

ТРЕХКРИСТАЛЛЬНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ. ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Аткнин И.И.^{1,2,3}, Благов А.Е.^{1,2}, Куликов А. Г.^{1,2}, Марченков Н.В.^{1,2}, Чуховский Ф.Н.¹,

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

² НИЦ «Курчатовский институт»

³ МГУ им. М.В. Ломоносова

e-mail: atknin.ii@physics.msu.ru

В настоящей работе обсуждаются результаты моделирования картины дифракции для двух- и трёхкристалльной геометрий рентгенодифракционного эксперимента [1]. Разработанные в рамках работы алгоритмы расчета содержат учет аппаратной функции рентгеновского дифрактометра: введены функция угловой расходимости пучка, определяемой размерами щелевых коллиматоров, оптическими расстояниями между оптическими элементами экспериментальной схемы и т. д., и спектральная функция источника излучения (рентгеновская трубка, синхротронный источник), описывающая вид его спектра. Согласно [2], учет аппаратной функции двухкристалльного дифрактометра, приводит к появлению на кривой дифракционного отражения (КДО) дополнительного максимума, отвечающего соседней по отношению к основной линии дублета характеристического излучения рентгеновской трубки. Кроме того, в расчетах учитывается вклад дисперсии, возникающей за счет спектральной расходимости рентгеновского пучка и разности углов Брэгга монохроматора, образца и анализатора (в случае трехкристалльной схемы) и вызывающей дополнительное уширение дифракционных максимумов. Для оценки адекватности учета дисперсии проведено сравнение расчетных данных с экспериментальными для нескольких дисперсионных схем эксперимента.

Основное внимание в работе уделено разработке алгоритмов расчета двумерных карт обратного пространства в окрестности брэгговского рефлекса, соответствующих получаемым в эксперименте в трехкристалльной схеме дифракции (рис. 1). Для оптимизации расчета, требующего многократного интегрирования, были использованы различные алгоритмы интегрирования (в т.ч. метод Монте-Карло), а также многопоточные вычисления. Был разработан теоретический подход к учету вклада диффузного рассеяния, возникающего вследствие наличия статических дефектов и тепловых колебаний атомов, в общую картину дифракции рентгеновских лучей в кристалле. В основе данного подхода лежит работа [3], в которой изложены физические основы теории дифракционного рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах, в которых дефекты структуры распределены по объему неравномерно так, что их средняя концентрация является функцией глубины в направлении нормали к поверхности исследуемого образца. Такая модель учитывает статистические свойства распределения дефектов и наличие двух каналов дифракции, когерентного и диффузного рассеяния.

Таким образом, в работе представлены результаты расчетов, проведенных с помощью разработанного комплекса программ, и их сравнения с экспериментальными данными по диагностике реальной структуры кристаллических материалов с применением методов двух- и трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии.

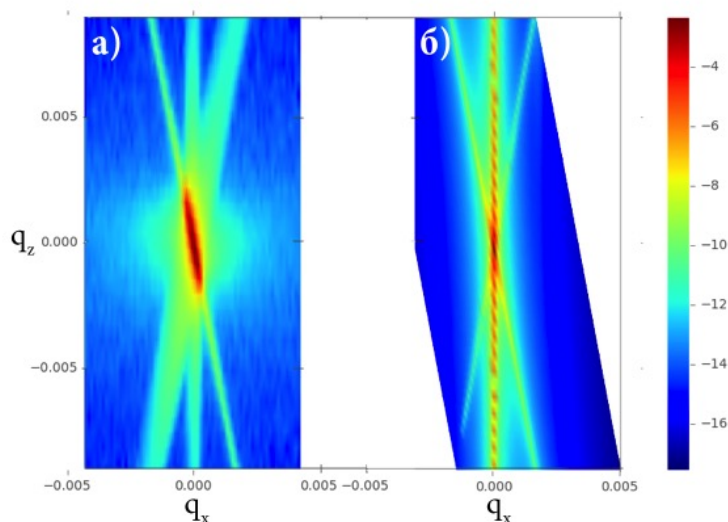


Рис.1. 2D карта ТРД (q_x , q_z) в окрестности узла обратной решетки (220) монокристалла Si, излучение $MoK_{\alpha 1}$:
а) эксперимент, б) расчет.

- [1] Bowen D.K, Tanner B.K. High resolution x-ray diffractometry and topography / London: Taylor & Francis Ltd. 2005. pp. 267.
- [2] Марченков Н.В., Чуховский Ф.Н., Благов А.Е. // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 2. с 194 – 198.
- [3] Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н. // Металлофизика. 1986. Т. 8. №3. с 45 – 51.