

УДК 548.732

РОЛЬ ВТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АМПЛИТУД В УРАВНЕНИЯХ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ПУЧКОВ

М.К. БАЛЯН*

Ереванский государственный университет, Армения

*e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 31 октября 2012 г.)

Рассмотрены уравнения динамической дифракции рентгеновских пучков, в которых сохраняются вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции. В случае идеального кристалла найдена запаздывающая функция Грина динамической задачи дифракции. Амплитуды проходящей и дифрагированной волны в кристалле представлены в виде свертки по поверхности кристалла с использованием найденной функции Грина. Такое представление может быть использовано для решения задач в геометриях Лауэ и Брэгг-дифракций в идеальном кристалле как с плоским, так и с неплоским входным и выходным поверхностями.

1. Введение

Уравнения двухволновой динамической дифракции рентгеновских пучков [1] двумерны – в них входят производные амплитуд по координатам точки в плоскости дифракции. Однако, при решении некоторого круга задач динамической дифракции возникает необходимость учитывать в этих уравнениях вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции (обычно координата u). Так, например, в работах [2,3], в связи с задачей двумерной фокусировки пучка с помощью кристалла, вектор смещения атомов которого из своих равновесных положений зависит от координаты u , обсуждался вопрос игнорирования вторых производных амплитуд по этой координате. В работе [4] вторые производные амплитуд сохранены при исследовании некомпланарной дифракции рентгеновского пучка в условиях зеркального отражения [5]. Зависимость амплитуд от u важна при исследовании фокусировки рентгеновского пучка с помощью кристалла с неплоским входным и выходным поверхностями. Такая фокусировка, без привлечения вторых производных, на основе плосковолновой теории, рассматривалась в [6,7]. Однако в [8] было представлено эйкональное приближение уравнений динамической дифракции, в которых сохранены вторые производные амплитуд. На основе такого эйконального приближения вопрос фокусировки рентгеновского пучка с помощью кристалла с неплоским входным и выходным поверхностями в симметричном случае Лауэ рассматривался в [9].

В данной статье найдена запаздывающая функция Грина уравнений динамической дифракции со вторыми производными амплитуд по y в идеальном кристалле. Решения для амплитуд внутри идеального кристалла представлены с помощью свертки амплитуд и функции Грина по поверхности кристалла. Такое представление дает возможность описать дифракцию внутри идеального кристалла как с плоским, так и с неплоским входной и выходной поверхностями для произвольного падающего пучка. В последующих работах полученное представление будет применено для выявления роли вторых производных амплитуд в асимметричной лауэвской и брэгговской дифракции внутри идеального кристалла с плоскими входным и выходным поверхностями, а также для оценок пространственной и временной когерентности пучков в рассматриваемом случае. Следует сказать, что здесь подразумевается существование одной несущей волны с расходимостью в обеих взаимоперпендикулярных плоскостях, что отличается от рассмотренной в [10] динамической дифракции широко расходящегося пучка. В [10] подразумевалось, что в дифракции участвуют все лучи, падающие под точным углом Брэгга на входную поверхность кристалла, и поэтому существует множество несущих волновых векторов. Для каждого волнового вектора задача решалась двумерно в соответствующей плоскости дифракции, тогда как в данной статье решается вопрос в одной плоскости дифракции, привлекая во внимание еще и третью координату для описания дифракции.

2. Основные формулы

В идеальном кристалле в условиях двухволновой динамической дифракции амплитуды E_0 , E_h проходящей и дифрагированной волны, соответственно, при сохранении вторых производных по координате y удовлетворяют уравнениям [2,4]

$$\begin{aligned} \partial^2 E_0 / \partial y^2 + 2ik \partial E_0 / \partial s_0 + k^2 \chi_{\bar{h}} E_h C &= 0, \\ \partial^2 E_h / \partial y^2 + 2ik \partial E_h / \partial s_h + k^2 \chi_h E_0 C &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, s_0 , s_h – координаты вдоль проходящей и дифрагированной волны, соответственно, χ_h , $\chi_{\bar{h}}$ – постоянные поляризуемости кристалла для данного отражения, $C = 1$ для σ -поляризации и $\cos 2\theta$ для π -поляризации, θ – угол Брэгга. В дальнейшем поляризационный фактор опускаем. Из системы (1), переходя к отдельным уравнениям для амплитуд, получим

$$\partial^4 E_{0,h} / \partial y^4 + 2ik(\partial / \partial s_0 + \partial / \partial s_h) \partial^2 E_{0,h} / \partial y^2 - 4k^2 \partial^2 E_{0,h} / \partial s_0 \partial s_h - k^4 \chi_h \chi_{\bar{h}} E_{0,h} = 0. \quad (2)$$

Как обычно, введем координату z вдоль отражающих плоскостей в глубь кристалла и координату x – антипараллельно вектору дифракции \mathbf{h} . Единичные векторы \mathbf{s}_0 , \mathbf{s}_h проходящей и дифрагированной волны, соответственно, составляют углы θ с направлением оси OZ (рис. 1). Производные по s_0 и s_h можно выразить через производные по x и z . Так как уравнения для амплитуд имеют один и тот же вид, то соответствующие функции Грина будут удовлетворять одному и тому же уравнению

$$\partial^4 G / \partial y^4 - 4ik \cos \theta \partial^3 G / \partial z \partial y^2 - 4k^2 (\cos^2 \theta \partial^2 G / \partial z^2 - \sin^2 \theta \partial^2 G / \partial x^2) - k^4 \chi_h \chi_{\bar{h}} G = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p). \quad (3)$$

Здесь δ в правой части есть дельта-функция Дирака, \mathbf{r}_p – радиус-вектор произвольной точки наблюдения P внутри кристалла (рис. 1), \mathbf{r} – радиус-вектор текущей точки в уравнении (3). Нахождение запаздывающей функции Грина про-

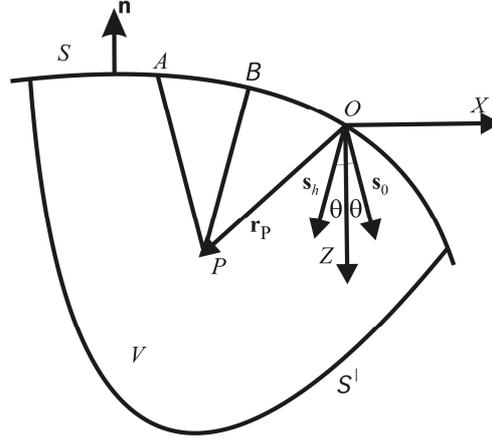


Рис. 1. Сечение в плоскости $y = y_p$ объема V и поверхности интегрирования $S + S'$. Показаны начало координат O и координатные оси в плоскости дифракции, единичные векторы в направлении проходящей и дифрагированной волн \mathbf{s}_0 и \mathbf{s}_h , соответственно, точка наблюдения P и ее радиус-вектор \mathbf{r}_p , сечения AP и BP плоскостей $(z_p - z)\text{tg}\theta - (x_p - x) = \text{const}$ и $(z_p - z)\text{tg}\theta + (x_p - x) = \text{const}$, соответственно, с плоскостью рисунка, внешняя нормаль \mathbf{n} в произвольной точке поверхности интегрирования.

водится методом преобразования Фурье по координатам x , y [11] и с последующим нахождением запаздывающего частного решения полученного неоднородного обыкновенного дифференциального уравнения по z [12] для Фурье-образа функции Грина. После проведения обратного преобразования Фурье найденного решения находим запаздывающую функцию Грина в виде

$$G(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}) = \frac{e^{-i\pi/4}}{4\pi} \frac{1}{2k^2 \sin 2\theta} \sqrt{\frac{2\pi k \cos \theta}{z_p - z}} e^{ik \frac{(y_p - y)^2}{2(z_p - z)}} \times J_0(\sigma \sqrt{(z_p - z)^2 \text{tg}^2 \theta - (x_p - x)^2}) H(z_p - z) H((z_p - z)\text{tg}\theta - |x_p - x|), \quad (4)$$

где $H(x)$ – функция Хевисайда, равная 1 при $x > 0$ и 0 при $x < 0$. Для нахождения амплитуд в уравнениях (2) переходим к переменным (x, y, z) , выделяем внутри кристалла объем V , содержащий точку P . Поверхность объема состоит из участка S поверхности кристалла и из части S' , находящейся внутри кристалла (рис. 1). Плоскости $(z_p - z)\text{tg}\theta - (x_p - x) = \text{const}$ и $(z_p - z)\text{tg}\theta + (x_p - x) = \text{const}$ находятся внутри объема V . Умножая (2) на функцию Грина, а (3) на соответствующую амплитуду, вычитая второе уравнение из первого, интегрируя по

выбранному объему и применяя теорему Гаусса–Остроградского, получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned}
E_{0,h}(\mathbf{r}_p) = & \oint \left(G \frac{\partial^3 E_{0,h}}{\partial y^3} - E_{0,h} \frac{\partial^3 G}{\partial y^3} + \frac{\partial E_{0,h}}{\partial y} \frac{\partial^2 G}{\partial y^2} - \frac{\partial G}{\partial y} \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y^2} \right) dS_y + \\
& + 4ik \cos \theta \oint \left(G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial z \partial y} + E_{0,h} \frac{\partial^2 G}{\partial z \partial y} - \frac{\partial}{\partial z} \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial y} \right) \right) dS_y + 4ik \cos \theta \oint G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y^2} dS_z - \quad (5) \\
& - 4k^2 \cos^2 \theta \oint \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial z} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial z} \right) dS_z + 4k^2 \sin^2 \theta \oint \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial x} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial x} \right) dS_x,
\end{aligned}$$

где dS_x , dS_y , dS_z – компоненты элемента $d\mathbf{S}$ поверхности на соответствующие оси координат. Интегрирование производится по замкнутой поверхности $S + S'$ объема V .

Исходя из наличия в выражении функции Грина функций Хевисайда, в конечном итоге интеграл берется только по поверхности S , точнее по участку AB поверхности S , заключенному между двумя пересечениями поверхности S и плоскостей $(z_p - z)\text{tg}\theta - (x_p - x) = \text{const}$ и $(z_p - z)\text{tg}\theta + (x_p - x) = \text{const}$. Имея в виду наличие функций Хевисайда, интеграл можно брать по поверхности S . Таким образом, получаем

$$\begin{aligned}
E_{0,h}(\mathbf{r}_p) = & \int_S \left(G \frac{\partial^3 E_{0,h}}{\partial y^3} - E_{0,h} \frac{\partial^3 G}{\partial y^3} + \frac{\partial E_{0,h}}{\partial y} \frac{\partial^2 G}{\partial y^2} - \frac{\partial G}{\partial y} \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y^2} \right) dS_y + \\
& + 4ik \cos \theta \int_S \left(G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial z \partial y} + E_{0,h} \frac{\partial^2 G}{\partial z \partial y} - \frac{\partial}{\partial z} \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial y} \right) \right) dS_y + 4ik \cos \theta \int_S G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y^2} dS_z - \quad (6) \\
& - 4k^2 \cos^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial z} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial z} \right) dS_z + 4k^2 \sin^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial x} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial x} \right) dS_x.
\end{aligned}$$

Для дальнейшего использования формулы (6) целесообразно оценить различные слагаемые, входящие в нее. Для оценок примем, что, как это следует из (1), $\partial E_{0,h}/\partial y \sim k\chi_h^{1/2} E_{0,h}$, $\partial^2 E_{0,h}/\partial y^2 \sim k\partial E_{0,h}/\partial z \sim k\partial E_{0,h}/\partial x \sim k^2\chi_h E_{0,h}$. Тогда первое слагаемое в (6) будет порядка $k^3\chi_h^{3/2} G E_{0,h}$, второе будет опять же порядка $k^3\chi_h^{3/2} G E_{0,h}$, остальные слагаемые будут порядка $k^3\chi_h G E_{0,h}$. Так как для рентгеновских лучей $|\chi_h| \sim 10^{-5} - 10^{-6}$, приходим к выводу, что в (6) можно отбросить первые два слагаемые, т.е. интегралы по dS_y . Тогда окончательно вместо (6) решение можно представить в виде

$$\begin{aligned}
E_{0,h}(\mathbf{r}_p) = & 4ik \cos \theta \int_S G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y^2} dS_z - 4k^2 \cos^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial z} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial z} \right) dS_z + \\
& + 4k^2 \sin^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial x} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial x} \right) dS_x. \quad (7)
\end{aligned}$$

Как видно из (7), представление решения внутри кристалла перейдет в известное выражение стандартной динамической теории [12,13], если пренебречь второй производной амплитуд по y в первом интеграле (7), а при интегрировании по y в двух оставшихся интегралах использовать метод стационарной фазы [14] со стационарной точкой $y_{st} = y_p$ функции $\exp[ik(y_p - y)^2/2(z_p - z)]$ в выражении функции Грина.

3. Заключение

Рассмотрены уравнения динамической дифракции, оставляя в них вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции. В случае идеального кристалла найдена запаздывающая функция Грина уравнения для амплитуд. Амплитуды проходящей и дифрагированной волн представлены в виде свертки с функцией Грина по поверхности кристалла. Такое представление решения может быть использовано для решения задач асимметричных лауэвской и брэгговской дифракций в идеальном кристалле как с плоским, так и неплоским входным и выходным поверхностями.

На основе полученного представления можно оценить требования пространственной и временной когерентности падающего пучка, необходимые для получения дифракционных картин.

Л И Т Е Р А Т У Р А

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. А.М.Афанас'ев, М.К.Melkonyan. Acta Cryst., **A39**, 207 (1983).
6. J.Hrdy. J. Synchrotron Rad., **5**, 1206 (1998).
7. J.Hrdy, J.Hoszowska, С.Мocuta, et al. J. Synchrotron Rad., **10**, 233 (2003).
8. М.К.Балян. Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 216 (2013).
9. М.К.Балян. Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 363 (2013).
10. Л.В.Левонян. Материалы научной конференции, посвященной 50-летию основания кафедры физики твердого тела ЕГУ, Ереван, 2007, с.4.
11. А.А.Соколов, И.М.Тернов. Релятивистский электрон. М., Наука, 1983.
12. В.С.Владимиров. Уравнения математической физики. М., Наука, 1981.
13. З.Г.Пинскер. Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.
14. А.Authier. Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford University Press, 2001.

A ROLE OF SECOND-ORDER DERIVATIVES OF AMPLITUDES IN X-RAY BEAM DYNAMICAL DIFFRACTION EQUATIONS

M.K. BALYAN

The dynamical diffraction equations, taking into account the second-order derivatives of amplitudes with respect to the direction perpendicular to the diffraction plane, are considered. For a perfect crystal the retarded Green's function for such equation is obtained. The amplitudes of primary and diffracted waves in the form of a convolution with Green's function along the entrance surface are presented. Such presentation of the solution can be used for diffraction tasks in Laue as well as in Bragg geometries in perfect crystals with plane and not plane entrance and exit surfaces.