

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В УСЛОВИЯХ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

И.Ш.Слободецкий, Ф.Н.Чузовский, В.Л.Инденбом

Анализ рентгеновского изображения дефектов решетки и полей искажений требует решения пространственно-неоднородных задач, выходящих за рамки известной динамической теории распространения рентгеновских лучей. Обычная для этой теории постановка задачи ограничивается случаем плоской монохроматической волны, падающей на поверхность полубесконечного идеального кристалла [1, 2]. Если ориентировка кристалла близка к одному из брегговских положений, волновое поле в кристалле представляется в виде суперпозиции двух когерентных плоских волн — проходящей и дифрагированной. Покажем, что обобщенное двухволновое приближение, использующее вместо плоских волн волновые пакеты, позволяет получить решение широкого класса пространственно-неоднородных задач.

1. Рассмотрим сначала монохроматический пространственно-неоднородный волновой пакет с частотой ω , падающий на плоскую поверхность идеального кристалла. Волновое поле внутри кристалла удовлетворяет уравнению Максвелла

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}) = \kappa^2 \epsilon(\omega, \mathbf{r}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\kappa = \omega/c$, а диэлектрическая проницаемость $\epsilon(\omega, \mathbf{r})$ мало отличается от единицы и является периодической функцией координат. Разложим диэлектрическую восприимчивость $\chi = \epsilon - 1$ в ряд по векторам обратной решетки \mathbf{k}_h

$$\chi(\omega, \mathbf{r}) = \sum_h \chi_h \exp(i \mathbf{k}_h \mathbf{r}). \quad (2)$$

Вблизи брегговского положения, соответствующего вектору \mathbf{k}_1 , решение уравнения (1) ищем в виде суммы двух волновых пакетов

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[i(\kappa \mathbf{r} + \kappa \frac{\chi_0}{2} \mathbf{n} \mathbf{r})] + \mathbf{E}_1 \exp[i\{(\kappa + \mathbf{k}_1) \mathbf{r} + \kappa \frac{\chi_0}{2} \mathbf{n} \mathbf{r}\}], \quad (3)$$

где $\mathbf{E}_0(\omega, \mathbf{r})$ и $\mathbf{E}_1(\omega, \mathbf{r})$ — медленно меняющиеся функции координат. Рассмотрим для простоты симметричный случай дифракции Лауэ, когда \mathbf{k}_1 перпендикулярен нормали \mathbf{n} к поверхности кристалла. Переходя, как обычно, от векторных уравнений (1) к скалярным и учитывая симметрию задачи, для амплитуд $E_0(\omega, \mathbf{r})$ и $E_1(\omega, \mathbf{r})$ находим в квази-

классическом приближении

$$2i \left(\frac{\partial E_0}{\partial z} + \frac{\partial E_0}{\partial x} \right) = -\chi_1 E_1; \quad 2i \left(\frac{\partial E_1}{\partial z} - \frac{\partial E_1}{\partial x} \right) = -\chi_1 E_0 + \alpha E_1. \quad (4)$$

Здесь введены безразмерные координаты $z = \pi\kappa/\cos\theta$ и $x = \pi k_{1\kappa}/k_1 \sin\theta$ θ – брегговский угол, $\alpha = (2\kappa k_1 + k_1^2)/\kappa^2$ определяет отклонение плоской волны с волновым вектором κ от условия Брегга, χ_0 и χ_1 , определяемые (2) – параметры обычной динамической теории. Заметим, что в кристалле, вообще говоря, распространяются волны, отвечающие различным "слабым" отражениям k_h , с $h \neq 1$ и неупруго рассеянные волны, однако влияние этих волн на основное поле излучения (3) можно в принципе учесть по теории возмущений, что приводит лишь к перенормировке параметров χ_0 и χ_1 (см., например, [3]).

Дополняя систему уравнений (4) граничными условиями

$$E_0(x, y, 0) = \xi(x, y); \quad E_1(x, y, 0) = 0 \quad (5)$$

находим общее решение для поля дифрагированной волны в виде свертки [4]

$$E_1(r) = i \frac{\chi_1}{2} \xi(x, y) * G(x, z), \quad (6)$$

где функция влияния $G(x, z)$ отлична от нуля лишь в области $|x| < z$, где

$$G(x, z) = \frac{1}{2} i_0 \left(\frac{\chi_1}{2} \sqrt{z^2 - x^2} \right) \exp \left[-\frac{ia}{4} (z - x) \right] \quad (7)$$

($i_0(\xi)$ – функция Бесселя нулевого порядка).

Поле проходящей волны находится из второго уравнения (4).

2. Изображение щели. Пусть плоская монохроматическая волна единичной амплитуды падает на кристалл, на поверхность которого помещена щель $|x| \leq \sigma$. В этом случае из (6) – (7) следует

$$E_1(x, z) = \frac{i\chi_1}{4} \int_{\max(x-z, -\sigma)}^{\min(x+z, \sigma)} d\xi i_0 \left(\frac{\chi_1}{2} \sqrt{z^2 - (x - \xi)^2} \right) \exp \left[-\frac{ia}{4} (z - x + \xi) \right]. \quad (8)$$

При $\sigma \rightarrow \infty$ формула (8), естественно переходит в обычное решение динамической задачи

$$E_1(z) = i \left\{ \sin \left(\frac{\chi_1 z}{2} \sqrt{1 + (\alpha/2\chi_1)^2} \right) / \sqrt{1 + (\alpha/2\chi_1)^2} \right\} \exp \left(-i \frac{\alpha z}{4} \right). \quad (9)$$

Если полуширина щели σ больше толщины кристалла t , решение (9) справедливо лишь для центральной "равномерно освещенной" области $|x| < \sigma - t$, а по краям изображения в полосах "полутени"

$a + t > |x| > a - t$ должны наблюдаться осцилляции интенсивности, симметричные относительно середины щели. На рис. 1 показаны примеры распределения интенсивности у края изображения щели для $a = 0$ и различных значений параметра $\chi_1 t$, определяющего интенсивность на центральном участке.

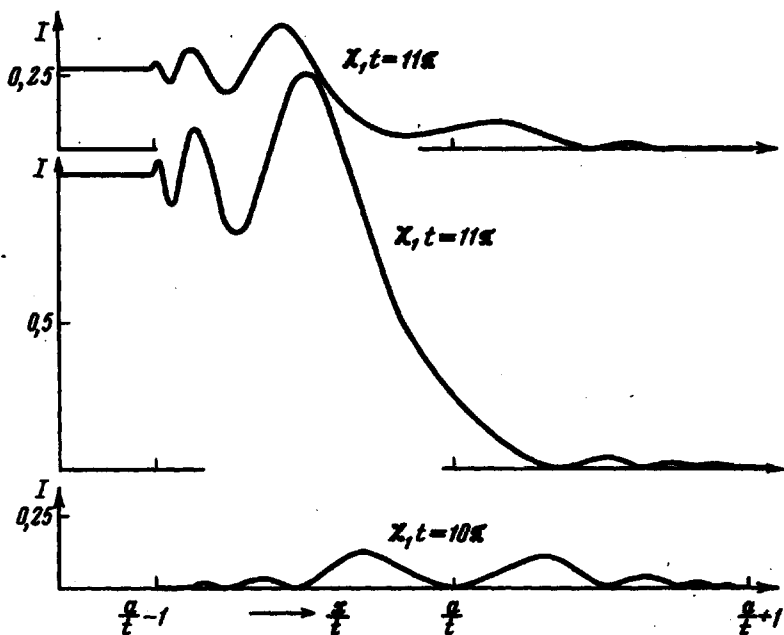


Рис. 1. Дифракционное изображение широкой щели $a > t$ при точном брэгговском положении непоглощающего кристалла, $a = 0$, в зависимости от величины $\chi_1 t$

Если полуширина щели меньше толщины кристалла, равномерно освещенная область исчезает, а области осцилляции интенсивности накладываются, причем с уменьшением ширины щели или с увеличением толщины кристалла максимум интенсивности смещается к краю изображения (рис. 2). В предельном случае $\chi_1 \sqrt{ta} \ll 1$ и $aa \ll 1$ изображение щели хорошо описывается квадратом бesselевой функции $j_0(\chi_1/2\sqrt{t^2 - x^2})$, что соответствует результату Като [5], рассчитавшему изображение бесконечно узкой щели в приближении выходящих из щели сферических волн. Заметим, что иллюстрируемые рис. 2 детали изображения щели утрачены в главной работе Атье и др. [6], решавших систему (4) численно.

3. Изображение реального кристалла. С помощью функции влияния (7) можно построить в борновском приближении общее решение динами-

ческой задачи распространения рентгеновских лучей в искаженном кристалле, когда диэлектрическая восприимчивость уже не является периодической функцией координат. Полагая, что кристалл слабо искажен, заменим χ_h на $\chi_h \exp(ik_1 u)$, где $u(r)$ медленно меняющееся поле смещений. Тогда уравнение (4) формально сохраняется, если заменить a на $a + 2(\partial/\partial z - \partial/\partial x)(k_1 u)$, но становится уравнением с переменными коэффициентами. В первом приближении $E_1 = (E_1^0 + E_1') \exp(ik_1 u)$, где

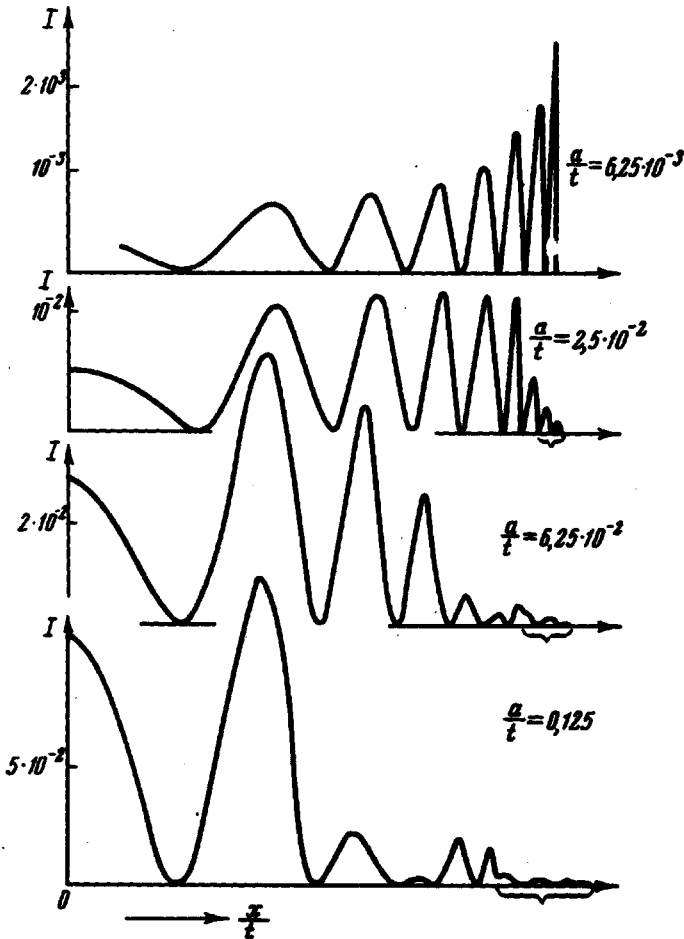


Рис. 2. Дифракционное изображение узкой щели $a < t$ при точном брэгговском положении непоглощающего кристалла, $\alpha = 0$, в зависимости от отношения a/t . Фигурной скобкой на рисунке отмечена область $|x - t| < a \cdot \chi_1 z = 16\pi$

$E_1^0(z)$ — решение обычной динамической задачи, а $E_1'(z)$ дается сверткой

$$E_1^*(\mathbf{r}) = -i \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) E_1^0 \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) (k_1 u) \right\} * G(x, z). \quad (10)$$

Как и следовало ожидать, в отличие от известного случая дифракционного электронно-микроскопического изображения, связь поля смещений $u(\mathbf{r})$ с его рентгеновским изображением $E_1^*(\mathbf{r})$ оказывается нелокальной. Не удивительно, что различные попытки локального истолкования рентгеновского изображения полей искажений оказывались неудачными.

Авторы выражают глубокую признательность проф. З.Г.Пинскеру за постоянное внимание к работе, ценные замечания и обсуждение результатов.

Институт кристаллографии
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
25 марта 1968 г.

Литература

- [1] R. W. James. Solid State Physics, 15, N.-Y., 1963.
- [2] B. W. Batterman, H. Cole. Res. Mod. Phys., 36, 681, 1964.
- [3] А.М.Афанасьев, Ю.М.Каган. ЖЭТФ, 52, 191, 1967.
- [4] Р.Курант. Уравнения с частными производными. М., Изд. Мир, 1964.
- [5] N. Kato. Acta Cryst., 14, 627, 1961.
- [6] A. Authier, C. Malgrange, M. Tournarie. Acta Cryst., A24, 126, 1968