

УДК 548.732

РЕНТГЕНОВСКАЯ БРЭГГОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ С УЧЕТОМ ВТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АМПЛИТУД В УРАВНЕНИЯХ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ

М.К. БАЛЯН*

Ереванский государственный университет, Армения

*email: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 13 марта 2013 г.)

Теоретически рассмотрена асимметричная брэгговская дифракция в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью. В уравнениях динамической дифракции учтены вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции. С использованием соответствующей функции Грина приведено общее выражение амплитуды волн в кристалле. Учтены как размеры источника по обоим направлениям, так и расстояние источник–кристалл и некогерентность падающего на кристалл излучения. На основе полученного выражения проанализированы когерентные характеристики поля в зависимости от размеров источника и ширины спектра падающего излучения.

1. Введение

Уравнения двухволновой динамической дифракции рентгеновских пучков двумерны – в них входят производные амплитуд по координатам точки в плоскости дифракции [1-3]. Если не наложить ограничений на расходимость пучка перпендикулярно к плоскости дифракции, то необходимо дальнейшее развитие теории. В работах [4,5], считая, что падающий пучок имеет значительную расходимость как в плоскости дифракции, так и в перпендикулярном направлении, с нахождением всех направлений на входной поверхности кристалла, удовлетворяющих точному условию Брэгга, была решена задача динамической дифракции как в симметричном случае Лауэ, так и в случае Брэгга. Каждый луч, удовлетворяющий точному условию Брэгга, выбирает свою плоскость дифракции, с перенормировкой глубины в кристалле с учетом координаты (обычно координата y), перпендикулярной к стандартной плоскости дифракции. В работах [6,7], в связи с задачей двумерной фокусировки пучка с помощью кристалла, вектор смещения атомов которого из своих равновесных положений зависит от координаты y , обсуждался вопрос игнорирования вторых производных амплитуд в уравнениях динамической дифракции по этой координате. В работе [8] вторые производные амплитуд сохранены при исследовании некопланарной дифракции рентгеновского пучка в условиях зеркального отражения

[9]. В [10] было представлено эйкональное приближение уравнений динамической дифракции, в которых сохранены вторые производные амплитуд по y . В работе [11] 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 плоской, так и с неплоской входной и выходной поверхностями для произвольного падающего пучка. Следует сказать, что здесь подразумевается существование одной несущей волны с расходимостью пучка в обеих взаимоперпендикулярных плоскостях, что отличается от рассмотренной в [4,5] динамической дифракции широко расходящегося пучка. В работе [12] полученное в [11] представление решений для амплитуд применено для выявления воздействия вторых производных амплитуд на лауэвскую дифракцию внутри идеального кристалла с плоской входной и выходной поверхностями, а также для оценок пространственной и временной когерентности пучков в рассматриваемом случае.

В настоящей работе полученное в работе [11] представление решения применяется для изучения воздействия вторых производных амплитуд на брэгговскую дифракцию внутри идеального кристалла с плоской входной поверхностью, а также для оценок пространственной и временной когерентности пучков в рассматриваемом случае. Учитываются расходимость пучка как в плоскости дифракции, так и в перпендикулярном направлении, а также расстояние источник-кристалл. На основе полученного выражения можно анализировать случаи, когда источник находится как в зоне Фраунгофера, так и в зоне Френеля и в непосредственной близости от кристалла.

2. Основные формулы

Рассмотрим асимметричную брэгговскую дифракцию в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью. Отражающие плоскости составляют угол α с входной поверхностью кристалла. Введем две системы координат. Одну из них – $OXYZ$, свяжем с отражающими плоскостями, а другую – $Oxyz$, с поверхностью кристалла (рис. 1a,b), причем ось OZ направлена вдоль отражающих плоскостей и находится между направлениями проходящей и дифрагированной волн, а ось OX антипараллельна вектору дифракции. Ось OY перпендикулярна к плоскости дифракции по правилу правой системы координат $OXYZ$. В идеальном кристалле, в условиях двухволновой динамической дифракции, амплитуды E_0 и E_h , проходящей и дифрагированной волн при сохранении вторых производных амплитуд по координате y , согласно [11], можно представить в виде

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = 4ik \cos \theta \int_S G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y'^2} dS_Z - 4k^2 \cos^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial Z'} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial Z'} \right) dS_Z + \\ + 4k^2 \sin^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial X'} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial X'} \right) dS_X, \quad (1)$$

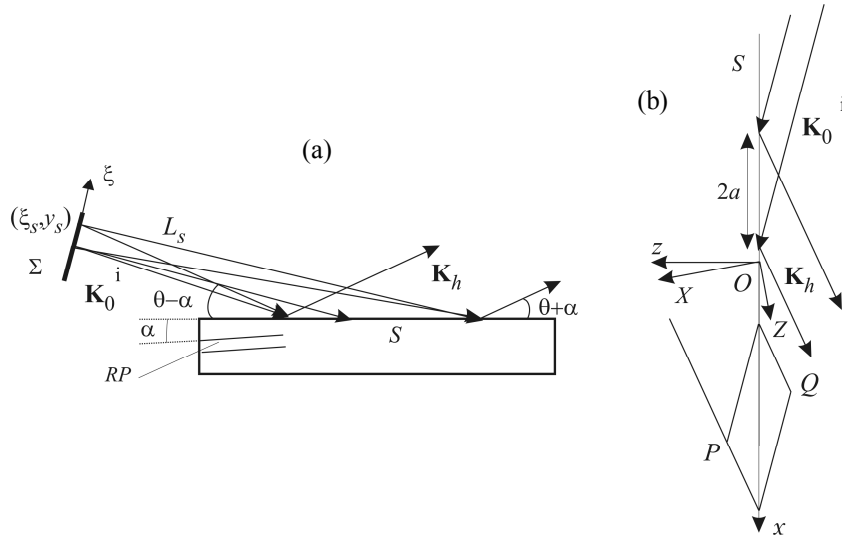


Рис.1. а) Общая схема дифракции. Показаны: Σ – протяженный источник рентгеновских лучей, направление оси $O\xi$, (ξ_s, η_s) – координаты некоторой точки источника, $\mathbf{K}_0^i$, L_s – средний волновой вектор падающей волны и среднее расстояние источник–кристалл, показаны лучи исходящие из точек источника $(0, \eta_s)$ и (ξ_s, η_s) , S – поверхность кристалла, RP – отражающие плоскости, показаны соответствующие углы, $\mathbf{K}_h$ – волновой вектор дифрагированной волны; б) Показаны координатные оси Ox , Oz и OX , OZ , ось Oy перпендикулярна плоскости рисунка, $2a$ – ширина пучка (щели), P – точка наблюдения внутри кристалла, показаны характеристики, проходящие через точку P , Q – вспомогательная точка вне кристалла.

где $\mathbf{r}(X, y, Z)$ – радиус-вектор точки наблюдения, $\mathbf{r}'(X', y', Z')$ – радиус-вектор текущей точки поверхности кристалла в интегралах формулы (1), $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, λ – длина волны, θ – угол Брэгга, G – запаздывающая функция Грина, dS_x , dS_z – проекции элемента dS поверхности кристалла на соответствующие оси координат, причем нормаль к dS направлена во внешнюю сторону объема кристалла. Запаздывающая функция Грина имеет вид

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{-i\pi/4}}{4\pi} \frac{1}{2k^2 \sin 2\theta} \sqrt{\frac{2\pi k \cos \theta}{Z - Z'}} e^{ik \frac{(y-y')^2 \cos \theta}{2(Z-Z')}} \times$$

$$\times J_0(\sigma \sqrt{(Z - Z')^2 \tan^2 \theta - (X - X')^2}) H(Z - Z') H((Z - Z') \tan \theta - |X - X'|), \quad (2)$$

где $H(x)$ – функция Хевисайда, равная 1 при $x > 0$ и 0 при $x < 0$, а $\sigma = kC(\chi_h \chi_{-h})^{1/2}/(2\sin \theta)$, C – поляризационный фактор, J_0 – функция Бесселя нулевого порядка, θ – угол Брэгга. Из-за наличия функций Хевисайда в выражении функции Грина (2), фактически интегрирование в (1) проводится по участку поверхности S , находящейся между двумя пересечениями поверхности кристалла с плоскостями (характеристиками) $Z \tan \theta - X = Z' \tan \theta - X'$ и $Z \tan \theta + X = Z' \tan \theta + X'$, проходящие через точку наблюдения (X, Z) (рис.1б). Координаты (X, Z) и (x, z) связаны преобразованием поворота

$$\begin{aligned} X &= x \sin \alpha + z \cos \alpha, \\ Z &= x \cos \alpha - z \sin \alpha. \end{aligned} \quad (3)$$

Последние два интеграла в (1) соответствуют стандартной теории динамической дифракции. Для последующего изложения удобно в этих интегралах перейти к интегрированию в координатной системе $Os_h y s_0$. Для этого заметим [11], что эти интегралы были получены при интегрировании по элементам объема $dX dy dZ$ с последующим применением теоремы Гаусса – Остроградского. Эти элементы объема перейдут в элементы объема $\sin 2\theta ds'_0 ds'_h dy'$. После использования теоремы Гаусса – Остроградского в двух последних интегралах (1) в этих новых переменных, вместо (1), получим

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = 4ik \cos \theta \int_S G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y'^2} dS_Z - 4k^2 \sin 2\theta \left(\int_S G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial s'_0} ds'_0 dy' + \int_S E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial s'_h} ds'_h dy' \right). \quad (4)$$

В случае Брэгга удобно выбрать функцию Грина так, чтобы она равнялась нулю для точек поверхности кристалла $\mathbf{r}(X', y', Z')$ для любой точки $\mathbf{r}(X, y, Z)$ [13]. Для этого необходимо к решению (2) неоднородного уравнения функции Грина добавить решение однородного уравнения функции Грина так, чтобы полученная функция Грина равнялась нулю на поверхности кристалла. Выберем некоторую точку Q вне кристалла (рис.1b). Тогда функция $G_1 = G(\mathbf{r}_Q - \mathbf{r}')$ будет решением однородного уравнения. Следуя [13], координаты точки Q можно выбрать из условия

$$\begin{aligned} s_{0Q} &= (\gamma_h / \gamma_0) s_h, \\ s_{hQ} &= (\gamma_0 / \gamma_h) s_0, \\ y_Q &= y. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь s_0, s_h – координаты точки наблюдения вдоль проходящей и дифрагированной волны, соответственно, а $\gamma_0 = \sin(\theta - \alpha)$, $\gamma_h = \sin(\theta + \alpha)$. Если за функцию Грина брать $\tilde{G} = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G_1(\mathbf{r}_Q - \mathbf{r}')$, то $\tilde{G} = 0$, когда $\mathbf{r}'$ и $\mathbf{r}$ принадлежат поверхности кристалла. Найдем такую функцию Грина, которая равняется нулю также для точек $\mathbf{r}$, принадлежащих объему кристалла (в том числе и поверхности), и для $\mathbf{r}'$, принадлежащих поверхности кристалла. С помощью Фурье-преобразования уравнения функции Грина можно показать, что таким свойством обладает такая функция Грина $\tilde{G}$, где для функции перед бесселевой функцией в выражении функции Грина (2) и в решении неоднородного уравнения, и в решении однородного уравнения берется $\mathbf{r}_Q = \mathbf{r}$, а в функции Бесселя для G_1 берется $\mathbf{r}_Q$ согласно (5). Точнее, выбираем функцию Грина в виде

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{e^{-i\pi/4}}{4\pi} \frac{1}{2k^2 \sin 2\theta} \sqrt{\frac{2\pi k \cos \theta}{Z - Z'}} e^{ik \frac{(y-y')^2 \cos \theta}{2(Z-Z')}} \times \\ &\times (J_0(\sigma \sqrt{(Z - Z')^2 \operatorname{tg}^2 \theta - (X - X')^2}) H(Z - Z') H((Z - Z') \operatorname{tg} \theta - |X - X'| - \\ &- J_0(\sigma \sqrt{(Z_Q - Z')^2 \operatorname{tg}^2 \theta - (X_Q - X')^2}) H(Z_Q - Z') H((Z_Q - Z') \operatorname{tg} \theta - |X_Q - X'|)). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь X_Q, Z_Q – координаты точки Q , которые определяются из (5). Если использовать функцию Грина (6) и учесть, что она равняется нулю на поверхности кристалла, то для любой точки наблюдения для амплитуд вместо (4) можно написать

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = -4k^2 \sin 2\theta \int_S E_{0,h} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial s'_h} ds'_h dy'. \quad (7)$$

Последнюю формулу можно привести к более удобному виду, учитывая, что фактически равенство нулю функции Грина на поверхности обеспечивается равенством нулю на поверхности функции

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & (J_0(\sigma \sqrt{(Z - Z')^2 \operatorname{tg}^2 \theta - (X - X')^2}) H(Z - Z') H((Z - Z') \operatorname{tg} \theta - |X - X'|) \\ & - J_0(\sigma \sqrt{(Z_Q - Z')^2 \operatorname{tg}^2 \theta - (X_Q - X')^2}) H(Z_Q - Z') H((Z_Q - Z') \operatorname{tg} \theta - |X_Q - X'|)). \end{aligned} \quad (8)$$

Обозначая

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{-i\pi/4}}{4\pi} \frac{1}{2k^2 \sin 2\theta} \sqrt{\frac{2\pi k \cos \theta}{Z - Z'}} e^{ik \frac{(y - y')^2 \cos \theta}{2(Z - Z')}}, \quad (9)$$

из (7) получим

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = -4k^2 \sin 2\theta \int_S E_{0,h} U \frac{\partial \tilde{G}}{\partial s'_h} ds'_h dy'. \quad (10)$$

Формула (10) отличается от соответствующей формулы стандартной теории [13] тем, что под интегралом входит функция U и интегрирование производится не только по s'_h , но и по y' .

Если произвести интегрирование по y' методом стационарной фазы, считая стационарной точкой $y'_{st} = y$ (стационарная точка функции U), то (10) переходит в соответствующее выражение стандартной теории. Вычислим амплитуду проходящей волны. Подставляя (8) в (10), для амплитуды проходящей волны получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{r}) = & 4k^2 \sin 2\theta \int_{-\infty}^{+\infty} E_0(s_h / b, y', s_h) U(s_0, y, s_h; s_h / b, y', s_h) dy' - \\ & - 4k^2 \sin \theta (\gamma_0 s_0 - \gamma_h s_h) \sigma \int_S E_0 U \frac{J_1(2 \sin \theta \sigma \Omega)}{\Omega} H(s_0 - s'_0) H(s_h - s'_h) dx' dy', \end{aligned} \quad (11)$$

где $\Omega = (s_0 - \gamma_h x' / \sin 2\theta)^{1/2} (s_h - \gamma_0 x' / \sin 2\theta)^{1/2}$. Здесь мы учли, что для точек поверхности $ds'_0 = \gamma_h dx' / \sin 2\theta$ и $ds'_h = \gamma_0 dx' / \sin 2\theta$.

Для того, чтобы найти амплитуду дифрагированной волны, как и в стандартной теории, воспользуемся уравнениями динамической дифракции с учетом вторых производных амплитуд по y [11] и выразим амплитуду дифрагированной волны с помощью амплитуды проходящей волны. Выполняя необходимые вычисления и используя выражение (11), для амплитуды дифрагированной волны находим

$$E_h(\mathbf{r}) = 4ik^2 \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \int_s E_0 U \left(\gamma_h \frac{J_1(2 \sin \theta \sigma \Omega)}{\Omega} \frac{s_h - \gamma_0 x' / \sin 2\theta}{s_0 - \gamma_h x' / \sin 2\theta} + \sigma \sin \theta \times \right. \\ \left. \times \left(\gamma_0 - \gamma_h \frac{s_h - \gamma_0 x' / \sin 2\theta}{s_0 - \gamma_h x' / \sin 2\theta} \right) J_0(2 \sin \theta \sigma \Omega) \right) H(s_0 - \gamma_h x' / \sin 2\theta) H(s_h - \gamma_0 x' / \sin 2\theta) dx' dy'. \quad (12)$$

Исходя из (12), нетрудно найти амплитуду дифрагированной волны на поверхности кристалла ($z = 0$):

$$E_h(\mathbf{r}) = 4ik^2 \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sin 2\theta \int_s E_0 U \frac{J_1(\tilde{\sigma}(x - x'))}{x - x'} H(x - x') dx' dy'. \quad (13)$$

Здесь $\tilde{\sigma} = \sigma \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} / \cos \theta$.

3. Протяженный квазимонохроматический источник

Будем считать, что источник излучает квазимонохроматическую волну с максимумом интенсивности на длине волны λ_m . Пусть источник имеет размеры, причем в плоскости дифракции координата произвольной точки источника пусть будет ξ_s (рис. 1а) (ось $O\xi$ находится в плоскости источника и в плоскости дифракции), а в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении $-y_s$. Из каждой точки источника с координатами (ξ_s, y_s) излучается сферическая волна. Будем считать, что центральная точка источника $(0,0)$ находится на расстоянии L_s от кристалла, причем волновой вектор $\mathbf{K}_0^i$, направленный от точки $(0,0)$ источника перпендикулярно к источнику, будем считать несущим волновым вектором. Для различных длин волн длины волновых векторов $\mathbf{K}_0^i$ различны $-|\mathbf{K}_0^i| = k = 2\pi/\lambda$, но направления всех $\mathbf{K}_0^i$ для всех длин волн одинаковы. Нам необходимо разложить фазу падающей волны до четвертого порядка по $1/L_s$ включительно, так как оставлены вторые производные амплитуд по y в уравнениях динамической дифракции. Нетрудно видеть, что для источника с координатами (ξ_s, y_s) падающая волна будет иметь вид

$$E_0^i e^{i\Phi^i} e^{i\mathbf{K}_0^i \mathbf{r}'} / L_s, \quad (14)$$

причем

$$\Phi^i = k \frac{\left[(x' \gamma_0 - \xi_s)^2 + (y' - y_s)^2 \right]}{2L_s} - k \frac{x' \cos(\theta - \alpha)}{2} \frac{(y' - y_s)^2}{L_s^2} - k \frac{(y' - y_s)^4}{8L_s^3}. \quad (15)$$

Учитывая (14) и то, что внутри кристалла несущие волновые векторы проходящей и дифрагированной волн выбраны так, что удовлетворяют точному условию Брэгга для данной длины волны, а также рефракцию в кристалле, из непрерывности амплитуд на поверхности кристалла находим амплитуду проходящей волны на входной поверхности:

$$E_0 = \frac{E_0^i}{L_s} e^{i\Phi^i} e^{-ik\Delta\theta\gamma_0 x'} \exp \left[-ik \frac{\chi_0 x' \gamma_h (1+b)}{2 \sin 2\theta} \right]. \quad (16)$$

Здесь χ_0 — нулевая Фурье-компонента поляризуемости кристалла, $\Delta\theta(\lambda) =$

$K_{0x}^i - K_{0x} = \theta^i - \theta(\lambda)$ – отклонение от точного условия Брэгга для данной длины волны, а θ^i – угол скольжения относительно отражающих плоскостей для $\mathbf{K}_0^i$. Используя закон Брэгга, нетрудно видеть, что

$$\Delta\theta(\lambda) = \theta^i - \theta(\lambda_m) - \frac{\lambda - \lambda_m}{\lambda} \operatorname{tg}\theta = \Delta\theta(\lambda_m) - \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \operatorname{tg}\theta. \quad (17)$$

При интегрировании по y' в (13) учтем, что функция U , согласно (8), содержит быстро осциллирующую экспоненту, которая имеет стационарную точку $y'_{st} = y$. Разлагая остальные члены фазы около стационарной точки до линейных членов по $y' - y_{st}$ включительно и проведя интегрирование в бесконечных пределах по y' , из (13) для амплитуды дифрагированной волны на поверхности кристалла приходим к следующему представлению (здесь для определенности в аргументе амплитуды явно написаны координаты источника и длина волны):

$$E'_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\lambda) = A e^{i\Phi_0(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\lambda)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J_1(\tilde{\alpha}x')}{x'} e^{i\Phi(x, x', y; \xi_s, y_s, \Delta\lambda)} H(x') dx', \quad (18)$$

где $E'_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\lambda) = E_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\lambda) e^{ik\chi_0 Z / (2\cos\theta)}$, $A = i(E_0 / L_s) \sqrt{\chi_h / \chi_{\bar{h}}} \sqrt{\gamma_0 / \gamma_h}$, J_1 – функция Бесселя первого порядка,

$$\Phi_0 = k \left(\frac{(y - y_s)^2}{2L_s} - \frac{(y - y_s)^4}{8L_s^3} - \frac{x \cos(\theta - \alpha)(y - y_s)^2}{2L_s^2} - \Delta\theta\gamma_0 x + \frac{(x\gamma_0 - \xi_s)^2}{2L_s} \right), \quad (19)$$

$$\Phi = k \left\{ \frac{x'^2 \gamma_0^2}{2L_s} + \frac{\chi_0 x' \gamma_h (1 + b)}{2 \sin 2\theta} + \Delta\theta\gamma_0 x' - \frac{(y - y_s)^2}{2L_s^2} x' \gamma_0 \operatorname{tg}\theta - x' \gamma_0 \frac{x\gamma_0 - \xi_s}{L_s} \right\}. \quad (20)$$

Как видно из формулы (18), существенно новой по сравнению со стандартной теорией [13] является появление отклонения от условия Брэгга по координате y в выражении для Φ формулы (20). Как и следовало ожидать, зависимость отклонения от условия Брэгга по координате y является квадратичной. Этот член и должен обуславливать нетривиальную зависимость амплитуды и пространственной когерентности пучка от координаты y .

4. Временная и пространственная когерентность

В литературе имеется много работ по вопросу пространственной и временной когерентности в рентген-дифракционной оптике (см., например, [14-18]). Эта задача рассматривалась также в сравнительно недавно вышедших работах [12, 19-24]. Основной подход заключается в том, что для исследования пространственной когерентности протяженный источник делят на отдельные точечные источники и, суммируя результирующую интенсивность по координатам источников, рассматривают влияние размеров источника на дифракционную или же на интерференционную картину. Для исследования влияния временной когерентности либо получают уравнение распространения рентгеновского зависящего от времени импульса в кристалле, либо же падающую волну разлагают в Фурье-спектр – на отдельные монохроматические составляющие, и

после решения задачи для отдельной монохроматической компоненты суммируют результирующую интенсивность по длинам волн (или по частотам). Обсуждение пространственной и временной когерентности по формуле (18) проведем по аналогии с работами [12,19].

4.1. Влияние размеров источника: пространственная или поперечная когерентность

Зафиксируем длину волны и будем рассматривать интенсивность дифрагированной волны для данного точечного источника. Будем считать, что размеры источника по ξ меняются в пределах $(-a_h, a_h)$, а по y в пределах $(-a_y, a_y)$. После возведения в модуль квадрата выражения (18) и интегрирования по координатам источника в выражении интенсивности появится взаимная интенсивность типа

$$I_h(x', x'') = \int_{-a_h}^{a_h} \int_{-a_y}^{a_y} |E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2 \exp \left[i \frac{k\gamma_0}{L_s} (x'' - x') \left(-\xi_s + \operatorname{tg}\theta \frac{(y - y_s)^2}{2L_s} \right) \right] d\xi_s dy_s. \quad (21)$$

Если задать некоторое распределение интенсивности $|E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2$ по координатам источников, то можно провести интегрирование в (21) и затем, интегрируя по x' и x'' , найти окончательное выражение для интенсивности. Тогда интегрирование по координатам источников приведет к некоторой степени размазывания дифракционной картины до полного ее исчезновения в зависимости от размеров источника и точки наблюдения в кристалле. Можно непосредственно из (21) оценить размеры источника, при которых получается неразмытая дифракционная картина. Заметим, что при интегрировании по y_s можно член $\exp \left[i k \gamma_0 (x'' - x') \operatorname{tg}\theta y_s^2 / (2L_s^2) \right]$ считать медленным по сравнению с линейным членом в фазе по y_s , так как максимальное значение a_y обычно порядка 100 мкм, а L_s можно считать порядка метра. Оставляя в фазе главный член, линейный по y_s , взаимную интенсивность можно написать в виде

$$I_{hs}(x', x'') = \int_{-a_h}^{a_h} \int_{-a_y}^{a_y} |E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2 \exp \left[-i \frac{k\gamma_0}{L_s} (x'' - x') \left(\xi_s + \operatorname{tg}\theta \frac{y y_s}{L_s} \right) \right] d\xi_s dy_s. \quad (22)$$

Максимальное значение $x_{\max} = \max(x'' - x')$ будет определять влияние пространственных размеров источника на дифракционную картину. Обозначим размер пучка вдоль входной поверхности кристалла через $2a$ (рис.1b). Обозначим также через $|y|_{\max}$ максимальное значение модуля координаты y точки наблюдения. Согласно (22), для получения четкой дифракционной картины достаточно, чтобы

$$\frac{k\gamma_0}{L_s} x_{\max} a_h < \pi, \quad k\gamma_0 x_{\max} \operatorname{tg}\theta \frac{|y|_{\max} a_y}{L_s^2} < \pi, \quad (23)$$

что на языке длин волн равносильно условиям

$$2a_h \gamma_0 x_{\max} < \lambda L_s, \quad 2a_y \gamma_0 \operatorname{tg}\theta x_{\max} |y|_{\max} < \lambda L_s^2. \quad (24)$$

Из (24) следует, что

$$x_{\max} < \min(\lambda L_s / (2a_h \gamma_0), \lambda L_s^2 / (2a_y \gamma_0 \operatorname{tg} \theta |y|_{\max})) . \quad (25)$$

Если пучок узкий, т.е. $2a \leq 3.8 / \tilde{\sigma}_r$, где $\tilde{\sigma}_r = \operatorname{Re} \tilde{\sigma}$, а 3.8 – первый нуль функции $J_1(\tilde{\sigma}_r x')/x'$, то $x_{\max} = 2a$. В этом случае из (25) следует

$$2a < \min(\lambda L_s / (2a_h \gamma_0), \lambda L_s^2 / (2a_y \gamma_0 \operatorname{tg} \theta |y|_{\max})) . \quad (26)$$

В условиях реализуемости случая Като устанавливается узкая щель близко к поверхности кристалла и тогда можно подобрать щель такого размера, чтобы по всей ширине и высоте пучка выполнялось условие (26) и наблюдались маятниковые полосы случая Брэгга [13].

В случае широкой щели выполняется неравенство $2a > 3.8 / \tilde{\sigma}_r$ и, следовательно, $x_{\max} = 3.8 / \tilde{\sigma}_r$, так как функция $J_1(\tilde{\sigma} x')/x'$ выполняет роль обрезывающей функции при интегрировании и эффективная область интегрирования определяется первым нулем этой функции. В этом случае из (25) имеем

$$3.8 / \tilde{\sigma}_r < \min(\lambda L_s / (2a_h \gamma_0), \lambda L_s^2 / (2a_y \gamma_0 \operatorname{tg} \theta |y|_{\max})) . \quad (27)$$

В этом случае расходимость пучка из-за размеров источника сравнивается с шириной кривой отражения. При приближении источника к кристаллу при интегрировании в формуле (18) решающими становятся осцилляции функции $e^{i\Phi(x, x', y; \xi_s, y_s, \Delta\lambda)}$ и эффективные размеры определяются первой зоной Френеля около точки стационарности функции $e^{i\Phi(x, x', y; \xi_s, y_s, \Delta\lambda)}$. В этом случае $x_{\max} = 2(\lambda L_s)^{1/2} / \gamma_0$. Поэтому из (25) следует следующее условие:

$$2\sqrt{\lambda L_s} / \gamma_0 < \min(\lambda L_s / (2a_h \gamma_0), \lambda L_s^2 / (2a_y \gamma_0 \operatorname{tg} \theta |y|_{\max})) . \quad (28)$$

4.2. Влияние немонахроматичности источника: временная или продольная когерентность

Падающая волна обычно является квазимонохроматической. При суммировании интенсивности дифрагированной волны по длинам волн в выражении интенсивности появится взаимная интенсивность типа

$$I_h(x', x'') = \int_{-\Delta\lambda_1}^{\Delta\lambda_1} |E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2 \exp[ik\gamma_0 \operatorname{tg} \theta (x'' - x') \Delta\lambda / \lambda] d\Delta\lambda . \quad (29)$$

Здесь $\Delta\lambda_1$ задает ширину спектра падающей волны. В формуле (29), не нарушая общности, предполагается, что $2 \sin 2\theta \Delta\theta(\lambda_m) = |\chi_{0r}|(1+b)/b$. Поэтому из (29) получаем следующее достаточное условие:

$$x_{\max} < \lambda^2 / (2\Delta\lambda_1)(1/\gamma_0 \operatorname{tg} \theta) . \quad (30)$$

Для узкой щели из (30) получаем

$$2a < \lambda^2 / (2\Delta\lambda_1)(1/\gamma_0 \operatorname{tg} \theta) . \quad (31)$$

В случае широкой щели (30) приводит к результату

$$3.8 / \tilde{\sigma}_r < \lambda^2 / (2\Delta\lambda_1)(1/\gamma_0 \operatorname{tg} \theta) , \quad (32)$$

а в случае близко расположенного к кристаллу источника

$$2\sqrt{\lambda L_s} / \gamma_0 < \lambda^2 / (2\Delta\lambda_1)(1 / \gamma_0 \operatorname{tg}\theta). \quad (33)$$

Здесь $\lambda^2/(2\Delta\lambda_1)$ является продольной длиной когерентности падающего на кристалл излучения.

4.3. Эффективное расстояние источника, ширина спектра и размеры источника

В контексте излагаемых вопросов не излишне исследовать также изменение существенных параметров задачи после асимметричной дифракции. Введем в рассмотрение координату ξ_0 перпендикулярно к падающему пучку и ξ_h — перпендикулярно к дифрагированному пучку в плоскости дифракции. Тогда на поверхности имеем $x = \xi_0/\gamma_0 = \xi_h/\gamma_h$ и $\xi_0 = \xi_h b$. Выражая x через ξ_h и подставляя в выражение для фазы дифрагированной волны (19), можно сделать следующие выводы. Отклонение центрального луча от условия Брэгга $\Delta\theta$ заменяется на $\Delta\theta b$. Следовательно, $\Delta\lambda/\lambda$ заменяется на $b\Delta\lambda/\lambda$. Кроме того, расстояние L_s источника в плоскости дифракции заменяется на эффективное расстояние L_s/b^2 , а координата источника ξ_s в плоскости дифракции заменяется на ξ_s/b . Отсюда следует, что расходимость пучка ξ_s/L_s , обусловленная размером источника в плоскости дифракции, заменяется на $b\xi_s/L_s$. Таким образом, если $b < 1$, то в дифрагированной волне улучшаются монохроматичность и коллимация пучка в плоскости дифракции.

5. Заключение

В работе теоретически рассмотрена асимметричная брэгговская дифракция в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью. В уравнениях динамической дифракции учтены вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции. С использованием соответствующей запаздывающей функции Грина приведено общее выражение амплитуд волн в кристалле и на поверхности. Учтены как размеры источника по обоим направлениям, так и расстояние источник–кристалл и немонохроматичность падающего на кристалл излучения. Фаза падающей волны разложена до членов $1/L_s^4$ включительно, что в конечном итоге приводит к нетривиальной зависимости амплитуды от координаты y . Найденное выражение может быть использовано для анализа дифракционного поля в кристалле, когда кристалл находится как в зоне Фраунгофера падающего излучения, так и в зонах Френеля и в непосредственной близости от источника. На основе полученного выражения проанализированы когерентные характеристики поля в зависимости от размеров источника и ширины спектра падающего излучения. Показано также, что при асимметричной дифракции расстояние источник–кристалл, размер источника в плоскости дифракции, а также ширина спектра заменяются на соответствующие эффективные величины в зависимости от фактора асимметричности b . При $b < 1$ как коллимация пучка в плоскости дифракции, так и монохроматичность улучшаются по сравнению с соответствующими характеристиками падающего излучения.

Автор выражает благодарность сотруднику кафедры ФТТ ЕГУ Л.В.Левоняну за полезное обсуждение вопросов когерентности и дифракции вертикально расходящихся рентгеновских пучков в рентген-дифракционной оптике.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. **S.Takagi.** J. Phys. Soc. Japan, **26**, 1239 (1969).
2. **З.Г.Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.
3. **A.Authier.** Dynamical theory of X-ray diffraction. Oxford University Press, 2001.
4. **N.Kato.** Acta Cryst., **14**, 526 (1961).
5. **Л.В.Левонян.** Материалы научной конференции, посвященной 50-летию основания кафедры физики твердого тела ЕГУ, Ереван, 2007, с.4.
6. **К.Т.Габриелян.** Межвузовский сборник научных трудов, **I**, 19 (1992).
7. **К.Т.Габриелян, Ф.Н.Чуховский, Д.И.Пискунов.** ЖЭТФ, **96**, 834 (1989).
8. **L.V.Levonyan, M.K.Balyan.** Phys. stat. sol. (a), **140**, 247 (1993).
9. **М.К.Балян, Л.В.Левонян.** Изв. НАН Армении, Физика, **35**, 309 (2000).
10. **А.М.Afanas'ev, М.К.Melkonyan.** Acta Cryst., **A39**, 207 (1983).
11. **М.К.Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 216 (2013).
12. **М.К.Балян.** Изв. НАН Армении, Физика **48**, 363 (2013).
13. **М.К.Балян.** Изв. НАН Армении, Физика **49**, 62 (2014).
14. **T.Uragami.** J. Phys. Soc. Japan, **27**, 147 (1969).
15. **С.Л.Азизян, П.А.Безирганян.** ЖТФ, **41**, 2186 (1971).
16. **В.Л.Инденбом.** Кристаллография, **21**, 479 (1976).
17. **Л.В.Левонян, К.Г.Труни.** Изв. АН Арм.ССР, Физика, **13**, 108 (1978).
18. **Л.В.Левонян, К.Г.Труни.** Изв. АН Арм.ССР, Физика, **14**, 253 (1979).
19. **V.Holy.** Phys. stat. sol. (b), **101**, 575 (1980).
20. **V.Mocella, Y.Epelboin, P.Guigay.** Acta Cryst., **A56**, 308 (2000).
21. **F.N.Chukhovskii, E.Forster.** Acta Cryst., **A51**, 668 (1995).
22. **H.Yamazaki, T.Ishikawa.** J. Appl. Cryst., **35**, 314 (2002).
23. **М.К.Balyan.** Acta Cryst., **A66**, 660 (2010).
24. **V.A.Bushuev.** J. Synchrotron Rad., **15**, 495 (2008).
25. **V.G.Kohn.** J. Synchrotron Rad., **19**, 84 (2012).

X-RAY BRAGG DIFFRACTION WITH ALLOWANCE FOR THE SECOND DERIVATIVES OF AMPLITUDES IN DYNAMICAL DIFFRACTION EQUATIONS

M.K. BALYAN

Asymmetrical Bragg diffraction in a perfect crystal with plane entrance surface is considered theoretically. In the dynamical diffraction equations the second derivatives of amplitudes in the direction, perpendicular to the diffraction plane are taken into account. Using the corresponding Green function a general form for the amplitudes of waves in the crystal is presented. The sizes of the source in both directions as well as the distance source-crystal and non-monochromaticity of the radiation incident on the crystal are taken into account. On the basis of obtained formulas, the coherent properties of the field, depending on the sizes of the source and on the width of spectrum of the incident radiation, are analyzed.