

УДК 548.7

ОБ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОМ ПОГЛОЩЕНИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В СЛАБОДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

К.Г. ТРУНИ, В.Р. КОЧАРЯН, Г.Р. ГРИГОРЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 16 сентября 2011 г.)

На основе решений уравнений Такаги динамической теории рассеяния рассмотрена задача бормановского поглощения (аномальное поглощение) рентгеновских лучей в слабо деформированных кристаллах. С помощью волновых функций дифрагированных волн в кристалле затухание волн представлено в виде $\exp(-\sigma l)$, где коэффициент затухания σ включает параметр, зависящий от поля деформации. Обсуждаются возможные случаи $\sigma = 0$, а также случаи $\sigma < 0$.

Интерференционное поглощение (эффект Бормана) [1,2] рентгеновского излучения наблюдается при динамической дифракции этого излучения на пространственной решетке совершенного кристалла. Сущность этого явления заключается в том, что волновое поле кристаллической решетки в условиях брэгговского отражения представляется в виде суперпозиции двух волновых мод – слабо и сильно поглощаемых полей, с разными распределениями амплитуд и фаз на атомных плоскостях рассматриваемого отражения. Для слабо поглощаемой моды это распределение имеет минимумы, тогда как сильно поглощаемая мода имеет максимумы на этих плоскостях. В результате этого для первой моды существенно уменьшаются, а для второй увеличиваются потери энергии рентгеновского фотона вследствие неупругого рассеяния на атомах, включая фотоэлектрическое поглощение, эффект Комптона и тепловое диффузное рассеяние. Отметим, что в подавляющем большинстве случаев динамического рассеяния основные потери обуславливаются фотоэлектрическим поглощением, которое примерно на два порядка превосходит два других эффекта. Очевидно, что искажения решетки кристалла приведут к перераспределению амплитуд и фаз волнового поля, что в свою очередь, приведет к нарушению условий аномального поглощения рентгеновского излучения в кристалле.

В настоящей работе рассматриваются особенности поглощения коротковолнового рентгеновского излучения в слабо деформированном кристалле, в котором смещения атомов $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ кристалла описываются квадратичной зависимостью от координат:

$$\mathbf{hu}(\mathbf{r}) = i\alpha\mathbf{s}_0\mathbf{s}_h. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{h} – вектор обратной решетки кристалла рассматриваемого отражения, s_0 и s_h (см. рис.1) – координаты косоугольной системы с осями, параллельными волновым векторам \mathbf{K}_0 и \mathbf{K}_h прошедшей и отраженной волн, соответственно. Волновое поле решетки кристалла представляется в виде суперпозиции этих волн с квазиамплитудами $\psi_0(\mathbf{r})$ и $\psi_h(\mathbf{r})$ с допущением, что последние являются макроскопическими функциями координат по сравнению с экспоненциальными фазовыми функциями [3]:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi_0(\mathbf{r})e^{-2\pi i\mathbf{K}_0(\mathbf{r})} + \psi_h(\mathbf{r})e^{-2\pi i\mathbf{K}_h(\mathbf{r})}, \\ (\mathbf{K}_h &= \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}), \\ |\mathbf{K}_h| &= |\mathbf{K}_0| = k(1 + \chi_0/2), \end{aligned} \quad (2)$$

где χ_0 – средняя поляризуемость решетки.

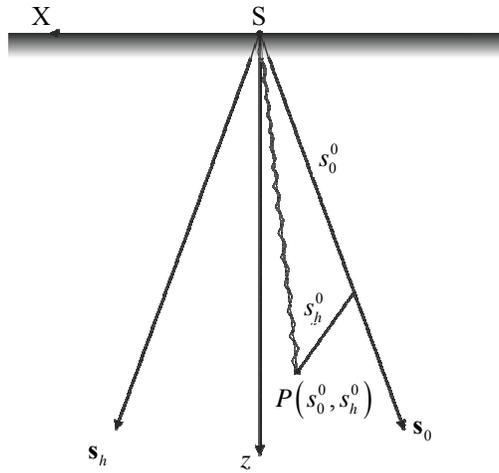


Рис.1. Схематическая картина распространения рентгеновского луча. Длина зигзагообразной линии определяет длину пути луча, достигающего точки наблюдения $P(s_0^0, s_h^0)$, $l = s_0^0 + s_h^0$. S – точечный источник излучения.

Квазиамплитуды ψ_0 и ψ_h волновых полей, составляющих проходящую и отраженную волну, в кристалле связаны функциями влияния $G_j(x, z)$ ($j = 0, \bar{0}, h, \bar{h}$) [4], определяющими влияние исходного излучения $\psi_i(x', z')$ в точке (x', z') плоскости входной поверхности ($z = 0$) на поле в точке наблюдения $P(x, z)$ плоскости рассеяния:

$$\psi_j(x, z) = \int G_j(x - x', z - z') \psi_i(x', z') dx', \quad (3)$$

где интегрирование проводится по сечению $z' = 0$ ($s'_0 + s'_h = 0$). Формула (3) представляет собой интегральную формулировку принципа Гюйгенса–Френеля в условиях брэгговской дифракции рентгеновского излучения на пространственной решетке кристалла.

В случае падающего излучения с точечным источником на входной поверхности кристалла в точке $x'=z'=0$ $\psi_i(x',z')=\delta(x')$, амплитуды дифрагированных волн поля в кристалле задаются непосредственно функциями влияния точечного источника $G_j(x,y)$ и могут быть представлены с помощью функций Уиттекера $M_{a,b}(z)$ [5]:

$$\psi_h(z) = e^{z/2} z^{-1/2} M_{a,0}(z), \quad (4a)$$

$$\psi_0(z) = \frac{\bar{\sigma}}{\beta s_h} e^{z/2} M_{a,1/2}(z), \quad (4б)$$

где $z = i\alpha s_0 s_h = i(\alpha/4) \left[(z/\cos\theta_B) - (x/\sin\theta_B)^2 \right]$, $a = \sigma\bar{\sigma}/i\alpha - 1/2$, θ_B – угол Брэгга.

Основным параметром, определяющим интерференционное поглощение в кристалле, является мнимая часть произведения

$$\chi_h \chi_h = \phi_{hr} + i\phi_{hi}, \quad (5)$$

где

$$\phi_{hr} = \chi_{hr} \chi_{hr} - \chi_{hi} \chi_{\bar{hi}}, \quad (6)$$

$$\phi_{hi} = \chi_{hr} \chi_{\bar{hi}} - \chi_{\bar{hr}} \chi_{hi},$$

Так как χ_{hr} и $\chi_{\bar{hr}}$, а также χ_{hi} и $\chi_{\bar{hi}}$ – комплексно сопряженные пары, то и ϕ_{hr} , и ϕ_{hi} реальны. С другой стороны, согласно определению волновых векторов K_h и K_0 имеем

$$\mathbf{K}_h^2 = \mathbf{K}_0^2 = K^2 (1 + \chi_0) (|\chi_0| \ll 1), \quad (7)$$

и так как $\chi_0 = \chi_{0r} + i\chi_{0i}$ тоже есть комплексная величина, то χ_{0i} выражается через линейный коэффициент поглощения кристалла μ :

$$\chi_{0i} = -\frac{\mu}{2\pi\mathbf{K}} < 0, \quad (8)$$

что и описывает потери рентгеновского излучения вследствие неупругого рассеяния излучения на атомах. В обычных случаях, когда частота излучения очень велика по сравнению с собственными частотами К-края поглощения вещества кристалла, имеем

$$|\chi_{0i}| \ll |\chi_{0r}|, \quad |\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|. \quad (9)$$

Следовательно, из (4) получаем

$$\phi_{hr} = \chi_{hr} \chi_{\bar{hr}} = |\chi_{hr}|^2 > 0, \quad |\phi_{hi}| \ll |\phi_{hr}|. \quad (10)$$

Возвращаясь к решениям (4а,б), заметим, что аргумент функции Уиттекера записывается в виде [6]

$$az = \left(\sigma \bar{\sigma} - \frac{i\alpha}{2} \right) s_0 s_h. \quad (11)$$

Из (11) очевидно, что параметр деформации решетки кристалла α вводит дополнительную мнимую часть, что в свою очередь означает дополнительное затухание или наоборот усиление амплитуды поля, не связанное с обычными явлениями поглощения излучения в кристалле. Это станет более наглядным, если рассмотреть асимптотическое поведение решения (4) вдали от краев дельты Бормана ($s_0 s_h = 0$) и малых деформаций, т.е. при допущениях

$$\frac{\sigma \bar{\sigma}}{|\alpha|} \gg 1 \quad \text{и} \quad \frac{\sigma \bar{\sigma}}{\alpha} \square |\alpha s_0 s_h|. \quad (12)$$

Асимптотическое представление при этом имеет вид

$$M_{a,0}(z) \cong \pi^{-1/2} \left(\frac{z}{a} \right)^{1/2} \cos \left(\sqrt{\left(\left(\sigma \bar{\sigma} - i \frac{\alpha}{2} \right) s_0 s_h - \frac{\pi}{4} \right)}. \quad (13)$$

Представление квазиамплитуды через косинусоидальную функцию – это результат когерентного наложения двух волновых мод слабо и сильно поглощаемых полей в решетке [7], распространение которых характеризуется двумя экспоненциальными функциями с комплексными аргументами. Теперь очевидно, что в результате деформации решетки, в зависимости от знака α разложение косинусов (13) в виде двух экспонент соответствует представлению волнового поля в кристалле в виде суперпозиции сильно и слабо поглощаемых мод. Очевидно, что законы ослабления интенсивностей этих мод вдоль траекторий лучей с учетом (13) запишутся в виде

$$e^{-\sigma l} = e^{-\left(\mu \pm \mu_l \sqrt{1-p^2} \right) (s_0 + s_h)}, \quad (14)$$

где верхний знак соответствует сильно, а нижний – слабо поглощаемым модам в недеформированном кристалле, μ_l – интерференционный коэффициент ослабления, включая член, обусловленный деформацией решетки:

$$\mu_l = 2\pi k c \chi_{hi} + \alpha/2 |\chi_{hr}| \pi k, \quad (15)$$

а $p = \tan \theta / \tan \theta_B$ есть параметр, определяющий угловое смещение от условия Брэгга соответствующей плоско-волновой компоненты в Фурье-разложении падающего пучка [8,9]; $l = s_0 + s_h$ интерпретируется как длина зигзагообразной ломаной вдоль траектории соответствующей моды (рис.1). Заметим, что первый член интерференционного ослабления (15) определяет эффект Бормана и описывает особенности явления неупругого взаимодействия волновой моды с атомами решетки, тогда как второй член не содержит параметров характеризующих подобные явления. Это означает, что второе слагаемое в (15) не связано с потерями волновой энергии и характеризует явления переброски энергии из одного поля в другое (из проходящего в отраженное или наоборот). Другими

словами, это явление экстинкции, т.е. экранировки атомных плоскостей данного отражения, когда некоторые плоскости настолько сильно отражают излучение, что исключают роль других плоскостей в формировании волнового поля в кристалле. При этом, в зависимости от знака α , т.е. от знака кривизны атомных плоскостей соответствующего отражения, этот член может усилить ($\alpha > 0$) эффект Бормана и/или, наоборот, подавить ($\alpha < 0$) это явление. При условии

$$|\alpha| = 4\pi^2 k^2 c^2 |\chi_{hr}| |\chi_{hi}| \quad (\alpha < 0) \quad (16)$$

интерференционный коэффициент исчезает, т.е. эффект Бормана оказывается полностью подавленным. При соответствующем выборе параметра α ($\alpha < 0$) можно достигнуть перестановки волновых мод, т.е. сильно поглощаемую моду превратить в слабо поглощаемую и наоборот. Условием этого является

$$|\alpha| > 4\pi^2 k^2 c^2 |\chi_{hr}| |\chi_{hi}|. \quad (17)$$

Еще одно важное заключение можно сделать из (13). Косинусоидальный член в (13) описывает интерференционное взаимодействие упомянутых волновых мод (Pendellösung-эффект). Комплексность аргумента этого члена обуславливает быстрое спадание видимости интерференционных полос этого явления из-за сильного различия коэффициентов поглощения двух взаимодействующих мод в совершенном кристалле ($\alpha = 0$). Появление в аргументе дополнительной мнимой части, пропорциональной α , может привести как к еще быстрому спаданию видимости, так и ее увеличению, вплоть до достижения стопроцентной видимости. Это произойдет при выполнении условия (15), когда амплитуды налагаемых волн сравниваются из-за подавления эффекта Бормана.

Для количественного анализа обсужденных выше теоретических результатов перепишем (14) в виде

$$e^{-\sigma l} = e^{-\left[1 \pm \left(\frac{|\chi_{hi}|}{|\chi_{oi}|} \pm \frac{\alpha}{4\pi^2 k^2 |\chi_{hr}| |\chi_{oi}| c^2} \right) \sqrt{1-p^2} \right] \frac{\mu z}{\cos \theta_B}} \quad (18)$$

и определим глубину $z_\alpha(p)$ проникновения излучения как глубину, на которой интенсивность поля падает в e раз, т.е. $\sigma l = 1$ или

$$\frac{z_\alpha(p)}{z_l} = \left[1 \pm \left(\frac{|\chi_{hi}|}{|\chi_{oi}|} \pm \frac{\alpha |\chi_{hr}|}{4\pi^2 k^2 c^2 |\chi_{oi}|} \right) \sqrt{1-p^2} \right]^{-1}, \quad (19)$$

где $z_l = \cos \theta_B / \mu$ – глубина проникновения при линейном поглощении в отсутствие дифракции (вдали от условия Брэгга ($p=1$)). Рассмотрим случай отражения $(10\bar{1}1)$ излучения MoK_α кристалла кварца, для которого численные значения параметров входящих в формулу (19) таковы:

$$\left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right| \approx 0.5, \quad \left| \frac{\chi_{hr}}{\chi_{oi}} \right| \approx 10^2, \quad \lambda = \frac{1}{k} \approx 0.71 \times 10^{-10} \text{ м.} \quad (20)$$

На рис.2 приведен график зависимости $z_\alpha(p)/z_l$ для различных значений параметра $(1/4\pi^2k^2)|\alpha/\Phi_{hr}| = 0; 0.001; 0.005; 0.01; 0.015$ для рассматриваемого отражения.

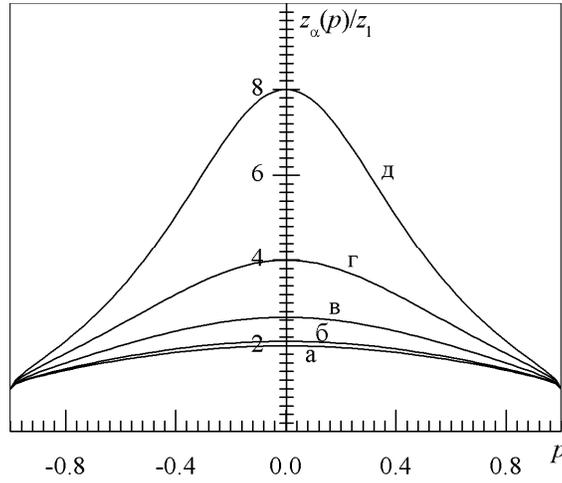


Рис.2. Зависимость $z_\alpha(p)/z_l$ слабо-поглощаемой моды для различных значений параметра $(1/4\pi^2k^2)|\alpha/\Phi_{hr}|$: а) 0, б) 0.001, в) 0.005, г) 0.01, д) 0.015.

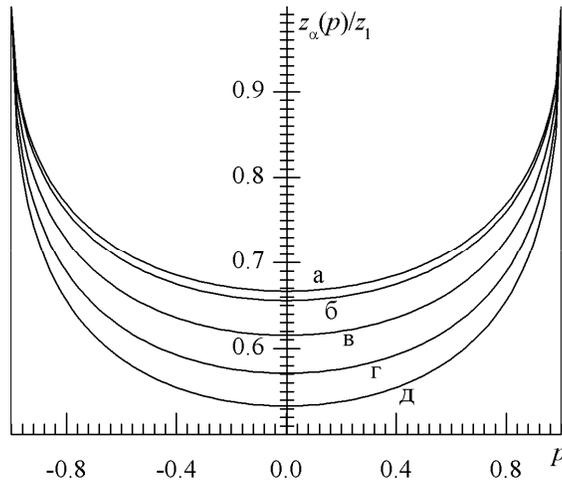


Рис.3. Зависимость $z_\alpha(p)/z_l$ сильно-поглощаемой моды для различных значений параметра $(1/4\pi^2k^2)|\alpha/\Phi_{hr}|$: а) 0, б) 0.001, в) 0.005, г) 0.01, д) 0.015.

Отметим, что в рассматриваемом нами примере отношение $|\chi_{hi}/\chi_{oi}| \approx 0.5$ относительно мало, в результате чего эффект Бормана выражен достаточно слабо, глубина проникновения интерференционного поля лишь в 2 раза превышает глубину линейного поглощения в недеформированном кристалле. С

увеличением параметра деформации α эта глубина увеличивается, достигая значения, в 8 раз превышающего глубину линейного поглощения при $(1/4\pi^2 k^2) \times |\alpha/\Phi_{hr}| = 0.015$. Та же глубина для сильно-поглощаемой моды падает монотонно с увеличением параметра α и имеет минимум в точке $p = 0$ (см. рис.3).

Более интересным являются случаи (см. рис.4), когда

$$\left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right| + \frac{|\alpha|}{4\pi^2 k^2 |\chi_{hr}|^2} \left| \frac{\chi_{hr}}{\chi_{oi}} \right| \geq 1. \quad (21)$$

При этом в зависимости $z(p)/z_l$ появляются разрывы в точках

$$p^2 = 1 - \left(\left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right| + \frac{|\alpha|}{4|\chi_{hr}|^2} \left| \frac{\chi_{hr}}{\chi_{oi}} \right| \right)^{-1}, \quad (22)$$

где $z_\alpha(p)/z_l \rightarrow \infty$, что означает равенство нулю коэффициента затухания интерференционного поля, а в области

$$p^2 < 1 - \left(\left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right| + \frac{|\alpha|}{4\pi^2 k^2 |\chi_{hr}|^2} \left| \frac{\chi_{hr}}{\chi_{oi}} \right| \right)^{-1} \quad (23)$$

$z_\alpha(p)$ становится отрицательным, что означает экспоненциальный рост интенсивности поля с углублением в кристалл.

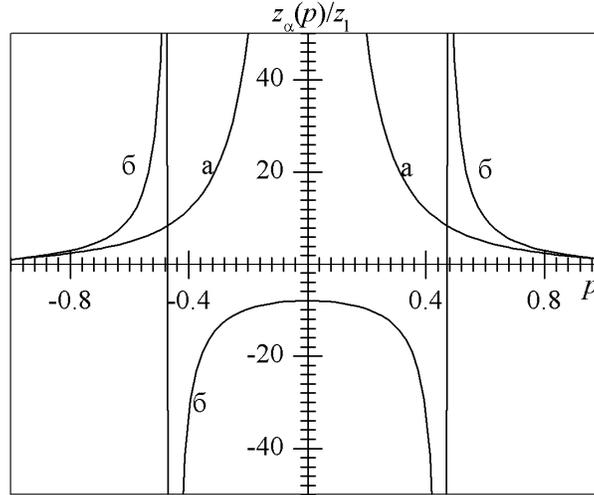


Рис.4. Зависимость $z_\alpha(p)/z_l$ слабо-поглощаемой моды для различных значений параметра $(1/4\pi^2 k^2) |\alpha/\Phi_{hr}|$ при условии $|\chi_{hi}/\chi_{oi}| + (|\alpha|/4|\chi_{hr}|^2) |\chi_{hr}/\chi_{oi}| \geq 1$: а) равно 1, б) больше 1.

Отметим, что ранее явление практического зануления коэффициента ослабления рентгеновского излучения в кристаллах кварца в условиях брэгговского отражения экспериментально было зарегистрировано в работах [10,11].

Авторы выражают благодарность академику А.Р. Мкртчяну за постановку задачи и внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.Authier.** Dynamical Theory of X-ray Diffraction. New York, Oxford University Press 2001.
2. **M.Laue.** Röntgenstrahl-Interferenzen, Akademische Verlag, Frankfurt am Main, 1960.
3. **S.Takagi.** Acta Crystallogr., **15**, 1311 (1962).
4. **В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуховский.** УФН, **107**, 229 (1972).
5. **П.В.Петрашень, Ф.Н.Чуховский.** ЖЭТФ, **69**, 477 (1975).
6. **Е.Янке, Ф.Эмде, Ф.Леш.** Специальные функции. М., Наука, 1968.
7. **L.V.Azaroff, R.Kaplow, N.Kato, R.J.Weiss, A.J.C.Wilson, R.A.Young.** X-Ray Diffraction. New York, McGraw-Hill, 1974.
8. **L.A.Naroutunyan, K.G.Trouni.** Opt. Commun., **90**, 173 (1992).
9. **Л.А.Арутюнян, К.Г.Труни.** Изв. НАН Армении, Физика, **5**, 272 (1999).
10. **В.К.Мирзоян, А.Р.Мкртчян, А.Г.Мкртчян, С.Н.Норейн, В.В.Вагнер, Г.Праде, В.Матц, Н.Шелл.** Тезисы докладов V Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучения, нейтронов и электронов для исследования наноматериалов и наносистем, Москва, 14–19 ноября 2005, с.286.
11. **В.Р.Кочарян, Р.Ш.Алексян, К.Г.Труни.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 290 (2010).

ԹՈՒՅԼ ԴԵՖՈՐՄԱՑԻԱՆԵՐԻ ԴԵՊՔՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ
ԻՆՏԵՐՖԵՐԵՆՅԱՅԻՆ ԿԼԱՆՄԱՆ ՄԱՍԻՆ

Վ.Գ. ԹՐՈՒՆԻ, Վ.Ռ. ՔՈՉԱՐՅԱՆ, Գ.Ռ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ

Ուսումնասիրված է ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցային կլանման երևույթը թույլ դեֆորմացված բյուրեղներում: Ցույց է տրված, որ որոշակի պայմաններում՝ կախված դեֆորմացիայի տիպից և դեֆորմացիոն դաշտով պայմանավորված շեղման ֆունկցիայի պարամետրերից, կարող է տեղի ունենալ ինտերֆերենցային մարման գործակցի զրոյացում, իսկ որոշ դեպքերում նաև մարման գործակցի նշանափոխություն, որը որոշակի սահմաններում բերում է դաշտի ինտենսիվության էքսպոնենտային աճի:

ON THE INTERFERENCE ABSORPTION OF X-RAYS IN CRYSTALS WITH WEAK DEFORMATIONS

K.G. TROUNI, V.R. KOCHARYAN, G.R. GRIGORYAN

The problem of Borrmann absorption (anomalous absorption) of X-rays in weakly deformed crystals is considered on the basis of Takagi's approach to the dynamical theory. Under wave function considerations, the attenuation of the rays is represented by $\exp(-\sigma l)$, where the attenuation factor σ includes a parameter of the lattice deformation field. The possibility of cases $\sigma = 0$ and even $\sigma < 0$ is discussed.