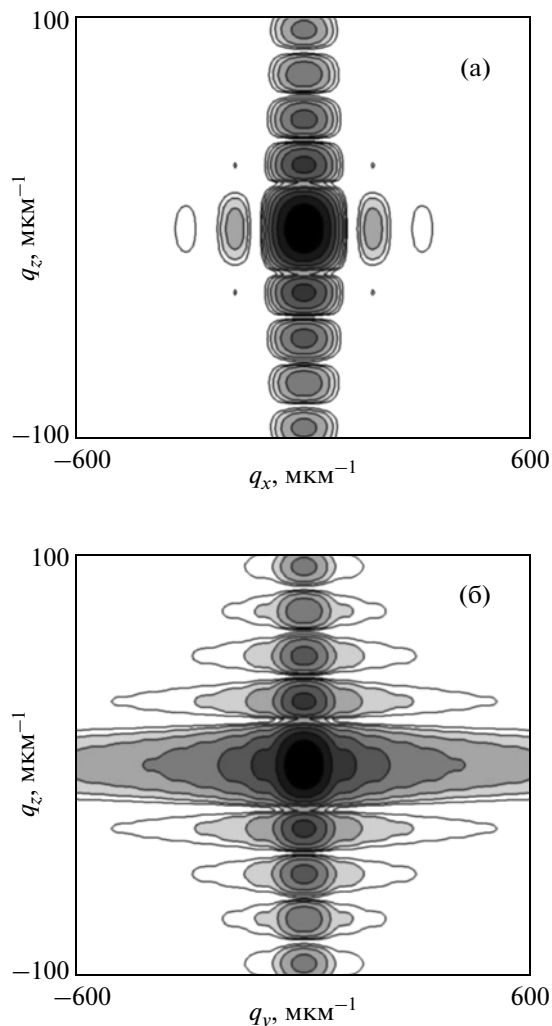
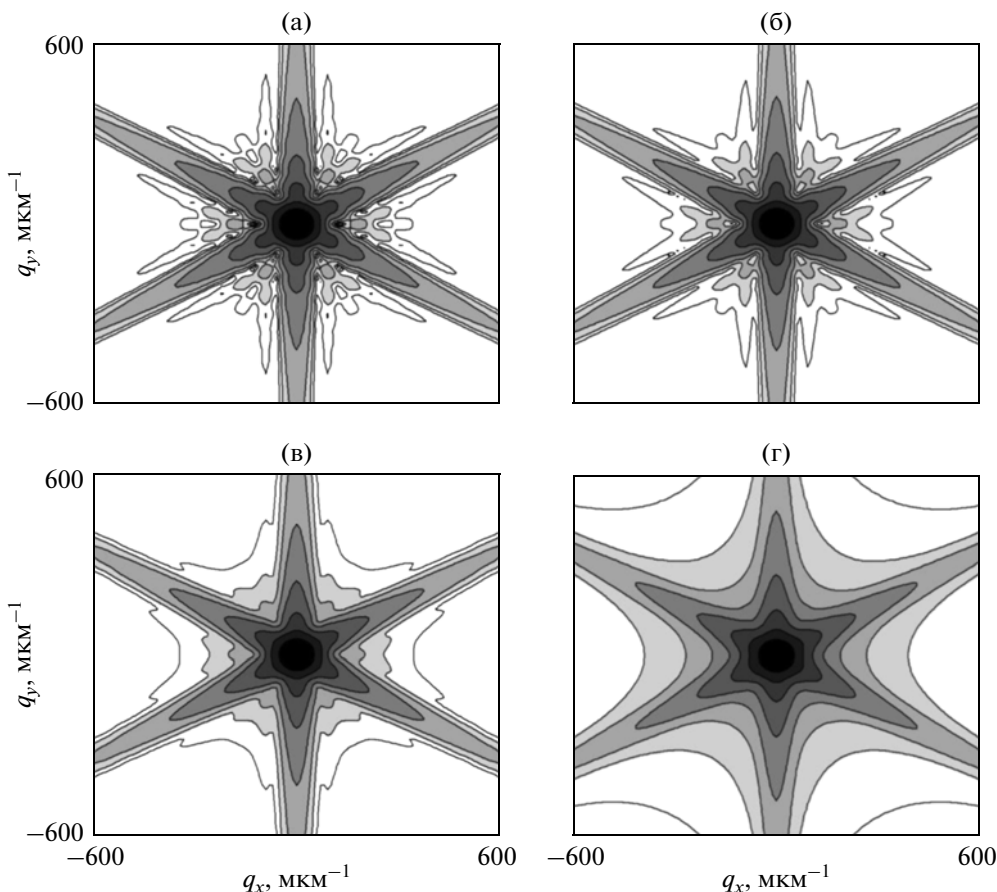


Рис. 4. Карты распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве: а – сечение  $I_h^d(q_x, 0, q_z)$ , б – сечение  $I_h^d(0, q_y, q_z)$ .

ний  $I_h^d(q_x, 0, q_z)$  и  $I_h^d(0, q_y, q_z)$  заметно различаются, в то время как угловые распределения интегральных интенсивностей  $I_h^d(q_x, q_z)$  и  $I_h^d(q_y, q_z)$  по виду совпадают между собой и имеют сходство с  $I_h^d(0, q_y, q_z)$ .

Имеющиеся на сегодняшний день технологии не позволяют создавать в кристаллах поры исключительно одного размера. Изложенная выше теория предсказывает осцилляционный характер углового распределения интенсивности ДР. В действительности экспериментальные измерения интенсивностей ДР от пористых кристаллов таких осцилляций не выявляют [6–8]. Это может быть обусловлено двумя обстоятельствами: недостаточной чувствительностью измерительной аппаратуры и отсутствием в кристаллах пор исключительно одинаковых размеров.



**Рис. 5.** Влияние флуктуаций размера пор на угловое распределение диффузного рассеяния  $I_h^d(q_x, q_y, 0)$ : а –  $\sigma_L = L/20$ , б –  $\sigma_L = L/10$ , в –  $\sigma_L = L/6$ , г –  $\sigma_L = L/4$ .

Проведем статистическое усреднение по размерам пор  $L$  с использованием логарифмического нормального распределения

$$p_{LN}(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L\sigma_{LN}}} \exp\left\{-\frac{[\ln(L/\langle L \rangle) + \sigma_{LN}^2/2]^2}{2\sigma_{LN}^2}\right\}, \quad (23)$$

$(L \geq 0),$

где  $\langle L \rangle = \int_0^\infty L p_{LN}(L) dL$  – средний размер пор в латеральном или вертикальном направлении. Дисперсия размера пор  $\sigma_L^2 = \int_0^\infty (L - \langle L \rangle)^2 p_{LN}(L) dL$  и положение максимума  $L_{\max}$  в распределении пор по размерам запишутся как  $\sigma_L^2 = [\exp(\sigma_{LN}^2) - 1] \langle L \rangle^2$  и  $L_{\max} = \exp(-3\sigma_{LN}^2/2) \langle L \rangle$ . Выбор такого распределения позволяет избежать вероятности отрицательных размеров пор. С другой стороны, малый разброс по размерам пор приводит к совпадению с нормальным распределением:  $\sigma_L^2 \cong \sigma_{LN}^2 \langle L \rangle^2$ ,  $L_{\max} \cong \langle L \rangle$ .

Влияние флуктуаций латерального размера пор на угловое распределение ДР показано на рис. 5. Первые четыре карты демонстрируют изменение контуров равной интенсивности  $I_h^d(q_x, q_y, 0)$  по мере увеличения разброса площади сечения поры. Из этого следует, что поэтапный рост дисперсии от  $\sigma_L = L/20$  до  $\sigma_L = L/4$ , где  $L = a$  – сторона правильного треугольника, приводит к сглаживанию осцилляционного поведения изодиффузных линий, а также размыванию полос ДР, которое более характерно для направлений между диффузными тяжами.

Важным является исследование ДР от кристалла с разными размерами пор применительно к трехкристальной дифрактометрии. На рис. 6 приведены карты углового распределения ДР от кристалла, в котором поры в форме треугольной призмы имеют разброс по размерам. В данном случае сильно выраженное осцилляционное поведение ДР характерно для направления вдоль вектора обратной решетки. Интересно, что вдоль латерального направления осцилляции интенсивности изначально сильно сглажены.

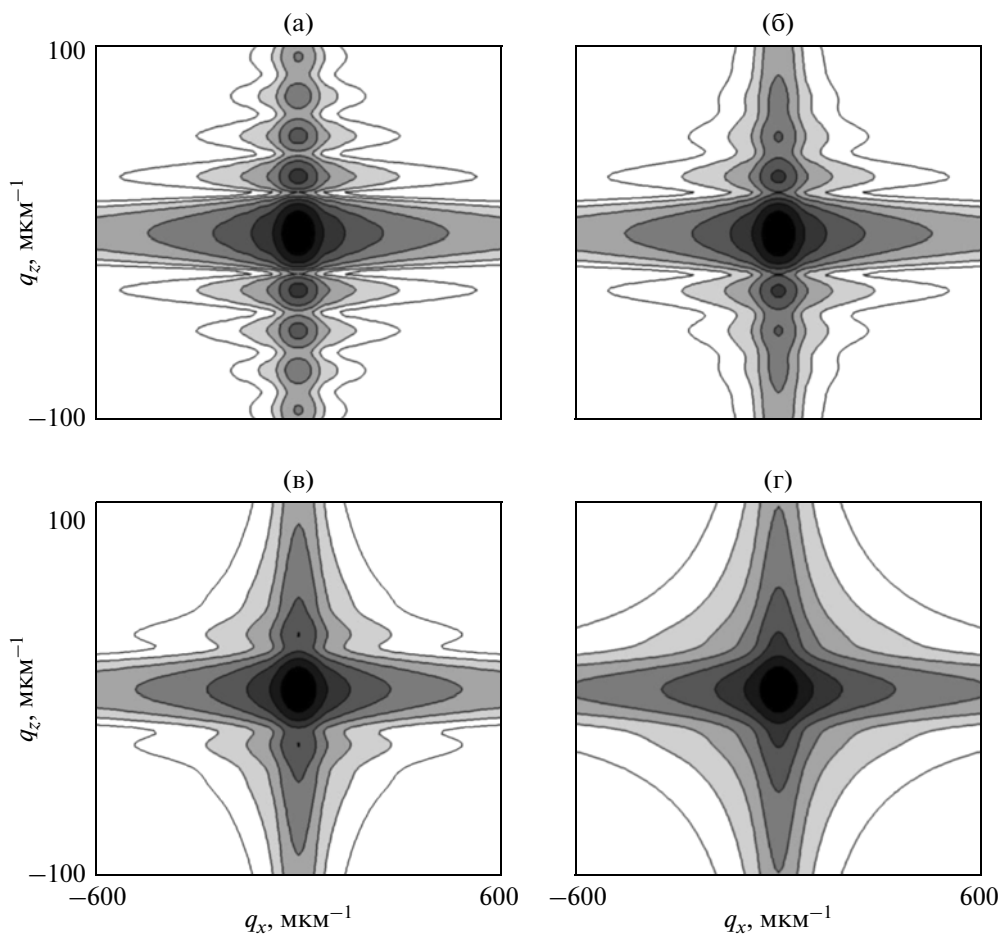


Рис. 6. Влияние флуктуаций размера пор на угловое распределение диффузного рассеяния  $I_h^d(q_x, q_z)$ : а –  $\sigma_L = L/20$ , б –  $\sigma_L = L/10$ , в –  $\sigma_L = L/6$ , г –  $\sigma_L = L/4$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано диффузное рассеяние от кристалла с порами в форме правильной треугольной призмы. На основе полученных решений и численного моделирования проанализировано трехмерное угловое распределение интенсивности ДР вблизи узла обратной решетки. Показано, что для разных двумерных сечений ДР контуры равной интенсивности сильно различаются. Подобные карты углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве, представленные на рис. 3 и 5, могут регистрироваться с использованием метода трехкристалльной дифрактометрии при условии, что поры расположены параллельно входной поверхности, а треугольное сечение пор находится в плоскости дифракции.

Таким образом, разработанная теория позволяет проводить численное моделирование ДР от кристалла с порами в форме треугольной призмы.

Автор выражает благодарность В.А. Бушуеву и А.А. Ломову за обсуждение отдельных проблем ДР пористым кристаллом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 13-02-00272-а), программы Президиума РАН 12-П-1-1014 и программы фундаментальных исследований УрО РАН 12-У-1-1010.

### ПРИЛОЖЕНИЕ

*А. Вычисление собственной корреляционной функции равностороннего треугольника*

По аналогии с (4) запишем выражение для СКФ:

$$g_{rr}(\rho_x, \rho_y, a) = \frac{1}{S_{tr}} \iint_{s_p} dx dy D(x, y) D^*(x + \rho_x, y + \rho_y), \quad (A1)$$

где  $s_p = s_p(\rho_x, \rho_y)$  – площадь пересечения двух равносторонних треугольников, выделенная более темным тоном на рис. 1б, 1в,  $S_{tr} = (\sqrt{3}/4)a^2$  – площадь правильного треугольника со стороной  $a$ .

Рассмотрим случай  $|\rho_x| < |\rho_y/\sqrt{3}| \leq a/2$  (рис. 1б). Затемненный участок пересечения двух равно-сторонних треугольников образован пересечением линий  $0'A'$ ,  $AB$  и  $0'B'$ . Уравнение линии для стороны  $0'A'$  расположенного выше правильного треугольника запишется как  $y = \sqrt{3}(x - \rho_x) + \rho_y$ , для стороны  $AB$  другого треугольника  $-y = \sqrt{3}(a - x)$ . С учетом перечисленного выше соотношение (A1) примет вид

$$g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = (1/S_{tr}) \int_{\rho_y}^{\hat{\rho}_y} \int_{x_1}^{x_2} dy dx, \quad (A2)$$

где пределы интегрирования в (A2) для первого интеграла соответствуют уравнениям линий для сторон треугольников:  $x_1 = y/\sqrt{3} + \rho_x - \rho_y/\sqrt{3}$  и  $x_2 = a - y/\sqrt{3}$ . Координата точки  $\hat{\rho}_y$  находится из условия пересечения прямых  $0'A'$  и  $AB$ :  $\hat{\rho}_y = \sqrt{3}/2(a - \rho_x + \rho_y/\sqrt{3})$ . В результате, вычисляя интегралы в (A2), получаем

$$g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = (1 - (1/a)(|\rho_x| + |\rho_y|/\sqrt{3}))^2. \quad (A3)$$

Рассмотрим второй случай пересечения тре-угольников, имеющий место при  $|\rho_y/\sqrt{3}| < |\rho_x| \leq a$  (рис. 1в). Фигура пересечения треугольников об-разована линиями  $0A$ ,  $AB$  и  $0'B'$ . Поскольку пря-мая  $0A$  задается уравнением  $y = \sqrt{3}x$ , в выражении (A2) необходимо брать следующие пределы инте-грирования:  $x_1 = y/\sqrt{3}$ ;  $x_2 = a - y/\sqrt{3}$  и  $\hat{\rho}_y = (\sqrt{3}/2)a$ . В итоге для СКФ получаем

$$g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = (1 - (2/a)|\rho_y|/\sqrt{3})^2. \quad (A4)$$

Отметим, что при условии  $|\rho_y/\sqrt{3}| < |\rho_x| \leq 2a$  СКФ не зависит от  $\rho_x$ . Таким образом, формулы (A3) и (A4) формируют решение для двумерной СКФ (10).

*Б. Вычисление латеральной корреляционной пло-щадки в форме равностороннего треугольника*

Используя уравнения линий для сторон пра-вильного треугольника и основываясь на реше-ниях (14) и (16), получаем

$$\tau_{tr}(q_x, q_y) = \frac{1}{S_{tr}} \left| \int_0^{\sqrt{3}a/2} dy \exp(iq_y y) \int_{y/\sqrt{3}-a/2}^{a/2-y/\sqrt{3}} dx \exp(iq_x x) \right|^2. \quad (B1)$$

Вычисление интегралов в (B1) приводит к резуль-тату

$$\tau_{tr}(q_x, q_y) = \frac{4S_{tr}}{\left[ \left( \frac{q_x a}{2} \right)^2 - \left( \frac{\sqrt{3}q_y a}{2} \right)^2 \right]^2} \left( 1 + \frac{\sqrt{3}q_y}{q_x} \sin\left(\frac{q_x a}{2}\right) \left( \frac{\sqrt{3}q_y}{q_x} \sin\left(\frac{q_x a}{2}\right) - 2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}q_y a}{2}\right) \right) + \left( \cos\left(\frac{q_x a}{2}\right) - 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_y a}{2}\right) \right) \cos\left(\frac{q_x a}{2}\right) \right). \quad (B2)$$

Подставляя безразмерные угловые переменные, получаем решение (17).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kochergin V., Föll H. Porous Semiconductors. Optical Properties and Applications. London: Springer-Verlag, 2009. 207 p.
2. Föll H., Leisner M., Cojocaru A., Carstensen J. // Materials. 2010. V. 3. P. 3006.
3. Granitzer P., Rumpf K., Pöhl P. et al. // Physica E. 2007. V. 38. P. 205.
4. Tiginyanua M., Kravetsky I. V., Monecke J. et al. // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 77. P. 2415.
5. Nohavica D., Gladkov P., Jarchovský Z., Zelinka J. // Acta Metall. Slovaca. 2008. V. 14. P. 240.
6. Lomov A.A., Bellet D., Dolino G. // Phys. Status Solidi. B. 1995. V. 190. P. 219.
7. Ломов А.А., Бушувев В.А., Караванский В.А., Бэйлисс С. // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 2. С. 362.
8. Punegov V.I., Lomov A.A., Shcherbachev K.D. // Phys. Status Solidi. A. 2007. V. 204. P. 2620.
9. Пунегов В.И., Ломов А.А. // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. № 6. С. 30.
10. Пунегов В.И., Ломов А.А. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. № 3. С. 60.
11. Пунегов В.И. // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. № 11. С. 53.
12. Kato N. // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. P. 763.
13. Бушувев В.А. Угловое распределение интенсивностей динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами в геометриях Лауэ и Брэгга. М: ВИНТИ. 1988. № 486-В88. 51с.
14. Пунегов В.И. // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 3. С. 415.