

О ПЕРСПЕКТИВАХ ЭФФЕКТА МАЯТНИКОВЫХ ПОЛОС В СТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ КРИСТАЛЛОВ

Согласно динамической теории дифракции [1,2], при взаимодействии излучения с идеальным кристаллом в кристалле возникает волновое поле, особенностью которого является периодическая «перекачка» энергии от проходящей волны к дифрагированной и обратно по мере проникновения излучения в глубь кристалла. Интерференция этих волн приводит к ряду эффектов, одним из которых является эффект «маятниковых полос», т.е. осцилляции интенсивности рассеивания в условиях лауэвской дифракции в зависимости от длины экстинкции или толщины кристалла. Интегральная интенсивность отражения в случае тонкого и прозрачного кристалла ($\mu t \ll 1$) при широком фронте падающей волны имеет вид:

$$R = N \lambda^2 |F_{\text{HKL}}| / 2 \sin 2\theta_{\text{B}} \cdot \int_0^{2U} \varphi_0(x) dx$$

и представляет осциллирующую функцию верхнего предела

$$2U = 2 |F_{\text{HKL}}| N \lambda t_0 / \cos \theta_{\text{B}}.$$

Период изменения интенсивности дифрагированной и прошедшей волн по толщине кристалла равен длине экстинкции

$$\Lambda_s = \pi \cos \theta_{\text{B}} / N \lambda |F_{\text{HKL}}|,$$

Где- $\varphi_0(x)$ – функция Бесселя нулевого порядка, N – число элементарных ячеек в единице объема кристалла, λ – длина волны излучения, $|F_{\text{HKL}}|$ – структурная амплитуда, θ_{B} – брегговский угол отражения.

Из измерений периода осцилляций интенсивности определяют абсолютные значения амплитуд рассеивания нейтронов и рентгеновских лучей с наилучшей точностью, достигнутой в настоящее время ($\approx 0,05\%$). А при традиционном определении этих величин из измерений интегральной интенсивности отражений получают лишь относительные значения с невысокой точностью ($\approx 5\%$). Поэтому переход к измерениям структурных амплитуд рассеяния по периоду маятниковых полос является основой более эффективных и высокоточных методов структурного анализа.

Экспериментальные исследования эффекта маятниковых полос в рассеянии и нейтронов проводились К.Шаллом [3], В.А.Соменковым и др. [4], а в случае рассеяния рентгеновских лучей Н.Като и др. [5].

Эффектом маятниковых полос методом наклона удалось наблюдать на совершенных кристаллах кремния, германия, дигидрофосфата калия и кварца [6], а в случае магнитного рассеяния нейтронов на магнитно упорядоченных кристаллах впервые наблюдались авторами работы [7].

Высокая светосила, универсальность, высокая точность получения данных и т.д. позволяет применять метод наклона при решении следующих различных структурных задач:

1. Исследование эффекта маятниковых полос в таких кристаллах, как LiF, NaCl, KCl, CaCO₃, α -Fe₂O₃, алмаз, шпинель, магнетит, и др.
2. Поскольку метод наклона позволяет определить с высокой точностью (0,05-0,1%) абсолютные значения структурных амплитуд, то этим методом можно исследовать распределение ядерной, спиновой и электронной плотности в кристаллах.
3. Высокая точность измерения $|F_{\text{HKL}}|$ позволила бы решать в случае рентгеновского излучения такую структурную задачу, как локализация атомов легких элементов (водород, кислород, углерод и др.) в решетке с тяжелыми атомами. Например,

локализация атомов водорода в решетке кристаллов KN_2PO_4 или $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$. До сих пор такие задачи решались с хорошей точностью только с помощью нейтронов.

4. Высокая точность в $|F_{\text{HKL}}|$ и ошибка в величине амплитуды ядерного рассеяния нейтронов, не превышающей амплитуды нейтрон – электронного взаимодействия, позволяет проводить эти эксперименты для решения ряда фундаментальных задач (например, определение константы нейтрон – электронного взаимодействия).

5. Представляет повышенный интерес изучение данным методом совершенных кристаллов сверхпроводников (например, V_3Si и V_3Ge), поскольку исследование распределения электронной плотности в них имеет важное значение для понимания природы их сверхпроводящих свойств.

6. Поскольку на контраст маятниковых полос существенное влияние оказывает степень совершенства кристалла, то большие перспективы ожидают в случае его применения в изучении структурных дефектов кристаллов.

7. Применение данного метода в непрерывном спектре синхротронного излучения открывает качественно новые возможности, так как плавное изменение длины волны должно повышать чувствительность контраста маятниковых полос к дефектам при приближении длины экстинкции к характерному расстоянию между ними.

8. В перспективе метод можно применять при рассеянии электронов, γ -лучей и т.д. с целью наблюдения эффекта при рассеянии различных по природе и длине волны видов излучений.

9. Измеряя картину маятниковых полос на идентичных отражениях, например на (333) и (511), где F_{HKL} и $\theta_{\text{В}}$ будут одинаковыми, можно с высокой точностью измерить асимметрию фактора Дебая-Валлера.

10. На совершенных кристаллах сегнето-электриков, например, KN_2PO_4 и $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$, можно решить и такую задачу, как определение величины F_{HKL} до, в и за точкой фазового перехода, при котором должна меняться структурная амплитуда рассеяния из-за изменения вклада атомов водорода.

11. В перспективе метод может быть применен в интерферометрических задачах для решения проблемы определения фазы волны в рентгеновской и нейтронной интерферометрии.

12. Разработки новых методов изучения структуры магнитоупорядоченных кристаллов, доменов, магнитных переходов и др.

13. Изучение статических и динамических искажений кристаллической и магнитной решетки (магнитоупругих колебаний).

14. Определение чувствительности эффекта как к нарушениям атомной структуры, так и к несовершенствам магнитной структуры, которая в ряде случаев может оказаться менее совершенной, чем кристаллическая.

Таким образом, наблюдение эффекта маятниковых полос в рассеянии различных видов излучений открывает широкие возможности в структурных исследованиях кристаллов, а также решения как фундаментальных, так и прикладных задач.

Литература:

1. Ewald P.P. – Acta Cryst., 1958, v.11, p. 887.
2. Zachariasen W.H. – Theory of X-ray diffraction in crystals. N.Y. 1945.
3. Shull C.G. - Observation of Pendellosung Fringe Structure in Neutron Diffraction. Phys.Rev.Lett. 1968, v.21, p.1585-1589.
4. Somenkov V.A., Shilstein S.Sh., Belova N.E., Utemisov K. – Observation of Dynamical Oscillations by GE Crystals Using the Inclination Method. Solid State Commun., 1978, v.25, p.593-595.
5. Kato N., Lang A.R. – A study of Pendellosung Fringes in X-Ray Diffraction. Acta Cryst., 1959, v.12, p787-794.

6. Утемисов К., Шильштейн С.Ш. , Соменков В.А. – Кристаллография. Т.26. вып. 1, 1981.

7. Kvardakov V.V., Somenkov V.A., Shilstein S.Sh. – Observation of Dynamical Effects in Neutron Scattering by Perfect Magnetic Crystals. Material Science Forum. 1988. V27/28. P.221-222