

ВПЛИВ СОРТУ ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ПАРАМЕТРИ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ХВИЛЬ ПАРОЮ АТОМІВ РЕЧОВИНИ

М.М. Рябощук

Інженерно-технічний факультет Ужгородського національного університету,
вул. Капітульна, 13, Ужгород, Україна 88000,
ivanc@mail.uzhgorod.ua

Досліджено вплив орієнтації та виду хімічних елементів пари атомів речовини відносно зондуєчого електронного пучка на розподіл інтенсивності дифракції в електронографії. Виявлено загальні закономірності впливу орієнтації атомних пар на дифракційну картину. Показано, що вид хімічних елементів сильно впливає на інтенсивність дифракційних піків і в меншій мірі змінює інші параметри дифрактограм.

Вступ

Тонкоплівковий стан є найбільш перспективним з точки зору його практичного використання аморфних речовин. Тому доцільно розширити експериментальні дослідження аморфних матеріалів саме у вигляді тонких плівок. А для таких об'єктів особливо ефективними методами структурних досліджень виступають просвічуюча електронна мікроскопія та електронографія [1]. Але методи розсіювання електронних хвиль та електронної дифракції на аморфних речовинах методично розроблені набагато слабше рентгенівських і поступаються їм за точністю отримуваних результатів. Це зумовлено тим, що метод електронної дифракції аморфних речовин розроблявся з використанням простого "механічного" перенесення багатьох підходів методу дифракції рентгенівських хвиль з не повним урахуванням суттєвих відмінностей між ними. Така ситуація робить важливим питання детального аналізу достовірності та точності результатів, отримуваних методами електронної дифракції для аморфних речовин. У зв'язку з цим особливого значення набуває правильне розуміння суті

процесу інтерференції електронних хвиль на аморфних речовинах, які зумовлюють утворення їх дифрактограм, що значною мірою може впливати на коректність інтерпретації отримуваних експериментальних результатів та на точність визначення структурних параметрів.

В [2] нами розроблена математична модель процесу розсіювання електронних хвиль парою атомів речовини з врахуванням впливу орієнтації даної пари в просторі відносно напрямку поширення зондуєчого електронного променя. Результати моделювання показали сильний вплив виду хімічних елементів, що утворюють атомну пару, на параметри утворених дифракційних картин. Тому актуальним завданням було провести детальні дослідження цього питання, результати яких і приведені в даній роботі.

Методика досліджень

Відповідно з побудованою математичною моделлю процесів розсіювання електронних хвиль на парі атомів речовини розподіл інтенсивності в дифракційній картині від таких об'єктів задається виразом

$$I_2(s) = F_1^2(s) + F_2^2(s) + 2F_1(s)F_2(s) \cos\left[\frac{4\pi}{\lambda} r \sin\theta (\sin\theta \cos\alpha + \sin\alpha \cos\theta \cos\varphi)\right] \quad (1)$$

де s – вектор розсіювання, $F_i(s)$ – атомна амплітуда розсіювання електронів i – ім атомом, r – міжатомна відстань, λ – довжина електронної хвилі, θ – кут розсіювання, α – кут між атомною відстанню та напрямком падіння зондуємого пучка, ϕ – кут між напрямком розсіювання та міжатомною відстанню.

Отримане співвідношення показує, що для кожної фіксованої відносно падаючого пучка орієнтації однієї пари атомів виникає свій кутовий розподіл інтенсивності розсіювання. Для детального вивчення особливостей впливу сорту атомів на параметри розсіювання нами проведено розрахунки просторового розподілу інтенсивності розсіювання електронів на парах різних хімічних елементів. Для цього у виразі (1) змінювалися значення міжатомних відстаней r та значення атомних амплітуд відповідно до досліджуваної пари. Довжина хвилі взята $\lambda = 0,01$ нм, що є типовим для електроннографічних досліджень. Розрахунки інтенсивності проводились до граничних значень величини $s = 100$ нм⁻¹, що відповідає реальним умовам електроннографічного експерименту.

Модельні розрахунки були виконані для різних випадків. Перший випадок відповідає атомній парі з “тяжких” атомів олова, другий – атомним парам з двох “легких” елементів сірки або вуглецю, третій – атомній парі з “середніх” атомів германію, а четвертий – одному “середньому” і одному “легкому” атомам у парі Ge-S.

З отриманих модельних дифракційних картин [2] визначалися такі основні параметри: ширина центрального пучка розсіювання Δs_0 котра вимірювалась на рівні інтенсивності 100 від.од.; положення першого дифракційного піку s_1 ; інтенсивність першого дифракційного піку I_1 та напівширина першого дифракційного піку Δs_1 , яка вимірювалась на рівні $0,5I_1$.

Результати досліджень та їх аналіз

Залежність основних параметрів

дифрактограм від кута орієнтації α атомної пари відносно зондуємого пучка для різних хімічних елементів наведено на рис.1-4. На цих залежностях із ростом кута α для всіх атомних пар виявляється ряд цікавих загальних закономірностей:

1. Дифракційні піки все ближче наближаються до центра дифрактограми, що проявляється у зміщенні положення першого максимуму s_1 від ~ 80 нм⁻¹ до ~ 20 нм⁻¹.

2. Різко росте інтенсивність дифракційних піків. Зокрема, величина I_1 збільшується від ~ 40 від.од. до ~ 4000 від.од. для атомної пари Sn-Sn.

3. Поступово зменшується ширина центрального малокутового піку розсіювання Δs_0 від ~ 50 нм⁻¹ до ~ 5 нм⁻¹.

4. Спадають ширини дифракційних піків різних порядків. Так напівширина першого піку Δs_1 зменшується від ~ 30 нм⁻¹ до ~ 5 нм⁻¹.

Таким чином, ріст кута орієнтації атомної пари відносно напрямку поширення зондуємого пучка у виді загального ефекту веде до все більш чіткої та контрастної дифракційної картини. В такій поведінці прослідковується повна аналогія з характером розподілу інтенсивності дифрагованого на щілині оптичного випромінювання.

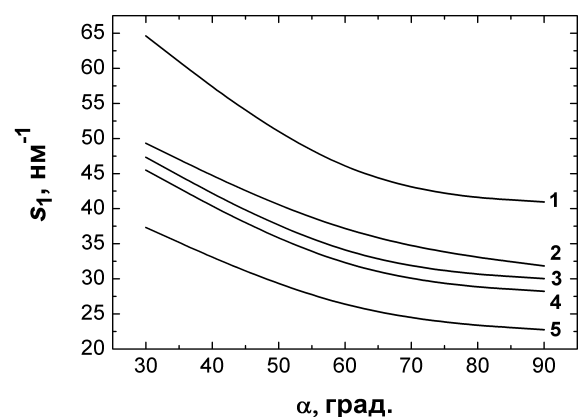


Рис.1. Залежність положення першого піку дифрактограм від кута орієнтації α для різних атомних пар: C-C (1), S-S (2), Ge-S (3), Ge-Ge (4), Sn-Sn (5).

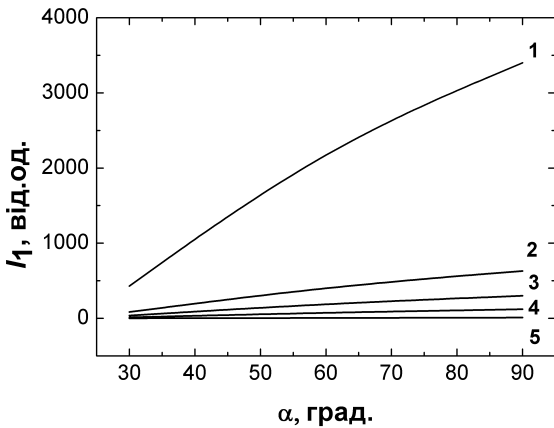


Рис.2. Залежність інтенсивності першого піку дифрактограм від кута орієнтації α для різних атомних пар: Sn-Sn (1), Ge-Ge (2), Ge-S (3), S-S (4), C-C (5).

Найбільш сильно змінюються інтенсивність I_1 та ширина центрального дифракційного піку Δs_0 (рис.2, 3). Але характер таких змін дуже різний. Інтенсивність першого піку росте із збільшенням порядкового номера атомів пари, тоді як ширина центрального пучка зменшується при цьому. Крім того, величина змін інтенсивності піків пропорційна кутам α (рис.2), тоді як основні зміни ширини центрального піку характерні для кутів $\alpha < 40^\circ$ (рис.3).

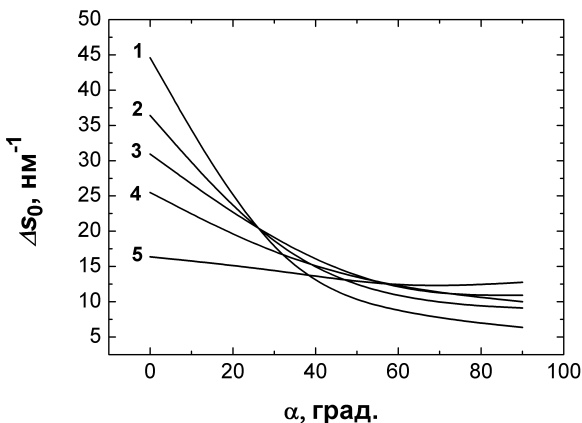


Рис.3. Залежність ширини центрального піку дифрактограм від кута орієнтації α для різних атомних пар: Sn-Sn (1), Ge-Ge (2), Ge-S (3), S-S (4), C-C (5).

Положення першого дифракційного піку s_1 та його напівширина Δs_1 залежать від виду атомів у парі значно менше (рис.1, 4). При переході від пари з “легких” атомів S – S до пари з “тяжких” атомів Sn – Sn величини даних змін не перевищують 30 – 50 % для всіх кутів α .

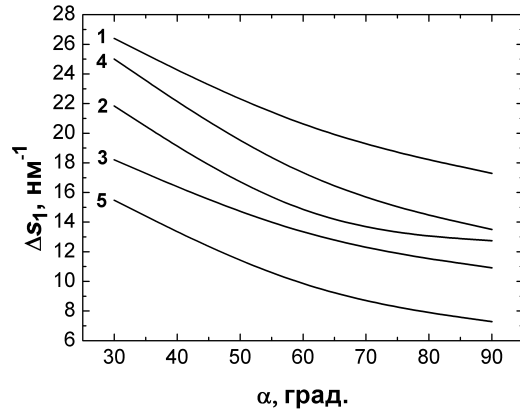


Рис.4. Залежність напівширини першого піку дифрактограм від кута орієнтації α для різних атомних пар: C-C (1), Ge-S (2), Ge-Ge (3), S-S (4), Sn-Sn (5).

Вплив на параметри дифрактограм виду атомів, які входять у розсіюючу пару, демонструє рис.5.

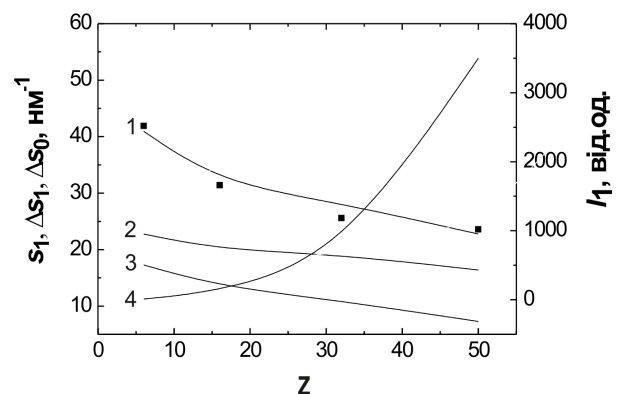


Рис.5. Залежність параметрів дифрактограм від атомного номера пари Z : 1 - s_1 ($\alpha=90^\circ$); 2 - Δs_0 ($\alpha=90^\circ$); 3 - Δs_1 ($\alpha=90^\circ$); 4 - I_1 ($\alpha=90^\circ$).

Як слідує із аналізу наведених на ньому залежностей, зміна параметрів дифрактограм при рості порядкового номера атомів пари Z проходить нерівномірно. Положення першого піку закономірно зменшується відповідно до росту міжатомних відстаней r для атомів з більшим Z (рис. 5, крива 1). На рис. 5 нанесено також точки, які відповідають положенню першого піку дифрактограм згідно співвідношенню Вульфа-Брега $s_i = \frac{2\pi}{r_i}$. При цьому спостерігається хороша узгодженість параметру моделі s_1 із вказаним співвідношенням.

Напівширина першого піку дифрактограм Δs_1 (рис. 5, крива 3) слабо

залежить від сорту хімічних елементів, що утворюють атомну пару. Зокрема, збільшення Z на порядок зумовлює зменшення параметру Δs_1 всього на $\sim 50\%$. Тобто, зміна хімічного складу об'єктів мало впливає на ступінь розмитості дифрактограм.

У ще меншій мірі впливають сорти атомів на ширину центрального піку (рис. 5, крива 2). Дана закономірність вказує на практичну нечутливість загального фону розсіювання електронів у мало кутівій області до хімічного складу досліджуваних матеріалів.

Найбільш сильно вид хімічних елементів атомної пари впливає на інтенсивність першого піку дифрактограм I_1 (рис. 5, крива 4). Звертає на себе увагу цікава закономірність. В діапазоні зміни Z до 30 параметр I_1 збільшується досить повільно. Для атомів же із $Z > 30$ спостерігається стрімкий ріст інтенсивності першого піку. Така поведінка I_1 зумовлює несприятливі умови для виявлення “легких” атомів на фоні “тяжких” хімічних елементів методом електронографії. Одночасно при наявності в складі зразків лише легких атомів, всі вони вносять практично еквівалентний вклад в електронограми.

Література

1. Куницький Ю.А., Купина Я.І. Електронна мікроскопія: навчальний посібник. – Київ: Лебідь, 1998. – 392 с.
2. Рябошук М.М. Розсіювання електронних хвиль парою атомів речовини в електронографії // Фізика і хімія твердого тіла, 2007. – т.8, №4. – С. 844-849.

MODELING OF THE INTERFERENCE OF ELECTRON WAVES SCATTERED ON THE ATOMIC PAIR OF THE SUBSTANCE

M.M. Ryaboschuk

Uzhhorod national university
Uzhhorod, Kapitulna str. 13,
e-mail: ivanc@mail.uzgorod.ua

It was studied how the orientation and type of the atomic pair of the substance relative to an electron ray influences the general character of the distribution of interference intensity from the given pair as well as the qualitative contribution of atomic pairs with different orientation to the total diffraction pattern of the amorphous substance. The structure in the directions close to an incidence vector of the probing ray is not actually reflected in them. It is shown, that the kind of chemical elements strongly influences intensity diffraction peaks and in a smaller measure changes other parameters of diffraction patterns.