

УДК 548.732

**КРИВЫЕ КАЧАНИЯ В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ
В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ОТКЛОНЕНИЯ ПАДАЮЩЕЙ
ПЛОСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ
ОТ УСЛОВИЯ БРЭГГА В ПЛОСКОСТИ ДИФРАКЦИИ
И В ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ К ПЛОСКОСТИ
ДИФРАКЦИИ НАПРАВЛЕНИИ**

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 30 сентября 2016 г.)

С использованием метода функции Грина в симметричной геометрии Лауэ теоретически исследованы кривые качания плоской рентгеновской волны в зависимости от отклонения пучка от точного условия Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. В качестве примера рассмотрено отражение Si(220) излучения $MoK\alpha$.

1. Введение

Интенсивность динамически дифрагированной рентгеновской плоской волны на выходной поверхности кристалла зависит от параметра отклонения от условия Брэгга. Эту зависимость называют кривой качания [1,2]. Обычно кривую качания получают качая кристалл в плоскости дифракции около точного брэгговского направления. В этом случае имеется один параметр отклонения от точного условия Брэгга – отклонение волны от условия Брэгга в плоскости дифракции. Как было показано в работе [3], кривую качания от параметра отклонения в плоскости дифракции можно получить в результате дифракции от удаленного точечного источника как распределение интенсивности на выходной поверхности кристалла. В этой работе падающая волна считается цилиндрической (как в стандартной теории динамической дифракции). В работах [4–6] была разработана динамическая теория, учитывающая двумерную кривизну волнового фронта падающей волны (учитываются вторые производные амплитуд в уравнениях динамической дифракции). Эта теория позволяет получить кривую качания как функцию от углов отклонения от некоторого точного направления Брэгга как в плоскости дифракции, так и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Здесь также, как и в [3], вместо рассмотрения различных плоских

волн можно рассматривать дифракцию от удаленного точечного источника и использовать идею локально-плоской волны. В этом случае кристалл находится в френгоферовой зоне источника. Такая задача была решена в работе [7].

В настоящей работе, используя развитую в [4–6] теорию, кривая качания в симметричном случае Лауэ получена как результат дифракции падающей плоской волны, имеющей два угла отклонения от условия Брэгга – угол отклонения в плоскости дифракции и угол отклонения в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении.

2. Основные формулы

Плоскостью дифракции называется плоскость, образованная волновым вектором \mathbf{K}_0^i падающей волны и вектором дифракции \mathbf{h} . Основной плоскостью дифракции будем называть плоскость дифракции, содержащую нормаль к входной поверхности кристалла (ось Oz , рис. 1а). Рассмотрим дифракцию, когда волновой вектор \mathbf{K}_0^i падающей плоской волны, в отличие от обычно рассматриваемых схем, имеет компоненты как в основной плоскости дифракции, так и в перпендикулярном направлении (рис. 1б). \mathbf{K}_0^i имеет компоненты $K_{0x}^i = k \sin \theta^i \cos \Phi$, $K_{0y}^i = k \sin \theta^i \sin \Phi$ и $K_{0z}^i = k \cos \theta^i$, где θ^i – угол между волновым вектором и осью Oz и Φ – угол отклонения волны от основной плоскости дифракции, который предполагается порядка нескольких угловых минут. Обозначим $\theta^i - \theta = \Delta\theta_{\parallel}$, где θ – угол Брэгга. Задачей является определить зависимость амплитуды дифрагированной волны от Φ и $\Delta\theta_{\parallel}$. С этой целью воспользуемся формулой для амплитуды дифрагированной волны внутри кристалла [5]

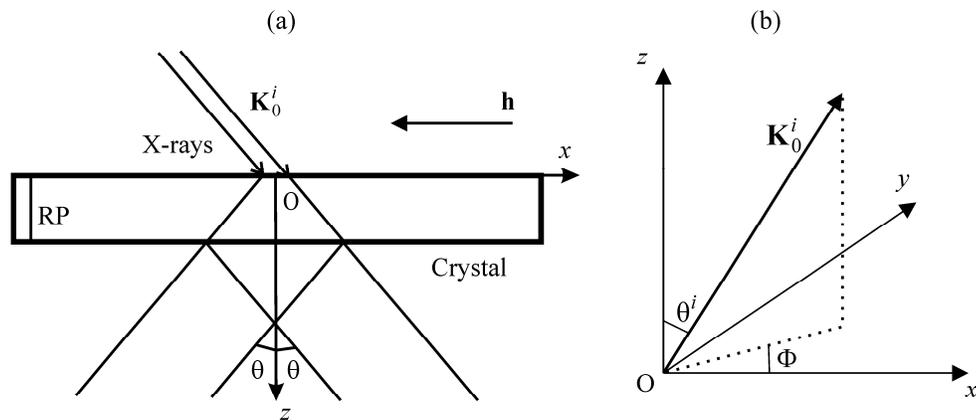


Рис. 1. (а) Основная плоскость дифракции: RP – отражающие плоскости, Oxz – координатная система, θ – угол Брэгга. (б) Волновой вектор \mathbf{K}_0^i падающей плоской волны и углы, составленные волновым вектором с осью Oz и с плоскостью дифракции.

$$E_h(\mathbf{r}) = 2ik\chi_h \cos\theta \int_S k^2 G(\mathbf{r}; x', y') E_0(x', y') dx' dy', \quad (1)$$

где интегрирование проводится по входной поверхности S кристалла, χ_h – Фурье-коэффициент поляризуемости кристалла для рассматриваемого отражения, $G(\mathbf{r}; x', y')$ – функция Грина [5] и $E_0(x', y')$ – амплитуда проходящей волны на входной поверхности кристалла ($z = 0$), которая определяется из граничного условия (амплитуда падающей волны считается равной единице и для простоты рассматривается случай σ -поляризованной волны)

$$E_0(x', y') = \exp[i(\mathbf{K}_0^i - \mathbf{K}_0)\mathbf{r}']. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{r}' – радиус-вектор произвольной точки входной поверхности кристалла, \mathbf{K}_0 – волновой вектор в основной плоскости дифракции, удовлетворяющий точному условию Брэгга. Используя малость углов Φ и $\Delta\theta$, из (2) получим

$$E_0(x', y') = \exp\left\{ik\left[\left(\Delta\theta_{\parallel} - \frac{\Phi^2}{2}\tan\theta\right)x'\cos\theta + \Phi y'\sin\theta\right]\right\}. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1) и используя выражение для функции Грина [5], сначала проводим интегрирование по y' в бесконечных пределах, после чего – по x' и находим

$$E_h(\mathbf{r}) = i\left(\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}\right)^{1/2} \exp\left[ik\left(x\cos\theta\Delta\theta - \frac{\Phi^2}{2}\tan\theta z\sin\theta + \Phi y\sin\theta\right)\right] \times \frac{\sin\frac{\pi z}{\Lambda_L}\sqrt{1+p^2}}{\sqrt{1+p^2}}, \quad (4)$$

где $\Lambda_L = \lambda\cos\theta/(\chi_h\chi_{\bar{h}})^{1/2}$,

$$p = \frac{\Delta\theta\sin 2\theta}{(\chi_h\chi_{\bar{h}})^{1/2}}, \quad (5)$$

$$\Delta\theta = \Delta\theta_{\parallel} - \frac{\Phi^2}{2}\tan\theta = \Delta\theta_{\parallel} + \Delta\theta_{\perp}. \quad (6)$$

В (6) введен обобщенный угол отклонения $\Delta\theta$ от условия Брэгга, являющийся суммой угловых отклонений в основной плоскости дифракции $\Delta\theta_{\parallel}$ и в перпендикулярном к этой плоскости направлении

$$\Delta\theta_{\perp} = -\frac{\Phi^2}{2}\tan\theta. \quad (7)$$

Для нахождения амплитуды проходящей волны используем уравнения динамической дифракции, содержащие вторые производные амплитуд [4]

$$E_0 = -\frac{1}{k^2 \chi_h} \left(\frac{\partial^2 E_h}{\partial y^2} + 2ik \frac{\partial E_h}{\partial s_h} \right), \quad (8)$$

где s_h – координата вдоль направления распространения дифрагированной волны. Подставляя (4) в (8) и выполняя необходимое дифференцирование, находим

$$E_0 = \exp \left[ik \left(x \cos \theta \Delta \theta - \frac{\Phi^2}{2} \tan \theta z \sin \theta + \Phi y \sin \theta \right) \right] \times \left(\cos \frac{\pi z}{\Lambda_L} \sqrt{1+p^2} - ip \frac{\sin \frac{\pi z}{\Lambda_L} \sqrt{1+p^2}}{\sqrt{1+p^2}} \right). \quad (9)$$

Полные амплитуды получаются из (4) и (9) умножением на фактор преломления

$$E'_{0,h} = E_{0,h} \exp \left(ik \frac{\chi_0 z}{2 \cos \theta} \right), \quad (10)$$

где χ_0 – нулевой Фурье-коэффициент поляризуемости кристалла. В соответствии с (10) коэффициенты прохождения и отражения равны:

$$T(\Delta \theta_{\parallel}, \Phi, z) = |E_0'|^2, \quad R(\Delta \theta_{\parallel}, \Phi, z) = |E_h'|^2. \quad (11)$$

Предметом дальнейшего обсуждения является изучение зависимостей T и R от $\Delta \theta_{\parallel}$ и Φ для двух различных фиксированных значений толщины и соответствующих факторов поглощения μz ($\mu = k\chi_{0i}$ – линейный коэффициент поглощения), причем эти углы могут варьироваться независимо друг от друга.

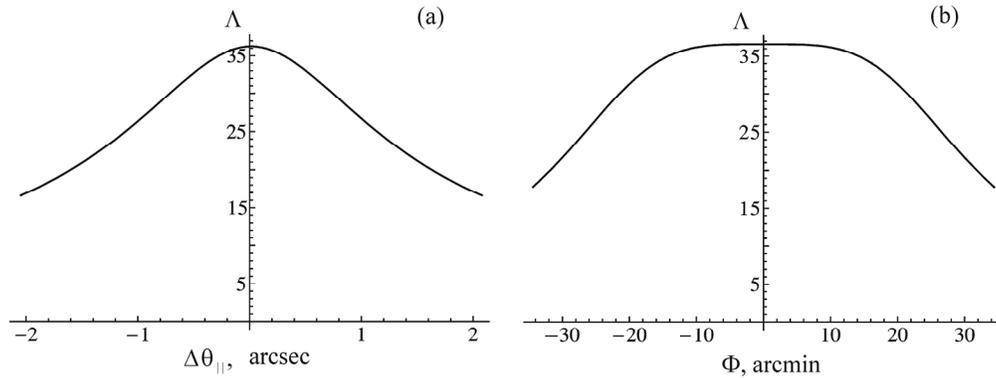


Рис.2. Зависимость экстинкционной длины от (а) $\Delta \theta_{\parallel}$ ($\Phi = 0$) и (б) Φ ($\Delta \theta_{\parallel} = 0$) для Si(220) и ($\text{Re} \Lambda_L = 36.6$ мкм) излучения MoK α .

3. Обсуждение результатов

Из формул (4) и (9) следует, что экстинкционная длина

$$\Lambda(\Delta\theta_{\parallel}, \Phi) = \operatorname{Re} \frac{\Lambda_L}{\sqrt{1+p^2}} \quad (12)$$

зависит от $\Delta\theta_{\parallel}$ и Φ . На рис.2 показаны зависимости экстинкционной длины от этих угловых отклонений.

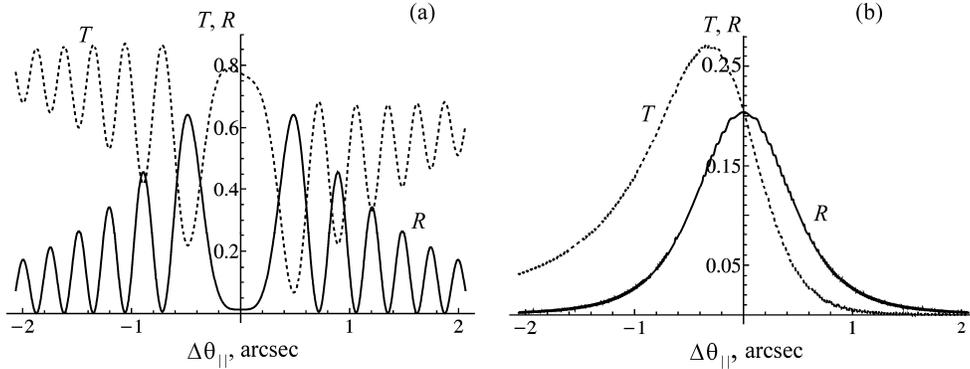


Рис.3. Кривые качания от $\Delta\theta_{\parallel}$ ($\Phi = 0$) при (a) $z = 5\operatorname{Re}\Lambda_L$ ($\mu z = 0.27$) и (b) $z = 102\operatorname{Re}\Lambda_L$ ($\mu z = 5.46$) для Si(220) и излучения $\text{MoK}\alpha$. Сплошная кривая – дифрагированная волна и пунктирная кривая – проходящая волна.

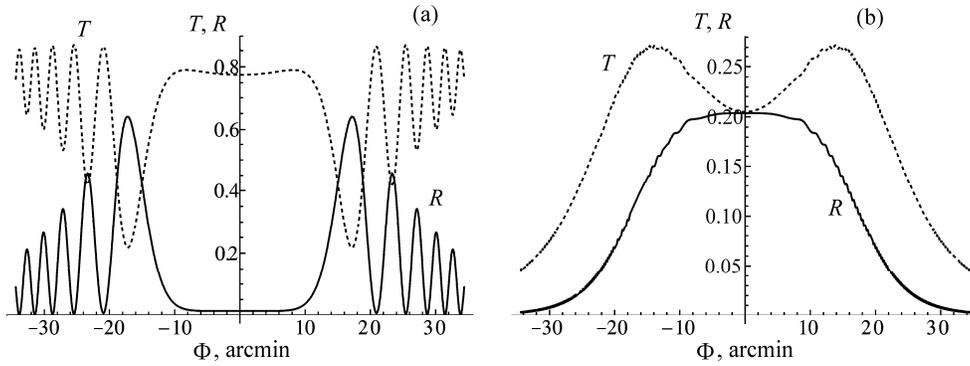


Рис.4. Кривые качания от Φ ($\Delta\theta_{\parallel} = 0$) при (a) $z = 5\operatorname{Re}\Lambda_L$ ($\mu z = 0.27$) и (b) $z = 102\operatorname{Re}\Lambda_L$ ($\mu z = 5.46$) для Si(220) и излучения $\text{MoK}\alpha$. Сплошная кривая – дифрагированная волна и пунктирная кривая – проходящая волна.

Если в формулы (11) подставить $\Phi = 0$ и рассмотреть зависимости T и R от $\Delta\theta_{\parallel}$, то получим классические кривые качания для прохождения и отражения в зависимости от углового отклонения в плоскости дифракции [1, 2] (рис.3). Если же в формулы (11) подставить $\Delta\theta_{\parallel} = 0$, то получим кривые качания для прохождения и отражения в зависимости от Φ (рис.4).

Сравнивая рис.3 и 4, можно заметить, что кривая для прохождения в зависимости от $\Delta\theta_{\parallel}$ асимметричная, а в зависимости от Φ – симметричная. Ширина полосы отражения в зависимости от Φ на несколько порядков превышает ширину полосы отражения от $\Delta\theta_{\parallel}$. Эти свойства кривых качания объясняются квадратичной зависимостью коэффициентов прохождения T и отражения R от Φ . На рис.3b и рис.4b виден эффект Бормана для толстого поглощающего кристалла. Из выражений (4), (9) и (11) следует, что постоянные значения коэффициентов прохождения и отражения находятся из условия

$$\Delta\theta_{\parallel} - \frac{\Phi^2}{2} \tan\theta = \text{const}, \quad (13)$$

причем при $\text{const} = 0$ падающая волна будет находиться в точном брэгговском положении, которому соответствует поворот пучка вокруг вектора дифракции с

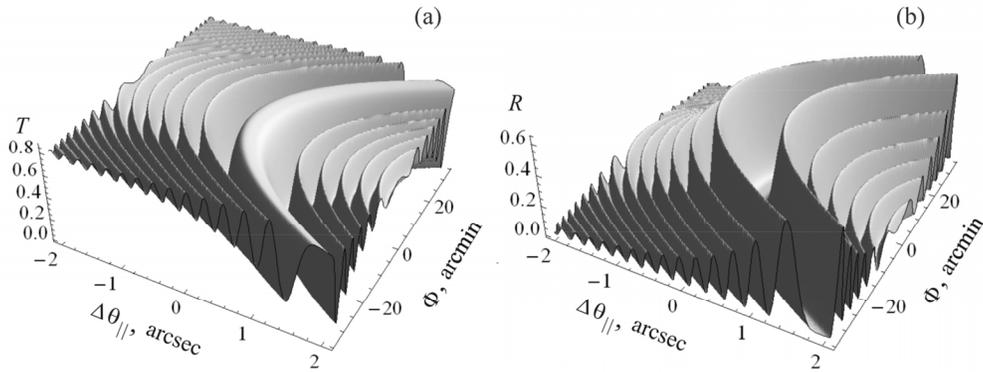


Рис.5. Кривые качания в зависимости от $\Delta\theta_{\parallel}$ и Φ : (а) проходящая волна и (б) дифрагированная волна для $z = 5\text{Re}\Lambda_L$ ($\mu z = 0.27$), Si(220) и излучения MoK α .

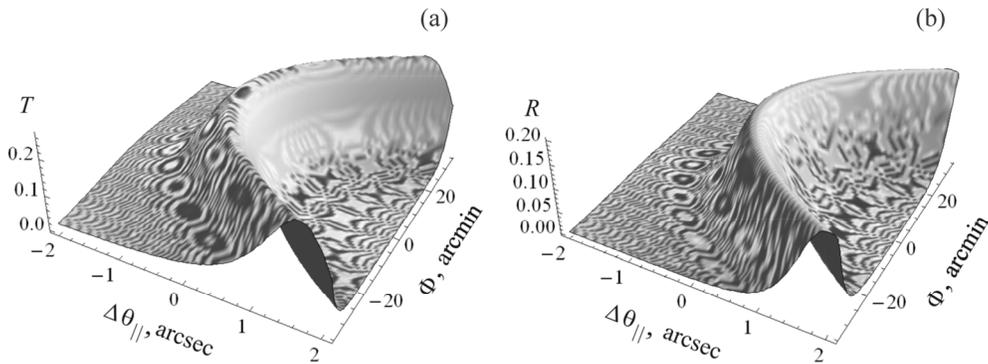


Рис.6. Кривые качания в зависимости от $\Delta\theta_{\parallel}$ и Φ : (а) проходящая волна и (б) дифрагированная волна для $z = 102\text{Re}\Lambda_L$ ($\mu z = 5.46$), Si(220) и излучения MoK α .

сохранением угла скольжения волнового вектора относительно отражающих плоскостей, равному точному углу Брэгга θ .

На рис.5 и 6 показаны коэффициенты прохождения и отражения (11) в зависимости от двух углов $\Delta\theta_{\parallel}$ и Φ одновременно. Хорошо видно, что постоянные значения этих коэффициентов лежат на кривых, удовлетворяющих условию (13).

Как видно из рис.2b и рис.4–6, коэффициенты прохождения T и отражения R , а также экстинкционная длина могут значительно изменяться, если угол Φ меняется на несколько угловых минут. Поэтому для обычных схем нет необходимости вводить поправки при измерениях, так как основную плоскость дифракции можно фиксировать с точностью долей угловой секунды. При этом измерения в зависимости от Φ с экспериментальной точки зрения намного легче проводить, так как требуемая точность положения кристалла порядка угловой минуты.

Также представляет интерес рассмотрение зависимостей от Φ для асимметричной дифракции, однако в этой работе мы ограничились симметричным случаем, так как применение метода функций Грина, учитывающего отклонение падающей волны от основной плоскости дифракции сложнее, чем для обычных схем дифракции. Кроме того, малые углы скольжения, когда требуется учитывать также зеркально-отраженные волны, не могут быть описаны с помощью примененной здесь теории, для них необходимо развить соответствующую теорию.

4. Заключение

Для симметричного случая Лауэ с использованием гриновского формализма динамической задачи дифракции для пучков с двумерной кривизной волнового фронта исследована зависимость коэффициентов прохождения T и отражения R динамически дифрагированной плоской рентгеновской волны в зависимости от двух углов отклонения от условия Брэгга – от углового отклонения в основной плоскости дифракции $\Delta\theta_{\parallel}$ и в перпендикулярном к этой плоскости направлении Φ . Вследствие квадратичной зависимости коэффициентов прохождения и отражения от угла Φ ширина кривых отражения и прохождения на несколько порядков превышает ширины кривых в зависимости от углового отклонения $\Delta\theta_{\parallel}$. Кроме того, зависимость коэффициента прохождения симметрична от Φ в отличие от зависимости $\Delta\theta_{\parallel}$. Исследована также зависимость экстинкционной длины от Φ .

Эти особенности кривых качаний можно экспериментально исследовать, применяя как лабораторные, так и синхротронные источники рентгеновского излучения, а также лазеры на свободных электронах.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-ray Diffraction. Oxford, Oxford University Press, 2001.
2. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
3. **V. Mocella, Y. Epelboin, P. Guigay.** Acta Cryst., **A56**, 308 (2000).
4. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 62, (2014).
5. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 130 (2014).
6. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 284 (2014).
7. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 446 (2014).

ԼԱՈՒԵԻ ԵՐԿՐԱԶՍՓՈՒԹՅԱՆ ՃՈՃՄԱՆ ԿՈՐԵՐԸ ԿԱԽՎԱԾ ՀԱՐԹ ԸՆԿՆՈՂ
ԱԼԻՔԻ ԲՐԵԳԻ ՊԱՅՄԱՆԻՑ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՀԱՐԹՈՒԹՅԱՆ ՄԵՋ ԵՎ
ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՀԱՐԹՈՒԹՅԱՆՆ ՈՒՂՂԱՀԱՅԱՑ ՈՒՂՂՈՒԹՅԱՄԲ ՇԵՂՈՒՄՆԵՐԻՑ
Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Լաուեի համաչափ երկրաչափության դեպքում՝ օգտվելով Գրինի ֆունկցիաների եղանակից, տեսականորեն հետազոտվել են հարթ ռենտգենյան ալիքի ճոճման կորերը՝ կախված Բրեգի ճշգրիտ պայմանից փնջի շեղման անկյունից, դիֆրակցիայի հարթության մեջ և դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ: Դիտարկված է օրինակ Si(220) $MoK\alpha$ անդրադարձման համար:

THE ROCKING CURVES IN THE LAUE GEOMETRY DEPENDING ON
DEPARTURE OF THE INCIDENT PLANE X-RAY WAVE FROM THE BRAGG
CONDITION IN THE DIFFRACTION PLANE AND IN THE PERPENDICULAR
TO DIFFRACTION PLANE DIRECTIONS

M.K. BALYAN

For the symmetrical Laue geometry using the Green functions method plane wave rocking curves depending on two departure angles in the diffraction plane and in the perpendicular direction to the diffraction plane from the Bragg angle are theoretically investigated. The Si(220) reflection of $MoK\alpha$ radiation is considered as an example.