Известия НАН Армении, Физика, т.48, №3, с.216-220 (2013)

УДК 548.732

ЭЙКОНАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ПУЧКОВ С ДВУМЕРНОЙ КРИВИЗНОЙ ВОЛНОВОГО ФРОНТА. I. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения
e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 1 октября 2012 г.)

С учетом вторых производных амплитуд по координате, перпендикулярной к плоскости дифракции, представлено эйкональное приближение уравнений динамической дифракции рентгеновских пучков с двумерной кривизной волнового фронта. Дифрагированное поле вне кристалла, в вакууме, описывается эйкональным приближением параболического уравнения дифракции. Получены соответствующие уравнения эйконала и полные интегралы в случае идеального кристалла. Описан метод, который дает возможность с одной общей точки зрения, используя полные интегралы, найти эйконалы и траектории внутри и вне кристалла, удовлетворяющие заданным граничным условиям на входной и выходной поверхностях кристалла. Данный метод дает возможность описать дифракцию при достаточно общих предположениях о волновом фронте падающей на кристалл волны, а также для неплоских входной и выходной поверхностях кристалла.

1. Введение

В двухволновом случае динамическая дифракция рентгеновских пучков [1] описывается системой уравнений для медленно меняющихся амплитуд проходящей и дифрагированной волн. В этих уравнениях, в обычных геометриях дифракции, вторые производные амплитуд по переменным в плоскости дифракции можно отбросить. При некоторых предположениях можно отбросить также вторые производные по координате, перпендикулярной к плоскости дифракции (координата y). Вопрос о применимости такого предположения обсуждался, например, в работах [2,3]. Но существуют случаи дифракции, когда вторые производные по y становятся существенными. В работе [4] рассматривался вопрос о некомпланарной дифракции в условиях зеркального отражения для падающей волны с неплоским волновым фронтом. В этом случае вторые производные амплитуд по координате, перпендикулярной к плоскости дифракции, становятся существенными.

Уравнение эйконала динамической дифракции тоже является двумерным [5]. Эйконал зависит только от координат точек в плоскости дифракции и не зависит от y.

В данной статье из уравнений динамической дифракции, содержащих вторые производные амплитуд по переменной y, получено соответствующее уравнение эйконала. Найден полный интеграл уравнения эйконала в идеальном кристалле, что дает возможность построить решение, удовлетворяющее заданным граничным условиям на входной поверхности кристалла, и определить траектории внутри кристалла. Дальнейшее распространение дифрагированной волны за кристаллом описывается параболическим уравнением дифракции для амплитуды (см., например, [6]). Для этого уравнения получены соответствующее уравнение эйконала и полный интеграл, что дает возможность построить решение уравнения эйконала и найти траектории, удовлетворяющие заданным граничным условиям на выходной поверхности кристалла.

2. Уравнения эйконала внутри кристалла и в вакууме

2.1. Уравнение эйконала внутри кристалла

В условиях двухволновой дифракции волновое поле в кристалле ищется в виде

$$E = \left(\tilde{E}_0 e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}} + \tilde{E}_h e^{i\mathbf{K}_h\mathbf{r}} \right) e^{ik\chi_0 z/2\cos\theta}. \tag{1}$$

Представление (1) написано для одного из возможных состояний поляризации, $\mathbf{K}_0$ – волновой вектор проходящей волны, $\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}$ – волновой вектор дифрагированной волны, $\mathbf{h}$ – вектор дифракции, $\mathbf{K}_0$ и $\mathbf{K}_h$ удовлетворяют точному условию Брэгга $\mathbf{K}_0^2 = \mathbf{K}_h^2 = k^2 = (2\pi/\lambda)^2$, k – волновое число в вакууме, λ – длина волны в вакууме, χ_0 – нулевая Фурье-компонента поляризуемости кристалла, θ – угол Брэгга, z – координата вдоль отражающих плоскостей в плоскости дифракции, $\tilde{E}_0$ и $\tilde{E}_h$ – амплитуды проходящей и дифрагированной волн, соответственно. Для амплитуд, сохранив вторые производные по координате y, приходим к следующим уравнениям динамической дифракции [2,4]:

$$\begin{aligned} &\partial^2 \tilde{E}_0 / \partial y^2 + 2ik\, \partial \tilde{E}_0 / \partial s_0 + k^2 \chi_{\bar{h}} \tilde{E}_h C e^{ihu} = 0, \\ &\partial^2 \tilde{E}_h / \partial y^2 + 2ik\, \partial \tilde{E}_h / \partial s_h + k^2 \chi_h \tilde{E}_0 C e^{-ihu} = 0, \end{aligned} \tag{2}$$

где s_0 и s_h – координаты вдоль проходящей и дифрагированной волн, соответственно, χ_h, $\chi_{\bar{h}}$ – фурье-коэффициенты поляризуемости кристалла для векторов обратной решетки $\mathbf{h}$ и $-\mathbf{h}$, соответственно, $\mathbf{u}$ – вектор смещения атомов из своих равновесных положений в идеальном кристалле, C – поляризационный фактор, равный 1 для σ-поляризации и $\cos 2\theta$ для π-поляризации (в дальнейшем C опускаем). Будем рассматривать дифракцию в идеальном кристалле ($\mathbf{u} = 0$). Из (2) перейдем к уравнениям для отдельных амплитуд:

$$\frac{\partial^4 \tilde{E}_{0,h}}{\partial y^4} + 2ik \left(\frac{\partial}{\partial s_0} + \frac{\partial}{\partial s_h} \right) \frac{\partial^2 \tilde{E}_{0,h}}{\partial y^2} - 4k^2 \frac{\partial^2 \tilde{E}_{0,h}}{\partial s_0 \partial s_h} - k^4 \chi_h \chi_{\bar{h}} \tilde{E}_{0,h} = 0. \tag{3}$$

Будем искать амплитуды эйконального приближения в виде

$$\tilde{E}_{0,h} = E_{0,h} e^{i\Phi}, \tag{4}$$

где Φ – эйконал, а $E_{0,h}$ – медленно меняющиеся амплитуды. Подставляя выражение (4) в (3), приходим к уравнению эйконала

$$\frac{\partial^4 \Phi}{\partial y^4} + 4k\cos\theta \frac{\partial \Phi}{\partial z}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial y}\right)^2 + 4k^2\left(\left(\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)^2 \cos^2\theta - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right)^2 \sin^2\theta\right) - k^4 \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0\,. \tag{5}$$

Здесь x – координата в плоскости дифракции, отсчитываемая в направлении, антипараллельном вектору дифракции **h**. Для нахождения полного интеграла, т.е. решения (5), зависящего от трех произвольных постоянных, ищем решение методом разделения переменных, т.е. в виде

$$\Phi = \Phi_1(x) + \Phi_2(y) + \Phi_3(z). \tag{6}$$

Подставляя (6) в уравнение (5), получим

$$\Phi = C_1 x + C_2 y \pm z\sqrt{C_1^2 \sin^2\theta + \sigma^2} \big/ \cos\theta - C_2^2 z \big/ 2k\cos\theta + C_3, \tag{7}$$

где C_1, C_2, C_3 – произвольные постоянные, $\sigma = k\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \big/ 2$, знаки "+" и "–" соответствуют слабо и сильно поглощающимся модам, соответственно. Имея полный интеграл (7), с помощью определенной процедуры находятся решение уравнения (5) и траектории, удовлетворяющие заданным граничным условиям [7]. Напомним суть этого метода. Пусть входная поверхность кристалла задана параметрически:

$$x = x(t_1,t_2),\; y = y(t_1,t_2),\; z = z(t_1,t_2), \tag{8}$$

а эйконал на входной поверхности задан функцией $\Phi_0(t_1,t_2)$ (эйконал падающей волны). Составляем систему

$$\begin{aligned} &\Phi_0(t_1,t_2) = \Phi\big(x(t_1,t_2), y(t_1,t_2), z(t_1,t_2)\big),\\ &\Phi_{0t_1} = \Phi_{t_1},\\ &\Phi_{0t_2} = \Phi_{t_2}. \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь индексы t_1 и t_2 у эйконалов означают дифференцирование по соответствующей переменной. Первое уравнение равносильно равенству на входной поверхности эйконалов падающей волны и волн внутри кристалла, второе и третье условия равносильны сохранению тангенциальной составляющей волнового вектора. Из (9) выражаем C_1, C_2, C_3 как функции параметров t_1, t_2. Подставляя эти функции в (7), находим так называемый общий интеграл, зависящий от двух параметров. Уравнение траекторий находим из системы

$$\begin{aligned} &\Phi_{t_1}\big(x,y,z,C_1(t_1,t_2),C_2(t_1,t_2),C_3(t_1,t_2)\big) = 0,\\ &\Phi_{t_2}\big(x,y,z,C_1(t_1,t_2),C_2(t_1,t_2),C_3(t_1,t_2)\big) = 0. \end{aligned} \tag{10}$$

Здесь каждой фиксированной паре (t_1, t_2) соответствует определенная траектория, выходящая из точки входной поверхности с координатами $\{x(t_1,t_2), y(t_1,t_2), z(t_1,t_2)\}$ и проходящая через точку $\{x, y, z\}$ внутри кристалла. Из системы (10), выражая t_1, t_2 через x, y, z и подставляя в общий интеграл $\Phi\left(x, y, z, C_1(t_1,t_2), C_2(t_1,t_2), C_3(t_1,t_2)\right)$, находим решение уравнения (5), удовлетворяющее поставленным граничным условиям.

2.2. Уравнение эйконала в вакууме

Будем рассматривать дальнейшее распространение дифрагированной волны в вакууме после дифракции в кристалле. Для определенности, не нарушая общности, будем рассматривать случай Лауэ, хотя те же самые рассуждения справедливы и для случая Брэгга. За кристаллом, в вакууме дифрагированная в кристалле волна опять же имеет вид $\tilde{E}_h e^{i\mathbf{K}_h\mathbf{r}}$ с медленно меняющейся амплитудой $\tilde{E}_h$, которая удовлетворяет параболическому уравнению дифракции (см., например, [6]):

$$\frac{1}{\cos^2\theta}\frac{\partial^2\tilde{E}_h}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\tilde{E}_h}{\partial y^2}+2ik\left(\frac{\partial\tilde{E}_h}{\partial z}\cos\theta-\frac{\partial\tilde{E}_h}{\partial x}\sin\theta\right)=0\,. \tag{11}$$

Как и в случае кристалла, представим $\tilde{E}_h$ в виде $E_h e^{i\Phi}$ и подставим в (11). В результате для эйконала получим уравнение

$$\frac{1}{\cos^2\theta}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right)^2+2k\left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\cos\theta-\frac{\partial\Phi}{\partial x}\sin\theta\right)=0. \tag{12}$$

Используя метод разделения переменных, находим полный интеграл уравнения (12)

$$\Phi=C_1\left(x+z\tan\theta\right)+C_2 y-\frac{C_1^2 z}{2k\cos^3\theta}-\frac{C_2^2 z}{2k\cos\theta}+C_3\,, \tag{13}$$

зависящий от трех произвольных постоянных C_1, C_2, C_3. Затем, используя метод, данный формулами (7)-(10), находим решение уравнения (12) и соответствующие траектории, удовлетворяющие заданным граничным условиям на выходной поверхности кристалла.

3. Заключение

С целью описания дифракции рентгеновского пучка с двумерной кривизной волнового фронта как в кристалле, так и за кристаллом в вакууме, использованы уравнения дифракции в кристалле, содержащие вторые производные амплитуд по координате, перпендикулярной к плоскости дифракции, а дальнейшее распространение пучка в вакууме описывается параболическим уравнением дифракции для амплитуды. Для этих уравнений найдены соответствующие уравнения эйконала и соответствующие полные интегралы в случае идеального кристалла. Описан способ, с помощью которого, зная полные интегралы, можно найти эйконал и траектории внутри и вне кристалла, удовлетворяющие заданным граничным условиям на неплоской входной и выходной поверхностях кристалла. Этот способ, в частности, может быть применен для исследования фокусировки рентгеновского пучка внутри и вне кристалла с неплоскими входной и выходной поверхностями.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S.Takagi.** J. Phys. Soc. Japan, **26,** 1239 (1969).
2. **К.Т.Габриелян, Ф.Н.Чуховский, Д.И.Пискунов.** ЖЭТФ, **96,** 834 (1989).
3. **L.V.Levonyan**, **M.K.Balyan.** Phys. Stat. Sol. (a), **140,** 247 (1993).
4. **М.К.Балян, Л.В.Левонян.** Изв. НАН Армении, Физика, **35**, 309 (2000).
5. **В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуховский.** УФН, **107,** 229 (1972).
6. **A.H.Grigoryan, M.K.Balyan, A.H.Toneyan.** J. Synchrotron Rad., **17**, 332 (2010).
7. **В.И.Смирнов.** Курс высшей математики, т. 4. М., Наука, 1981.

ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՃԱԿԱՏԻ ԵՐԿՉԱՓ ԿՈՐՈՒԹՅԱՄԲ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՓՆՋԵՐԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐԻ ԷՅԿՈՆԱԼԱՅԻՆ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅՈՒՆ: I. ՀԻՄՆԱԿԱՆ ԲԱՆԱՁԵՎԵՐ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Ներկայացված է ալիքային ճակատի երկչափ կորությամբ ռենտգենյան փնջերի դինամիկ դիֆրակցիայի հավասարումների էյկոնալային մոտավորություն՝ հաշվի առնելով ամպլիտուդների երկրորդ կարգի ածանցյալները ըստ դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց կոորդինատի: Դիֆրակցված դաշտը բյուրեղից դուրս՝ վակուումում, նկարագրվում է դիֆրակցիայի պարաբոլական հավասարմանը համապատասխանող էյկոնալային մոտավորությամբ: Ստացված են համապատասխան էյկոնալի հավասարումները և լրիվ ինտեգրալները: Նկարագրված է մեթոդ, որը թույլ է տալիս օգտվելով էյկոնալի հավասարումների լրիվ ինտեգրալներից, գտնել տրված սահմանային պայմաններին բավարարող էյկոնալները և հետագծերը բյուրեղի ներսում և բյուրեղից դուրս՝ վակուումում: Մեթոդը թույլ է տալիս դիֆրակցիան նկարագրել բյուրեղի վրա ընկնող դաշտի ալիքային ճակատի վերաբերյալ բավականին ընդհանուր ենթադրությունների, ինչպես նաև բյուրեղի ոչ հարթ մուտքի և ելքի մա-կերևույթների դեպքում:

EIKONAL APPROXIMATION OF DYNAMICAL DIFFRACTION EQUATIONS FOR X-RAY BEAMS WITH TWO-DIMENSIONAL CURVATURE OF THE WAVE FRONT. I. BASIC FORMULAS

M.K. BALYAN

Taking into account the second derivatives of amplitudes with respect to the coordinate perpendicular to the diffraction plane, the eikonal approximation of X-ray beam diffraction with two-dimensional curvature, is presented. The diffracted field outside the crystal, in the vacuum is described by the corresponding eikonal approximation of the parabolic equation of diffraction. The corresponding eikonal equations and complete integrals are obtained in case of perfect crystal. A method is described, by which the eikonals and trajectories inside the crystal as well as in vacuum, outside the crystal, satisfying the given boundary conditions, can be obtained. This method allows to describe the diffraction using sufficiently general assumptions on the incident wave front and for the non-plane entrance and exit surfaces of the crystal.