

На правах рукописи

Бакланов Дмитрий Александрович

**ОЦЕНКА НЕСОВЕРШЕНСТВА СТРУКТУРЫ
КРИСТАЛЛОВ ПО ХАРАКТЕРИСТИКАМ ИЗЛУЧЕНИЯ
БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Белгород – 2012

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Внуков Игорь Евгеньевич.

Официальные оппоненты: **Сыщенко Владислав Вячеславович** доктор физико-математических наук, ФГАОУ ВПО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет», профессор.

Забаяев Виктор Николаевич кандидат физико-математических наук, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, заведующий лабораторией.

Ведущая организация: ФГАОУ ВПО «Южный федеральный университет».

Защита состоится «7» февраля 2013 года в 15 часов 30 минут на заседании диссертационного совета Д 212.015.04 при ФГАОУ ВПО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» по адресу: 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ФГАОУ ВПО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет».

Автореферат разослан «___» _____ 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, кандидат физ.-мат. наук.



В. А. Беленко

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы.

Наличие упорядоченности атомов среды приводит к появлению ориентационных и интерференционных эффектов в выходе вторичных процессов, возникающих при прохождении через него быстрых заряженных частиц. К ним, в частности, относятся процессы рассеяния, ионизационных потерь энергии частиц, выхода ядерных реакций, процессы генерации излучения и т.д. Наличие связи между внутренней структурой мишени и выходом вторичных процессов позволяет ставить вопрос об анализе внутренней структуры мишени по результатам измерений. Например, по выходу рассеянных назад каналированных ионов можно судить о расположении примесей в кристаллической решётке, а по спектрам излучения при каналировании быстрых электронов можно уточнять форму потенциала, плотность электронов, амплитуду тепловых колебаний атомов решётки и тому подобное.

В этом же ряду стоит и задача анализа качества структуры кристаллических образцов, то есть наличие в образце блоков мозаичности, их распределение по углу разориентации относительно основного направления и размерам по характеристикам рентгеновского излучения, генерируемого при прохождении через них быстрых электронов. Наиболее удобным, по видимому, является регистрация и анализ характеристик излучения, испускаемого под большими углами к направлению падения частиц на образец, что существенно уменьшает вклад тормозного излучения не чувствительного к структуре образца.

Этому требованию удовлетворяют два типа излучения: параметрическое рентгеновское излучение быстрых заряженных частиц в кристаллах (ПРИ) и дифракция свободных фотонов, возникающих при влёте частицы в образец, то есть дифрагированное переходное излучение, или родившихся в нём за счёт процесса тормозного излучения - дифрагированное тормозное излучение (ДТИ). К достоинствам этого подхода можно отнести высокую проникающую способность рентгеновского излучения, энергию которого можно менять выбором угла регистрации излучения и ориентации кристалла в широком диапазоне энергий квантов от нескольких кэВ до 150-200 кэВ и наглядность интерпретации.

Возможность такого анализа обусловлена тем, что интенсивность дифрагированного излучения зависит от качества структуры [1], угла наблюдения угла между направлением движения электрона (фотона) и плоскостью кристалла. Следует отметить, что вопрос о соотношении вкладов дифракции реальных фотонов в наблюдаемые спектры ПРИ экспериментально до последнего времени не был разрешён и оставался дискуссионным, поэтому анализ соотношения вкладов параметрического рентгеновского

излучения и дифрагированного тормозного излучения в спектр регистрируемого под брэгговскими углами излучения электронов средних энергий в совершенных кристаллах представляется важным и актуальным.

Сравнительно недавно в эксперименте [2] в области энергий фотонов $\omega > \gamma\omega_p$ где γ - Лоренц-фактор, а ω_p плазменная частота среды, с помощью кристалл-дифракционного спектрометра на основе мозаичных кристаллов пиролитического графита было обнаружено уверенное подавление выхода тормозного излучения вдоль направления движения падающих на кристалл вольфрама электронов обусловленное дифракцией фотонов тормозного излучения в этом же кристалле, названное в цитируемой работе эффектом дифракционного подавления выхода тормозного излучения, что свидетельствует о существенности вклада ДТИ в выход излучения, испускаемого под брэгговскими углами. В этом же эксперименте при выполнении условий дифракции на плоскостях кристалла вольфрама был зарегистрирован новый тип излучения быстрых частиц в совершенных кристаллах в области энергий фотонов $\omega \leq \gamma\omega_p/2$, - параметрическое рентгеновское излучение под малым углом к скорости частицы в совершенном кристалле или, как его иногда называют, ПРИ вперед, проявившийся в увеличении выхода излучения так же при выполнении условий дифракции для фотонов с этой энергией.

Поскольку в диапазоне энергий фотонов $\omega \sim \gamma\omega_p$ выход тормозного излучения не спадает до нуля, то эффект дифракционного подавления выхода тормозного излучения может проявляться и для меньших энергий фотонов, чем это было зарегистрировано в цитируемой работе, поэтому оценка вклада эффекта дифракционного подавления выхода фотонов в условиях проявления ПРИ вперед важна и актуальна. Здесь следует отметить, что до эксперимента [2] как ПРИ вперед, так и эффект дифракционного подавления тормозного излучения экспериментально не наблюдались, хотя с точки зрения физики процесса прохождения рентгеновского излучения через ориентированные кристаллы существование второго процесса совершенно естественно. Тем не менее, исследования причин уверенного проявления дифракционного подавления и анализа соотношения двух разнонаправленных механизмов, влияющих на выход излучения быстрых электронов в совершенных кристаллах при выполнении условий дифракции, до последнего времени не проводилось.

В наиболее отчётливой форме преимущества использования ПРИ и ДТИ реализуются в случае анализа микроструктуры образцов большой толщины, где использование традиционных методов рентгеноструктурного анализа и фотонов с энергией 8-20 кэВ не в состоянии обеспечить контроль качества внутренней структуры. Использование более жёсткого излучения, например, фотонов с энергией $\omega=412$ кэВ от распада ^{198}Au может дать

информацию о величине характерного угла мозаичности и распределении блоков мозаики по углу разориентации, но не в состоянии определить однородность их расположения по глубине образца.

Оценка характерного угла мозаичности образцов σ_m по характеристикам наблюдаемого излучения не представляет собой существенного интереса, поскольку та же самая информация может быть получена с помощью более простых методов рентгеноструктурного анализа с использованием в случае необходимости более жёстких, чем в обычном рентгеноструктурном анализе, фотонов или методов нейтроноструктурного анализа. Однако для анализа микроструктуры образцов, то есть оценки размеров микроблоков и углов относительной разориентации соседних блоков между собой, от чего часто зависит возможность использования таких кристаллов в прикладных целях, ситуация не столь очевидна.

Прямое измерение размеров микроблоков с помощью пучков рентгеновского излучения представляет собой сложную экспериментальную задачу и может быть использовано только для анализа поверхностных слоев. Методы электронной микроскопии позволяют решать эту задачу применительно к тонким поликристаллическим и кристаллическим образцам, если углы разориентации соседних блоков и их размеры больше расходимости и линейных размеров электронного пучка. Если получить тонкие кристаллические мишени без нарушения структуры невозможно, как, например, в случае пластичных металлических кристаллов, использование электронной микроскопии не может дать требуемую информацию.

Практика показывает, что для большинства применений необходима вполне определённая микроструктура кристалла. Для снижения стоимости эксплуатации, повышения интенсивности и безопасности использования квазимонохроматических фотонных пучков для медицинских применений целесообразно создавать источники такого излучения на основе ускорителей электронов средних энергий с последующей дифракцией полученного пучка со сплошным спектром в мозаичных кристаллах. Это должны быть кристаллы класса $b\alpha$, поскольку они обеспечивают большую интенсивность дифрагированного излучения, чем кристаллы класса a или совершенные кристаллы. Принадлежность этих кристаллов к классу α позволяет получить большой выход излучения под фиксированным углом и лучшую монохроматичность. Здесь и далее используется классификация мозаичных кристаллов по соотношению длины первичной экстинкции и характерных размеров микроблоков с одной стороны, и величине характерного угла их взаимной разориентации с другой, предложенная в [1].

Близкая по смыслу задача есть и в рентгеновской и гамма - астрономии, где для определения направления импульсных потоков электромагнитного излучения высокой энергии и низкой интенсивности из-за большой

удалённости от Земли требуются как высокая отражающая способность, которую способны обеспечить только мозаичные кристаллы класса b с большим атомным номером (вольфрам, германий арсенид галлия и другие), так и достаточно узкий угловой захват, обеспечить который могут только совершенные кристаллы, или, в крайнем случае мозаичные кристаллы класса α с величиной $\sigma_m \approx 0.1-0.5$ мрад и лучше. Отсюда понятно, что разработка методов поиска таких кристаллов и оценка характерных размеров кристаллитов в них является важной и актуальной.

Для решения этих задач необходим контроль качества внутренней структуры монокристаллов больших размеров (вплоть до 10 сантиметров) на уровне разориентации блоков $\sim 10^{-4}$ рад. и менее, что требует нестандартных методов анализа и повышения энергии фотонов, используемых для решения этой задачи. Нейтронноструктурный анализ, часто используемый для исследования внутренней структуры кристаллов большой толщины, не в состоянии обеспечить требуемую точность из-за практической невозможности получения узкого пучка нейтронов с монохроматичностью $\Delta\omega/\omega \sim 10^{-5}$ и расходимостью $\sim 10^{-5}$ рад., необходимого для решения этой задачи.

При использовании быстрых электронов варьируя механизм генерации излучения, изменением угла разориентации кристаллографических осей и плоскостей относительно направления электронного пучка, угол наблюдения и энергию регистрируемых фотонов можно получить более качественную информацию о микроструктуре кристаллов большой толщины, чем применяя рентгеновское излучение с фиксированной длиной волны или методы электронной микроскопии. Поэтому задача оценки качества внутренней структуры монокристаллов с помощью излучения, генерируемого при прохождении через них быстрых электронов, и достижимых в этом случае параметров в зависимости от энергии используемых частиц, является важной и актуальной.

Исходя из вышеизложенного, основную **цель** диссертационной работы можно сформулировать следующим образом:

Разработка методов оценки совершенства структуры кристаллов по характеристикам рентгеновского излучения, генерируемого при прохождении через них быстрых электронов.

Для выполнения поставленной цели в диссертации решаются следующие **задачи**:

1. Анализ соотношения интенсивностей параметрического рентгеновского излучения и дифрагированных реальных фотонов, генерируемых быстрыми электронами в совершенных кристаллах. Разработка и верификация приближённой модели учёта дифракции реальных фото-

нов, генерируемых электронами при прохождении через совершенные кристаллы.

2. Анализ и интерпретация экспериментальных данных по выходу излучения с фиксированной энергией, генерируемого при прохождении быстрых электронов через кристаллы, при выполнении условий дифракции.
3. Исследование влияния несовершенства структуры реальных кристаллов на характеристики регистрируемого излучения. Разработка методов оценки характерных размеров микроблоков и углов их относительной разориентации по характеристикам излучения быстрых заряженных частиц в исследуемых образцах.

Научная новизна.

Показана значимость эффекта дифракции тормозного излучения в формировании выхода излучения в направлении прямо - вперёд.

Предложен метод оценки характерных размеров микроблоков по дифракционному подавлению выхода рентгеновского излучения с фиксированной энергией, генерируемого быстрыми электронами в кристалле.

Предложен метод определения наличия в кристаллах развернутых моноблоков, посторонних включений и взаимного разворота плоскостей на входной и выходной гранях по измерению угловых распределений или ориентационных зависимостей выхода мягкой компоненты когерентного излучения быстрых электронов.

Предложен метод оценки размеров микроблоков по соотношению интенсивностей параметрического рентгеновского излучения и дифрагированного тормозного и переходного излучений.

Достоверность полученных результатов обеспечивалась (1) использованием хорошо апробированных методов описания параметрического рентгеновского излучения, дифракции тормозного и переходного излучения, (2) воспроизведением известных результатов в тех предельных случаях, исследование которых проводилось ранее другими авторами, (3) согласием с известными экспериментальными данными.

Практическая значимость

Результаты исследований могут быть использованы в процессе анализа экспериментальных данных и исследовании микроструктуры кристаллов с точки зрения применимости их использования для генерации интенсивных пучков квазимонохроматического рентгеновского излучения при взаимодействии быстрых электронов с кристаллами для практических применений, в том числе в медицине.

Апробация работы.

Результаты, изложенные в диссертации, докладывались на XXXVII - XLII Международных конференциях по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, МГУ, 2007-2012 гг.), V - X конференциях по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям (г. Харьков, ННЦ ХФТИ, Украина, 2007-2012 гг.). Международном симпозиуме «Излучение релятивистских электронов в периодических структурах» (Лондон (Англия), 2011), International Conference on Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena - Channeling 2010 (Феррара (Италия), 2010).

По теме диссертации опубликовано 8 печатных работ, из них 6 статей в рецензируемых журналах из перечня ВАК РФ и индексируемых международными базами данных.

Личный вклад соискателя состоит в (1) выполнении основной части аналитических вычислений и оценок порядков величин, ожидаемых эффектов, (2) разработке программного обеспечения и выполнении компьютерного моделирования ДТИ, ДПИ, ПРИ быстрых частиц в кристалле, (3) написании текстов статей.

Положения, выносимые на защиту:

1. Вклад дифракции реальных фотонов в измеряемый спектр ПРИ из совершенных кристаллов так же, как и при использовании мозаичных кристаллов, не является пренебрежимо малым.
2. Измерение дифракционного подавления выхода рентгеновского излучения с фиксированной энергией, генерируемого быстрыми электронами в кристалле и его сопоставление с измеренным для совершенного кристалла или расчётным значением позволяет зарегистрировать наличие внутри него блоков и определить их характерные размеры.
3. Измерение угловых распределений или ориентационных зависимостей выхода мягкой компоненты когерентного излучения быстрых электронов в кристаллах позволяет определить наличие в них развернутых моноблоков, посторонних включений и взаимного разворота плоскостей на входной и выходной гранях.
4. Регистрация выхода излучения под брэгговскими углами для разных углов наблюдения (разных порядков отражения) и сопоставление с результатами расчёта для этих экспериментальных условий позволяет получить информацию о характерных размерах блоков из которых состоит исследуемый образец.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка литературы. Общий объём диссертации

ции (включая рисунки и список литературы) составляет 113 страниц. Работа иллюстрирована 24-ю рисунками, 1-ой таблицей. Список литературы включает 104 источника.

Содержание работы

Во введении описано состояние исследований к моменту начала работы по теме диссертации, приведен обзор основных работ по этой тематике, обоснована актуальность и необходимость проведения дальнейших исследований, сформулированы цель, задачи исследования и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена исследованию соотношения выходов параметрического рентгеновского излучения и дифрагированных реальных фотонов тормозного и переходного излучений быстрых заряженных частиц в совершенных кристаллах.

В *разделе 1.1* кратко описана теория параметрического рентгеновского излучения быстрых электронов в совершенных кристаллах. Приведены приближения, вводимые для проведения численных вычислений, и методика расчёта выхода ПРИ с учётом многократного рассеяния электронов в кристалле.

Спектрально - углового распределение параметрического рентгеновского излучения, генерируемое электроном на единице пути в кристалле с совершенной решёткой, может быть записано в виде:

$$I_0 = \frac{d^2 N}{dt d\Omega} = \frac{\sum_{\alpha} \alpha \omega^3 |\chi_g|^2}{2\pi \epsilon_0^{3/2} \beta (1 - \sqrt{\epsilon_0} \vec{\beta} \vec{n})} \left[\frac{(\omega \vec{\beta} - \vec{g}) \vec{e}_{\vec{k}\alpha}}{(k_{\perp} + g_{\perp})^2 + \frac{\omega^2}{\beta^2} \{\gamma^{-2} + \beta^2 (1 - \epsilon_0)\}} \right]^2$$

где \vec{n}_0 и \vec{n} - единичные векторы в направлении движения электрона и излученного фотона; \vec{g} - вектор обратной решётки; ϵ_0 - диэлектрическая проницаемость среды ($\epsilon_0 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$), $\vec{\beta} = \beta \vec{n}_0$ - скорость электрона, индекс \perp означает проекции векторов на плоскость перпендикулярную вектору \vec{n}_0 ; $\vec{e}_{\vec{k}\alpha}$ - единичные вектора поляризации. Через $|\chi_g|^2$ обозначена следующая величина:

$$|\chi_g|^2 = |S(\vec{g})|^2 \exp(-|\vec{g}| A_t) \left[-\frac{\omega_p^2 F(\vec{g})}{\omega^2 Z} \right]^2$$

где $|S(\vec{g})|^2$ - структурный фактор, $\exp(-|\vec{g}| A_t)$ - фактор Дебая-Валера, в котором A_t - средне квадратичная амплитуда тепловых колебаний, $F(\vec{g})$ - Фурье компонента пространственного распределения электронов в атоме кристалла, z - общее число электронов в атоме.

В разделе 1.2 описана предложенная в диссертации приближённая методика учёта дифракции реальных фотонов в совершенных кристаллах применительно к разным механизмам генерации излучения быстрыми электронами. В том же направлении, что и ПРИ может распространяться и дифрагированное в кристалле рентгеновское излучение, рождённое непосредственно внутри мишени или на её поверхности. В первом случае можно говорить о дифрагированном тормозном излучении (ДТИ), а во втором о дифрагированном переходном излучении (ДПИ).

Известно, см., например, [1], что отражающая способность совершенного кристалла зависит от длины пути, проходимого фотоном от точки влёта до вылета из кристалла. Если толщина кристалла T превышает длину первичной экстинкции l_{ex} ($\sim 0,1 - 100$ мкм в зависимости от энергии фотонов и используемого порядка отражения, то в узком диапазоне углов вблизи брэгговского направления $\Delta\Theta$ (в области так называемого столика Дарвина) при отсутствии поглощения отражающая способность близка к единице, а вне этого диапазона очень быстро спадает. Вследствие многократного переотражения излучения в совершенном кристалле большой толщины ($T \gg l_{ex}$) можно считать, что в любой точке кристалла в среднем половина излучения, удовлетворяющего брэгговскому условию для данной ориентации, распространяется вдоль первичного направления, а другая половина в брэгговском направлении. Для учёта отличия формы распределения отражающей способности от прямоугольной, ширина области полного отражения в первом приближении может быть увеличена в 4/3 раза [1].

Следовательно, можно считать, что для фиксированного направления распространения излучения \vec{n} из пучка с спектрально - угловым распределением $\frac{d^2 I_{ТИ}}{d\omega d\Omega}$ при выполнении брэгговского условия для излучения с энергией ω отразятся только фотоны в энергетическом интервале $\Delta\omega = \omega \cos(\Theta) \Delta\Theta / \sin(\Theta)$. Для неполяризованного излучения (случай дифракции тормозного излучения) и отсутствия поглощения $\Delta\Theta = 2\gamma\Delta\theta_0$, где $\Delta\theta_0 = \frac{2\delta}{\sin(2\Theta)}$ - поправка к углу Брэгга Θ_B из-за преломления волны в кристалле, $\delta = (\omega_p/\omega)^2/2$ - отличие показателя преломления от 1, а $\gamma = \frac{f(g)}{f(0)}(1 + \cos(2\Theta))/2$.

В области частот $\omega > \gamma\omega_p$ наблюдается дифрагированное тормозное излучение (ДТИ). Ориентационная зависимость выхода ДТИ в коллиматор может быть представлена в виде:

$$N_{DBR}(\Theta) = \int_0^T dt \int d\omega \int \frac{d^2 I_{BR}^*}{d\omega d\Omega} R(\omega, \vec{n}, \vec{g}, \vec{n}', t) S(\omega, \vec{n}, \vec{g}, \vec{n}', t) d\Omega$$

где $\int_0^T dt \int d\omega \int \frac{d^2 I_{BR}^*}{d\omega d\Omega}$ спектрально - угловое распределение интенсивности ТИ с учётом многократного рассеяния электронов в мишени, $R(\omega, \vec{n}, \vec{g}, \vec{n}', t)$ отражающая способность для данного направления векторов \vec{n} , \vec{n}' и \vec{g} , связанного с углом ориентации кристалла Θ , $S(\omega, \vec{n}, \vec{g}, \vec{n}', t)$ - коэффициент, учитывающий поглощение излучения в материале мишени и геометрию эксперимента, T - толщина кристалла.

В области частот $\omega < \gamma\omega_p$ наблюдается дифрагированное переходное излучение (ДПИ). В случае перпендикулярного падения заряда на границу раздела для переходного излучения можно воспользоваться описанной выше формулой.

Для наклонного падения частицы предложенный нами приближённый подход использовать нельзя, так как для ПИ появляется вторая компонента поляризации. В этом случае лучше воспользоваться более точной формулой для расчёта ДПИ. Если ПИ генерируется непосредственно на входе в кристалл и затем дифрагирует в нём, тогда в диапазоне малого фотопоглощения можно получить следующую формулу для углового распределения дифрагированного переходного излучения:

$$\frac{dN_\lambda^{DTR}}{d^2\Theta} = \frac{16e^2\omega_p^2}{3\pi^2g^2}\delta_\lambda \left\langle \Omega_\lambda^2 \left(\frac{1}{\gamma^{-2} + \Omega^2} - \frac{1}{\gamma^{-2} + \gamma_*^{-2} + \Omega^2} \right)^2 \right\rangle,$$

где $\Omega_1 = \Theta_\perp - \Psi_\perp$, $\Omega_2 = 2\theta' + \Theta_\parallel + \Psi_\parallel$, $\Omega^2 = \Omega_1^2 + \Omega_2^2$ и $\gamma_* = \omega_B/\omega$. Здесь $\Theta_\perp, \Theta_\parallel, \Psi_\perp, \Psi_\parallel$ - компоненты углов Θ и Ψ описывающих угловые распределения налетающих электронов и испускаемых фотонов, соответственно. Скобки $\langle \rangle$ означают усреднение по углам Θ_\perp и Θ_\parallel .

В *разделе 1.3* развитые в предыдущих разделах диссертации методики расчёта выхода дифрагированных виртуальных и реальных фотонов используются для анализа экспериментальных данных, приведённых в литературе. На рисунке 1 приведены результаты измерения ориентационной зависимости выхода ПРИ для отражения (111) из кристалла кремния толщиной $17 \mu\text{м}$ в эксперименте [3] (точки) для следующих экспериментальных условий: энергия электронов 15.7 МэВ , угол наблюдения $\Theta_D = 305.9 \text{ мрад}$, угол коллимации излучения $\vartheta_c \sim 2 \text{ мрад}$. В цитируемой работе были получены следующие значения спектрально - угловой плотности ПРИ для отражения (111) в максимумах и минимуме ориентационной зависимости: $I_{exp} \approx 7.5 \cdot 10^{-5} \text{ фот./эл./ср}$, $I_{exp} \approx 4.5 \cdot 10^{-5} \text{ фот./эл./ср}$ и $I_{exp} \approx 2.5 \cdot 10^{-5} \text{ фот./эл./ср}$. Погрешность абсолютизации результатов измерений $\sim 15\%$.

Здесь же (кривая 1) приведены результаты расчёта по теории ПРИ в кинематическом приближении для совершенного кристалла. Значения спектрально - угловой плотности излучения в максимумах и минимуме, соответственно, равны $I_{calc} = 7.46 \cdot 10^{-5} \text{ фот./электр./ср}$, $I_{calc} = 3.94 \cdot 10^{-5}$

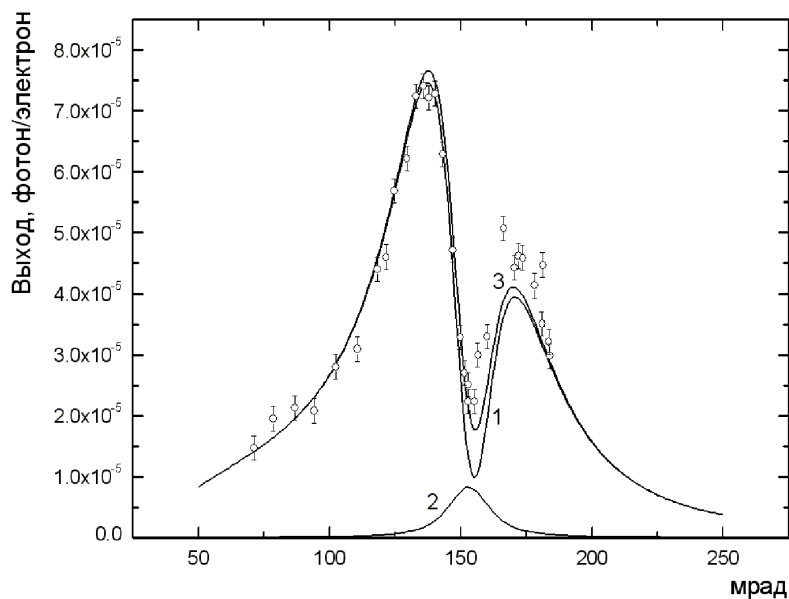


Рис. 1. Ориентационные зависимости выхода фотонов для отражения (111) из кристалла кремния толщиной $17 \mu\text{м}$ и энергии электронов 15.7 МэВ . Расчётные кривые получены в предположении совершенного кристалла, описанного в первой главе: 1 - ПРИ; 2 - ДТИ; 3 - ПРИ+ДТИ; точки - эксперимент[3].

фот./электр./ср и $I_{calc} = 0.99 \cdot 10^{-5}$ фот./электр./ср. Из рисунка видно, что расчётная зависимость достаточно хорошо описывает результаты эксперимента за исключением минимума ориентационной зависимости, где зарегистрированная интенсивность излучения более чем в два раза превышает результаты расчёта, что свидетельствует о вкладе дифрагированных реальных фотонов тормозного излучения.

На этом же рисунке (кривая 2) приведены результаты расчёта ОЗ выхода ДТИ в совершенном кристалле, выполненного в соответствии с методикой приведённой в разделе 1.2. В расчёте учтены геометрические размеры детектора и линейные размеры пучка электронов на кристалле. Кривая 3 - результирующая зависимость суммарного выхода излучения: ПРИ+ДТИ. Как видно из рисунка, эта кривая существенно лучше описывает результаты измерений, чем зависимость 1. Различие в экспериментальном и расчётном соотношениях спектрально - угловых плотностей излучения в правом максимуме ОЗ обусловлено, по-видимому, интерференцией ПРИ и КТИ, изменяющей соотношение между пиками в ориентационной зависимости, а в минимуме возможным вкладом дифракции фотонов КТИ, поскольку в нашем расчёте спектрально - угловой плотности излучения мы не учитывали кристаллическую структуру мишени.

Такое же различие экспериментального и расчётного соотношений интенсивностей в максимумах и минимуме ориентационных зависимостей

наблюдается для всех проанализированных нами экспериментальных работ. Измеренное значение интенсивности излучения в минимуме ОЗ в два, два с половиной раза превышает результаты расчёта, а полученное из результатов измерений отношение интенсивностей в минимуме и максимуме, соответственно, в два раза больше расчётного.

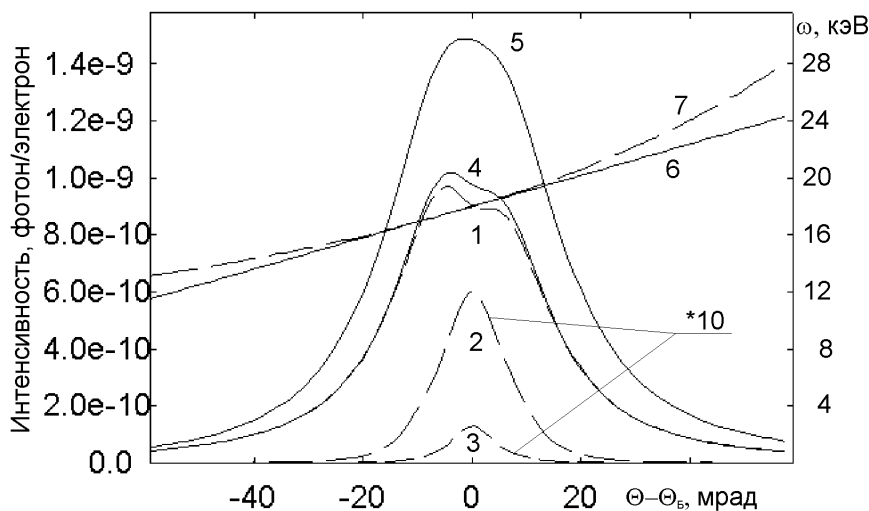


Рис. 2. Ориентационные зависимости выхода фотонов для кристалла кремния толщиной 0.3 мм для условий эксперимента [4]: 1 - ПРИ; 2 - ДТИ, рождённое в самом кристалле; 3 - ДТИ от тормозного излучения, рождённого в воздухе; 4 - ПРИ+ДТИ; 5 - ПРИ+ДТИ для кристалла с $T = 0.625$ мм; 6 - зависимость средней энергии пучка ПРИ от ориентации кристалла; 7 - зависимость средней энергии пучка ДТИ от ориентации кристалла.

Одним из часто используемых доводов об отсутствии вклада ДТИ в экспериментально наблюдаемые спектры излучения (см., например, [3,4]) является зависимость энергии пиков в измеренных спектрах от ориентации кристалла, совпадающая с предсказаниями теории ПРИ и отличающаяся от аналогичной зависимости для ДТИ. Зависимости средней энергии ПРИ и ДТИ от угла ориентации, рассчитанные для кристалла толщиной 0.3 мм и условий эксперимента [4], приведены на рисунке 2, соответственно кривые 6 и 7. Из сопоставления этих зависимостей и ОЗ выхода ПРИ и ДТИ (кривые 1 и 2) следует, что вклад ДТИ является значимым только для малых углов разориентации отражающей плоскости относительно брэгговского направления, то есть там, где зависимости энергий фотонов ПРИ и ДТИ от угла ориентации кристалла практически идентичны. Другими словами, при использовании детектора с разрешением $\Delta\omega \sim 150-200$ эВ зависимость энергии пиков регистрируемого излучения (ПРИ+ДТИ) будет совпадать с предсказаниями теории ПРИ, что и наблюдалось в цитируемых экспериментальных работах. В соответствии с результатами расчёта откло-

нение значений средней энергии пика в спектре излучения (ПРИ+ДТИ) от предсказаний теории ПРИ для этих условий не превышает 0.2%. Такое отклонение не может быть зарегистрировано с помощью обычно используемых спектрометров рентгеновского излучения. Зафиксировать вклад ДТИ с их помощью можно лишь по асимметрии измеренных спектров излучения либо путём сопоставления расчётных и экспериментальных ориентационных зависимостей, как это сделано выше.

В разделе 1.4 сформулированы выводы по результатам исследований, изложенным в первой главе диссертации.

Во второй главе проведен анализ результатов эксперимента по поиску и исследованию параметрического рентгеновского излучения под малыми углами к скорости быстрых электронов в кристалле вольфрама с помощью кристалл-дифракционных спектрометров на основе мозаичных кристаллов пиролитического графита [2]. Показано, что результаты измерений можно описать только в предположении, что использованный в этом эксперименте кристалл является мозаичным кристаллом класса $a\alpha$. Предложен метод оценки числа и характерных размеров микроблоков в кристаллах класса $a\alpha$ по дифракционному подавлению выхода рентгеновского излучения с фиксированной энергией, генерируемого быстрыми электронами в кристалле, и определены границы его применимости.

В *разделе 2.1* кратко описана экспериментальная установка и основные результаты эксперимента по поиску и исследованию параметрического рентгеновского излучения под малыми углами к скорости быстрых электронов в кристалле вольфрама с помощью кристалл-дифракционных спектрометров на основе мозаичных кристаллов пиролитического графита [2]. Главный результат цитируемой работы состоит в том, что в зависимости от энергии регистрируемых фотонов реализуются два противоположно направленных механизма изменения выхода излучения. В области энергий фотонов $\omega \leq \gamma\omega_p/2$ - параметрическое рентгеновское излучение под малым углом к скорости частицы, приводящее к увеличению выхода излучения (см. рис. 3б). А в области энергий фотонов $\omega > \gamma\omega_p$ уменьшение выхода регистрируемого излучения, обусловленное дифракцией тормозного излучения внутри кристалла и названное авторами цитируемой работы дифракционным подавлением выхода тормозного излучения (см. рис. 3а).

В *разделе 2.2* проведено сопоставление результатов расчёта дифракционного подавления выхода излучения с использованием приближённой методики учёта дифракции излучения в совершенных кристаллах, описанной в первой главе диссертации, и учётом характеристик экспериментальной аппаратуры с данными, полученными в цитируемой работе (смотри рис. 4). Из сопоставления рисунков 3 и 4 видно, что глубина расчётных провалов для и энергий фотонов 67 кэВ и 96 кэВ, соответственно 2.5% и

1.5% почти в пять раз меньше экспериментальных 15% и 10%. Ширина расчётных зависимостей примерно в 1.2-1.5 раза меньше экспериментальных. Другими словами, описать результаты эксперимента [2] в области энергий фотонов $\omega > \gamma\omega_p$ и предположении, что использованный в нём кристалл вольфрама является совершенным, невозможно.

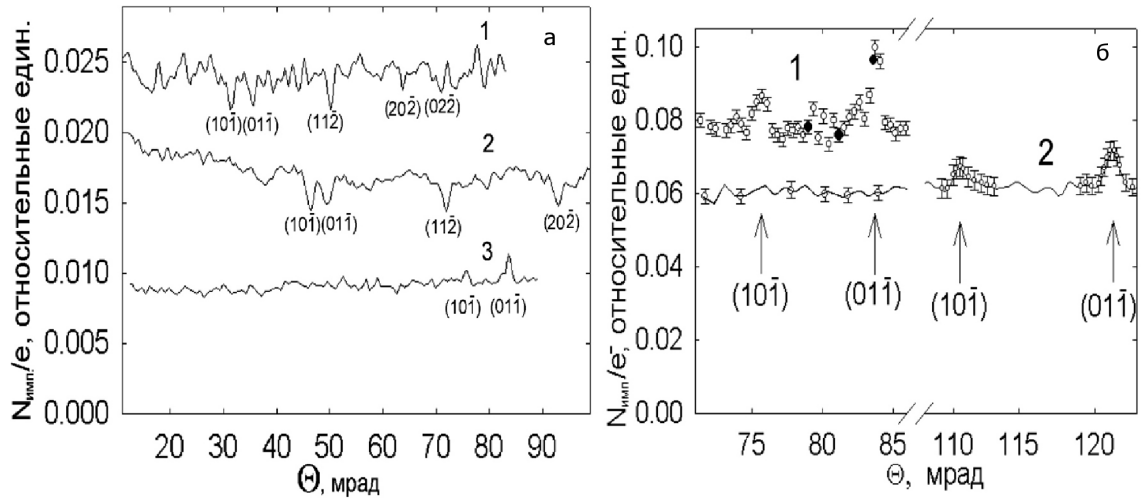


Рис. 3. Ориентационные зависимости выхода рентгеновского излучения для монокристалла вольфрама с размерами $\varnothing 8.5 \times 0.41$ мм³, $\langle 111 \rangle$, $E_0 = 500$ МэВ [2] а) 1 - $\omega = 95$ кэВ; 2 - $\omega = 67$ кэВ; 3 - $\omega = 40$ кэВ, б) 1 - $\omega = 40$ кэВ; 2 - $\omega = 28.3$ кэВ. ● - точки измерения спектров дифрагированного излучения.

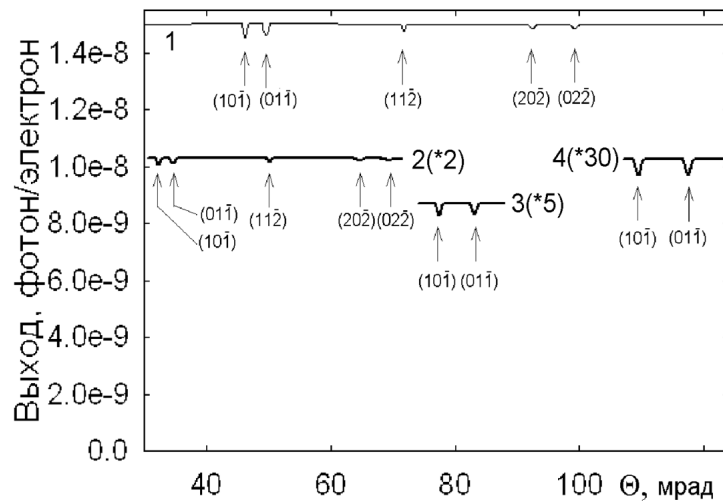


Рис. 4. Расчётные зависимости выхода излучения: 1 - $\omega = 67$ кэВ; 2 - $\omega = 96$ кэВ; 3 - $\omega = 40$ кэВ; 4 - $\omega = 28.3$ кэВ.

В разделе 2.3 показано, что отражающая способность рентгеновского излучения мозаичными кристаллами выше, чем совершенными, и сделан

вывод, что кристалл, использованный в эксперименте [2], является мозаичным кристаллом класса $a\alpha$, так как с одной стороны на нём был зарегистрирован динамический эффект ПРИ вперед, что предполагает совершенство структуры. А с другой стороны, увеличение дифракционного подавления выхода излучения можно объяснить только наличием микроблоков, разориентированных на угол больший, чем область полного отражения рентгеновских лучей с этой энергией. Описан способ оценки характерных размеров блоков по степени проявления параметрического рентгеновского излучения под малым углом к скорости частицы в кристалле. Предложена методика оценки числа и характерных размеров микроблоков в кристаллах класса $a\alpha$ по дифракционному подавлению выхода рентгеновского излучения не теряющая работоспособность даже для относительно низких энергий электронов. По результатам сопоставления величин измеренного и рассчитанного подавления определена характерная длина кристаллитов в кристалле вольфрама, использованного в эксперименте [2]. Исходя из соотношения глубин экспериментальных и расчётных провалов для энергий фотонов $\omega=67$ кэВ (~ 5.4) и значения длины поглощения фотонов с этой энергией $l_a \approx 183$ $\mu\text{м}$ средний размер блоков в этом кристалле ~ 30 $\mu\text{м}$. Сделана оценка каков должен был быть выход фотонов ПРИ вперед для энергии квантов 40 кэВ и 28.3 кэВ в предположении, что кристалл совершенный, а не мозаичный.

В *разделе 2.4* проведено сопоставление величин дифракционного подавления рассчитанных с помощью приближённой методики, описанной в первой главе диссертации, и в рамках динамической теории дифракции рентгеновского излучения в совершенных кристаллах с учётом поглощения излучения в нём. Для ситуации, когда поглощением излучения внутри кристалла пренебречь нельзя, как в случае кристалла вольфрама использование допущений принятых в первой главе диссертации требует дополнительных доказательств. Поскольку известно, что учёт поглощения приводит к относительному росту области углов разориентации, где наблюдается отражение, это может привести к увеличению регистрируемого дифракционного подавления. Здесь следует учесть, что на кристаллах, полученных по той же технологии, что и кристалл вольфрама, использованный в анализируемом эксперименте, наблюдался эффект аномального прохождения рентгеновских лучей. Этот эффект, в случае его проявления, также может сказаться на результатах измерений и привести к увеличению выхода излучения, регистрируемого кристалл - дифракционным спектрометром, что будет выглядеть как уменьшение дифракционного подавления выхода фотонов тормозного излучения с фиксированной энергией.

На рисунке 5 приведена зависимость отношения площадей провалов в выходе излучения для приближённого и точного подходов от толщины

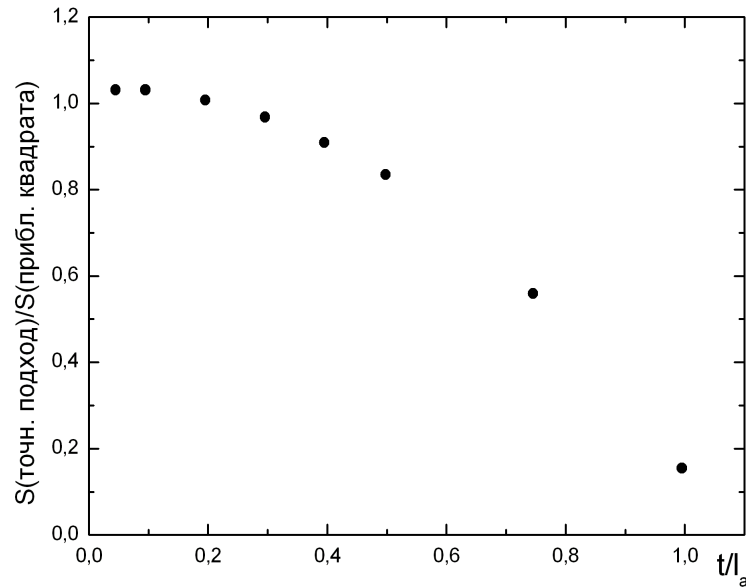


Рис. 5. Расчётные зависимости выхода излучения: 1 - $\omega=96$ кэВ; 2 - $\omega=67$ кэВ; 3 - $\omega=40$ кэВ; 4 - $\omega=28.3$ кэВ.

кристалла в единицах длин поглощения. Из рисунка видно, что для толщин кристалла вплоть до $0.3-0.4 l_a$, где l_a - длина поглощения, оба подхода дают примерно одинаковую величину отраженного потока излучения. Далее с ростом толщины кристалла начинает увеличиваться вклад эффекта аномального прохождения рентгеновских лучей в совершенных кристаллах (эффект Бормана), что приводит к уменьшению поглощения фотонов в кристалле и, следовательно, к увеличению выхода излучения, прошедшего через кристалл и регистрируемого дифракционным спектрометром. С точки зрения решаемой нами задачи - оценки характерной длины кристаллита по степени дифракционного подавления тормозного излучения с фиксированной энергией это выглядит как уменьшение дифракционного подавления и количества микроблоков на характерной длине, где генерируется регистрируемое излучение.

Характерная длина, с которой снимается регистрируемое излучение, близка к длине поглощения. Микроблоки с такими характерными размерами не дадут значимого дифракционного подавления, и, следовательно, предлагаемый нами метод просто перестаёт работать в этой области характерных длин кристаллитов. В области толщин кристаллов, где метод вполне работоспособен, приближённый и точный подходы дают одинаковые результаты, поэтому применение приближённого подхода является оправданным и более предпочтительным из-за удобства использования. В случае необходимости оценка характерных размеров кристаллитов в таких кристаллах также может быть выполнена с помощью предлагаемой методики. Для этого необходимо увеличить энергию фотонов, на которую

настроен спектрометр. С увеличением энергий фотонов длина поглощения, как правило, увеличивается и мы можем перейти в область применимости развиваемого нами метода оценки характерных размеров микроблоков в мозаичных (почти совершенных) кристаллах класса $a\alpha - l_b < 0.3 - 0.4l_a$.

В *разделе 2.5* анализируется влияние многократных отражений на величину дифракционного подавления выхода фотонов фиксированной энергии, определены границы применимости предложенной методики оценки числа и характерных размеров блоков в кристаллах класса $a\alpha$ по величине дифракционного подавления выхода фотонов. Она может использоваться только при условии, что величина зарегистрированного подавления существенно меньше, чем для кристалла класса $b\alpha$ с таким же значением σ_m . Если это не так, и они сопоставимы, то оценка числа микроблоков, полученная таким образом, окажется заниженной, а их характерный размер, наоборот, существенно завышенным. Выходом из этого положения может быть использование более слабых порядков отражения, для которых характерная угловая область полного отражения, а, соответственно, и вероятность переотражения становится существенно меньше. Предложен способ оценки характерного угла мозаичности таких кристаллов по перекрытию провалов в выходе фотонов фиксированной энергии от идентичных плоскостей в зависимости от угла их взаимного разворота. Поскольку ширина «столика Дарвина» $\Delta\Theta \sim \omega^{-1}$, которая в свою очередь, определяется углом расположения детектора дифрагированного излучения, предложенная методика в состоянии обеспечить существенно лучшую чувствительность к микроструктуре образцов, чем традиционные методы рентгеноструктурного анализа.

В *разделе 2.6* сформулированы выводы по результатам исследований, изложенным во второй главе диссертации.

Третья глава посвящена разработке новых методов анализа несовершенства структуры кристаллов и оценки характерных размеров кристаллитов, наличия посторонних включений и развернутых относительно основного направления монокристаллов по характеристикам когерентного излучения быстрых электронов в таких кристаллах.

В *разделе 3.1* проверки возможности определения степени несовершенства структуры кристалла по характеристикам регистрируемого излучения анализируются результаты измерений, выполненных на томском синхротроне для алмазных мишеней, вырезанных из одного и того же образца природного алмаза, для углов наблюдения $\Theta_D=90^\circ$ [5] (рисунок 6) и $\Theta_D=4^\circ$ [6] (рисунок 7), что предполагает одинаковую микроструктуру мишеней, и показано, что чувствительностью к микроструктуре обладает только вклад дифракции реальных фотонов, ДТИ или ДПИ в зависимости от условий эксперимента.

Из рисунка 6 для угла наблюдения $\Theta_D = 90^\circ$ и энергии фотонов $\omega \sim 7$ кэВ видно, что рассчитанное угловое распределение совпадает с измеренным, только если это совершенный кристалл, или, в крайнем случае, кристалл класса $a\alpha$ с размером микроблоков больше $7 \mu\text{м}$. Выход ДПИ для кристалла класса $b\alpha$ (зависимость 4) намного больше измеренного.

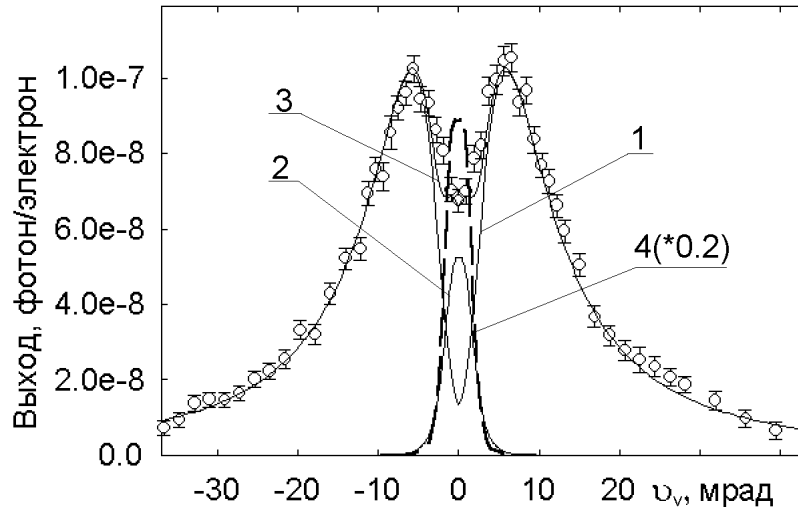


Рис. 6. Вертикальное угловое распределение фотонов первого разрешенного порядка отражения для кристалла алмаза. $E_0=900$ МэВ; $T=0.5$ мм; $\Theta_D = 90^\circ$; $\vartheta_c=1.88$ мрад. Точки - эксперимент[5]. Кривые - расчёт: 1 - ПРИ в совершенном кристалле; 2 - ДПИ в совершенном кристалле; 3 - ПРИ+ДПИ в совершенном кристалле; 4 - ДПИ в мозаичном кристалле класса $b\alpha$.

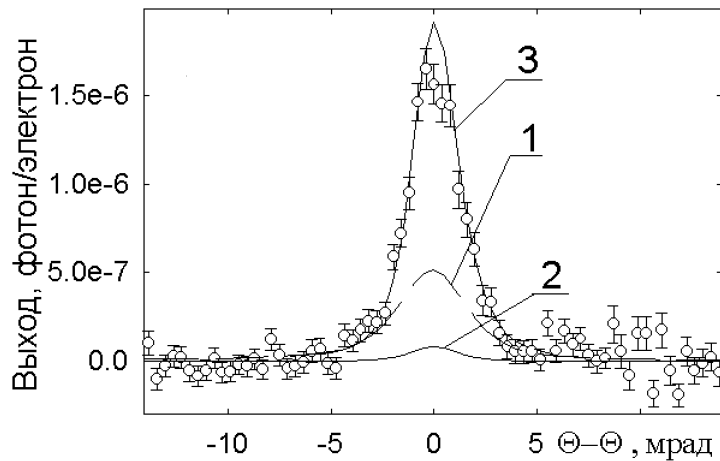


Рис. 7. Ориентационная зависимость выхода излучения для первого порядка отражения для кристалла алмаза. $E_0=500$ МэВ; $T=2$ мм; $\Theta_D = 4^\circ$; $\vartheta_c=1.9$ мрад. Точки - эксперимент[6]. Кривые - расчёт: 1 - ПРИ в совершенном кристалле; 2 - ДТИ в совершенном кристалле; 3 - ПРИ+ДТИ в мозаичном кристалле класса $b\alpha$.

Для угла $\Theta_D=4^\circ$ и $\omega \sim 150$ кэВ (рисунок 7) ситуация обратная. Рассчитанная ориентационная зависимость совпадает с результатами измерений только в том случае, если это кристалл класса $b\alpha$ с характерным углом мозаичности $\sigma_m \approx 0.2$ мрад. То есть характерная длина микроблоков в нём меньше длины первичной экстинкции для этого отражения и энергии фотонов - $148 \mu\text{м}$. Поскольку микроструктура кристаллов должна быть одинаковой, характерные размеры микроблоков в образце естественного алмаза из которого вырезаны мишени, находятся в пределах $7 \mu\text{м} < l < 148 \mu\text{м}$. Следовательно, регистрация выхода излучения (ПРИ+ДТИ+ДПИ) в брэгговском направлении для разных углов наблюдения (разных порядков отражения) и сопоставление полученных данных с результатами расчёта для этих экспериментальных условий позволяет получить информацию о характерных размерах блоков, из которых состоит исследуемый образец.

В *разделе 3.2* показано, что измерение угловых распределений или ориентационных зависимостей выхода мягкой компоненты когерентного излучения быстрых электронов в ориентированных кристаллах позволяет определить наличие в них развернутых моноблоков, посторонних включений и взаимного разворота плоскостей на входной и выходной гранях. При наличии развернутого моноблока внутри кристалла в выходе излучения появляется дополнительный пик, отстоящий от основного на угол разориентации. В зависимости от положения детектора меняется соотношение дополнительного и основного пика, что позволяет судить о глубине залегания моноблока. Предложена возможная схема реализации такого эксперимента.

В *разделе 3.3* сформулированы выводы по результатам исследований, изложенным в третьей главе диссертации.

В заключении кратко сформулированы основные результаты, полученные в ходе выполнения диссертационной работы.

Основные результаты работы.

1. Вклад дифракции реальных фотонов в измеряемый спектр ПРИ из совершенных кристаллов так же, как и при использовании мозаичных кристаллов, не является пренебрежимо малым. Для условия $\omega \ll \gamma\omega_p$ это дифрагированное переходное излучение, а для условия $\omega \geq \gamma\omega_p$ это дифрагированное тормозное излучение. В зависимости от условий измерений вклады дифрагированных реальных фотонов и параметрического рентгеновского излучения могут быть сопоставимы.
2. Измерение дифракционного подавления выхода рентгеновского излучения с фиксированной энергией, генерируемого быстрыми электронами в кристалле, и его сопоставление с измеренным для совершенного кристалла или расчётным значением позволяет зарегистрировать

наличие внутри него блоков, развернутых на угол $\Theta > \Delta\Theta \sim 10^{-5}$, и определить характерные продольные размеры микроблоков в нём при выполнении условий, что величина регистрируемого подавления значительно меньше, чем для кристалла класса $b\alpha$ с такой же величиной характерного угла мозаичности и длина микроблоков $l_b < 0.3 - 0.4l_a$.

3. Слабая зависимость интенсивности ПРИ от несовершенства структуры не позволяет эффективно использовать этот тип излучения для анализа микроструктуры.
4. Регистрация выхода излучения под брэгговскими углами для разных углов наблюдения (разных порядков отражения) и сопоставление с результатами расчёта для этих экспериментальных условий позволяет получить информацию о характерных размерах блоков, из которых состоит исследуемый образец, в том случае, если размеры блоков порядка длины первичной экстинкции.
5. Измерение угловых распределений или ориентационных зависимостей выхода мягкой компоненты когерентного излучения быстрых электронов в кристаллах позволяет определить наличие в них развернутых моноблоков, посторонних включений и взаимного разворота плоскостей на входной и выходной гранях.

Список цитируемой литературы

1. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей / Р. Джеймс - М.: Изд-во Иностран. Лит., 1950. – 464с.
2. Алейник А.Н. Экспериментальное обнаружение параметрического рентгеновского излучения вдоль скорости релятивистских электронов, движущихся в кристалле вольфрама / А.Н. Алейник, А.Н. Балдин, Е.А. Богомазова, И.Е. Внуков и др. //Письма в ЖЭТФ. – 2004. – Т.80. – №6. – С.446 – 451.
3. Shchagin A.V. Differential properties of parametric X-ray radiation from a thin crystal / A.V.Shchagin, N.A. Khizhnyak //Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B – 1996. – V. 119. – P.115-122.
4. Akimoto T. Generation and use of parametric X-rays with an electron linear accelerator / T. Akimoto, M. Tamura, J. Ikeda et al. //Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A – 2001. – V.459. – P.78.
5. Верзилов В.А. Экспериментальное исследование параметрического рентгеновского излучения в образцах из алмаза и графита. / В.А.

Верзилов, И.Е. Внуков, В.В. Зарубин и др. // Тез. докл. XXVII Межд. конф. по физике взаимодей. заряж. частиц с кристаллами. - М.: Изд. МГУ, 1997. – С.72.

6. Chefonov O.V. Radiation from relativistic electron in carbon samples with different structure at large angles ($\gg \gamma^{-1}$) / O.V. Chefonov, B.N. Kalinin, G.A. Naumenko, D.V. Padalko, A.P. Potylitsin, I.E. Vnukov // IV International Symposium «RADIATION from RELATIVISTIC ELECTRONS in PERIODIC STRUCTURES» September 13-16, 1999, Lake Baikal, Russia.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

Статьи в рецензируемых журналах из перечня ВАК РФ и индексируемых международными базами данных:

1. Бакланов Д.А. Оценка структуры кристаллических образцов с помощью излучения быстрых электронов в этом образце / Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Р.А. Шатохин // Поверхность. – 2010. – №4. – С.31-39.
2. Бакланов Д.А. Оценка характеристик кристаллов большой толщины с помощью излучения в них быстрых электронов / Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, С.А. Лактионова, Р.А. Шатохин // Научные ведомости БелГУ. Серия Математика. Физика. – 2010. – №4. – С.23 -35
3. Baklanov D.A. Influence of crystals mosaicity on observed characteristics of X-ray emission along the propagation velocity of fast electrons in thick tungsten crystals / D.A. Baklanov, T.G. Duong, S.A. Laktionova, R.A. Shatokhin, I.E. Vnukov, Yu.V. Zhandarmov //IL Nuovo Cimento DOI 10.1393/ncc/i2011-10933-7.
4. Бакланов Д.А. Влияние мозаичности кристаллов на наблюдаемые характеристики рентгеновского излучения под малым углом к направлению скорости частицы / Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Ж.Т. Зыонг, С.А. Лактионова, Р.А. Шатохин // Поверхность. – 2011. – №4. – С.5-12.
5. Baklanov D.A. Estimation of grains size in mosaic crystals by means of radiation of fast electrons in these samples / D.A. Baklanov, S.A. Laktionova, R.A. Shatokhin, I.E. Vnukov // Journal of Physics: Conference Series. – 2012. – 012036 doi:10.1088/1742-6596/357/1/012036.

6. Бакланов Д.А. Оценка размеров микроблоков в мозаичных кристаллах по характеристикам излучения быстрых электронов / Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, С.А. Лактионова, Р.А. Шатохин // Поверхность. – 2012. – №11. – С.78-88.

Статьи в прочих рецензируемых журналах:

1. Бакланов Д.А. Соотношение вкладов дифрагированного тормозного излучения и параметрического рентгеновского излучения в совершенных кристаллах / Д.А. Бакланов, А.Н. Балдин, И.Е. Внуков, Д.А. Нечаенко, Р.А. Шатохин // Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. – 2007. – Т. 763. – №1. – С.41.
2. Бакланов Д.А. Оценка структуры кристаллических образцов с помощью излучения быстрых электронов / Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Р.А. Шатохин // Научные ведомости БелГУ. Серия Физика. Математика. – 2008. – № 9. – С. 90-99.

Подписано в печать 26.12.2012. Гарнитура Times New Roman.

Формат 60×84/16. Усл. п. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ 376.

Оригинал макет тиражирован в ИД «Белгород»

308015, г. Белгород, ул. Победы 85.