

Ф. Н. ЧУХОВСКИЙ, П. В. ПЕТРАШЕНЬ

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА ИЗОГНУТОМ КРИСТАЛЛЕ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 10 I 1975)

1. Для количественного описания рентгено топографического изображения кристалла используется геометрическая оптика рентгеновских лучей (р.л.) в приближении постоянного градиента деформации ⁽¹⁻³⁾. Эта теория находится в хорошем согласии с экспериментом в слабо искаженных кристаллах, когда эффективный параметр деформации $|B| \ll 1$. Однако в сильно искаженных областях теория приводит к качественно неправильным выводам, в частности, к росту интегральной интенсивности дифрагированной волны для непоглощающего кристалла пропорционально $|B| \gg 1$.

Недавно в ^(4, 5) (см. также ^(6, 7)) построена функция Грина — Римана рентгеновских лучей в однородно деформированном кристалле. Ниже приводится решение и краткий анализ задачи рассеяния на изогнутом кристалле. Использование точного решения позволяет снять ограничения, связанные с величиной деформации, при этом упомянутая расходимость интегральной интенсивности дифрагированной волны снимается. Кроме того удастся выявить качественные особенности геометрической (лучевой) оптики рассеяния р.л. в изогнутом кристалле и указать пределы ее применимости.

2. Как известно, при дифракции р.л. в искаженных кристаллах амплитуды $E_{0,1}$ волнового поля удовлетворяют динамическим уравнением Такаги ⁽⁸⁾. При этом система уравнений записывается в косоугольных координатах (s_0, s_1) , отвечающих направлениям падающей и дифрагированной волны. Однако граничные условия формулируются на входной поверхности кристалла. Поэтому представляет интерес выбор системы (см. рис. 1) координат, в которой одна из осей (Ox) направлена вдоль поверхности. Направление второй оси определяется соображениями простоты описания асимметричной Лаундифракции. Для этого ось Oz удобно направить по медиане дельты Бормана. При специальном выборе масштабов по осям в системах (s_0, s_1) , (x, z) связь между ними имеет вид

$$z = Z = s_0 + s_1, \quad x = s_0 - s_1. \quad (1)$$

Основным преимуществом системы (x, z) является то, что симметричный и асимметричный случаи дифракции описываются в ней математически одинаково, что существенно упрощает рассмотрение.

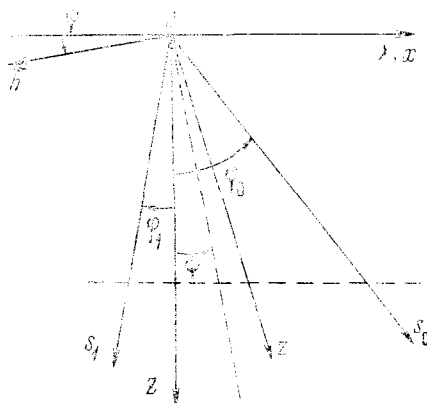


Рис. 1. Геометрия дифракции. (X, Z) — декартова, (s_0, s_1) — стандартная косоугольная, (x, z) — специальная системы координат. В декартовой системе расстояния измеряются в единицах Λ/π , где Λ — экстинкционная длина

В случае дифракции р.л. на изогнутом кристалле стандартная функция поля смещений (hu) является квадратичной по координатам

$$hu = 2As_0^2 + 4Bs_0s_1 + 2Cs_1^2. \quad (2)$$

В конкретном случае механического изгиба наиболее важный для теории коэффициент B имеет вид

$$B = -\frac{\sin \theta_B \sin \psi}{\pi \gamma_0 \gamma_1} \frac{\Lambda^2}{\lambda R} (1 + (1 + \nu) \gamma_0 \gamma_1), \quad (3)$$

где R — радиус изгиба, ν — коэффициент Пуассона, λ — длина волны р.л. Отметим, что в случае симметричной дифракции $\psi = 0$ и $B = 0$.

3. Используя полученные в ^(1, 5) функции Грина — Римана, значения амплитуд проходящей дифрагированной волн E_0 , E_1 в произвольной точке наблюдения (x_P, z_P) можно определить в соответствии с принципом Гюйгенса — Френеля:

$$E_0(x_P, z_P) = \int dx G_{00}(x_P, z_P, x, 0) E_0(x, 0), \quad (4)$$

$$E_1(x_P, z_P) = \int dx G_{10}(x_P, z_P, x, 0) E_0(x, 0),$$

где интегрирование проводится по области влияния $|x_P - x| \leq z_P$ на входной поверхности $z = 0$. При выводе соотношений (4) учтено, что при Лауэ-дифракции амплитуда $E_1(x, 0) = 0$. Функции $G_{00}(\mathbf{r}_P, \mathbf{r})$ и $G_{10}(\mathbf{r}_P, \mathbf{r})$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} G_{00}(\mathbf{r}_P, \mathbf{r}) = & \exp(iS_0 + i\eta(\mathbf{r}_P - \mathbf{r})) \left\{ \delta(x - x_P + z_P - z) - \right. \\ & \left. - \frac{\sigma^2}{4} (z_P - z - x_P + x) {}_1F_1\left(1 + i\frac{\sigma^2}{4B}, 2; iB\rho^2\right) \right\}, \\ G_{10}(\mathbf{r}_P, \mathbf{r}) = & i\frac{\sigma_1}{2} \exp(iS_0 + i\eta(\mathbf{r}_P - \mathbf{r}) - i(hu)_P) {}_1F_1\left(1 + i\frac{\sigma^2}{4B}, 1; iB\rho^2\right), \end{aligned} \quad (5)$$

где приняты обозначения

$$\begin{aligned} \rho^2 = & (z_P - z)^2 - (x_P - x)^2, \quad \sigma^2 = 1 + 2ik, \\ \eta_{x,z} = & \frac{\chi_0(1 \mp \beta) \pm \alpha\beta}{2\mathcal{E} \sqrt{|\beta|} \chi_{rh} \chi_{rh-}}, \end{aligned} \quad (6)$$

${}_1F_1(a, b; x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция, фаза $S_0(\mathbf{r}_P, \mathbf{r})$ равна

$$S_0(\mathbf{r}_P, \mathbf{r}) = \frac{C}{2} [(z_P - x_P)^2 - (z - x)^2] + \frac{B}{2} [(z_P + x)^2 - (x_P + z)^2 - \rho^2]; \quad (7)$$

остальные обозначения в (5), (6) стандартные.

Функция (5) представляет собой волновое поле в точке наблюдения (x_P, z_P) , порожденное точечным источником, помещенным в точку (x, z) .

Как видно из (5), функции Грина — Римана с точностью до фазового множителя обладают инвариантностью относительно трансляций $\mathbf{r}_P \rightarrow \mathbf{r}_P + \mathbf{a}$, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$. Физически это связано с инвариантностью распределения интенсивности точечного источника, помещенного в однородно изогнутый кристалл, относительно преобразований симметрии вокруг центра кривизны отражающих плоскостей и точечного источника. Функции влияния (5) при $A, B, C \rightarrow 0$ переходят в соответствующие выражения для совершенного кристалла. Если ось однородного изгиба лежит в отражающей плоскости, $B = 0$ и функции (5) отличаются от функций влияния для совершенного

кристалла лишь фазовым множителем. В этом случае интегральная интенсивность дифрагированной волны не зависит от деформации.

4. Подробный анализ решения задачи (4), (5) можно провести асимптотическими методами. Функция F_1 имеет различные асимптотические представления в зависимости от областей изменения параметров и аргумента. Анализ показывает, что стандартные асимптотики функции F_1 не решают поставленной задачи, и необходимо использовать общий метод Олвера⁽⁹⁾ для построения асимптотических представлений. В практических приложениях наибольший интерес представляет поведение функций влияния в лучевой области

$$\rho \gg 1. \quad (8)$$

Учитывая, что обычно динамический коэффициент поглощения мал, $|k| \ll 1$, и опуская промежуточные выкладки, приведем результат построения асимптотического представления F_1 в лучевой области, равномерного по параметру B (ср. (9)):

$$F_1 \left(1 + i \frac{\sigma^2}{4B} b; iB\rho^2 \right) \sim \Gamma(b) \exp(iB\rho^2/2) (|B|\rho^2)^{(4-b)/2} \times \\ \times \{D(b, |B|) \exp(iS(\rho)) + D^*(b, |B|) \exp(-iS(\rho))\}, \quad b=1, 2, \quad (9)$$

где фазовый интеграл $S(\rho)$ равен

$$S(\rho) = \frac{\rho}{2} (1+B^2\rho^2)^{1/2} - \left(\frac{1+2ik}{2|B|} + i \operatorname{sign} B(b-2) \right) \ln((1+B^2\rho^2)^{1/2} - |B|\rho). \quad (10)$$

Абсолютное значение коэффициента $D(b, |B|)$ определяется соотношением

$$|D(b, |B|)|^2 = \frac{1 - \exp(-\pi/2|B|)}{2\pi} (4|B|)^{b-1}. \quad (11)$$

При $|B| \ll 1$ фаза рассеяния $\operatorname{Im} \ln D(1, |B|)$ равна $-\pi/4$, а для больших деформаций стремится к нулю. Отметим, что в (9) первый член соответствует слабо, а второй — сильно поглощающимся полям в кристалле.

Формулы (5), (9) — (11) отличаются от формул эйконального приближения Като^(2,7) зависимостью фазы рассеяния от деформации и множителем $1 - \exp(-\pi/2|B|)$, который в выражении для интенсивности имеет физический смысл статического фактора рассеяния < 1 .

5. Для расчета волнового поля в изогнутом кристалле интегралы (4) можно вычислить методом стационарной фазы. Точки стационарной фазы определяются из условий

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(S_0(\mathbf{r}_P, \mathbf{r}) + \operatorname{Re} \eta(\mathbf{r}_P - \mathbf{r}) + \frac{B}{2} \rho^2 \pm \operatorname{Re} S(\rho) \right) = 0, \quad (12)$$

где знаки $\pm$ соответствуют слабо и сильно поглощающимся полям.

Непосредственные преобразования позволяют привести (12) к виду

$$(2B(x_P - x) \mp \xi(x))^2 - (2Bz_P - \eta(x))^2 = 1; \quad (13)$$

здесь $\eta(x)$ — отклонение от точного условия Брэгга в точке x на входной поверхности, а $\xi(x) = (1 + \eta^2(x))^{1/2}$.

Формулы (13) представляют собой уравнения траекторий лучей, входящих из точки $(x, 0)$ и имеющих форму гипербол. При $B=0$ гиперболы вырождаются в прямые

$$\xi(x)(x_P - x) = \pm \eta(x)z_P. \quad (14)$$

Если на поверхность кристалла падает плоская волна, траектории лучей образуют сходящийся или расходящийся «веер» в зависимости от вет-

ви дисперсионной поверхности и знака деформации. При этом могут возникать точки пересечения лучей (каустики), условие образования которых есть

$$dx_F/dx=0. \quad (15)$$

В качестве примера приведем минимальную глубину, на которой возможно пересечение лучей, для случая симметричной дифракции Лауэ, $B=0$. Из соображений симметрии и (14), (15) следует, что $|C|z_{P\min}=1$ при $\eta(x_F)=0$.

В целом проведенное рассмотрение подтверждает правильность выводов теории геометрической оптики р.л. С другой стороны, точное решение позволяет описывать дифракцию р.л. при больших деформациях $|B|\geq 1$, или вблизи краев дельты Борманна, $\rho \ll 1$, когда геометрическая оптика заведомо неприменима.

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
3 I 1975

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
Академии наук СССР
Ленинград

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ P. Penning, D. Polder, Philips Res. Rep., v. 16, 419 (1961). ² N. Kato, J. Phys. Soc. Japan, v. 18, 1785 (1963); v. 19, 67 (1964); v. 19, 971 (1964). ³ Y. Ando, N. Kato, J. Appl. Cryst., v. 3, 74 (1970). ⁴ П. В. Перрашень, ФТТ, т. 15, 3131 (1973). ⁵ Ф. Н. Чуховский. а) Кристаллография, т. 19, 482 (1974); б) Collected Abstracts II European Crystallogr. Meeting, Keszthely, 26–29 Aug. 1974, Hungary. p. 61. ⁶ O. Litzman, Z. Jantšek, Phys. Stat. Sol. (a), v. 25, 663 (1974). ⁷ T. Katagawa, N. Kato, Acta Cryst., v. A30, 830 (1974). ⁸ S. Takagi, ibid., v. 15, 1131 (1962); J. Phys. Soc. Japan, v. 26, 1239 (1969). ⁹ Л. Слейтер, Вырожденные гипергеометрические функции, ВЦ АН СССР, М., 1966 г., стр. 76.