

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С КОНЕЧНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТЬЮ ЦУГА

Л. В. ЛЕВОНЯН, К. Г. ТРУНИ

Рассмотрена задача дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с учетом конечной длительности когерентного излучения. В интегральной форме приведено наиболее общее выражение для амплитуды отраженной волны.

Теория дифракции рентгеновских пучков в кристаллах, основанная на уравнениях Такаги [1], определила повышенный интерес к динамическому рассеянию. Эта теория, применимая как к идеальным, так и деформированным кристаллам, позволила полностью решить проблему дифракции пространственно-неоднородных рентгеновских волновых пакетов в идеальных кристаллах [2], а также многочисленные задачи дифракции рентгеновских пучков в кристаллах с различными искажениями пространственной решетки [3] (дефекты упаковки, упругие деформации, некоторые виды дислокаций).

Однако предположение о строгой монохроматичности первичного излучения (бесконечно-протяженный дуг волн), лежащее в ее основе, практически не оправдано. Неучет конечной длительности когерентного излучения может привести в некоторых случаях к ошибочному истолкованию дифракционной картины.

Цель настоящей работы — общая постановка задачи дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с учетом конечной длительности когерентного излучения и нахождение решения этой задачи для любой формы пространственно-неоднородных рентгеновских пучков квазимонохроматического излучения.

Основные уравнения волнового поля

Предполагается, что падающее излучение представляет собой совокупность дугов со средней частотой $\bar{\nu}$ и эффективной спектральной шириной $\Delta\nu$, которая различна в зависимости от предварительной монохроматизации, но всегда ограничена значением естественной спектральной ширины $(\Delta\nu)_{\text{ест.}}$:

$$\Delta\nu \leq (\Delta\nu)_{\text{ест.}} \quad (1)$$

Условие квазимонохроматичности волнового цуга записывается в виде

$$\Delta\nu/\bar{\nu} \ll 1. \quad (2)$$

Волновые дуги характеризуются либо временем когерентности τ_0 , либо длиной когерентности l_0 :

$$l_0 = c\tau_0, \quad \tau_0 \sim (\Delta\nu)^{-1},$$

где c — скорость света в вакууме.

Вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ волнового поля в кристаллической среде с периодической по координатам эффективной поляризуемостью $\chi(\mathbf{r})$ удовлетворяет волновому уравнению

$$\Delta \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -\text{rot rot } (\chi \mathbf{D}). \quad (3)$$

Для деформированного кристалла поляризуемость представляется фурье-рядом вида [1]

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}} e^{-2\pi i (\mathbf{g}\mathbf{r} - \mathbf{g}\mathbf{u})}, \quad (4)$$

где $\mathbf{g}$ — вектор обратной решетки кристалла, $\mathbf{u}$ — вектор локального смещения атома в деформированном кристалле.

Для квазимонохроматического излучения, в отличие от случая строго-монохроматического излучения, решение уравнения (3) можно представить в виде модулированных не только по координатам, но и по времени блоховских волн:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{g}} \mathbf{D}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, t) e^{-2\pi i (\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\mathbf{r} - \mathbf{g}\mathbf{u} - \bar{\nu}t)}, \quad (5)$$

где $\mathbf{k}_{\mathbf{g}}$ — волновые векторы, соответствующие векторам обратной решетки $\mathbf{g}$ и связанные с волновым вектором $\mathbf{k}_0$ соотношением

$$\mathbf{k}_{\mathbf{g}} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}, \quad |\mathbf{k}_0| = \frac{\bar{\nu}}{c} n,$$

где n — средний показатель преломления кристалла.

Предполагается, что квазиамплитуды $\mathbf{D}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, t)$ в (5) являются макроскопическими функциями координат и в областях порядка размеров элементарной ячейки кристалла изменяются незначительно. Как функции времени $\mathbf{D}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, t)$, согласно условию (2), в любом интервале, малом по сравнению со временем когерентности τ_0 , изменяются сравнительно мало. Так как длина когерентности характеристического рентгеновского излучения есть величина порядка $(l_0)_{\text{ест.}} \sim 10^{-5} + 10^{-6}$ см [4] и как минимум на два порядка превышает размеры элементарной ячейки кристалла, то с учетом (1) условие макроскопического изменения амплитуд $\mathbf{D}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}, t)$ в областях, малых по сравнению с l_0 , не нарушается. Поэтому подставляя выражения (4) и (5) в уравнение (3) и пренебрегая членами второго порядка малости и выше, получаем

$$\sum_{\mathbf{g}} \left\{ (\mathbf{k}'_{\mathbf{g}} \cdot \text{grad}) \mathbf{D}_{\mathbf{g}} + i\pi (\bar{k}^2 - k_{\mathbf{g}}'^2) \mathbf{D}_{\mathbf{g}} + i\pi k_{\mathbf{g}}'^2 \sum_{\mathbf{g}'} \chi_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'} [\mathbf{D}_{\mathbf{g}'}]_{\mathbf{g}} + \right. \\ \left. + \frac{\bar{k}}{c} \frac{\partial \mathbf{D}_{\mathbf{g}}}{\partial t} \right\} e^{-2\pi i (\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\mathbf{r} - \mathbf{g}\mathbf{u})} = 0, \quad (6)$$

где $\mathbf{k}'_{\mathbf{g}} = \mathbf{k}_{\mathbf{g}} - \text{grad}(\mathbf{g}\mathbf{u})$, $\bar{k}$ — среднее значение волнового вектора пакета в вакууме, $\bar{k} = \bar{\nu}/c$, $[\mathbf{D}_{\mathbf{g}'}]_{\mathbf{g}}$ — компонента $\mathbf{D}_{\mathbf{g}'}$, нормальная $\mathbf{k}_{\mathbf{g}}$.

Умножив обе части уравнения (6) на $\exp[2\pi i(\mathbf{k}_h \mathbf{r} - h\omega)]$ и проинтегрировав по объему элементарной ячейки кристалла с учетом макроскопического изменения D_g , получим

$$(\mathbf{s}_h \cdot \text{grad}) D_h + \frac{1}{c} \frac{\partial D_h}{\partial t} = 2\pi i \bar{k} \beta_h D_h - i\pi \bar{k} \sum_{h' \neq h} \chi_{h-h'} [D_{h'}]_h, \quad (7)$$

где $\mathbf{s}_h$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{k}_h$, β_h — параметр, определяющий локальное отклонение падающего пучка от условия Брэгга,

$$\beta_h = [k_h'^2 - (n\bar{k})^2]/(2\bar{k}^2).$$

Система дифференциальных уравнений (7) и есть система основных уравнений для нахождения амплитуд D_h для квазимонохроматического волнового поля.

Решение основных уравнений

В двухволновом приближении из уравнений (7) получаем

$$(\mathbf{s}_0 \cdot \text{grad}) \psi_0 + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = -i\pi \bar{k} C \chi_h \psi_h, \quad (8)$$

$$(\mathbf{s}_h \cdot \text{grad}) \psi_h + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi_h}{\partial t} = -i\pi \bar{k} C \chi_h \psi_0 - 2\pi i \bar{k} \beta_h \psi_h,$$

где ψ_0 и ψ_h — скалярные компоненты D_0 и D_h для двух независимых направлений поляризации, C — фактор поляризации, равный 1 и $\cos 2\theta$ (θ — угол Брэгга) соответственно для σ - и π -поляризаций.

Применяя интегральное преобразование Лапласа

$$F_{0,h}(\mathbf{s}_0; \mathbf{s}_h, p) = \int_0^\infty e^{-pt} \psi_{0,h}(\mathbf{s}_0; \mathbf{s}_h, t) dt, \quad (9)$$

из системы уравнений (8) с нулевыми начальными условиями* получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_0}{\partial s_0} + \frac{p}{c} F_0 &= -i\pi \bar{k} C \chi_h F_h, \\ \frac{\partial F_h}{\partial s_h} + \frac{p}{c} F_h &= -i\pi \bar{k} C \chi_h F_0 + 2i\pi \bar{k} \beta_h F_h. \end{aligned} \quad (10)$$

В (10) материальные константы заменены их значениями при $\bar{k} = \sqrt{\epsilon}/c$.

Вместо F_h введем функцию

$$F'_h = e^{\frac{p}{c}(s_0 + s_h)} F_h.$$

* Это ограничение не нарушает общности результатов и приводит лишь к неопределенности решений в начальный момент времени [5].

Из (10) для F'_h получаем уравнение

$$\frac{\partial^2 F'_h}{\partial s_0 \partial s_h} - 2\pi i \bar{k} \beta_h \frac{\partial F'_h}{\partial s_0} + \left(\pi^2 \bar{k}^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} - 2\pi i \bar{k} \frac{\partial \beta_h}{\partial s_0} \right) F'_h = 0. \quad (11)$$

Общее решение дифференциального уравнения (11) в рассматриваемой точке с координатами (s_0^0, s_h^0) с помощью функций Римана V_h записывается в интегральном виде [6]

$$F'_h(s_0^0, s_h^0, p) = -i\pi \bar{k} C \chi_h \int_{s_0 = -L s_h} \left[V_h(s_0, s_h; s_0^0, s_h^0) e^{\frac{p}{c}(s_0 + s_h)} F_t(s_0, s_h, p) \right] ds_h, \quad (12)$$

где интегрирование проводится по участку входной поверхности кристалла, образованному пересечением характеристик, проведенных из точки наблюдения, с входной поверхностью кристалла, уравнение которой есть $s_0 = -b s_h$, $b = \gamma_h / \gamma_0$, где γ_0 и γ_h — соответственно направляющие косинусы s_0 и s_h , $F_t(s_0, s_h, p)$ — изображение амплитуды падающей волны $\psi_i(s_0, s_h, t)$.

Функция V_h для уравнения (11) удовлетворяет сопряженному уравнению

$$\frac{\partial^2 V_h}{\partial s_0 \partial s_h} + 2\pi i \bar{k} \frac{\partial (\beta_h V_h)}{\partial s_0} + \left(\pi^2 \bar{k}^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} - 2\pi i \bar{k} \frac{\partial \beta_h}{\partial s_0} \right) V_h = 0.$$

Аналитический вид функции V_h известен для ряда случаев. Например, для идеального кристалла при геометрии Лауэ V_h имеет вид

$$V_h = \exp[-2\pi i \bar{k} \beta_h (s_h - s_h^0)] J_0 [2\pi \bar{k} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} \sqrt{(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0)}],$$

а при геометрии Брэгга—

$$V_h = \exp[-2\pi i \bar{k} \beta_h (s_h - s_h^0)] \left\{ J_0 [2\pi \bar{k} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} \sqrt{(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0)}] + \right. \\ \left. + b^{-1} \frac{s_0 - s_0^0}{s_h - s_h^0} J_2 [2\pi \bar{k} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} \sqrt{(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0)}] \right\},$$

где J_0 и J_2 — функции Бесселя нулевого и второго порядка.

Для кристалла с квадратичным полем деформации локальное отклонение от условия Брэгга определяется соотношением

$$2\pi i \bar{k} \beta_h = q s_0 + \text{const}$$

и в случае Лауэ V_h выражается следующим образом:

$$V_h = \exp[-q s_0^0 (s_h - s_h^0)] F \left[-\frac{\pi^2 \bar{k}^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}{q}, 1, q(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0) \right],$$

а при геометрии Брэгга—

$$V_h = \exp[-qs_0^0(s_h - s_h^0)] \sum_{n=0}^{\infty} A_{2n}(s_0^0 - s_0)^{2n} \times \\ \times F\left[-\frac{\pi^2 k^2 C^2 \lambda_h \lambda_h}{q}, 2n+1, q(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0)\right],$$

где $F(a, c, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция, а коэффициенты A_{2n} удовлетворяют рекуррентным соотношениям [7].

Выражение для определения амплитуды отраженной волны получается из (12) с помощью обратного преобразования Лапласа

$$\psi_h(s_0^0; s_h^0, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{p\left(t - \frac{s_0^0 + s_h^0}{c}\right)} F'_h(s_0^0; s_h^0, p) dp. \quad (13)$$

Решение (13) является интегральной формулировкой принципа Гюйгенса—Френеля для дифракции пространственно-временных неоднородных рентгеновских пучков. При известной функции Римана оно позволяет полностью решить проблему динамического рассеяния квазимонохроматических рентгеновских волновых пакетов с произвольной пространственной и временной структурой как для идеальных, так и деформированных кристаллов. Подробное рассмотрение с применением развитой здесь теории к некоторым конкретным задачам будет приведено в последующих работах. Приведем лишь некоторые качественные результаты, полученные этим методом. Рассмотрение в случае Лауэ явления маятникового эффекта в прозрачном кристалле выявило существенную зависимость контраста этого интерференционного явления от длительности когерентного излучения. Спадание контраста зависит от длительности когерентного излучения и оно тем больше, чем меньше длительность. В случае Брэгга для прозрачного полубесконечного кристалла конечная длительность когерентного излучения приводит к уменьшению максимума с одновременным увеличением полуширины кривой отражения.

Авторы выражают благодарность проф. П. А. Безирганяну за постановку задачи и ценные обсуждения.

Ереванский государственный
университет

Поступила 10.VII.1977

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Takagi. J. Phys. Soc. Japan, 26, 1239 (1969).
2. В. Л. Инденбом, Ф. Н. Чуховский. УФН, 107, 229 (1972).
3. A. Authier, D. Simon. Acta Cryst., A24, 517 (1968).
F. Balibar, A. Authier. Phys. Stat. Sol., 21, 413 (1967).
A. Afanasev, V. Kon. Acta Cryst., A27, 421 (1971).
F. Chukhovski, A. Sctolberg. Phys. Stat. Sol., 41, 815 (1970).
4. А. В. Колпаков, Р. Н. Кузьмин. ДАН СССР, 180, 63 (1968).

5. Г. Деч. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования, Изд. Наука, М., 1971.
6. С. А. Соболев. Уравнения математической физики, Изд. Наука, М., 1966.
7. П. В. Петрашень. ФТТ, 15, 3131 (1973).

ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՎԵՐՋԱՎՈՐ ՏԵՎՈՂՈՒԹՅԱՄԲ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ
ՀԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՑՈՒԳԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ՑՐՄԱՆ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆ

Լ. Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Կ. Գ. ԹՐՈՒՆԻ

Քննարկված է բյուրեղներում ունեղենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի խնդիրը կոհերենտ ճառագայթման տեղումբյան վերջավոր լինելու հաշվառմամբ: Անդրադարձած ալիքի ամպլիտուդի համար բերված է ինտեգրալ տեսքով ընդհանուր արտահայտություն:

THE DYNAMICAL THEORY OF SCATTERING OF A FINITE
LENGTH X-RAY WAVE TRAIN IN CRYSTALS

L. V. LEVONYAN, K. G. TRUNI

The problem of the diffraction of a finite length X-ray wave train is considered. The most general expression for the diffracted wave amplitude in the integral form is obtained.