

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННОГО КОНТРАСТА В УСЛОВИЯХ $gb=0$ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗНАКА ВЕКТОРА БЮРГЕРСА ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ, ДИПОЛЕЙ И КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

В. Н. Рожанский, И. А. Рагимов, К. Шеершмидт,
И. Хейденрайх

Теоретически рассчитаны на ЭВМ изображения диполя из краевых дислокаций в условиях $gb=0$. Результаты расчета позволили предложить несколько упрощенных методик определения знака вектора Бюргерса дислокационных петель, диполей и краевых дислокаций. Показана возможность определения знака из одного снимка, и отмечаются некоторые отличия экспериментальных изображений от теоретических.

Анализ дифракционного контраста в условиях $gb=0$ приводит к упрощенной методике определения знака вектора Бюргерса.

Для случая призматических дислокационных петель, расположенных вблизи поверхности фольги или пересекающих фольгу, это было показано ранее, однако, без строгого теоретического обоснования [1]. В данной работе на основе расчета с помощью ЭВМ дифракционного контраста эта методика распространяется на диполи и отдельные дислокации.

1. ЭВМ моделирование контраста

Для проведения численного расчета электронно-микроскопического дифракционного контраста мы исходили из уравнений Хауи—Вилана для двухволнового приближения в предположении изотропно упругого поля смещений с использованием электронно-вычислительной машины БЭСМ-6. Рассчитывался контраст дислокационных диполей, наклоненных под углом 45° к поверхности фольги при условии $gb=0$. На рис. 1 показано расположение дислокационного диполя, положенного в основу расчета. Поверхность фольги параллельна (001). Действующий рефлекс $g=[040]$. Вектора Бюргерса дислокаций 1 и 2 соответственно равны: $b_1=a/2 [101]$, $b_2=a/2 [101]$. Лишняя полуплоскость лежит между дислокациями. Ввиду того, что выполняется условие $gb=0$, контраст обусловлен радиальными смещениями поля напряжений, создаваемого дислокациями. Толщина фольги во всех случаях принималась равной $t=4 \xi_g$. Расстояние между дислокациями — d . Принимались различные значения отклонения от условий Брегга $w=s\xi_g$.

На рис. 2 приведены результаты теоретического расчета контраста для светопольных изображений диполя при $\xi'_g=\xi''_g=10 \xi_g$. Рис. 2, а соответствует изображению диполя с расстоянием между дислокациями $d=1.8 \xi_g$ и $w=0$. Рис. 2, б — изображение диполя с расстоянием между дислокациями $d=0.2 \xi_g$ и $w=0$. Ввиду того, что в первом случае расстояние $d=1.8 \xi_g$ между дислокациями достаточно велико, то исключается взаимное влияние полей смещений дислокаций друг на друга, и полученный контраст на рис. 2, а можно интерпретировать как контраст от двух отдельных

дислокаций с векторами Бюргера противоположного знака. Наблюдается асимметрия светлопольного изображения дислокаций относительно середины фольги и осцилляция контраста по глубине фольги.¹

У точек пересечения дислокаций с поверхностью наблюдается уширение контраста в виде светлого и темного ореолов, расположенных в пределах менее одного экстинкционного расстояния от поверхности. При перемене знака дислокации контраст ореолов меняется на противоположный. В случае светлопольного изображения при сближении дислокаций (рис. 2, б) контраст падает из-за компенсации смещений разного знака.²

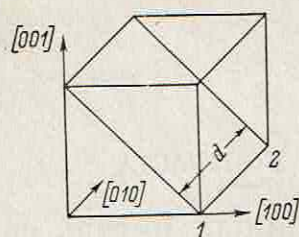


Рис. 1. Схема расположения диполя, положенного в основу расчета.

Темнопольные изображения диполя представлены на рис. 3. На рис. 3, а, б, в расстояние между дислокациями $d=1.8 \xi_g$, а $w=0, 0.3$ и -0.3 соответственно. На рис. 3, г, д, е дислокации сближены ($d=0.2 \xi_g$).

В отличие от светлопольных изображений, темнопольные изображения дислокаций в случае $w=0$ симметричны относительно середины фольги. При $w \neq 0$ симметрия темнопольного изображения относительно середины кристалла несколько нарушается. При $w > 0$ наблюдается увеличение светлых ореолов у нижней поверхности фольги, при $w < 0$ наоборот (сравните рис. 3, а, б, в).

Также наблюдаются зависящие от знака дислокации сильные светлые и темные ореолы у пересечения с поверхностями фольги. Темнопольные

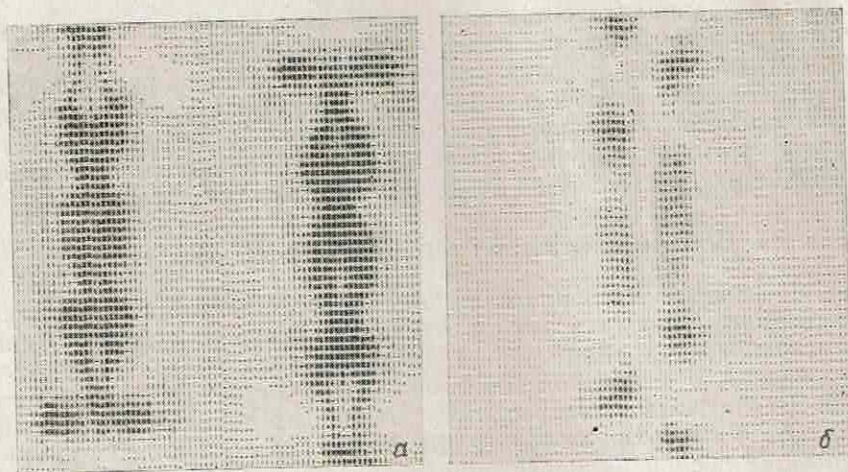


Рис. 2. Светлопольное расчетное изображение диполя, лежащего под углом 45° к поверхности, в плоскости (101).

Ориентация фольги (001). Действующее отражение $g = [040]$, $\xi_g = 700 \text{ \AA}$, $\xi'_g = \xi'_0 = 10\xi_g$.
а — расстояние между дислокациями $d=1.8 \xi_g$, $w=0$; б — $d=0.2 \xi_g$, $w=0$.

изображения дислокаций аналогичны светлопольным у верхней поверхности фольги и дополнены у нижней поверхности.

Наличие сильных светлых или темных ореолов около мест пересечения дислокаций с поверхностями фольги в пределах менее экстинкционного расстояния от поверхности не связано с эффектами релаксации напряжений у поверхности, которые не учитывались в расчетах. Контраст ореолов зависит от знака g и b и на темнопольном изображении диполя светло-

¹ В противоположность этому в случае $gb=1$ светлопольное изображение имеет симметрию, известную из литературы [2].

² Подобное явление наблюдается и для темнопольного изображения, однако, величина контраста оказывается зависящей от толщины фольги.

темное чередование ореолов по направлению g соответствует внедренной петле или призматическому диполю внедренного типа. Изменение параметров поглощения оказывает незначительное влияние на контраст. При умень-

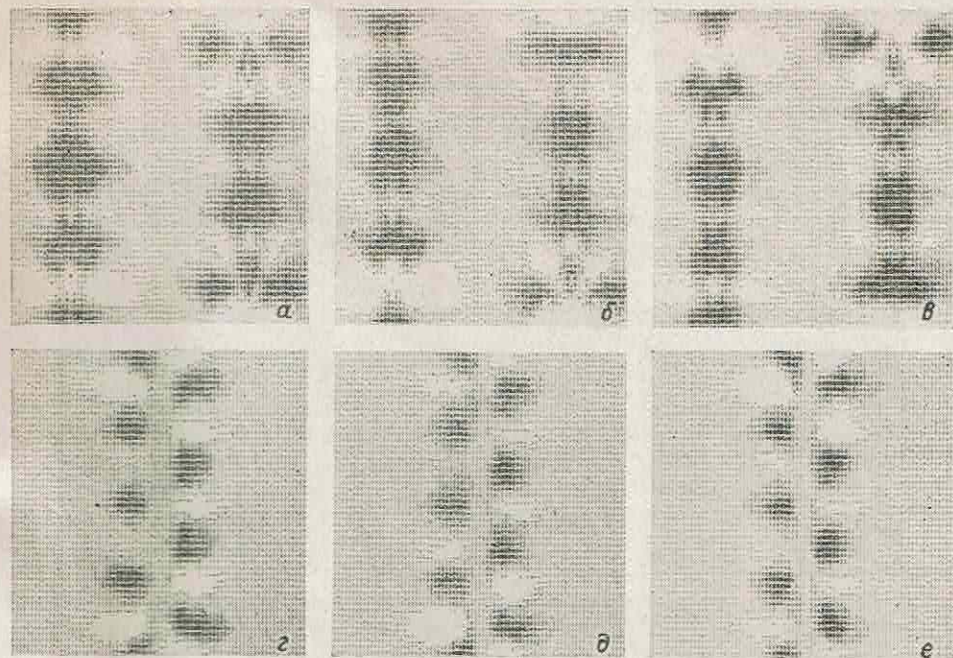


Рис. 3. Темнопольное расчетное изображение диполя.

d/ξ_g и w : а — 1.8 и 0, б — 1.8 и 0.3, в — 1.8 и -0.3, г — 0.2 и 0, д — 0.2 и 0.3, е — 0.2 и -0.3.

шении поглощения, как видно из сравнения рис. 3, г ($\xi'_0/\xi_g = \xi'_0/\xi_g = 10$) и рис. 4, а ($\xi'_0/\xi_g = 20$, $\xi'_g/\xi_g = 40$), наблюдается лишь некоторое просветление изображений обеих дислокаций диполя. Для установления роли ре-

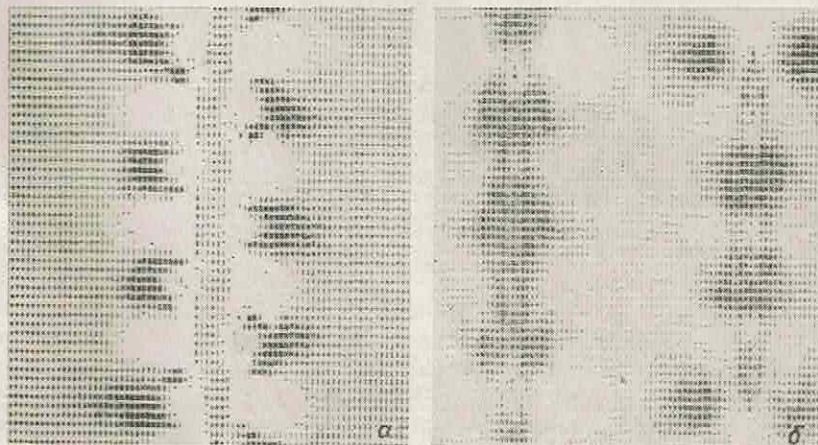


Рис. 4.

а — темнопольное расчетное изображение того же диполя с параметрами поглощения:

$\xi'_0 = 20\xi_g$ и $\xi'_g = 40\xi_g$; б — темнопольное изображение с учетом сил изображения $d = 1.8\xi_g$, $w = 0$.

лаксации напряжений у поверхности проведен расчет контраста с учетом сил изображения у верхней и нижней поверхностей с использованием зеркальных отражений дислокаций поверхностью. Это дает возможность

поля, почти перпендикулярного поверхности фольги. Хорошо видны светлые и темные ореолы около выходов дислокаций на поверхность. Величина ореолов увеличена.

Усиление контраста изображения дислокаций около поверхности при $w > 0$ и $w < 0$ и $gb \neq 0$ наблюдалось также в работе [7].

3. Обсуждение результатов

Полученные результаты показывают, что анализ темнопольных и светлопольных изображений дислокаций при $gb=0$ ведет к упрощенному определению типа дислокационных петель, диполей и отдельных дислокаций. Можно предложить следующие методики.

1) Определение типа дислокационных петель и диполей из темнопольных изображений в условиях $gb=0$.

Светло-темное чередование контраста ореолов около дислокаций по направлению вектора g соответствует внедренной петле или диполю, а темно-светлое чередование контраста соответствует вакансионной петле или диполю. Следует указать, что метод дает однозначный результат для петель вблизи поверхности фольги или для больших петель, пересекающих поверхность фольги, или прилегающих одной частью к поверхности фольги.

Причем экспериментально наблюдаемые асимметричные изображения от радиальных смещений позволяют иногда определить тип петель даже при $gb \neq 0$ (рис. 5, б).

Следует заметить, что данная методика не дает однозначного результата для типа петель, расположенных в средней части толстой фольги ($t \geq 5 \xi_g$) особенно для петель, лежащих параллельно поверхности фольги. Наиболее целесообразно применение этой методики для определения типа большого числа дефектов на одном темнопольном снимке. Метод позволяет на одном снимке расшифровать дефекты различного знака.

2) Определение знака петель, пересекающих поверхность фольги или прилегающих одной частью к поверхности фольги, возможно из светлопольных изображений при $gb=0$. Однако для этого необходимо дополнительно установить наклон петли.

Если петля пересекает или прилегает одной частью к верхней поверхности фольги и вдоль вектора g наблюдается светло-темное чередование ореолов, то петля (диполь) — внедренного типа, если чередование ореолов темно-светлое, то — вакансионного типа. Для петель, пересекающих нижнюю поверхность фольги или прилегающих одной частью к нижней поверхности фольги, чередование ореолов обратное. Хотя это определение возможно и при $w=0$, целесообразно наблюдать ореолы при $w \neq 0$ для усиления контраста ореолов темнопольных и светлопольных изображений у нижней или верхней поверхности фольги.

3) Из темнопольных изображений при $gb=0$ можно определить знак вектора Бюргерса отдельных краевых дислокаций, лежащих наклонно к поверхности фольги. Этот метод следует из расчетных изображений. Если при $gb=0$ вектор отражения g перпендикулярен изображению линии дислокации и на концах темнопольного изображения дислокации наблюдаются светлые ореолы, то лишняя полуплоскость лежит от дислокации по направлению вектора g . Если ореолы темные, то лишняя полуплоскость лежит с противоположной стороны.

4) Используя светлопольные изображения, можно определить знак отдельных краевых дислокаций, лежащих наклонно к поверхности фольги, изображения которых при $gb=0$ параллельны вектору g .

Если при $gb=0$ изображение наклонной краевой дислокации параллельно вектору g , то, если по направлению вектора g наблюдается светло-темное чередование ореолов на концах изображения дислокации, лишняя полуплоскость находится сверху от линии дислокации; если чередование ореолов темно-светлое, то снизу.

Авторы выражают благодарность Ф. Н. Чуховскому за обсуждение результатов и полезные советы.

Л и т е р а т у р а

- [1] И. А. Рагимов, В. Н. Рожанский. ФТТ, 15, 1648, 1973.
- [2] П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон, Д. Пэшли, М. Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М., 1968.
- [3] И. А. Рагимов, И. П. Арсентьева, В. Н. Рожанский. ФТТ, 11, 992, 1969.
- [4] A. Howie, M. I. Whelan. Proc. Roy. Soc. (London), A267, 206, 1962.
- [5] M. F. Ashby, L. M. Brown. Phil. mag., 8, 1649, 1963.
- [6] И. А. Рагимов. Кристаллография, 16, 1047, 1971.
- [7] W. L. Bell, G. Thomas. Phys. Stat. Sol., 12, 843, 1965.

Институт кристаллографии
АН СССР
Москва
ИФТТ ЭМ АН ГДР, Халле

Поступило в Редакцию
8 апреля 1975 г.
В окончательной редакции
11 мая 1975 г.