Изв. АН Армянской ССР, Физика, 14, 253—260 (1979)

К ВОПРОСУ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С КОНЕЧНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТЬЮ ЦУГА В СОВЕРШЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Л. В. ЛЕВОНЯН, К. Г. ТРУНИ

Рассматривается дифракция рентгеновских лучей в совершенных кристаллах в плосковолновом приближении как в случае Лауэ, так и в случае Брэгга с учетом конечности длительности когерентного излучения падающего пучка.

В работе [1] динамическая теория дифракции рентгеновских лучей развита для случая падающего излучения в виде волнового цуга конечной длины. В настоящей работе исследуется решение полученных в [1] основных уравнений волнового поля*

$$(\mathbf{s}_0\cdot \operatorname{grad})\,\psi_0+\frac{1}{c}\,\partial\psi_0/\partial t=-\,i\pi\bar{k}\,C\chi_{\bar{h}}\,\psi_h,$$
$$(\mathbf{s}_h\cdot \operatorname{grad})\,\psi_h+\frac{1}{c}\,\partial\psi_h/\partial t=-\,i\pi\bar{k}\,C\chi_h\psi_0-2\,\pi i\bar{k}\,\beta_h\psi_h \tag{1}$$

как в случае Лауэ, так и в случае Брэгга, когда падающее излучение представляет собой плосковолновой цуг. Так как при брэгговской дифракции кристалл пропускает некоторый частотный интервал, который обычно уже, чем эффективная спектральная ширина характеристического рентгеновского излучения [2], то плосковолновое приближение достигается применением асимметричных монохроматоров [3].

Согласно [1], решение (1) для амплитуды отраженной волны ψ_h в точке наблюдения с координатами $(s_0^0;\ s_h^0)$ и началом координат в произвольной точке на входной поверхности кристалла записывается в виде

$$\psi_h(s_0^0;\,s_h^0,\,t)=-\frac{\bar{k}C\chi_h}{2}\int\limits_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty}\exp\left[p\left(t-\frac{s_0^0+s_h^0}{c}\right)\right]\left\{\int\limits_{AB}\left[V_h(s_0;\,s_h,\,s_0^0;\,s_h^0)\times\right.\right.$$
$$\left.\left.\times\exp\left[\frac{p}{c}(s_0+s_h)\right]F_i(s_0;\ s_h,\ p)\right]_{s_0=-bs_h}ds_h\right\}dp, \tag{2}$$

где $V_h(s_0;\ s_h,\ s_0^0;\ s_h^0)$ — соответствующая функция Римана, $F_i(s_0;\ s_h,\ p)$ — преобразование Лапласа амплитуды падающей волны $\psi_i(s_0;\ s_h,\ t)$.

Пусть волновой фронт падающего цуга пересекает точку 0 в момент времени t_0. Предполагается также, что все волновые цуги идентичны, имеют длительность τ_0 (время когерентности) и распространяются в направ-

---

* Используемые обозначения те же, что и в работе [1].

лении s_0. Тогда амплитуда цуга, как функция времени, запишется в виде

$$\psi_i(t) = A\left(\frac{t-t_0}{\tau_0}\right)\theta(t-t_0)\,\theta(\tau_0-t+t_0), \tag{3}$$

где $\theta(\tau)$ — ступенчатая функция, а функция $A(\tau)$ различна для разных видов цугов, например,

$$A(\tau) = A_0, \tag{4a}$$

когда в течение интервала времени τ_0 амплитуда цуга постоянна,

$$A(\tau) = A_0 e^{-\tau}, \tag{4б}$$

когда в интервале τ_0 амплитуда цуга экспоненциально затухает.

В точке с координатами $(s_0;\ s_h)$ (3) примет вид

$$\psi_i(s_0;\ s_h,\ t) = A\left(\frac{t-t_0-t_1}{\tau_0}\right)\theta(t-t_0-t_1)\,\theta(\tau_0-t+t_0+t_1), \tag{5}$$

где $ct_1 = s_0 + s_h\cos 2\theta$ — расстояние точки $(s_0;\ s_h)$ от волнового фронта в момент пересечения последним поверхности кристалла в точке 0.

Преобразование Лапласа $F_i(s_0;\ s_h,\ p)$ функции $\psi_i(s_0;\ s_h,\ t)$ для рассмотренных конкретных случаев соответственно будет

$$F_i(s_0;\ s_h,\ p) = A_0\frac{1-e^{-\tau_0 p}}{p}\exp[-p(t_0+t_1)], \tag{6a}$$

$$F_i(s_0;\ s_h,\ p) = A_0\frac{1-e^{-\left(p+\frac{1}{\tau_0}\right)\tau_0}}{p+\frac{1}{\tau_0}}\exp[-p(t_0+t_1)]. \tag{6б}$$

Рассмотрим в отдельности решение (2) в случаях Лауэ и Брэгга.

Решение в случае Лауэ

Соответствующая функция Римана имеет в этом случае вид [4]

$$V_h(s_0;s_h,\ s_0^0;\ s_h^0) = \exp[-2\pi i\bar{k}\beta_h(s_h-s_h^0)]\times$$
$$\times J_0[2\pi\bar{k}C(\chi_h\chi_{\bar{h}})^{1/2}\sqrt{(s_0-s_0^0)(s_h-s_h^0)}]. \tag{7}$$

Подставляя (7) и (6а, б) в (2), интегрируя по s_h в пределах от s_h^0 до $-s_0^0/b$ и применяя теорему о свертке [5], получаем

$$\psi_h(s_0^0;\ s_h^0,\ t) = \frac{i\pi\bar{\nu}C\chi_h}{2\sin^2\theta}A_0\int\exp\left(\frac{i\pi\bar{\nu}\beta_h}{\sin^2\theta}\tau\right)J_0\left[\frac{\pi\bar{\nu}C(\chi_h\chi_{\bar{h}})^{1/2}}{\sin^2\theta}\times\right.$$
$$\left.\times\left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right)^{1/2}\sqrt{\tau(\tau_d-\tau)}\right]\theta(\tau_d-\tau)\,\theta(\tau)\,\theta(t-t_0-t_1-\tau)\,\theta(\tau-t+t_0+t_1+\tau_0)\,d\tau. \tag{8a}$$

$$\psi_h(s_0^0;\ s_h^0,\ t) = \frac{i\pi\bar{\nu}C\chi_h A_0}{2\sin^2\theta}\int\exp\left(\frac{i\pi\bar{\nu}\beta_h}{\sin^2\theta}\tau-\frac{t-t_0-t_1-\tau}{\tau_0}\right)\times$$

$$\times J_0\left[\left(\frac{\pi\nu C(\chi_h\chi_{\bar h})}{\sin^2\theta}\right)^{1/2}\left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right)^{1/2}\sqrt{\tau(\tau_d-\tau)}\right]\times$$

$$\times\,\theta(\tau_d-\tau)\,\theta(\tau)\,\theta(t-t_0-t_1-\tau)\,\theta(\tau-t+t_0+t_1+\tau_0)\,d\tau, \tag{8б}$$

где $c\tau_d = 2d\sin^2\theta/\gamma_h$ — максимальная разность ходов интерферирующих пучков, $d = s_0^0\gamma_0 + s_h^0\gamma_h$ — глубина рассматриваемой точки $(s_0^0;\ s_h^0)$ в кристалле.

Как видно из выражений (8*а*, *б*), пределы интегрирования в отличие от строго монохроматического случая зависят от времени и определяются произведениями θ-функций. $|\psi_h(s_0^0;\ s_h^0,\ t)|^2$ описывает мгновенное значение интенсивности, создаваемой одним волновым цугом, а за время наблюдения, которое значительно превышает интервал, имеющий в данном случае физический смысл масштаба времени (средний период $1/\nu$ и время когерентности $1/\Delta\nu$), нерегулярным образом через точку наблюдения проходит множество волновых цугов, испускаемых в различные моменты времени. Поэтому $|\psi_h(s_0^0;\ s_h^0,\ t)|^2$ следует усреднить по t_0:

$$I_h(s_0^0;\ s_h^0) = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_h(s_0^0;\ s_h^0,\ t)|^2\,dt. \tag{9}$$

Из (8*а*, *б*) и (9) видно, что I_h зависит только от глубины в кристалле, и линии равной интенсивности волнового поля, как и для строго монохроматической плоской волны, есть прямые, параллельные поверхности входа кристалла.

Рассмотрим зависимость интенсивности I_h от глубины d в кристалле для разных значений длины цуга. Для симметричного отражения от семейства плоскостей (111) кремния при излучении CuK_α дифракционная полуширина составляет величину порядка $7''$, что соответствует такой спектральной ширине, какую имеет цуг с длиной $l_0 \approx 0{,}17$ *мкм*. Отметим, что для излучения CuK_α с естественной спектральной шириной длина цуга $l_0 \approx 0{,}1$ *мкм* [6]. Поэтому для получения плосковолновых интерференционных линий следует излучение предварительно монохроматизировать с помощью асимметричных монохроматоров. Такой эксперимент проведен в работе [7], где монохроматизированный пучок имел длину когерентности порядка 2 *мкм*. На рис. 1*а* приведена зависимость I_h от d для этого случая как для прозрачного, так и для поглощающего кристалла*. Для сравнения на рис. 2*а* приведена также зависимость I_h от d для строго монохроматического излучения в поглощающем кристалле. Явление аномального прохождения приводит, в основном, к значительному уменьшению максимумов интерференционной картины и сравнительно мало изменяет минимумы этой картины, тогда как (см. рис. 1*а*) конечность длины цуга оказывает существенное влияние и на минимумы картины. Естественно, поэтому, что конечность длительности цуга падающего излучения

---

* Приведенные в статье графики построены на основе численного расчета на ЭВМ.

в данном случае оказывает более сильное влияние на видность $\gamma = (I_{max} - I_{min})/(I_{max} + I_{min})$ интерференционной картины, чем поглощение (рис. 1*б* и 2*б*).

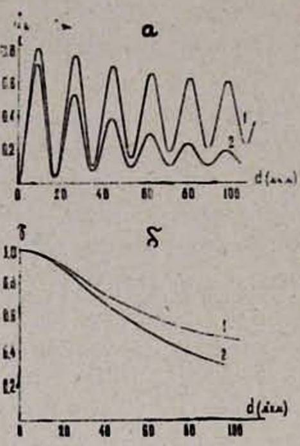

Рис. 1.

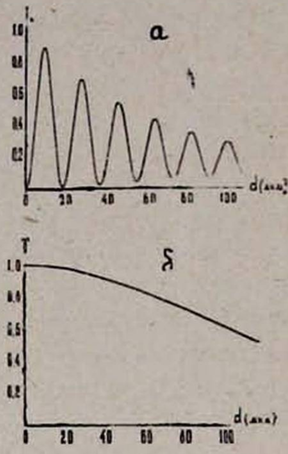

Рис. 2.

Рис. 1. Зависимости интенсивности (*а*) и видности (*б*) интерференционной картины от глубины в кристалле для падающего цуга с длиной когерентности 2 *мкм*; кривая 1—прозрачный кристалл, кривая 2—поглощающий кристалл.

Рис. 2. Зависимости интенсивности (*а*) и видности (*б*) интерференционной картины от глубины в поглощающем кристалле для строго монохроматического излучения.

На рис. 3*а* приведен случай, когда падающее излучение CuK_{α} после асимметричного монохроматора имеет вдвое меньшую эффективную спектральную ширину, чем спектральная ширина пропускания кристалла (длина цуга порядка 0,34 *мкм*). Падение видности интерференционных полос значительно уже при незначительных толщинах (рис. 3*б*).

На рис. 4*а* показан случай, когда монохроматизация излучения имеет такую степень, что $l_0 \sim \Lambda_0$, где Λ_0 — экстинкционная глубина, равная для данного случая 18,4 *мкм*. При этом видность интерференционных полос по сравнению со строго монохроматическим случаем отличается незначительно (рис. 4*б*). Падение видности интерференционной картины в поглощающем кристалле является результатом различия интерференционных коэффициентов поглощения двух волновых полей, интерферирующих в кристалле (аномально сильно и слабо поглощающиеся поля). Функция видности интерференционных маятниковых полос зависит от разности этих коэффициентов и определяется следующим образом:

$$\gamma = 1/\mathrm{ch}\,(sd), \tag{10}$$

где $2s = \sigma_1 - \sigma_2$ — разность интерференционных коэффициентов этих полей. Интенсивность волнового поля плосковолнового цуга, согласно (9), определяется следующим образом:

$$I_h = \int_{-\infty}^{\infty} F(l_0, \beta_h)\, G(d, \beta_h)\, d\beta_h,$$

где $F(l_0, \beta_h)$ — функция, зависящая от формы и структуры падающего цуга, а $G(d, \beta_h)$ имеет смысл коэффициента отражения совершенного кристалла при отклонении от условия Брэгга, определяемом параметром β_h.

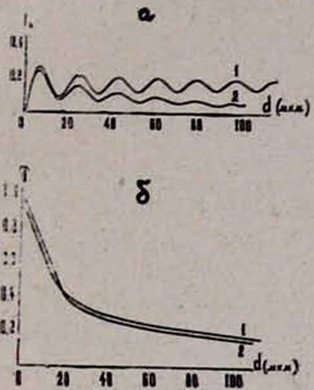

Рис. 3.

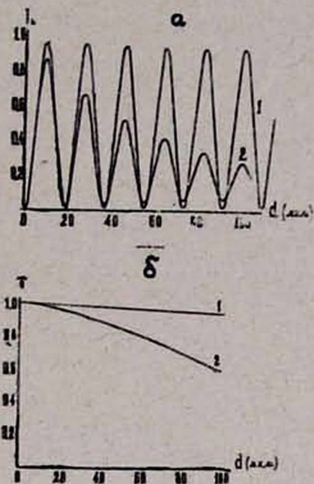

Рис. 4.

Рис. 3. То же самое, что и на рис. 1, для падающего цуга с длиной когерентности 0,34 *мкм.*

Рис. 4. То же самое, что и на рис. 1, для падающего цуга с длиной когерентности 18,4 *мкм.*

Таким образом, если $F(l_0, \beta_h)$ — достаточно медленно изменяющаяся функция (короткий цуг), спектральная ширина дифрагированного пучка определяется отражательной способностью кристалла, т. е. функцией $G(d, \beta_h)$, причем угловая полуширина пучка оказывается равной дифракционной полуширине совершенного кристалла. Если же функция $F(l_0, \beta_h)$, как функция β_h, меняется быстрее (длинный цуг), чем $G(d, \beta_h)$, то вклад в волновое поле дает некоторая малая область вокруг точки $\beta_h = 0$. В предельном случае бесконечно протяженного цуга $F(l_0, \beta_h) = \delta(\beta_h)$ и дифракционный пучок полностью определяется отражающей способностью кристалла. В промежуточных случаях спектральная и угловая структуры дифрагированного пучка зависят как от структуры падающего волнового цуга, так и отражающей способности кристалла. В соответствии с этим видность интерференционных явлений существенно зависит от формы и структуры падающего плосковолнового цуга. В предельном случае достаточно широкого в спектральном отношении падающего цуга функция видности, в основном, определяется падающим пучком. В другом предельном случае $F(l_0, \beta_h) = \delta(\beta_h)$ функция видности определяется по формуле (10) для совершенного кристалла.

Таким образом, при учете длины когерентности на видность интерференционных картин экстинкционная длина является характерным параметром: при $l_0 < \Lambda_0$ учет существенен, а при $l_0 > \Lambda_0$ он не существенен. Так как экстинкционная длина обычно есть величина порядка 30 *мкм*, то в экспериментах мы имеем, как правило, $l_0 < \Lambda_0$.

В общем случае для цуга с произвольным спектральным распределением по положениям максимумов и минимумов интерференционной картины и с помощью функции видности полос $\gamma(d)$ можно воспроизвести спектральное распределение исходного пакета [8], если его ширина меньше спектральной ширины пропускания кристалла.

Решение в случае Брэгга

Функция Римана для случая Брэгга имеет вид [9]

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

$$\left. \times \sqrt{(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0)}\right] + \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \frac{s_0 - s_0^0}{s_h - s_h^0} J_2 \left[2\pi \bar{k} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} \sqrt{(s_0 - s_0^0)(s_h - s_h^0)}\right] \Big\}. \tag{11}$$

Рассмотрим случай полубесконечного кристалла. Аналогично случаю Лауэ подставляя (11) и (6*а*, *б*) в (2), интегрируя по s_h в пределах от $-\infty$ до s_h^0 и применяя теорему о свертке, получаем

$$\psi_h(s_0^0, s_h^0, t) = -\frac{i\pi\bar{\nu} C \chi_h}{2\sin^2\theta} A_0 \int \exp\left(\frac{i\pi\bar{\nu}\beta_h}{\sin^2\theta}\tau\right) \times$$

$$\times \left\{ J_0 \left[\frac{\pi\bar{\nu} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2}}{\sin^2\theta} \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right)^{1/2} \sqrt{\tau(\tau + \tau_d)}\right] + \right.$$

$$\left. + \frac{\tau + \tau_d}{\tau} J_2 \left[\frac{\pi\bar{\nu} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2}}{\sin^2\theta} \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right)^{1/2} \sqrt{\tau(\tau + \tau_d)}\right]\right\} \times$$

$$\times \theta(\tau)\, \theta(t - t_0 - t_1 - \tau)\, \theta(\tau - t + t_0 + t_1 + \tau_0)\, d\tau, \tag{12а}$$

$$\psi_h(s_0^0; s_h^0, t) = -\frac{i\pi\bar{\nu} C \chi_h}{2\sin^2\theta} A_0 \int \exp\left(\frac{i\pi\bar{\nu}\beta_h}{\sin^2\theta}\tau - \frac{t - t_1 - t_0 - \tau}{\tau_0}\right) \times$$

$$\times \left\{ J_0 \left[\frac{\pi\bar{\nu} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2}}{\sin^2\theta} \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right)^{1/2} \sqrt{\tau(\tau + \tau_d)}\right] + \right.$$

$$\left. + \frac{\tau + \tau_d}{\tau} J_2 \left[\frac{\pi\bar{\nu} C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2}}{\sin^2\theta} \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right)^{1/2} \sqrt{\tau(\tau + \tau_d)}\right]\right\} \times$$

$$\times \theta(\tau)\, \theta(t - t_0 - t_1 - \tau)\, \theta(\tau - t + t_0 + t_1 + \tau_0)\, d\tau, \tag{12б}$$

где $c\tau_d = 2d \sin 2\theta / |\gamma_h|$, $d = s_0^0 \gamma_0 - s_h^0 |\gamma_h|$ — глубина рассматриваемой точки $(s_0^0; s_h^0)$ в кристалле. Как и в случае Лауэ, пределы интегрирования в отличие от строго монохроматического случая зависят от времени и определяются произведением θ-функций, т. е. когерентно освещенный участок входной поверхности кристалла, дающий вклад в рассматриваемой точке, меняется со временем. Наблюдаемой величиной на эксперименте является

$$I_h(s_0^0;\ s_h^0) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} |\psi_h(s_0^0;\ s_h^0, t)|^2\, dt\,.$$

На рис. 5 приведены значения интенсивности отраженной волны I_h на входной поверхности кристалла кремния при симметричном отражении от плоскостей (111) при излучении CuK_α с разными длинами когерентности в зависимости от параметра β_h. Для сравнения приведена также кривая отражения для строго монохроматического излучения CuK_α. В отличие от случая Лауэ интенсивность дифрагированного пучка не является осциллирующей функцией. Но теперь угловое распределение коэффициента отражения определяется спектральной структурой падающего волнового цуга. Угловая полуширина дифрагированного пучка, служащая характерным параметром отражающей способности кристалла и являющаяся основой многих практических применений (коллимация и монохроматизация рентгеновских пучков, определение структурных амплитуд различных отражений), существенным образом зависит от спектральной структуры падающего цуга. Как и в случае Лауэ учет этой структуры несущественен лишь тогда, когда длина когерентности падающего пучка больше экстинкционной длины и учет конечности длины когерентности необходим при $l_0 < \Lambda_0$.

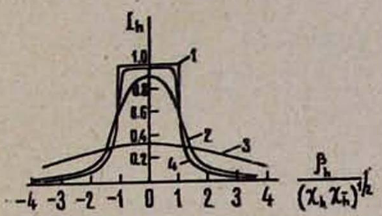

Рис. 5. Зависимость интенсивности отраженного пучка от параметра угла падения в прозрачном кристалле: строго монохроматическое излучение (1), излучение с длиной когерентности 2 *мкм* (2); 0,34 *мкм* (3); 18,4 *мкм* (4).

Авторы выражают благодарность проф. П. А. Безирганяну за проявленный интерес к работе и ценные обсуждения.

Ереванский государственный
университет

Поступила 2.X.1978

ЛИТЕРАТУРА

1. *Л. В. Левонян, К. Г. Труни.* Изв. АН АрмССР, Физика, 13, 108 (1978).
2. *З. Г. Пинскер.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах, Изд. Наука, М., 1974.
3. *S. Kikuta, K. Kohra.* J. Phys. Soc. Japan, 29, 1322 (1970).
   T. Matsushita, S. Kikuta, K. Kohra. J. Phys. Soc. Japan, 30, 1136 (1970).
4. *A. Authier, D. Simon.* Acta Cryst., A24, 517 (1968).
5. *Г. Деч.* Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования, Изд. Наука, М., 1971.
6. *L. G. Parratt.* Rev. Mod. Phys., 31, 616 (1959).
7. *H. Hashizume, H. Ishida, K. Kohra.* Jap. J. Appl. Phys., 10, 514 (1971).

8. *М. Борн, Э. Вольф.* Основы оптики, Изд. Наука, М., 1970.
9. *T. Uragami.* J. Phys. Soc. Japan, 27, 147 (1969).

ԿԱՏԱՐՅԱԼ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՑՈՒԳԻ ՎԵՐՋԱՎՈՐ ՏԵՎՈՂՈՒԹՅԱՄԲ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՀԱՐՑԻ ՄԱՍԻՆ

Լ. Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Կ. Գ. ԹՐՈՒՆԻ

Քննարկված է կատարյալ բյուրեղներում ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիան հարթալիքային մոտավորությամբ ինչպես Լաուեի, այնպես էլ Բրեգի դեպքում՝ ընկնող ճառագայթի կոհերենտ ճառագայթման տևողության վերջավոր լինելու հաշվառմամբ։

ON THE PROBLEM OF X-RAY DIFFRACTION FOR FINITE DURATION OF WAVE TRAIN IN PERFECT CRYSTALS

L. V. LEVONYAN, K. G. TROUNI

The *X*-ray diffraction in perfect crystals is considered in the plane wave approximation for both the Laue case and the Bragg case taking into account the finite duration of coherent radiation of an incident beam.