

ПРИБЛИЖЕНИЕ СФЕРИЧЕСКИХ РЕНТГЕНОВЫХ ВОЛН
В СЛУЧАЕ БРЭГГА

К. Г. ТРУНИ, Д. М. ВАРДАНЯН, П. А. БЕЗИРГАНЯН

Работа посвящена теории динамического рассеяния рентгеновых волн в случае Брэгга в приближении сферических волн. Показано, что в случае Брэгга также необходимо учитывать сферический характер падающей волны. Получены общие выражения кристаллических волновых полей при брэгговском отражении сферических волн от кристаллов конечной толщины. Как частный случай, получен вид волновых полей полубесконечного кристалла. Показано, что в случае Брэгга также должны существовать сферические волновые маятниковые полосы. Последние, однако, уже не имеют гиперболического вида, как в случае Лауэ. Обсуждены краевые эффекты в случае Брэгга.

Одним из исходных условий динамической теории рассеяния рентгеновых лучей в идеальных кристаллах [1,2] является падение на кристалл плоской монохроматической волны. Для объяснения V-образных маятниковых полос [3] на секционных снимках Като [4, 5] развил теорию для случая падающей сферической волны. Однако эта теория ограничивалась лишь случаем Лауэ. Нет сомнения, что в случае Брэгга, как и в случае Лауэ, также следует использовать приближение сферических волн, так как этот подход к явлениям рассеяния рентгеновых волн в идеальных кристаллах ближе к условиям эксперимента, чем приближение плоской падающей волны. Недавно Сака, Катагава, Като [9] развили динамическую теорию рассеяния рентгеновых лучей для полиэдрических кристаллов, исходя из предложенного ими метода описания отражения блоховских волн от поверхности.

В настоящей работе показано, что теорию сферических волн для брэгговских случаев можно развить и без применения этого метода. Итак, допустим, что на кристаллическую пластинку толщиной d падает монохроматическая сферическая волна

$$\Phi_s = \frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \quad (1)$$

По известному представлению сферической волны [4] в виде суперпозиции плоских монохроматических волн (1) можем переписать в виде

$$\Phi_s = \frac{i}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{k_z} dk_x dk_y. \quad (2)$$

Внутри кристалла для проходящей и отраженной волн имеем соответственно

$$\Phi_0 = \frac{i}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{k_z} \sum_{j=1}^2 D_0^{(j)}(\vec{r}) dk_x dk_y, \quad (3)$$

$$\Phi_h = \frac{i}{8\pi^2} \int \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k_z} \sum_{j=1}^2 D_h^{(j)}(\vec{r}) dk_x dk_y, \quad (4)$$

где $D_0^{(j)}(\vec{r})$ и $D_h^{(j)}(\vec{r})$ согласно обычной плосковолновой теории представляются в следующем виде:

$$D_0^{(j)}(\vec{r}) = \mp \frac{(s \pm \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{\mp iad \sqrt{s^2 - \beta^2}} e^{i \vec{h} \cdot \vec{r}}}{(s + \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{-iad \sqrt{s^2 - \beta^2}} - (s - \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{iad \sqrt{s^2 - \beta^2}}} \times \\ \times e^{i(k/2\gamma_0) \varphi_0 t_0} e^{ia t_0 (-s \pm \sqrt{s^2 - \beta^2})},$$

$$D_h^{(j)}(\vec{r}) = \pm \frac{(\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/2} (\varphi_h/\varphi_{\vec{h}})^{1/2} e^{\mp iad \sqrt{s^2 - \beta^2}} e^{i(\vec{h} + 2\pi \vec{R}_h) \cdot \vec{r}}}{(s + \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{-iad \sqrt{s^2 - \beta^2}} - (s - \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{iad \sqrt{s^2 - \beta^2}}} \times \\ \times e^{i(k/2\gamma_0) \varphi_0 t_0} e^{ia t_0 (-s \pm \sqrt{s^2 - \beta^2})}.$$

В этих формулах параметр s линейно зависит от смещения точного угла Брэгга и определяется следующим образом:

$$s = -k_x + \frac{k}{2} \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} + 1 \right) \frac{\varphi_0}{\sin 2\theta_B},$$

где θ_B — угол Брэгга, k_x — x -компонента волнового вектора $\vec{k}$; α — геометрический фактор, который дается выражением

$$\alpha = \frac{\sin 2\theta_B}{2|\gamma_h|},$$

β — структурный параметр брэгговского отражения

$$\beta = \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right)^{1/2} kC (\varphi_h \varphi_{\vec{h}})^{1/2} / \sin 2\theta_B;$$

φ_0 , φ_h и $\varphi_{\vec{h}}$ — Фурье-компоненты поляризуемости φ соответственно для отражений 0, h и $\vec{h}$; k — модуль вакуумного волнового вектора; $\gamma_0 = \cos(k_0^B n)$, $\gamma_h = \cos(k_h^B n)$, где $\vec{n}$ — внутренняя нормаль к входной поверхности, а $\vec{k}_0^B$ и $\vec{k}_h^B$ — волновые векторы соответственно падающей и отраженной под точным углом Брэгга волн. Понятно, что $\vec{k}_h^B = \vec{k}_0^B + 2\pi \vec{R}_h$, где $\vec{R}_h$ — вектор обратной решетки рассматриваемого отражения h . Величина

$$t_0 = (\vec{r} - \vec{r}_e) \cdot \vec{n}$$

определяет глубину рассматриваемой точки от входной поверхности кристалла, где $\vec{r}_e$ — радиус-вектор точки на входной поверхности, а C — поляризационный фактор, который определяется следующим образом:

$$C = \begin{cases} 1 & \text{при } \sigma\text{-поляризации,} \\ |\cos 2\theta_B| & \text{при } \pi\text{-поляризации;} \end{cases}$$

В рассматриваемом случае удобно выбрать ось z параллельной $\vec{k}_0^B$, а ось x перпендикулярной к $\vec{k}_0^B$, и пусть они лежат в плоскости отражения. Волновые поля рассматриваются в плоскости $y = 0$.

Сначала проинтегрируем (3) и (4) по k_y , что можно сделать методом перевала [4, 5, 10]. Здесь предполагается, что величину $\frac{1}{k_z}$ в

(3) и (4) можно заменить на $\frac{1}{k}$, что равносильно двухволновому приближению [5]. В таком случае переменная интегрирования k_y будет фигурировать в членах только в виде $k_z \cdot z = \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2} z$, так что интегрирование по k_y равносильно умножению на величину

$$\left(\frac{2\pi k}{r}\right)^{1/2} e^{-i\pi/4}.$$

Таким образом, волновые поля в кристалле можно записать в следующем виде:

$$\Phi_0 = i \left(\frac{1}{32 \pi^3 k r} \right)^{1/2} e^{-i \left(\frac{\pi}{4} - k z - P \right)} U_0, \quad (5)$$

$$\Phi_h = i \left(\frac{1}{32 \pi^3 k r} \right)^{1/2} e^{-i \left(\frac{\pi}{4} - k z - P - 2\pi \vec{R}_h \cdot \vec{r} \right)} U_h. \quad (6)$$

В выражениях (5) и (6) фаза P дается формулой

$$P = \frac{k\varphi_0}{2\gamma_0} \left[t_0 + \frac{x(\gamma_0 + |\gamma_h|)}{\sin 2\theta_B} \right],$$

а U_0 и U_h — интегральные факторы, равные соответственно

$$U_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^2 \frac{(-s \pm \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{-i(x+at_0)s \mp i\alpha(d-t_0)\sqrt{s^2 - \beta^2}} ds}{(s + \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{-i\alpha d \sqrt{s^2 - \beta^2}} - (s - \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{i\alpha d \sqrt{s^2 - \beta^2}}}, \quad (7)$$

$$U_h = \beta \left(\frac{\varphi_h}{\varphi_0} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^2 \frac{\pm e^{-i(x+at_0)s \mp i\alpha(d-t_0)\sqrt{s^2 - \beta^2}} ds}{(s + \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{-i\alpha d \sqrt{s^2 - \beta^2}} - (s - \sqrt{s^2 - \beta^2}) e^{i\alpha d \sqrt{s^2 - \beta^2}}}. \quad (8)$$

Интегрирование выражений (7) и (8) мы производим в общем случае поглощающего кристалла, когда β и s — комплексные величины. Эти интегралы вычисляются с помощью контурного интегрирования (контур показан на рис. 1). Предварительно разлагая в ряд Фурье знаменатель подынтегральных выражений (7) и (8), с помощью контурного интегрирования получаем

$$U_h = U_{h1} + U_{h2},$$

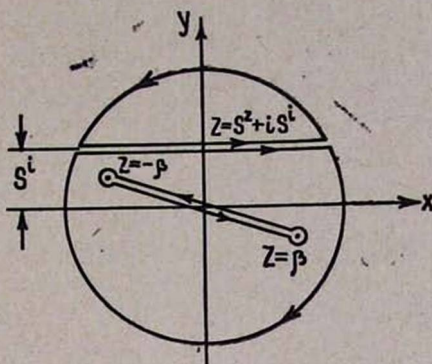


Рис. 1. Контуры интегрирования.

$$U_{h1} = \begin{cases} i (\gamma_0 / |\gamma_h|)^{1/2} \pi \beta (\varphi_h / \varphi_h)^{1/2} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^{m+1} \left(\frac{a_{2m}}{b_{2m}} \right)^{m+1/2} \times \\ \times \left[\left(\frac{a_{2m}}{b_{2m}} \right)^{1/2} J_{2(m+1)} (\beta \sqrt{a_{2m} \cdot b_{2m}}) + \left(\frac{b_{2m}}{a_{2m}} \right)^{1/2} \times \right. \\ \left. \times J_{2m} (\beta \sqrt{a_{2m} \cdot b_{2m}}) \right], \text{ если } a_{2m} \cdot b_{2m} > 0, \\ 0, \text{ если } a_{2m} \cdot b_{2m} < 0, \end{cases} \quad (9)$$

$$U_{h2} = \begin{cases} -i (\gamma_0 / |\gamma_h|)^{1/2} \pi \beta (\varphi_h / \varphi_h)^{1/2} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^{m+1} \left(\frac{c_{2(m+1)}}{d_{2(m+1)}} \right)^{m+1/2} \times \\ \times \left[\left(\frac{c_{2(m+1)}}{d_{2(m+1)}} \right)^{1/2} J_{2(m+1)} (\beta \sqrt{c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)}}) + \left(\frac{d_{2(m+1)}}{c_{2(m+1)}} \right)^{1/2} \times \right. \\ \left. \times J_{2m} (\beta \sqrt{d_{2(m+1)} \cdot c_{2(m+1)}}) \right], \text{ если } c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)} > 0, \\ 0, \text{ если } c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)} < 0, \end{cases} \quad (10)$$

где J_n — функция Бесселя n -го порядка,

$$\begin{aligned} a_{2m} &= x - 2mad, \quad c_{2(m+1)} = x - 2a[(m+1)d - t_0], \\ b_{2m} &= x + 2a(md + t_0), \quad d_{2(m+1)} = x + 2(m+1)ad. \end{aligned} \quad (11)$$

Для проходящей волны из очевидного соотношения

$$U_0 = \left\{ \frac{\partial}{\partial (iat_0)} + \frac{\partial}{\partial [i(x + at_0)]} \right\} \frac{U_h}{\beta (\varphi_h / \varphi_h)^{1/2} (\gamma_0 / |\gamma_h|)^{1/2}},$$

которое непосредственно вытекает из (7) и (8), получаем

$$U_0 = U_{01} + U_{02},$$

$$U_{01} = \begin{cases} \pi\beta \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^{m+1} \left(\frac{a_{2m}}{b_{2m}}\right)^{m+1} \left[\left(\frac{a_{2m}}{b_{2m}}\right)^{1/2} J_{2m+3}(\beta \sqrt{a_{2m} \cdot b_{2m}}) + \right. \\ \left. + \left(\frac{b_{2m}}{a_{2m}}\right)^{1/2} J_{2m+1}(\beta \sqrt{a_{2m} \cdot b_{2m}}) \right], & \text{если } a_{2m} \cdot b_{2m} > 0, \\ 0, & \text{если } a_{2m} \cdot b_{2m} < 0, \end{cases} \quad (12)$$

$$U_{02} = \begin{cases} -\pi\beta \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^{m+1} \left(\frac{c_{2(m+1)}}{d_{2(m+1)}}\right)^{m+1} \left[\left(\frac{c_{2(m+1)}}{d_{2(m+1)}}\right)^{1/2} \times \right. \\ \times J_{2m+3}(\beta \sqrt{c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)}}) + \\ \left. + \left(\frac{d_{2(m+1)}}{c_{2(m+1)}}\right)^{1/2} J_{2m+1}(\beta \sqrt{c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)}}) \right], & \text{если } c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)} > 0, \\ 0, & \text{если } c_{2(m+1)} \cdot d_{2(m+1)} < 0. \end{cases}$$

Рассмотрим сначала случай полубесконечного кристалла. Устремив в этих формулах d к бесконечности, легко получаем

$$U_h = U_{h1} = \begin{cases} i\pi\beta (\varphi_h/\varphi_h)^{1/2} (\gamma_0/\gamma_h)^{1/2} [J_0(\beta \sqrt{a_0 \cdot b_0}) + \\ + \frac{a_0}{b_0} J_2(\beta \sqrt{a_0 \cdot b_0})], & \text{если } x > 0, \\ 0, & \text{если } x < 0, \end{cases} \quad (13a)$$

$$U_{h2} \equiv 0,$$

где $a_0 = x$, $b_0 = x + 2at_0$.

Из (13a) видно, что в отличие от плосковолновой теории в случае сферических падающих волн в полубесконечном кристалле должны наблюдаться маятниковые полосы. Это и понятно, так как по сферической волновой теории полосы обусловлены взаимодействием волн, принадлежащих так называемым сопряженным волновым центрам на разных ветвях дисперсионных гипербол (волновые центры А и В на рис. 2), тогда как по плосковолновой теории маятниковые полосы — ре-

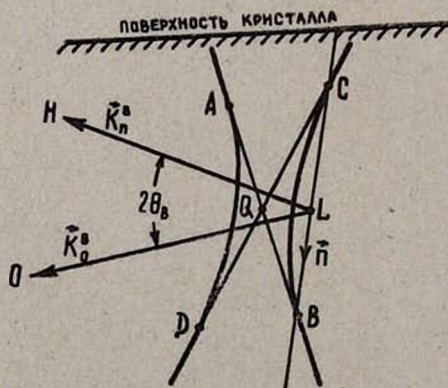


Рис. 2. Дисперсионная поверхность; Q — точка Лоренца, L — точка Лауэ.

зультат взаимодействия волн, принадлежащих волновым центрам на одной и той же ветви дисперсионных гипербол, связанных условием непрерывности тангенциальных компонент волновых векторов (волновые центры С и В на рис. 2), а в полубесконечном кристалле волны, исходящие из волновых центров С и сопряженных им центров D, отсутствуют, так как они возникают при отражении волн, исходящих из центров А и В, от выходной поверхности кристалла.

В отличие от случая Лауэ [3-5] эти полосы — уже не гиперболического вида, так как отраженная волна является суммой двух функций Бесселя от одного аргумента с разными коэффициентами. Вклад первой из них в общее волновое поле возрастает при приближении к следу прямопроходящей волны, тогда как вклад второй возрастает при приближении к входной поверхности кристалла.

В случае тонкого кристалла из-за многократных отражений от входной и выходной поверхностей волновые поля, согласно (9), (10) и (12), (13), представляются в виде суперпозиции цилиндрических волн, что наглядно видно из рис. 3. Соответственно этому маятниковые полосы представляют собой суперпозицию нескольких групп полос, обусловленных наложением многократно отраженных волн.

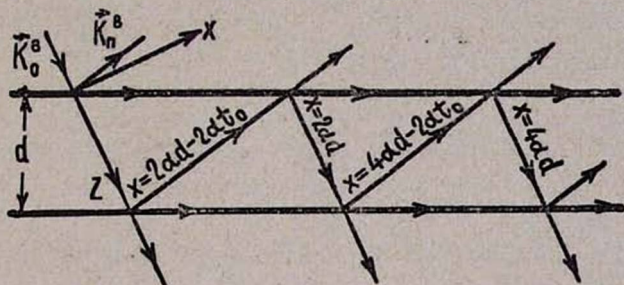


Рис. 3. Многократные отражения. Линии $x = 2mad$ параллельны $\vec{k}_0^B$, линии $x = 2mad - 2at_0$ параллельны $\vec{k}_h^B$.

В случае непоглощающих кристаллов на линиях $x = 2mad$ (см. рис. 3) интеграл (9) сингулярен, а интеграл (10) сингулярен на линиях $x = 2(m+1)ad - 2at_0$, т. е. на этих линиях волновое поле усилено. Это является аналогом краевого эффекта, обсужденного для случая Лауэ в работах [5, 8].

Ереванский государственный
университет

Поступила 2.IX.1972

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Von Laue. Röntgenstrahlinterferenzen, Akad. Verlag., Frankfurt, 1960.
2. R. W. James. The Dynamical Theory of X-Ray Diffraction in Solid State Physics, eds. E. Seitz and D. Turnbull, Academic Press, 1963, Vol. 15, § 37.

3. N. Kato, A. R. Lang. Acta Cryst., 12, 787 (1959).
4. N. Kato. Acta Cryst., 13, 349 (1960).
5. N. Kato. Acta Cryst., 14, 526, 627 (1961).
6. N. Kato. J. Appl. Phys., 39, 2225, 2231 (1968).
7. H. Wagner. Z. Phys., 146, 127 (1956).
8. N. Kato. Acta Cryst., 13, 1091 (1960).
9. H. Kato, T. Katahara, T. Saka. Кристаллография, 16, 1110 (1971).
10. А. Г. Свешников, А. Н. Тихонов. Теория функций комплексной переменной, Изд. Наука, М., 1970.

ՌԵՆՏԳԵՆՆԱՆ ԶԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԶՐՄԱՆ ՍՖԵՐԻԿ ԱՆԻՔԱՅԻՆ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ԲՐԵԳԻ ԴԵՊՖՈՒՄ

Կ. Գ. ԹՐՈՆԻ, Դ. Մ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ

Աշխատանքը նվիրված է ունեղենյան ճառագայթների դինամիկ ցրման սֆերիկ ալիքային տեսությանը Բրեգի դեպքում: Ցույց է տրված, որ Բրեգի դեպքում նույնպես անհրաժեշտ է հաշվի առնել ընկնող ալիքի սֆերիկ բնույթը: Ստացված են բյուրեղական ալիքային դաշտերի ընդհանուր արտահայտությունները վերջավոր հաստությամբ բյուրեղներից սֆերիկ ալիքների բրեգյան անդրադարձման դեպքում: Որպես մասնավոր դեպք այդ արտահայտություններից ստացված է մեկ կողմից սահմանափակ բյուրեղի ալիքային դաշտերի տեսքը: Ցույց է տրված, որ Բրեգի դեպքում եւս պետք է գոյություն ունենան սֆերիկ ալիքային ճոճանակային շերտեր: Վերջիններս, սակայն, այլևս հիպերբոլիկ տեսք չունեն, ինչպես Լաուեի դեպքում: Փննարկված են եզրային էֆեկտները Բրեգի դեպքում:

THE SPHERICAL X-RAY APPROXIMATION IN THE BRAGG CASE

K. G. TRUNI, D. M. VARDANYAN, P. H. BEZIRGANYAN

This paper deals with the dynamical scattering theory in the spherical wave approximation in the Bragg case. The necessity of taking into account also the character of the incident wave in the Bragg case is shown. General expressions of the crystalline wave fields at the Bragg reflection of the spherical waves from the crystal of finite thickness are obtained. As a particular case, the expressions for a semiinfinite crystal wave fields are obtained. It is shown that the spherical wave "Pendellosung" fringes must exist in the Bragg case too. These fringes, however, are not "hook-shaped" fringes as in the Laue case. The margin effects in the Bragg case are discussed.