Изв. АН Армянской ССР, Физика, 7, 418—425 (1972)

ПОТОК ЭНЕРГИИ В КРИСТАЛЛАХ ПРИ НЕСИММЕТРИЧНОМ ПРОХОЖДЕНИИ РЕНТГЕНОВЫХ ЛУЧЕЙ

К. Г. ТРУНИ, П. А. БЕЗИРГАНЯН

При несимметричном прохождении рентгеновых лучей для Вульф-Брегговского угла падения направления среднего потока энергии не совпадают с отражающими плоскостями и лишь в частном случае симметричного прохождения энергия течет по отражающим плоскостям.

При несимметричном прохождении отклонения среднего потока энергии от направления падения неодинаковы даже для непоглощающих кристаллов. В случае поглощающего кристалла изгибы кривых среднего потока различны для разных сторон отражающих плоскостей.

В работах [1, 2] подробно исследован поток энергии динамически взаимодействующих рентгеновых волн в кристалле при их симметричном прохождении. Несмотря на то, что в этих работах получены общие выражения для среднего потока энергии, однако несимметричный случай почти не исследован. Между тем исследование этого вопроса в последнем случае очень важно для развития теории рентгеновых интерферометров с несимметричными отражениями и прохождениями.

В работе [3] впервые детально рассмотрен случай асимметричного отражения в поглощающем кристалле. Показано, что при переходе к толстым кристаллам максимумы коэффициента отражения становятся асимметричными и смещаются относительно точки, соответствующей центру полного внутреннего отражения ($p_n=0$), причем коэффициенты отражения для плоскостей (hkl) и ($\bar{h}\bar{k}\bar{l}$) смещаются в противоположные стороны. Аналогичную закономерность обнаруживают коэффициенты прохождения с тем фундаментальным различием, что коэффициенты, соответствующие (hkl) и ($\bar{h}\bar{k}\bar{l}$), сильно отличаются друг от друга.

В излагаемой работе детально исследован поток энергии рентгеновых волн при несимметричном прохождении в прозрачных и поглощающих кристаллах.

Как известно [1], в общем случае плотность потока энергии как функция угла падения выражается следующим образом:

$$\frac{\vec{S}}{|\vec{S}_0|} = \frac{e^{-\bar{\sigma} z}}{2\,\mathrm{ch}^2 v_r}\left\{\left[\,\mathrm{ch}\,(2 v_r + kz) - \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right)\cos 2 v_l\right]\vec{s}_0 + \right. \tag{1}$$

$$\left. + |G|^2\left[\mathrm{ch}\,kz - \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right)\right] s_h\right\},$$

где $\vec{S}_0$ — плотность потока падающей волны, $\bar{\sigma} = \mu/2\,(\gamma_0^{-1} + \gamma_n^{-1})$ — среднее значение коэффициента поглощения, p_r, v_r и p_l, v_l — действительные и мнимые части параметров угла падения,

$$\gamma_0 = \sin(\chi + \theta_0),\ \gamma_h = \sin(\chi - \theta_0),\ G = -\gamma_0/\gamma_h,$$

χ — угол между отражающими плоскостями и поверхностью красталла, θ_0 — угол Брегга, $\vec{s}_0$ и $\vec{s}_h$ — единичные векторы в направлении падения и отражения соответственно, Δ — период маятниковых полос, μ — линейный коэффициент поглощения, $k = \sigma_1 - \sigma_2$, где σ_1 и σ_2 — коэффициенты поглощения первой и второй волн соответственно.

Величина k выражается через угол падения следующим образом:

$$k = \mu/2 \left[\frac{(\gamma_h^{-1} - \gamma_0^{-1})\, p_r}{(p_r^2 + 1)^{1/2}} + \frac{2\,|\Phi_{hi}/\Phi_{oi}|/(\gamma_0\gamma_h)^{1/2}}{(p_r^2 + 1)^{1/2}} \right], \tag{2}$$

где индекс i означает мнимую часть.

Для нахождения параллельной и перпендикулярной к поверхности кристалла компонент плотности потока выразим единичные векторы $\vec{s}_0$ и $\vec{s}_h$ через единичные векторы $\vec{t}$ и $\vec{n}$, первый из которых параллелен, а второй перепендикулярен к поверхности кристалла (рис. 1),

$$\begin{aligned} \vec{s}_0 &= \sin(\chi + \theta_0)\,\vec{n} - \cos(\chi + \theta_0)\,\vec{t}, \\ \vec{s}_h &= \sin(\chi - \theta_0)\,\vec{n} - \cos(\chi - \theta_0)\,\vec{t}. \end{aligned} \tag{3}$$

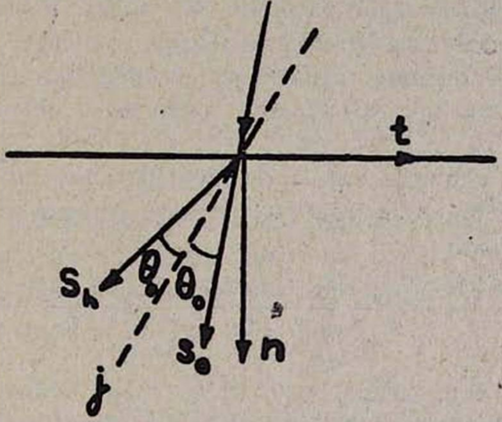

Рис. 1.

С помощью (3) и (1) имеем

$$\begin{aligned} \vec{S}/|\vec{S}| = \frac{e^{-\bar{\sigma} z}}{2\,\mathrm{ch}^2 v_r} \Big\{ &\Big[\mathrm{ch}(2v_r + kz) - \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right) \cos 2v_i \Big] \sin(\chi + \theta_0)\,\vec{n} + \\ &+ |G|^2 \Big[\mathrm{ch}\, kz - \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right) \Big] \sin(\chi - \theta_0)\,\vec{n} - \\ &- \Big[\mathrm{ch}(2v_r + kz) - \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right) \cos 2v_i \Big] \cos(\chi + \theta_0)\,\vec{t} - \\ &- |G|^2 \Big[\mathrm{ch}\, kz - \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right) \Big] \cos(\chi - \theta_0)\,\vec{t}, \end{aligned} \tag{4}$$

откуда

$$S_n = \frac{e^{-\bar{\sigma} z}}{2\,\mathrm{ch}^2 v_r} 2\sin(\chi+\theta_0)\left[\mathrm{ch}(v_r+kz)\,\mathrm{ch}\,v_r - \sin^2 v_i \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right)\right],$$

$$S_t = -\frac{e^{-\bar{\sigma} z}}{2\,\mathrm{ch}^2 v_r}\Big\{\mathrm{ch}(v_r+kz)\cos(\chi+\theta_0) + \mathrm{ch}\,kz\sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ctg}(\chi-\theta_0) -$$

$$-\cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right)\cos 2v_i\cos(\chi+\theta_0) - \sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ctg}(\chi-\theta_0)]\Big\},$$

где S_n и S_t—компоненты $\vec{S}/|\vec{S}_0|$ в направлении единичных векторов $\vec{n}$ и $\vec{t}$ соответственно.

Как видно из (5), каждая из компонент имеет члены двух типов: периодические с периодом Δ $\left(\text{члены, содержащие выражение } \cos\left(\frac{2\pi z}{\Delta}\right)\right)$ и непериодические.

Обычно $v_i \ll 1$ (см. [1]) , так что без существенной ошибки можем в выражениях (5) подставить $\cos 2v_i \approx 1$, $\sin^2 v_i \simeq 0$. Тогда из (5) получается, что периодическая компонента, как и при симметричном прохождении, направлена по поверхности кристалла.

На достаточно большой глубине $(\bar{\sigma} r \simeq 10)$ периодический член в (5), обусловленный взаимодействием двух волновых полей, затухает из-за быстрого поглощения одного из полей (поле (1)). Так что направление потока энергии с большой точностью описывается первым членом в (5).

Пренебрегая периодическим членом, мы получим выражения для тангенса угла между направлением среднего потока и нормалью к поверхности кристалла:

$$\frac{S_t}{S_n} = \mathrm{tg}\,\varphi = -\frac{\mathrm{ch}(2v_r+kz)\cos(\chi+\theta_0)+\sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ctg}(\chi-\theta_0)\,\mathrm{ch}\,kz}{2\sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ch}(2v_r+kr)\,\mathrm{ch}\,v_r}. \tag{6}$$

Интегрируя по z в пределах от 0 до z, после некоторых преобразований для огибающей направлений среднего потока, касательная к которой в каждой точке дает направление среднего потока в этой точке, получим

$$f(z) = \frac{\mathrm{th}\,v_r}{2k}\ln\left[\frac{\mathrm{ch}(v_r+kz)}{\mathrm{ch}\,v_r}\right]\mathrm{ctg}(\chi-\theta_0) - \mathrm{ctg}(\chi+\theta_0)] -$$

$$-\left(\frac{1}{2}\right)[\mathrm{ctg}(\chi+\theta_0)+\mathrm{ctg}(\chi-\theta_0)]\,z. \tag{7}$$

Нетрудно убедиться, что из (7) можно получить и выражение для симметричного случая. Действительно, подставив в (7) $\chi = \pi/2$, получим

$$f(z) = \frac{\mathrm{th}\,v_r}{M}\ln\left[\frac{\mathrm{ch}(v_r+kz)}{\mathrm{ch}\,v_r}\right]\mathrm{tg}\,\theta_0.$$

Из последнего видно, что при $p_r = v_r = 0$ $f(z) = 0$, т. е. поток параллелен отражающим плоскостям.

В рассматриваемом случае асимметричного прохождения, когда $p_r = v_r = 0$ (угол падения Вульфа-Брегга), из (7) получим

$$f(z) = -\frac{1}{2}[\mathrm{ctg}\,(\chi+\theta_0) + \mathrm{ctg}\,\chi + \theta_0)]\,z, \tag{9}$$

откуда видно, что поток энергии параллелен прямой, направление которой зависит от χ и θ_0, т. е. с изменением угла Вульфа-Брегга и угла между плоскостями и поверхностью кристалла изменяется угол между направлением потока энергии и отражающими плоскостями.

Непоглощающий кристалл

Сначала мы рассмотрим кристалл с незначительным поглощением. Подставив в выражение (6) $\mu = \bar{\sigma} = k = 0$, получим

$$\mathrm{tg}\,\varphi = -\frac{\mathrm{ch}\,2v_r \cos(\chi+\theta_0) + \sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ctg}\,(\chi-\theta_0)}{2\sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ch}^2 v_r}. \tag{10}$$

Из последнего для линий среднего потока получаем

$$f(z) = -\frac{(\mathrm{ch}^2 v_r + \mathrm{sh}^2 v_r)\cos(\chi+\theta_0) + \sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ctg}\,(\chi-\theta_0)}{2\sin(\chi+\theta_0)\,\mathrm{ch}^2 v_r}\cdot z. \tag{11}$$

Обозначая $\mathrm{sh}\,v_r = p_r$, $\mathrm{ch}\,v_r = (p_r^2+1)^{1/2}$, имеем

$$f(z) = -\frac{\mathrm{ctg}\,(\chi+\theta_0)(2p_r^2+1) + \mathrm{ctg}\,(\chi-\theta_0)}{2(p_r^2+1)}\cdot z. \tag{12}$$

Первым долгом мы рассмотрим предельные случаи.

1) Допустим, $p_r = 0$ (что соответствует Вульф-Брегговскому углу падения); тогда из (12) получим

$$f(z) = -\frac{1}{2}[\mathrm{ctg}\,(\chi+\theta_0) + \mathrm{ctg}\,(\chi-\theta_0)]\,z, \tag{13}$$

откуда видно, что при Вульф-Брегговском угле падения линии потока энергии в поглощающих и непоглощающих кристаллах совпадают (см. рис. 2 и 3).

2) Допустим, $|p_r| \to \infty$ (угол падения намного отличается от угла Вульфа-Брегга); тогда из (12) получим

$$f(z) = -\mathrm{ctg}\,(\chi+\theta_0)\cdot z. \tag{14}$$

Нетрудно убедиться в том, что прямая (14) совпадает с направлением падения, т. е. с направлением $\vec{s}_0$. Следовательно, в этом случае энергия течет только в направлении преломленной волны.

В промежуточных случаях направление среднего потока расположено между прямыми (13) и (14).

На рис. 2 показаны кривые $f(z)$ для каменной соли в случае отражения от плоскостей (200) для излучения Cu K_α ($\chi = 54°\,42'$, $\theta_0 = 15°50'$).

Как видно из рисунка, линия среднего потока совпадает с отражающими плоскостями, когда $p_r \simeq 1/2$, а при $p_r = 0$ линия потока составляет с плоскостями угол, примерно равный 3°17′.

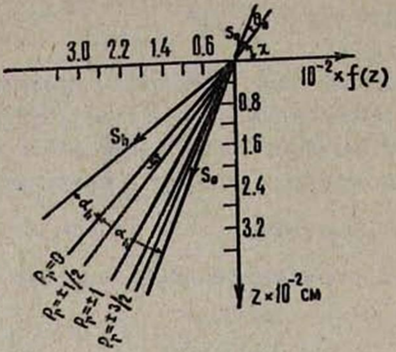

Рис. 2.

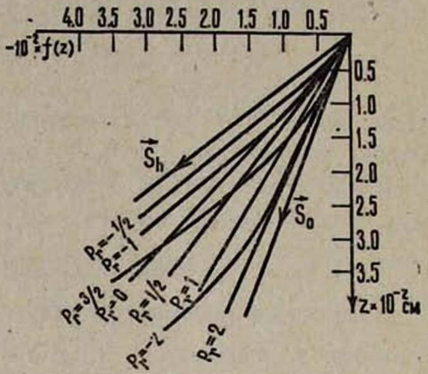

Рис. 3.

Поглощающий кристалл

Теперь рассмотрим случай поглощающего кристалла ($\mu \neq 0$). Перепишем (7) в следующем виде

$$f(z) = \frac{p_r}{2(p_r^2+1)^{1/2} k} \ln\left[\frac{\operatorname{ch}(v_r + kz)}{\operatorname{ch} v_r}\right]\left[\operatorname{ctg}(\chi - \theta_0) - \operatorname{ctg}(\chi + \theta_0)\right] - \tag{15}$$

$$- \frac{1}{2}\left[\operatorname{ctg}(\chi - \theta_0) + \operatorname{ctg}(\chi + \theta_0)\right] \cdot z$$

и опять рассмотрим предельные случаи.

Случай $p_r = 0$ или $f(z) = Az$ нами уже рассмотрен. Как видно, в этом случае направление среднего потока не зависит от глубины проникновения в кристалле (от z) и энергия течет по прямой.

В случаях $p_r \to \pm\infty$ соответственно получаются следующие выражения:

$f(z) = -\operatorname{ctg}(\chi + \theta_0) z$ (направлено по $\vec{s}_0$),

$f(z) = -\operatorname{ctg}(\chi - \theta_0) z$ (направлено по $\vec{s}_n$).

Рассмотрим поведение линий среднего потока в зависимости от z, т. е. глубины проникновения в кристалле.

Как видно из (15), $f(z)$ пересекает прямую Az на глубине

$$z_0 = \frac{2|v_r|}{k},$$

а на глубине, равной половине этой величины, параллельна Az. В последних точках ее численное значение равно

$$f(z^\circ/2) = \frac{p_r}{2(p_r^2+1)^{1/2}k}\ln[(p_r^2+1)^{1/2}][\operatorname{ctg}(\chi-\theta_0)-\operatorname{ctg}(\chi+\theta_0)]+Az.$$

При $z \to \infty$

$$f(z) = -\operatorname{ctg}(\chi+\theta_0)z \qquad \text{если } p_r > 0,$$

$$f(z) = -\operatorname{ctg}(\chi-\theta_0)z \qquad \text{если } p_r < 0.$$

Таким образом, в бесконечно толстых кристаллах направление среднего потока совпадает с направлением $\vec{s}_0$ при $p_r>0$ и с направлением $\vec{s}_h$ при $P_r<0$. Это есть следствие аномального поглощения, так как в зависимости от знака p_r одно из полей поглощается быстрее, чем второе.

Допустим, $z \to 0$. Из (7) вытекает

$$f(z) = -\frac{(2p_r^2+1)\operatorname{ctg}(\chi+\theta_0)+\operatorname{ctg}(\chi-\theta_0)}{2(p_r^2+1)},$$

что совпадает с направлением среднего потока для непоглощающих кристаллов (12).

На рис. 3 показаны кривые $f(z)$ для отражения (200) каменной соли, когда плоскости (100) параллельны поверхности кристалла ($\chi=54°42'$, $\theta_0=15°50'$, $\mu=160$ *см*$^{-1}$, излучение CuK_α, см. [1]).

Асимметрия кривых

Интересно проследить зависимость линий потока энергии от разных сторон отражающих плоскостей. Как видно из (12), в случае непоглощающих кристаллов для плоскостей (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, ширины областей изменения направления потока энергии в зависимости от направления падения не одинаковы. В случае отражения от плоскостей (hkl) при изменении параметра p_r от 0 до ∞ направление потока энергии изменяется от прямой Az до $\vec{s}_0$. А при отражении от $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ эти направления меняются соответственно от Az до $\vec{s}_h$. В последнем случае $\vec{s}_h$ совпадает с направлением падения (см. рис. 2). Этот интересный эффект нетрудно исследовать с помощью дисперсионных поверхностей. Действительно, как видно из рис. 4а, при изменении p_r от 0 до ∞ направление потока энергии меняется от направления вектора $\vec{T}$ до $\vec{s}_0$. А при отражении от плоскостей (hkl) оно меняется от направления $\vec{T}$ до $\vec{s}_h$ (см. рис. 4в). Как видно из этих же рисунков, углы между направлениями $(\widehat{\vec{T}\,\vec{s}_0})$ и $(\widehat{\vec{T}\,\vec{s}_h})$ не равны и отличаются на угол между отражающими плоскостями и направлениями потока при $p_r=0$. В рассматриваемом случае ($\chi=54°42'$, $\theta_0=15°50'$, отражение (200), когда (100) параллелен к поверхности кристалла) этот угол равен примерно 3°17′.

Таким образом, с точки зрения направления потока энергии внутри кристалла разные стороны отражающих плоскостей не эквивалентны.

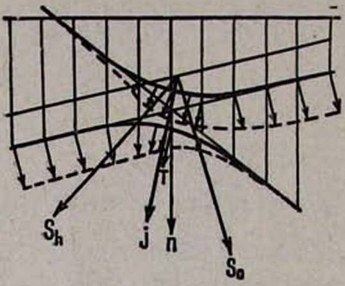

Рис. 4а.

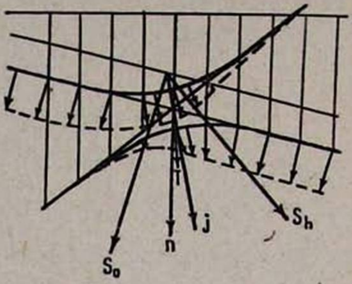

Рис. 4б.

И даже при $p_r = 0$ смещения направления потока энергии внутри кристалла относительно направления падения в случае отражения от плоскостей (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ значительно отличаются друг от друга.

В случае поглощающего кристалла при отражении от разных сторон отражающих плоскостей изгибы кривых потоков энергии разные. При отражении от плоскостей (hkl) пересечение кривых $f(z)$ потоков энергии для поглощающих и непоглощающих кристаллов происходит на больших глубинах (слабое поглощение), а при отражениях от $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ это пересечение происходит на меньших глубинах (сильное поглощение). И если учесть, что это пересечение означает переход от двухволнового к одноволновому потоку энергии, то этот переход для отражения $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ происходит быстрее, чем для (hkl) (см. рис. 5).

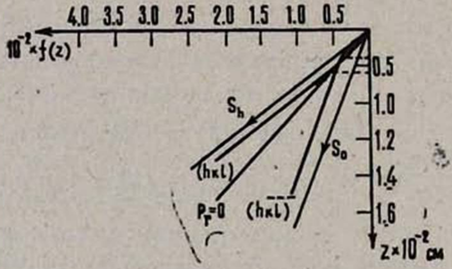

Рис. 5.

Так, например, в рассматриваемом нами случае каменной соли при отражении от плоскостей (hkl) для значений параметра $p_r = -1/2$, -1, $-3/2$ и -2 пересечение кривых потока энергии с прямой происходит соответственно на глубинах $z_0 = 0{,}6; 1{,}6; 3{,}2$ и $5{,}8 \times 10^{-2}$ *см*.

Эти пересечения при отражении от плоскостей $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ происходят соответственно на глубинах $z_0 = 0,48; 1,02; 1{,}6$ и $2{,}3 \times 10^{-2}$ *см*.

Ереванский государственный
университет

Поступила 12.XI.1971

ЛИТЕРАТУРА

1. *R. W. James.* Sol. state Phys., 15, 53 (1963).
2. *M. V. Laue.* Röntgenwellenfelder in Kristallen, Berlin, 1959.
3. *З. Г. Пинскер.* Кристаллография, 15, 658 (1970).

ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՀՈՍՔԸ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԱՍԻՄԵՏՐԻԿ ԱՆՑՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Կ. Գ. ԹՐՈՒՆԻ, Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ

Աշխատանքում տրված է էներգիայի հոսքի մանրամասն ուսումնասիրությունը ռենտգենյան ճառագայթների ասիմետրիկ անցման դեպքում։ Ցույց է տրված, որ Վուլֆ-Բրեգի անկման անկյան համար հոսքի ուղղությունը ընդհանուր դեպքում չի համընկնում անդրադարձնող հարթությունների հետ և նրանց միջև կազմված անկյունը կախված է անդրադարձնող հարթությունների ու բյուրեղի մակերևույթի և Վուլֆ-Բրեգի անկյունից։

Բացի դրանից հոսքի վարքը տարբեր է (ինչպես կլանող, այնպես էլ չկլանող բյուրեղների համար) կախված այն բանից, թե անդրադարձնող հարթությունների ո՞ր երեսից է տեղի ունենում անդրադարձումը։

ENERGY FLUX IN CRYSTALS IN THE CASE OF ASYMMETRICAL TRANSMISSION OF *X*-RAYS

K. G. TRUNI, P. H. BEZIRGANIAN

For the Bragg incidence angles in the case of asymmetrical transmission of *X*-rays, the directions of the average energy flux don't coincide with the reflecting planes, and only in the particular case of symmetrical transmission the energy flows along the reflecting planes.

In the case of asymmetrical transmission even for nonabsorbing crystals the deviations from the direction of incidence of the average energy flux are not the same. In the case of absorbing crystals the curvatures of the average energy flux curves are different for different sides of reflecting planes.