

УДК 548.732

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ В СИСТЕМАХ КРИСТАЛЛ-ВАКУУМ

Л.А. АРУТЮНЯН, Г.М. ОГАНЕСЯН

Ереванский государственный университет

К.Г. ТРУНИ

Интернациональная академия науки и технологии, Глендейл, США

(Поступила в редакцию 29 июля 2002 г.)

На основе одного из широко распространенных алгоритмов численного интегрирования уравнений Такаги развита метод моделирования динамической дифракции рентгеновских лучей в системах кристалл-вакуум (КВ), состоящих из кристаллических и вакуумных областей. В предлагаемом методе не требуется явного задания граничных условий на внутренних границах рассматриваемой системы. В качестве примера новый метод применен в задаче дифракции рентгеновских лучей на ограниченных кристаллах.

### 1. Введение

В двухволновом приближении динамической дифракции рентгеновского излучения в кристаллах волновое поле внутри кристалла можно представить в виде суммы проходящей и отраженной квази плоских волн:

$$D^{(cr)}(\mathbf{r}) = D_0^{(cr)}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) + D_h^{(cr)}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}) \mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{h}$  – вектор обратной решетки рассматриваемого отражения. Квази-амплитуды  $D_0^{(cr)}(\mathbf{r})$  и  $D_h^{(cr)}(\mathbf{r})$  удовлетворяют уравнениям Такаги [1], которые для недеформированного кристалла представляются в виде

$$\begin{cases} (\mathbf{s}_0 \cdot \text{grad } D_0^{(cr)}(\mathbf{r})) = i \frac{KC\chi_{\bar{h}}}{2} D_h^{(cr)}(\mathbf{r}), \\ (\mathbf{s}_h \cdot \text{grad } D_h^{(cr)}(\mathbf{r})) = i \frac{KC\chi_h}{2} D_0^{(cr)}(\mathbf{r}). \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $\mathbf{s}_0$  и  $\mathbf{s}_h$  – единичные векторы, параллельные волновым векторам  $\mathbf{k}_0$  и  $\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$  соответственно,  $K$  – волновое число в вакууме,  $C$  – поляризационный фактор,  $\chi_h$  и  $\chi_{\bar{h}}$  – коэффициенты Фурье-разложения поляризуемости кристалла, соответствующие прямому ( $\mathbf{h}$ ) и обратному ( $-\mathbf{h}$ )

векторам дифракции. В общем случае в уравнениях Такаги имеется некая произвольность в выборе волнового вектора  $\mathbf{k}_0$ , ограниченная медленностью изменения квазиамплитуд  $D_0^{(cr)}(\mathbf{r})$  и  $D_0^{(vac)}(\mathbf{r})$  по сравнению с экспонентами, входящими в выражение (1). В нашем случае  $\mathbf{k}_0$  определено из условий  $\mathbf{k}_0^2 = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{h})^2 = K^2(1 + \chi_0)$ , где  $\chi_0$  – средняя поляризуемость кристалла.

Вакуумное волновое поле представим в форме, аналогичной (1):

$$D^{(vac)}(\mathbf{r}) = D_0^{(vac)}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{K}_0 \mathbf{r}) + D_h^{(vac)}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{K}_0 + \mathbf{h}) \mathbf{r}). \quad (3)$$

Так как поляризуемость кристалла для жесткого рентгеновского излучения намного меньше единицы, граничные условия на кристаллических поверхностях приводятся к условиям непрерывности проходящих и отраженных волновых полей<sup>1</sup>. В частности, если выбрать  $\mathbf{K}_0 = \mathbf{k}_0$  (именно так мы будем считать в дальнейшем), для граничных условий получим более простой вид:

$$D_g^{(cr)}(\mathbf{r}_e) = D_g^{(vac)}(\mathbf{r}_e) \quad (g = 0; h),$$

где  $\mathbf{r}_e$  – радиус-вектор произвольной точки вышеупомянутых поверхностей.

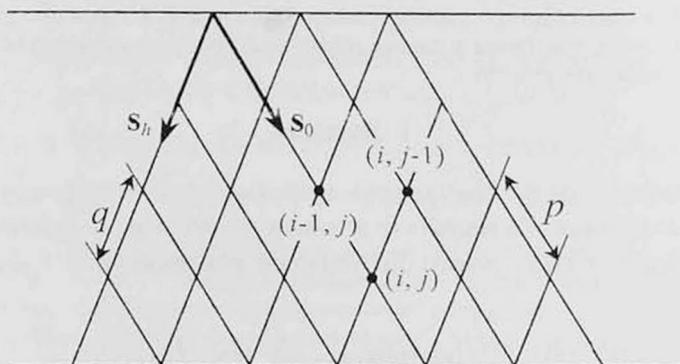


Рис.1. Сетка интегрирования уравнений Такаги, использованная в CSA [2].

Рассмотрим вкратце один из алгоритмов численного интегрирования уравнений Такаги, так называемый “алгоритм с постоянным шагом” (CSA) [2]. Внутри кристалла, в плоскости рассеяния, вводится сетка интегрирования с узлами в точках

<sup>1</sup> Таким упрощением мы исключаем из дальнейшего рассмотрения случаи, когда проходящий или отраженный пучок составляют экстремально малый угол с некоторой областью этой границы.

$$\mathbf{r}_{ij} = ips_0 + jq\mathbf{s}_h, \quad (4)$$

где  $p$  и  $q$  – шаги сетки по направлениям  $\mathbf{s}_0$  и  $\mathbf{s}_h$  соответственно, а  $i$  и  $j$  – целые числа (рис.1). Согласно этому методу, волновое поле в некоем узле  $(i, j)$  введенной сетки определяется линейной комбинацией волновых полей в узлах  $(i-1, j)$  и  $(i, j-1)$ :

$$\begin{bmatrix} D_0^{(cr)}(\mathbf{r}_{ij}) \\ D_h^{(cr)}(\mathbf{r}_{ij}) \end{bmatrix} = \frac{1}{1-AB} \begin{bmatrix} 1 & A & AB & A \\ B & AB & B & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_0^{(cr)}(\mathbf{r}_{i-1j}) \\ D_h^{(cr)}(\mathbf{r}_{i-1j}) \\ D_0^{(cr)}(\mathbf{r}_{ij-1}) \\ D_h^{(cr)}(\mathbf{r}_{ij-1}) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где  $A$  и  $B$  – параметры, пропорциональные соответственно шагам сетки  $p$  и  $q$ , и при разумном выборе последних, они намного меньше единицы<sup>2</sup>. Ур.(5) позволяет вычислить значения квазиамплитуд во всех узлах внутри кристалла. Вычисления начинаются с входной поверхности, где квазиамплитуды определяются из граничных условий.

Целью данной работы является обобщение упомянутого выше метода численного интегрирования уравнений Такаги для систем КВ.

## 2. Распространение рентгеновских лучей в вакууме

Подставляя общее выражение (3) для вакуумного волнового поля в волновое уравнение Пуассона

$$\nabla^2 D + K^2 D = 0,$$

получим уравнения, описывающие распространение проходящих и отраженных квазиплоских волн в вакууме:

$$(\mathbf{s}_g \cdot \text{grad}) D_g^{(vac)} = i \frac{K^2 - \mathbf{k}_g^2}{2K} D_g^{(vac)}, \quad (g = 0, h), \quad (6)$$

где  $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$ . При выводе последних, как и в случае уравнений Такаги, отброшены члены, пропорциональные второй производной от квазиамплитуд. Это приводит к пренебрежению дифракционными явлениями в вакууме, что обычно допустимо, когда речь идет о расстояниях порядка размеров кристаллических блоков.

Как и в случае кристаллической среды, введем сетку интегрирования в вакууме, с узлами, определенными согласно (4). Поступая аналогичным образом, как при выводе (5), из (6) получим рекуррентные соотношения

<sup>2</sup> Выражение (5) написано для частного случая недеформированного кристалла, при упомянутом выше выборе волнового вектора  $\mathbf{k}_0$ .

$$\begin{cases} D_0^{(vac)}(\mathbf{r}_{i,j}) = \frac{1+i\beta_0 p/2}{1-i\beta_0 p/2} D_0^{(vac)}(\mathbf{r}_{i-1,j}), \\ \dots \\ D_h^{(vac)}(\mathbf{r}_{i,j}) = \frac{1+i\beta_h q/2}{1-i\beta_h q/2} D_h^{(vac)}(\mathbf{r}_{i-1,j}), \end{cases} \quad (7)$$

где

$$\beta_0 = \frac{K^2 - k_0^2}{2K}, \quad \beta_h = \frac{K^2 - k_h^2}{2K}.$$

Хотя приведенные уравнения не дают ничего нового, а лишь описывают распространение проходящих и отраженных пакетов в вакууме без учета дифракционных явлений, они полезны для дальнейших рассуждений. Являясь формально частным случаем выражения (5), ур-я (7) позволяют распространить упомянутый выше алгоритм интегрирования уравнений Такаги для описания распространения рентгеновских лучей в вакууме.

### 3. Моделирование дифракции в системе КВ

Разделим мысленно кристалл на маленькие кристаллы, связанные с узлами вышеупомянутой сетки интегрирования. Тогда  $D_0(\mathbf{r}_{i,j})$  и  $D_h(\mathbf{r}_{i,j})$  будут представлять квазиамплитуды проходящих и отраженных волновых полей на этих кристаллах. Упомянутый выше алгоритм численного интегрирования уравнений Такаги можно интерпретировать как моделирование динамической дифракции рентгеновского излучения в кристалле при условии, что дифракция на одном, достаточно маленьком, кристалле описывается уравнениями (5). Такая трактовка позволяет распространить этот алгоритм и на системы КВ. Если расширим сетку интегрирования на всю систему КВ, то эту систему можно рассматривать как совокупность маленьких кристаллов, связанных только с теми узлами сетки, которые находятся в кристаллической среде (рис.2). Как и раньше, будем последовательно вычислять значения квазиамплитуд на всех узлах сетки, начиная с входной поверхности системы. Для узлов, находящихся внутри кристаллической среды, будем использовать ур.(5), а для вакуумных – ур.(7). Хотя при таком подходе заметно увеличивается объем компьютерных вычислений, этот подход позволяет избежать явного, подчас трудоемкого, применения граничных условий.

Описанный алгоритм можно обосновать следующим образом. Для системы, состоящей из кристаллических и вакуумных областей, мы находим некое волновое поле, которое, с одной стороны, удовлетворяет уравнениям Такаги в кристаллических областях, с другой – уравнению Пуассона в вакуумных. Удовлетворяет оно и граничным условиям, как на входной поверхности общей системы, так и на внутренних границах

кристалл–вакуум, так как на последних сохраняется непрерывность квазиамплитуд (разумеется, при достаточно малых шагах сетки интегрирования). Известно, что эти условия обеспечивают единственность решения волнового уравнения.

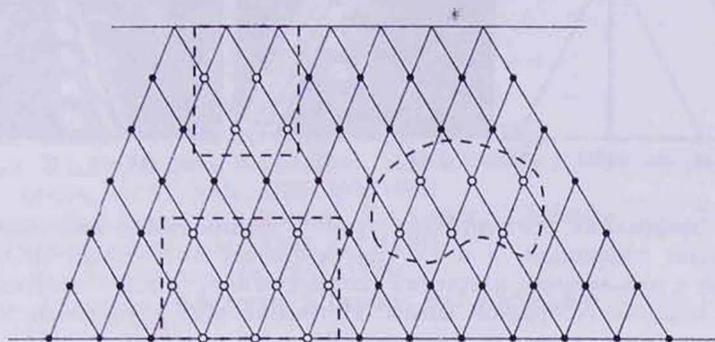


Рис.2. Система КВ и сетка интегрирования. Темными точками отмечены узлы сетки в кристалле, светлыми – узлы сетки в вакууме. Пунктирами отмечены вакуумные области.

Предлагаемый алгоритм можно использовать в случае многоблочных интерферометров. При этом все или отдельные блоки интерферометра могут быть ориентированы как по геометрии Лауэ, так и по геометрии Брэгга. Важно, чтобы во всей системе в дифракции участвовало только одно семейство кристаллических плоскостей, т.е. чтобы двухволновое приближение реализовалось для всей системы в целом. Отметим также необходимость отсутствия разориентаций между блоками интерферометра.

Другой областью применения этого алгоритма могут послужить брэгг-френелевские зонные пластинки, на выходных поверхностях которых нанесен рельеф по френелевскому закону [3-6]. В результате этого на боковых поверхностях вышеупомянутого рельефа могут возникнуть многократные отражения рентгеновских лучей.

В качестве примера предложенный алгоритм был применен для расчета дифракции падающей  $\delta$ -образной волны на ограниченном кристалле – задача, подробно рассмотренная в литературе [7-9]. На рис.3а показана геометрия дифракции, а на рис.3б и 3в – распределение интенсивностей соответственно проходящего и отраженного волновых полей. Как и следовало ожидать из граничных условий, отраженная волна обращается в нуль на боковой грани кристалла ВС и остается нулевой правее от него, в вакууме. Проходящая же волна выходит в вакуум через эту грань и дальше распространяется по закону параллельного перемещения. При этом в кристалле, в области  $H_1O_1C$  образуется дополнительная волна, соответствующая отражению от боковой грани кристалла.

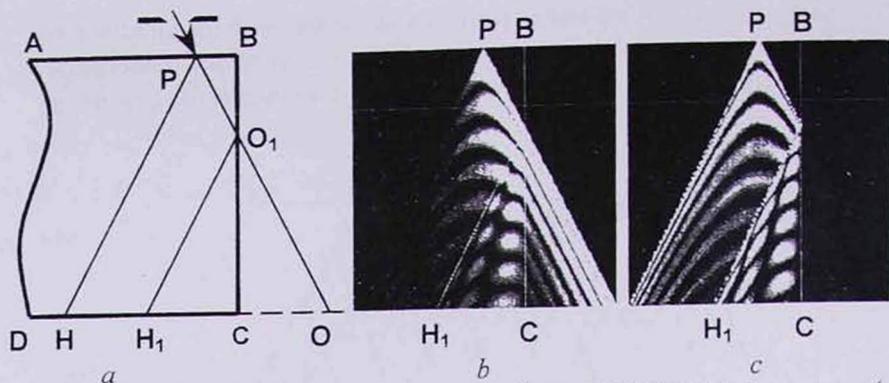


Рис.3. Дифракция рентгеновских лучей в ограниченном кристалле (*a* – геометрия дифракции, *b* и *c* – распределения интенсивностей проходящего и отраженного излучений соответственно). ABCD – кристалл, P – точка падения  $\delta$ -образной волны. Излучение  $\text{MoK}_{\alpha 1}$ , отражение  $\text{Si}(220)$ , толщина кристаллической пластинки (BC) – 290 мкм.

#### 4. Заключение

Известный алгоритм моделирования динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах – CSA обобщен таким образом, что в качестве частных случаев включает в себя распространение рентгеновских лучей как в кристаллической среде, так и в вакууме. В результате получен алгоритм, моделирующий дифракцию рентгеновских лучей в системах, состоящих из кристаллических и вакуумных областей (интерферометры, ограниченные кристаллы, брэгг-френелевские зонные пластинки и т.д.). При этом отпадает необходимость явного задания граничных условий при переходе рентгеновских лучей от кристаллических областей в вакуумные и наоборот. Эти условия удовлетворяются автоматически, по ходу пошагового интегрирования волнового уравнения. Вышеотмеченная особенность рассматриваемого алгоритма позволяет создать компьютерную программу, в которой переход от одной системы КВ к другой приводит лишь к переопределению программного кода функции, определяющей принадлежность данной точки к кристаллической или вакуумной среде.

В конце упомянем об одной существенной ограниченности предложенного метода. Она связана с тем, что метод CSA был использован нами лишь в частном случае недеформированного кристалла. В нашем случае это приводит к требованию не только идеальности отдельных кристаллических блоков системы, но и существования единой, неискаженной кристаллической решетки для всех блоков системы в целом. Другими словами, все блоки системы должны быть частями единого недеформированного кристалла. Авторы надеются, что предлагаемый алгоритм можно обобщить и для искаженных кристаллических систем, что,

в частности, позволит рассматривать интерферометры с разориентированными блоками.

Авторы благодарят Е.В.Прохоренко и М.К.Баляна за обсуждение работы, а также А.П.Джотян за ценные советы.

Работа поддержана грантом INTAS 99-0469.

## ЛИТЕРАТУРА

1. S.Takagi. J. Phys. Soc. Jap., 26, 1239 (1969).
2. Y.Epelboin. Materials Science and Engineering, 73, 1 (1985).
3. Yu.A.Basov, T.L.Pravdivtseva, A.A.Snigirev, M.Belakhovsky, P.Dhez, and A.Freund. Nuclear Instrum. and Methods, A308, 363 (1991).
4. V.V.Aristov, Yu.A.Basov, A.A.Snigirev, V.A.Yunkin, T.Ishikawa, and S.Kikuta. Nuclear Instrum. and Methods, A308, 413 (1991).
5. A.Snigirev. Rev. Sci. Instrum., 66, 2053 (1995).
6. A.Snigirev, I.Snigireva, P.Bosecke, S.Lequien, and I.Schelokov. Optics Communications, 135, 378 (1997).
7. T.Saka, T.Katagawa, and N.Kato. Acta Cryst., A28, 102 (1972).
8. T.Saka, T.Katagawa, and N.Kato. Acta Cryst., A28, 113 (1972).
9. Е.В.Шулаков, И.А.Смирнова, Э.В.Суворов. Материалы совещания "Рентгеновская оптика - 2001", Нижний Новгород, 2001, с.277.

ԲՅՈՒՐԵՂ-ՎԱԿՈՒՌՄ ՀԱՍԱԿԱՐԳԵՐՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ  
ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՄՈԳԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ

Լ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Գ.Մ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ, Կ.Գ. ԹՐՈՒՆԻ

Հիմք ընդունելով Տալկազիի հավասարումների թվային ինտեգրման լայն տարածում ստացած ալգորիթմներից մեկը, զարգացված է բյուրեղ-վակուում համակարգերում ռենտգենյան ճառագայթների դինամիկ դիֆրակցիայի մոդելավորման եղանակ: Առաջարկվող եղանակում չի պահանջվում դիտարկվող համակարգի ներքին մակերևույթներին սահմանային պայմանների բացահայտ կիրառումը: Որպես օրինակ զարգացված մեթոդը կիրառված է սահմանափակ բյուրեղներում ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի խնդրում:

## SIMULATION OF X-RAY DIFFRACTION IN CRYSTAL-VACUUM SYSTEMS

L.A. HAROUTUNYAN, G.M. HOVHANNISYAN, K.G. TROUNI

Based on one of the most widely used algorithms of numerical integration of Takagi equations, a method has been developed for modeling of dynamical diffraction of X-rays in crystal-vacuum systems consisting of crystalline and vacuum regions. In the proposed method an explicit setting of boundary conditions at internal borders of the system to be studied is not required. For illustration this method was applied to the problem of X-ray diffraction in polyhedral crystals.

