Известия НАН Армении, Физика, т.35, №6, с.309-319 (2000)

УДК 548.732

# УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ ТЕОРИЯ НЕКОМПЛАНАРНОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН В УСЛОВИЯХ ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ

М.К. БАЛЯН, Л.В. ЛЕВОНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 мая 2000 г.)

В двухволновом приближении получены уравнения, описывающие динамическую дифракцию рентгеновских пространственно-модулированных волн в идеальных и деформированных кристаллах в условиях скользящей некомпланарной геометрии дифракции. Найдены решения полученных уравнений при дифракции в полубесконечном идеальном кристалле при падении волны с произвольно пространственно-модулированной амплитудой. Как частный случай найденных решений, кратко рассмотрен вопрос о дифракции сферической волны, падающей на кристалл под малым углом скольжения.

## 1. Введение

Теория дифракции рентгеновских волн охватывает две области: дифракция без зеркального отражения и дифракция с зеркальным отражением. В первой области теория развита как для дифракции плоских волн в идеальных кристаллах [1,2], так и для дифракции рентгеновских пространственно-модулированных волн в идеальных и деформированных кристаллах (уравнения Такаги [3]). В области дифракции с зеркальным отражением в некомпланарной геометрии теория развита лишь для плоских волн: в идеальных кристаллах [4,5], в сверхрешетках и многослоистых структурах (см., например, [6-8]). Для резко асимметричных случаев дифракции, сопровождаемой зеркальным отражением волн от поверхности кристалла, теория развита также лишь для плоских волн в случаях геометрий Брэгга [9-11] и Лауэ [12-14], в сверхрешетках [15]. Между тем, несомненый интерес представляет рассмотрение дифракции с зеркальным отражением для пространственно-модулированных рентгеновских волн.

Угол скольжения для рентгеновских волн, при котором зеркально отраженная волна имеет заметную интенсивность, порядка $\sqrt{|\chi|}$, где $\chi$ – поляризуемость кристалла. Для рентгеновского диапазона этот угол составляет несколько угловых минут. Особенностью схем дифракции с зеркальным отражением заключается в том, что хотя бы одна из участвующих в дифракции волн распространяется почти параллельно одной из поверхностей раздела сред и порождает соответствующую, зеркальную относительно поверхности раздела волну. Направляя ось OZ перпендикулярно к поверхности раздела, заключаем, что для скользящих волн $z$-составляющая волновых векторов мала. Следовательно, следует ожидать достаточно быстрого изменения амплитуд этих волн по $z$. Этот факт заставляет в уравнениях распространения амплитуд, в отличие от уравнений Такаги, учитывать кроме первых, также вторые производные амплитуд по $z$.

Целью настоящей работы является получение уравнений, описывающих дифракцию пространственно-модулированных рентгеновских волн с зеркальным отражением в некомпланарной геометрии дифракции и решение этих уравнений для идеального кристалла. В частности, будет кратко рассмотрен случай падающей сферической волны.

## 2. Уравнения дифракции рентгеновских пространственно-модулированных волн с зеркальным отражением

Исходным уравнением распространения рентгеновских монохроматических волн с частотой $\omega$ в немагнитных кристаллах, свободных от токов и зарядов, является волновое уравнение для электрического вектора:

$$\mathrm{rot\,rot}\,\mathbf{E} = k^2(1+\chi)\mathbf{E}\,, \tag{1}$$

где $k=\omega/c$, $c$ – скорость света в вакууме. Поляризуемость идеального кристалла является периодической функцией координат и ее можно представить рядом Фурье по векторам $\mathbf{g}$ обратной решетки:

$$\chi_{id}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}\,. \tag{2}$$

Для деформированных кристаллов с полем смещений атомов $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ принимается [3], что

$$\chi(\mathbf{r}) = \chi_{id}(\mathbf{r}-\mathbf{u}(\mathbf{r})) = \sum_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}-i\mathbf{g}\mathbf{u}}\,, \tag{3}$$

при этом должны соблюдаться условия медленного изменения вектора $\mathbf{u}$: $|\partial\mathbf{u}/\partial x_k| \ll 1$, где $x_k$ – декартовые координаты радиуса-вектора $\mathbf{r}$.

Рассмотрим случай двух сильных волн. Схема некомпланарной двухволновой дифракции в скользящей геометрии в симметричном случае Лауэ (отражающие атомные плоскости перпендикулярны к входной поверхности кристалла) показана на рис.1. $\mathbf{K}_0^{(e)}$, $\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r})$ – волновой вектор и вектор электрической напряженности пространственно-модулированной падающей волны, $\mathbf{E}_0^{(s)}(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}_h^{(s)}(\mathbf{r})$,

$\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}_h(\mathbf{r})$ – векторы электрической напряженности зеркально-отраженной, зеркально-дифрагированной, проходящей и дифрагированной волн соответственно, $\Phi_0$ – угол скольжения падающей волны, $\mathbf{h}$ – вектор дифракции, равный одному из векторов обратной решетки $\mathbf{g}$ и антипараллельный оси OX. Пусть $\mathbf{K}_0$ – средний волновой вектор в направлении прохождения, удовлетворяющий условию Брэгга, т.е., $\mathbf{K}_0^2 = \mathbf{K}_h^2 = k^2$, где $\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}$ – средний волновой вектор дифрагированной волны и $2k\sin\theta_B = |\mathbf{h}|$, где $\theta_B$ – угол Брэгга для данного отражения. Исходя из геометрии задачи, удобно выбрать $\mathbf{K}_0$ с нулевой $z$-составляющей: $K_{0x} = k\sin\theta_B$, $K_{0y} = k\cos\theta_B$, $K_{0z} = 0$. Тогда для дифрагированной волны $z$-составляющая среднего волнового вектора тоже равна нулю: $K_{hx} = -k\sin\theta_B$, $K_{hy} = k\cos\theta_B$, $K_{hz} = 0$.

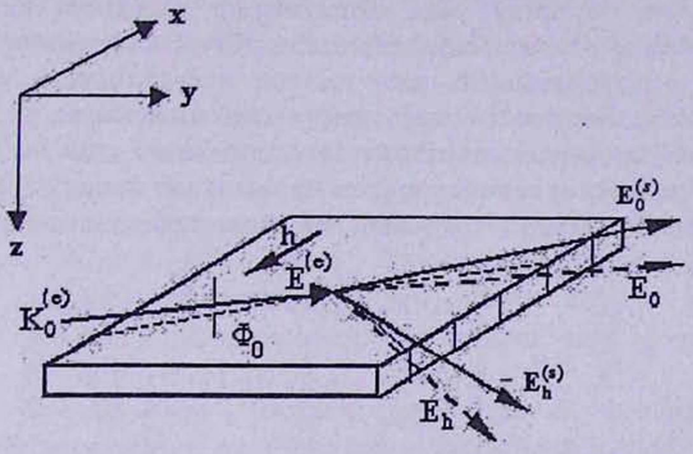


Рис.1. Схема дифракции рентгеновских лучей при скользящей геометрии. $\mathbf{K}_0^{(e)}$, $\mathbf{E}^{(e)}$ – волновой вектор и вектор электрической напряженности падающей волны, $\mathbf{E}_0^{(s)}$, $\mathbf{E}_h^{(s)}$, $\mathbf{E}_0$, $\mathbf{E}_h$ – векторы электрической напряженности зеркально-отраженной, зеркально-дифрагированной, проходящей и дифрагированной волн соответственно, $\Phi_0$ – угол скольжения падающей волны, $\mathbf{h}$ – вектор дифракции.

В этих условиях $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ в кристалле ($z > 0$) представится суммой проходящей и дифрагированной волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}} + \mathbf{E}_h(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}_h\mathbf{r}}, \qquad (4)$$

а вне кристалла ($z < 0$) – суперпозицией падающей, зеркально-отраженной и зеркально-дифрагированной волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{K}_0^{(e)}-\mathbf{K}_0)\mathbf{r}}e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}} + \mathbf{E}_0^{(s)}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}} + \mathbf{E}_h^{(s)}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}_h\mathbf{r}}\ . \qquad (5)$$

Волновой вектор для зеркально-отраженной волны мы выбрали равным среднему волновому вектору проходящей волны, отличающемуся от волнового вектора $\mathbf{K}_0^{(e)}$ падающей на кристалл волны. Волновой вектор зеркально-дифрагированной волны выбран равным среднему волновому вектору дифрагированной волны внутри кристалла. Такой выбор возможен, т.к. при заметной интенсивности зеркально-отраженной и зеркально-дифрагированной волн их волновые векторы отличаются лишь $z$-составляющими (которые намного меньше, чем другие компоненты волновых векторов) от волновых векторов проходящей и дифрагированной волны соответственно. Зависимость же полей от $z$-составляющих волновых векторов внесена в амплитуды.

Поля в кристалле можно считать поперечными [16], что позволяет от векторных уравнений перейти к скалярным уравнениям для $\sigma$- и $\pi$-поляризованных волн относительно плоскости дифракции $(\mathbf{K}_0\mathbf{K}_\mathrm{h})$. Волны $\sigma$-поляризации перпендикулярны к плоскости дифракции, для $\pi$-поляризованных волн векторы напряженности, оставаясь поперечными, лежат в плоскости дифракции. Подставляя (3), (4), (5) в (1), приравнивая нулю коэффициенты полученного ряда по векторам обратной решетки и оставляя вторые производные амплитуд по $z$, приходим к системе четырех уравнений для неизвестных амплитуд:

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 E_0}{\partial z^2}+\frac{2i}{k}(\mathbf{s}_0\nabla)E_0+\chi_0E_0+\chi_{\bar{h}}Ce^{i\mathbf{hu}}E_h=0,\\
&\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 E_h}{\partial z^2}+\frac{2i}{k}(\mathbf{s}_h\nabla)E_h+\chi_0E_h+\chi_hCe^{-i\mathbf{hu}}E_0=0,\\
&\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 E_0^{(s)}}{\partial z^2}+\frac{2i}{k}(\mathbf{s}_0\nabla)E_0^{(s)}=0,\\
&\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 E_h^{(s)}}{\partial z^2}+\frac{2i}{k}(\mathbf{s}_\mathrm{h}\nabla)E_h^{(s)}=0.
\end{aligned}
\qquad (6)
$$

Здесь $\mathbf{s}_0=\mathbf{K}_0/k$, $\mathbf{s}_\mathrm{h}=\mathbf{K}_\mathrm{h}/k$; $\chi_0=\chi_{0r}+i\chi_{0i}$, $\chi_\mathrm{h}=\chi_{\mathrm{h}r}+i\chi_{\mathrm{h}i}$, $\chi_{\bar{\mathrm{h}}}=\chi_{\bar{\mathrm{h}}r}+i\chi_{\bar{\mathrm{h}}i}$ – Фурье-коэффициенты комплексной поляризуемости кристалла для $\mathbf{g}=0$, $\mathbf{h}$, $-\mathbf{h}$ соответственно, $C$ – фактор поляризации, равный 1 для $\sigma$-поляризации и $\cos 2\theta_B$ для $\pi$-поляризации. Последние два уравнения описывают дифракцию в вакууме зеркально-отраженной и зеркально-дифрагированной волн, соответственно, и получаются из (1) при $\chi=0$.

Граничные условия заключаются в том, что непрерывны а) тангенциальные компоненты векторов электрической и магнитной напряженности и б) нормальные компоненты векторов электрической индукции $\mathbf{D}$ и магнитной индукции $\mathbf{B}$. Поскольку для рентгеновских лучей поляризуемость мала, это приводит к непрерывности $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ (что равносильно непрерывности $\mathbf{E}$ и $\operatorname{rot}\mathbf{E}$) на границе раздела [2].

Следовательно, граничные условия для обоих состояний поляризации сводятся к следующим соотношениям:

$$\begin{aligned}
&E_0 /_{z\to+0} = E_0^{(e)} /_{z\to-0} + E_0^{(s)} /_{z\to-0}, \\
&E_h /_{z\to+0} = E_h^{(s)} /_{z\to-0}, \\
&\left.\frac{\partial E_0}{\partial z}\right|_{z\to+0} = \left.\frac{\partial E_0^{(e)}}{\partial z}\right|_{z\to-0} + \left.\frac{\partial E_0^{(s)}}{\partial z}\right|_{z\to-0}, \\
&\left.\frac{\partial E_h}{\partial z}\right|_{z\to+0} = \left.\frac{\partial E_h^{(s)}}{\partial z}\right|_{z\to-0}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Здесь $E_0^{(e)} = E^{(e)} e^{i(\mathbf{K}_0^{(e)} - \mathbf{K}_0)\mathbf{r}}$. Система уравнений (6) и граничные условия (7) решают вопрос о нахождении волновых полей при двухволновой некомпланарной дифракции рентгеновских волновых пучков с зеркальным отражением в идеальных и деформированных кристаллах.

В случае конечного кристалла необходимо написать аналогичные граничным условиям (7) соотношения на выходной поверхности кристалла. В случае же кристалла с неплоской входной или выходной поверхностями граничные условия (7) должны быть заданы при $z = S(x,y)$, где $S(x,y)$ – уравнение либо входной, либо выходной поверхности кристалла.

Остановимся на вопросе об отличии приведенных уравнений от уже существующих.

1) Существующая плосковолновая теория дифракции в скользящей геометрии [4] пригодна для плоских волн и для совершенных кристаллов. В предлагаемом варианте теории сняты оба ограничения, т.е. она пригодна для описания дифракции пространственно-модулированных волн как в совершенных, так и в деформированных кристаллах. Кроме того, вместо граничных условий для полного поля получены граничные условия (7) для амплитуд. Разделены уравнения для $\sigma$- и $\pi$-поляризованных волн относительно плоскости дифракции ($\mathbf{K}_0\mathbf{K}_h$).

2) Существующая теория дифракции пространственно-модулированных волн (уравнения Такаги [3,17]), не применима для дифракции в скользящей геометрии. Первые два уравнения (6) переходят в уравнения Такаги, если отбросить вторые производные амплитуд по $z$. Между тем, именно эти члены в уравнениях (6) обеспечивают правильную зависимость $z$-компоненты волнового вектора в кристалле и количество возможных собственных значений, в чем мы убедимся в следующем параграфе. Система (6) состоит из четырех уравнений, вместо двух в теории Такаги, в соответствии с числом неизвестных амплитуд.

Именно два последних уравнения (6) описывают дифракцию зеркально-отраженной и зеркально-дифрагированной волн соответственно. Без этих двух последних уравнений система (6) неполна и не может описать дифракцию в условиях зеркального отражения. Отличие от теории Такаги заключается и в граничных условиях (7) для амплитуд. Вместо двух, имеем четыре граничных условия в соответствии с числом неизвестных амплитуд.

### 3. Решение уравнений дифракции для идеального кристалла

Рассмотрим скользящую геометрию дифракции от полубесконечного идеального ($\mathbf{u}=0$) кристалла. Уравнения (6) после перехода к безразмерным переменным

$$\frac{k|\chi_h|}{2\sin\theta_B}x \to x, \quad \frac{k|\chi_h|}{2\cos\theta_B}y \to y, \quad k\sqrt{|\chi_h|}\, z \to z, \tag{8}$$

принимают вид:

$$\begin{gathered}
\frac{\partial^2 E_0}{\partial z^2} + i\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)E_0 + \varepsilon_0 E_0 + \varepsilon_{\bar{h}} E_h = 0, \\
\frac{\partial^2 E_h}{\partial z^2} + i\left(-\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)E_h + \varepsilon_0 E_h + \varepsilon_h E_0 = 0, \\
\frac{\partial^2 E_0^{(s)}}{\partial z^2} + i\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)E_0^{(s)} = 0; \\
\frac{\partial^2 E_h^{(s)}}{\partial z^2} + i\left(-\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)E_h^{(s)} = 0; \quad \varepsilon_0 = \frac{\chi_0}{|\chi_h|}, \quad \varepsilon_{\bar{h},h} = \frac{C\chi_{\bar{h},h}}{|\chi_h|}.
\end{gathered} \tag{9}$$

Для идеального кристалла с плоской входной поверхностью задача полностью решается преобразованием Фурье:

$$\begin{gathered}
E_{0,h} = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f_{0,h}(p,q)\exp[i(px+qy+\lambda z)]\,dpdq, \\
E_{0,h}^{(s)} = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f_{0,h}^{(s)}(p,q)\exp[i(px+qy+\lambda_{0,h}^{(s)} z)]\,dpdq, \\
E_0^{(e)} = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f_0^{(e)}(p,q)\exp[i(px+qy+\lambda_0^{(e)} z)]\,dpdq.
\end{gathered} \tag{10}$$

Подставляя (10) в (9) и используя граничные условия (7) находим характеристические значения $\lambda$:

$$\lambda = \pm\sqrt{\varepsilon_0 - q \pm \sqrt{p^2 + \varepsilon_h \varepsilon_{\bar h}}}, \quad \lambda_0^{(s)} = \pm\sqrt{-(q+p)},$$
$$\lambda_h^{(s)} = \pm\sqrt{-(q-p)}, \quad \lambda_0^{(e)} = \pm\sqrt{-(q+p)} \tag{11}$$

и соответствуюшие амплитуды:

$$f_{01} = \frac{\gamma_{h2}(\lambda_2 - \lambda_h^{(s)})(\lambda_0^{(s)} - \lambda_0^{(e)})}{\Gamma} f_0^{(e)}, \quad f_{02} = \frac{\gamma_{h1}(\lambda_h^{(s)} - \lambda_1)(\lambda_0^{(s)} - \lambda_0^{(e)})}{\Gamma} f_0^{(e)},$$

$$f_{h1} = -\frac{\varepsilon_h}{\varepsilon_{\bar h}} \frac{(\lambda_2 - \lambda_h^{(s)})(\lambda_0^{(s)} - \lambda_0^{(e)})}{\Gamma} f_0^{(e)}, \quad f_{h2} = -\frac{\varepsilon_h}{\varepsilon_{\bar h}} \frac{(\lambda_h^{(s)} - \lambda_1)(\lambda_0^{(s)} - \lambda_0^{(e)})}{\Gamma} f_0^{(e)},$$

$$f_0^{(s)} = \frac{\gamma_{h2}(\lambda_2 - \lambda_h^{(s)})(\lambda_1 - \lambda_0^{(e)}) + \gamma_{h1}(\lambda_h^{(s)} - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_0^{(e)})}{\Gamma} f_0^{(e)}, \tag{12}$$

$$f_h^{(s)} = \frac{\varepsilon_h}{\varepsilon_{\bar h}} \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_0^{(s)} - \lambda_0^{(e)})}{\Gamma} f_0^{(e)},$$

$$\Gamma = \gamma_{h2}(\lambda_0^{(s)} - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_h^{(s)}) + \gamma_{h1}(\lambda_0^{(s)} - \lambda_2)(\lambda_h^{(s)} - \lambda_1);$$

$$\gamma_{hi} = \frac{p \pm \sqrt{p^2 + \varepsilon_h \varepsilon_{\bar h}}}{\varepsilon_{\bar h}}; i = 1,2.$$

В (11) для $\lambda$, $\lambda_0^{(e)}$ следует брать корни со знаком плюс перед первым квадратным корнем, т.к. соответствующие амплитуды распространяются в положительном направлении оси OZ и стремятся к нулю на бесконечности, а для $\lambda_0^{(s)}, \lambda_h^{(s)}$ – со знаком минус, т.к. соответствующие амплитуды распространяются в отрицательном направлении оси OZ.

Из (10), (12) можно написать следующие общие выражения для амплитуд:

$$E = \iint T f_0^{(e)} e^{i(px+qy+\lambda z)} dpdq, \qquad E^{(s)} = \iint R f_0^{(e)} e^{i(px+qy+\lambda^{(s)} z)} dpdq. \tag{13}$$

Коэффициенты $R$ и $T$ для каждой амплитуды определяются из выражений (12), как множители перед $f_0^{(e)}$. Конкретный вид функции $f_0^{(e)}$ и значение $\lambda_0^{(e)}$ зависят от вида падающей на кристалл волны. Рассмотрим несколько частных случаев.

**а) Падающая плоская волна.**

Пусть на кристалл падает плоская волна $E^{(e)} e^{i\mathbf{K}_0^{(e)}\mathbf{r}}$. Вектор $\mathbf{K}_0^{(e)}$ можно задать длиной $k$, углом $\pi/2-\theta$, , который он образует с вектором дифракции, и углом скольжения $\Phi_0$, который он образует с входной поверхностью кристалла: $\mathbf{K}_0^{(e)} = k(\sin\theta, \sqrt{\cos^2\theta - \Phi_0^2}, \Phi_0)$. Ввиду малости $\Phi_0$ мы воспользовались приближением $\sin\Phi_0 \approx \Phi_0$. Из (10) для амплитуды падающей волны и его Фурье-образа найдем:

$$E_0^{(e)} = E^{(e)} e^{i(p_0 x + q_0 y + \lambda_0^{(e)} z)}, \quad F_0^{(e)} = E^{(e)} \delta(p - p_0)\delta(q - q_0) e^{i\lambda_0^{(e)} z},$$
$$p_0 = -\frac{\alpha}{2|\chi_h|}, \quad q_0 = -p_0 - \lambda_0^{(e)2}, \quad \alpha = -2\Delta\theta \sin 2\theta_B, \quad \lambda_0^{(e)} = \Phi_0 / \sqrt{|\chi_h|}. \tag{14}$$

Здесь $\Delta\theta$ – отклонение от точного угла Брэгга. Подставляя полученное выражение для Фурье-образа амплитуды падающей волны в (12) и найдя таким образом $f$ амплитуды, после выполнения Фурье-преобразования (13) (из-за наличия $\delta$-функции это сводится к подстановке в подынтегральных выражениях $p = p_0$, $q = q_0$), находим амплитуды дифрагированных и зеркально-отраженных волн. Легко показать, что полученные таким образом выражения совпадают с соответствующими выражениями, полученными в рамках стандартной плосковолновой теории динамической дифракции рентгеновских лучей [4].

**б) Падающая сферическая волна.**

Пусть из точечного источника на кристалл падает пучок рентгеновских волн со сферическим волновым фронтом и средним волновым вектором $\mathbf{K}_0^{(e)}$. Начало декартовой системы координат поместим в точке падения среднего луча на входной поверхности кристалла. Расстояние от источника до кристалла вдоль направления $\mathbf{K}_0^{(e)}$ обозначим через $L_0$. Тогда координаты источника будут

$$x_s = -L_0 \sin\theta, \qquad y_s = -L_0 \cos\theta\left(1 - \frac{\Phi_0^2}{2\cos^2\theta}\right), \qquad z_s = -L_0 \Phi_0. \tag{15}$$

Амплитуда падающей волны будет иметь следующий вид:

$$E_0^{(e)} = \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_s|} e^{-i\mathbf{K}_0 \mathbf{r}}}{L_0},$$

после разложения фазы которой около точки (0,0) в ряд Тейлора с точностью до квадратичных членов включительно, получим:

$$E_0^{(e)} = E^{(e)} \exp[i(p_0 x + q_0 y) + i\beta(x - y)^2], f_0^{(e)} = \frac{E^{(e)} e^{i\pi/4}}{2\sqrt{\pi\beta}} \delta(q + p + \lambda_0^2) e^{-i\frac{(p - p_0)^2}{4\beta}},$$
$$E^{(e)} = \frac{e^{ikL_0}}{L_0}, \qquad \beta = \frac{\sin^2 2\theta}{2L_0 k|\chi_h|^2}, \; \lambda_0 = \Phi_0 / \sqrt{|\chi_h|}. \tag{16}$$

Согласно (13) находим следующие выражения для амплитуд:

$$E=\frac{E^{(e)}e^{i\pi/4}e^{-i\lambda_0^2 y}}{2\sqrt{\pi\beta}}\int_{-\infty}^{+\infty}T(p,-p-\lambda_0^2)e^{i[W+\lambda(p,-p-\lambda_0^2)z]}dp,$$

$$E^{(s)}=\frac{E^{(e)}e^{i\pi/4}e^{-i\lambda_0^2 y}}{2\sqrt{\pi\beta}}\int_{-\infty}^{+\infty}R(p,-p-\lambda_0^2)e^{i[W+\lambda^{(s)}(p,-p-\lambda_0^2)z]}dp, \qquad (17)$$

$$W=-\frac{(p-p_0)^2}{4\beta}+p(x-y).$$

Для входной поверхности кристалла $z=0$ легко оценить полученные здесь интегралы методом стационарной фазы [18]. Для амплитуд зеркальных волн этим методом находим:

$$\begin{aligned}&E_{0,h}^{(s)}=E^{(e)}R_{0,h}^{(s)}(p_{st.},-p_{st.}-\lambda_0^2)\exp[i(\beta(x-y)^2+p_0x-(p_0+\lambda_0^2)y)];\\&p_{st.}=p_0+2\beta(x-y).\end{aligned} \qquad (18)$$

На рис.2 и 3 приведены трехмерные графики функций $I_{0,h}^{(s)}=\left|E_{0,h}^{(s)}\right|^2 \Big/ \left|E^{(e)}\right|^2$, рассчитанные по формуле (18) для двух различных значений параметра $\Phi_0$. Из графиков видно подавление зеркально-отраженной волны в области появления сильной зеркально-дифрагированной волны. Отметим одно интересное обстоятельство. В рассматриваемом случае интенсивности зависят не от $x$ и $y$ по отдельности, а от разности $y$–$x$, что является следствием выражения (16) для амплитуды падающей на кристалл волны. В итоге значения интенсивностей неизменны вдоль направления падающего пучка, что хорошо видно на графиках.

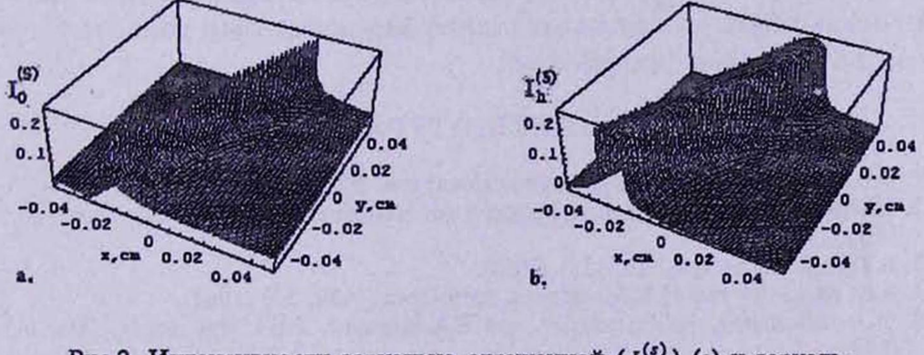


Рис.2. Интенсивности зеркально-отраженной ($I_0^{(s)}$) (a) и зеркально-дифрагированной ($I_h^{(s)}$) (b) волн для отражения (220) кристалла Ge (излучение CuK$_\alpha$, $L_0=3m$) при $\Phi_0=\left|\chi_0+\chi_h\right|^{1/2}$, $\alpha=0$.

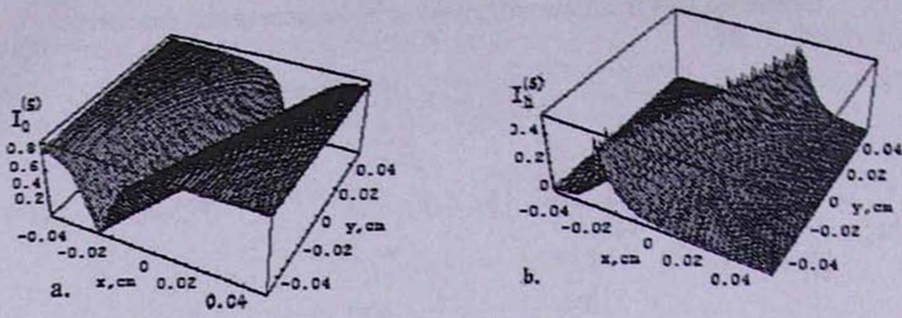


Рис.3. Интенсивности зеркально-отраженной ($I_0^{(s)}$) (a) и зеркально-дифрагированной ($I_h^{(s)}$) (b) волн для отражения (220) кристалла Ge (излучение CuK$_\alpha$, $L_0 = 3m$) при $\Phi_0 = \frac{2}{3}\left|\chi_0 + \chi_h\right|^{1/2}$, $\alpha = 0$.

Подробный анализ особенностей поведения амплитуд для падающей сферической волны (в частности, возможность фокусировки внутри и вне кристалла и распространение в вакууме), рассмотрение дифракции волновых пучков другого типа (изображение щелей, волновые поля в случае изогнутого кристалла и т.д.) будут сделаны в следующих сообщениях.

В заключение отметим, что использование падающих волновых пучков, в сравнении с плоской волной в условиях двухволновой дифракции с зеркальным отражением, открывает новые возможности для изучения сверхтонких приповерхностных слоев монокристаллов, сверхрешеток, многослойных структур. К их числу относятся фокусировка внутри и вне кристалла, использование вместо кривых качаний одновременного падения лучей под различными углами скольжения и с различными параметрами отклонения от условия Брэгга, другие динамические эффекты, связанные с интерференцией волн различных точек дисперсионной поверхности.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **З.Г.Пинскер.** Рентгеновская кристаллоптика, М., Наука, 1982.
2. **Ш.Чжан.** Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах, М., Мир, 1987.
3. **S.Takagi.** Acta Cryst., **15**, 1311 (1962).
4. **A.M.Afanas'ev and M.K.Melkonyan.** Acta Cryst., **A39**, 209 (1983).
5. **P.A.Aleksandrov, A.M.Afanasiev, and S.A.Stepanov.** Phys. stat. sol.(a), **86**, 143 (1984).
6. **S.A.Stepanov and R.Koehler.** J. Phys. D: Applied Physics, **27**, 1923 (1994).
7. **S.A.Stepanov, U.Pietsch and G.T.Baumbach.** Z. Physik B, **96**, 341 (1995).
8. **S.A.Stepanov, E.A.Kondrashkina, R.Koehler, D.V.Novikov, G.Materlik, and S.M.Durbin.** Phys. Rev. B, **57**, 4829 (1998).

9. S.Kishino and K.Kohra. Japan. J. Appl. Phys., **10**, 551 (1971).
10. S.Kishino. J. Phys. Soc. Japan, **31**, 1168 (1971).
11. F.Rusticelli. Phil. Mag. **31**, 1 (1975).
12. S.Kishino, A.Noda, and K.Kohra. J. Phys. Soc. Japan, **33**, 158 (1972).
13. J.Hartwig. Phys. stat. sol.(a), **37**, 417 (1976).
14. J.Hartwig. Phys. stat. sol.(a), **42**, 495 (1977).
15. P.H.Bezirganyan and A.P.Ayvazyan. Phys. stat. sol. (a), **100**, 389 (1987).
16. В.Л.Инденбом,.Ф.Н.Чуховский. УФН, **107**, 229 (1971).
17. S.Takagi. J. Phys. Soc. Japan., **26**, 1239 (1969).
18. М.Борн, Э.Вольф. Основы оптики. М., 1973.

## ՀԱՅԵԼԱՅԻՆ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁՄԱՆ ՊԱՅՄԱՆՆԵՐՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԱԼԻՔՆԵՐԻ ՈՉ ԿՈՄՊԼԱՆԱՐ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ԿԱՏԱՐԵԼԱԳՈՐԾՎԱԾ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ, Լ.Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ

Երկալիքային մոտավորությամբ ստացված են կատարյալ և դեֆորմացված բյուրեղներում հայելային անդրադարձման պայմաններում ռենտգենյան տարածականորեն մոդուլված ալիքների դինամիկ դիֆրակցիան նկարագրող հավասարումներ: Գտնված է ստացված հավասարումների լուծումը կիսաանվերջ կատարյալ բյուրեղներում ընկնող կամայական տարածականորեն մոդուլված ալիքի դիֆրակցիայի դեպքում: Որպես ստացված լուծումների մասնավոր դեպք համառոտ քննարկված է փոքր սահող անկյան տակ ընկնող գնդաձև ալիքի դիֆրակցիան:

## IMPROVED THEORY OF NONCOMPLANAR DIFFRACTION OF X-RAYS UNDER SPECULAR REFLECTION CONDITIONS

M.K. BALYAN, L.V. LEVONYAN

In two-wave approximation the equations describing the dynamical diffraction of X-ray spatially modulated waves in ideal and deformed crystals in grazing noncomplanar incidence geometry are obtained. The solutions of obtained equations for diffraction of arbitrary spatially modulated incidence wave in ideal half-infinite crystal are found. As a special case of the obtained solutions, the diffraction of incidence spherical wave under small grazing angle is briefly considered.