Известия НАН Армении, Физика, т.53, №1, с.111–119 (2018)

УДК 548.732

КРИВЫЕ КАЧАНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ АСИММЕТРИЧНОЙ ДИФРАКЦИИ ЛАУЭ С ДВУМЕРНОЙ КРИВИЗНОЙ ВОЛНОВОГО ФРОНТА

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 5 октября 2017 г.)

Рассмотрена рентгеновская асимметричная дифракция Лауэ в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей на кристалл волны. С использованием соответствующей функции Грина изучены кривые качания в зависимости от углов отклонения от выбранного точного направления Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении в приближении локально-плоской волны. Исследована зависимость кривых качания от степени асимметричности геометрии дифракции. Получены аналитические выражения для полуширин кривых качания в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Оценены требования к пространственной и временной когерентности.

1. Введение

Коэффициенты прохождения и отражения динамически дифрагированной рентгеновской плоской волны на выходной поверхности кристалла зависят от параметра отклонения от условия Брэгга, от толщины кристаллической пластинки и от степени асимметричности геометрии дифракции. При фиксированных толщине и угле асимметрии зависимость коэффициентов от углового отклонения от условия Брэгга называется кривой качания [1, 2]. Кривую качания можно получить в результате дифракции от удаленного точечного источника как распределение интенсивности по углам отклонения на выходной поверхности кристалла [3]. В работах [1–3] рассматривается зависимость кривой качания от углового отклонения от условия Брэгга в плоскости дифракции. Была развита динамическая теория, учитывающая двумерную кривизну волнового фронта падающей волны (учитываются вторые производные амплитуд в уравнениях динамической дифракции в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении) [4, 5] и позволяющая изучить кривую качания как функцию от углового отклонения от некоторого точного направления Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Основываясь на работах [4, 5], такие исследования были проведены в симметричном случае Лауэ в рамках приближения локально-плоских волн [6] и в приближении плоской падающей волны [7].

В настоящей работе изучаются кривые качания с использованием дифракции волны от удаленного точечного источника с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающего излучения в асимметричном случае Лауэ.

2. Основные формулы

Согласно работе [5], амплитуду дифрагированной волны в асимметричном случае Лауэ (рис.1) в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью и с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей от точечного источника волны можно написать в виде

$$E_h(\mathbf{r}) = Ae^{i\Phi_0(\mathbf{r})}\int_{-l}^{l} J_0\left(\pi\frac{z}{\Lambda}\sqrt{1-x'^2/l^2}\right)e^{i\Phi(\mathbf{r},\mathbf{r}')}dx', \tag{1}$$

где

$$\begin{aligned}\Phi_0(\mathbf{r}) = k\frac{\chi_0 z}{4}\left(\frac{1}{\gamma_0}+\frac{1}{\gamma_h}\right)+k\gamma_0\Delta\theta\left(x-z\frac{1-b^2}{2b\sin 2\theta}\right)+\frac{k\gamma_0^2}{2L_S}\left(x-z\frac{1-b^2}{2b\sin 2\theta}\right)^2 + \\ +\frac{ky^2}{2L_S}-\frac{ky^2}{2L_S^2}\left(x\sin(\theta+\alpha)+z\gamma_h\frac{(1+b)^2}{4\cos^2\theta}\right)-\frac{ky^4}{8L_S^3},\end{aligned} \tag{2}$$

$$\Phi(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \beta(\mathbf{r})x' + \frac{kx'^2\gamma_0^2}{2L_S}, \tag{3}$$

$$\beta(\mathbf{r}) = k\gamma_0\left(\Delta\theta - \frac{\chi_0(1-b)}{2b\sin 2\theta}\right)+\frac{k\gamma_0}{L_S}\left(x\gamma_0 - z\gamma_h\frac{1-b^2}{2\sin 2\theta}-\operatorname{tg}\theta\frac{y^2}{2L_S}\right). \tag{4}$$

Здесь интегрирование проводится по входной поверхности кристалла Σ, θ – угол Брэгга, $\mathbf{r}$ – координата точки наблюдения, $\mathbf{r}'$ – координата точки на входной поверхности кристалла, $A = i\left(k\chi_h\gamma_0/2\sin 2\theta\right)\left(E_0^i/L_s\right)$, $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, χ_0, χ_h – Фурье-коэффициенты поляризуемости кристалла для направления прохождения и для данного отражения, $\gamma_0 = \cos(\theta+\alpha)$, $\gamma_h = \cos(\theta-\alpha)$, $b = \gamma_0/\gamma_h$ – коэффициент асимметричности, E_0^i – амплитуда падающей волны, $\Lambda = \lambda\sqrt{\gamma_0\gamma_h}/\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}$ ($\mathrm{Re}\,\Lambda$ – экстинкционная длина), $l = z\sin 2\theta/(2\gamma_0\gamma_h)$. Отклонение центрального луча падающей волны от точного условия Брэгга $\Delta\theta = \theta^i - \theta(\lambda) = \theta^i - \theta(\lambda_m) - \Delta\lambda tg\theta/\lambda$, где $\theta(\lambda_m)$ – угол Брэгга для длины волны

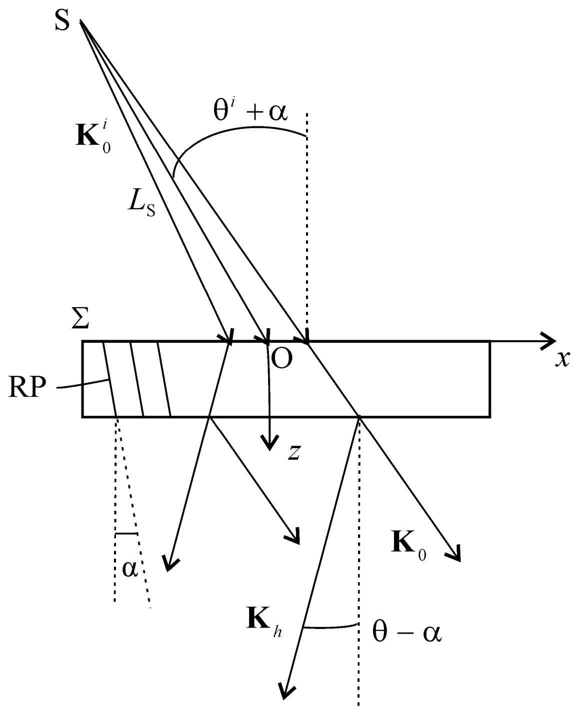

Рис.1. Схема асимметричной дифракции Лауэ: S – источник рентгеновской волны, $\mathbf{K}_0^i$ – средний волновой вектор падающей волны, L_S – расстояние источник–кристалл, θ^i – угол между волновым вектором и отражающими плоскостями, α – угол между отражающими плоскостями и внутренней нормалью к входной поверхности Σ, RP – отражающие плоскости, Oxz – координатная система в плоскости дифракции, ось Oy направлена перпендикулярно к плоскости дифракции по закону правой системы координат, $\mathbf{K}_0$ и $\mathbf{K}_h$ – волновые векторы проходящей и дифрагированной волн, удовлетворяющие точному условию Брэгга.

λ_m и λ_m – длина волны, соответствующая максимальной интенсивности в спектре падающей волны.

В выражении амплитуды (1) отличием от стандартной теории является зависимость локального параметра отклонения от условия Брэгга β не только от x, но и от координаты y.

3. Кривые качания в асимметричном случае Лауэ

Переход к локально-плоской волне осуществляется игнорированием квадратичным относительно x' членом в выражении $\Phi(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ (формула (3)). Соответствующую оценку, позволяющую такой переход, легко получить из условия $kx'^2\gamma_0^2 / 2L_S \ll \pi$:

$$L_S \gg L_{S0}\,, \qquad (5)$$

где $L_{S0} = z^2 \sin^2 2\theta/(\lambda\gamma_h^2)$. После игнорирования квадратичным членом в формуле (3) и используя табличный интеграл, для амплитуды дифрагированной волны в приближении локально-плоской волны из выражения (1) получим:

$$E_h(\mathbf{r}) = i\frac{E_0^i}{L_S}\sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}}\sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}}e^{i\Phi_0}\frac{\sin\frac{\pi z}{\Lambda}\sqrt{1+p^2}}{\sqrt{1+p^2}}, \tag{6}$$

$$p(x,y,z,\alpha) = \frac{2\sin 2\theta\,\Delta\Theta(x,y,z,\alpha) - \frac{\chi_0(1-b)}{b}}{2\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}\sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}}}, \tag{7}$$

$$\Delta\Theta(x,y,z,\alpha) = \Delta\theta + \frac{\gamma_0}{L_S}\left(x - z\frac{1-b^2}{2b\sin 2\theta}\right) - \mathrm{tg}\theta\frac{y^2}{2L_S^2}. \tag{8}$$

Отклонение $\Delta\Theta(x,y,z,\alpha)$ от условия Брэгга можно представить в виде суммы двух отклонений – в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении:

$$\Delta\Theta(x,y,z,\alpha) = \Delta\theta_{\parallel} + \Delta\theta_{\perp}, \tag{9}$$

$$\Delta\theta_{\parallel} = \Delta\theta + \frac{\gamma_0}{L_S}\left(x - z\frac{1-b^2}{2b\sin 2\theta}\right), \tag{10}$$

$$\Delta\theta_{\perp} = -\mathrm{tg}\theta\frac{y^2}{2L_S^2}. \tag{11}$$

В том же приближении амплитуду проходящей волны можно получить, используя уравнения динамической дифракции, содержащие вторые производные амплитуд по y [4]. Согласно этим уравнениям,

$$E_0 = -\frac{1}{k^2\chi_h}\left(\frac{\partial^2 E_h}{\partial y^2} + 2ik\frac{\partial E_h}{\partial s_h} + k^2\chi_0 E_h\right), \tag{12}$$

где s_h – координата вдоль направления дифрагированной волны. Подставим выражение (6) в (12) и выполним необходимое дифференцирование. Учитывая условие (5), можно проигнорировать члены с производными $\partial p/\partial x$, $\partial p/\partial y$, $\partial p/\partial z$ и $\partial^2\Phi_0/\partial y^2$. После чего получим

$$E_0 = \frac{E_0^i}{L_S}e^{i\Phi_0}\left(\cos\frac{\pi z}{\Lambda}\sqrt{1+p^2} - i\frac{p}{\sqrt{1+p^2}}\sin\frac{\pi z}{\Lambda}\sqrt{1+p^2}\right). \tag{13}$$

Выражения для амплитуд (6) и (13) совпадают с теми же выражениями для падающей плоской волны [1, 2], а отклонение от условия Брэгга (9) дается в зависимости от точки наблюдения. Поэтому коэффициенты прохождения и отражения будут определятся как

$$T(x,y,z,\alpha)=\frac{\left|E_0\right|^2}{\left(E_0^i/L_{\mathrm{S}}\right)^2}=$$
$$=e^{-\mu z\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\gamma_0}+\frac{1}{\gamma_h}\right)}\left|\cos\frac{\pi z}{\Lambda}\sqrt{1+p^2}-i\frac{p}{\sqrt{1+p^2}}\sin\frac{\pi z}{\Lambda}\sqrt{1+p^2}\right|^2, \tag{14}$$

$$R(x,y,z,\alpha)=\frac{\left|E_h\right|^2\gamma_h}{\left(E_0^i/L_{\mathrm{S}}\right)^2\gamma_0}=\left|\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}\right|e^{-\mu z\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\gamma_0}+\frac{1}{\gamma_h}\right)}\left|\frac{\sin\frac{\pi z}{\Lambda}\sqrt{1+p^2}}{\sqrt{1+p^2}}\right|^2, \tag{15}$$

где $\mu=k\chi_{0i}$ – линейный коэффициент поглощения кристалла, χ_{0i} – нулевая Фурье-компонента мнимой части поляризуемости кристалла. При фиксированных толщине кристалла и угле асимметричности из зависимостей (14) и (15) от координат определяются кривые качания.

Отметим, что приведенные формулы верны для σ-поляризации (фактор поляризации $C = 1$). Формулы для π-поляризации получаются заменой $\chi_h\to C\chi_h$ и $\chi_{\bar{h}}\to C\chi_{\bar{h}}$, где $C=\cos 2\theta$.

4. Полуширины кривых качания

Как известно [1, 2], полуширины кривых качания по переменной p определяются из условия $\left|\operatorname{Re} p\right|=1$, откуда для полуширины получаем $\Delta_p=2$. В дальнейшем, не нарушая общности, будем предполагать, что

$$\Delta\theta=\frac{\chi_{0r}(1-b)}{2\sin 2\theta b}, \tag{16}$$

где χ_{0r} – нулевая Фурье-компонента действительной части поляризуемости кристалла. Из формулы (7) следует, что кривая качания по переменной x в плоскости дифракции сконцентрирована около точки

$$x_0=z\frac{1-b^2}{2b\sin 2\theta}. \tag{17}$$

Тогда из $\Delta_p=2$ и формулы (7) для полуширины кривой качания в плоскости дифракции ($y = 0$) получим

$$\Delta_{x-x_0}=\frac{2\left|\chi_{hr}\right|L_{\mathrm{S}}}{\gamma_0\sin 2\theta b^{1/2}}, \tag{18}$$

где χ_{hr} – Фурье-компонента действительной части поляризуемости кристалла для данного отражения. Точно так же для полуширины кривой качания в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении при $x = x_0$ получим

$$\Delta_y = \frac{2\sqrt{|\chi_{hr}|}L_S}{\sin\theta b^{1/4}}. \tag{19}$$

Заметим, что точка $x = x_0$ соответствует точке выхода траектории для центрального луча, падающего в точке (0,0,0) на входную поверхность. Сравнение формулы (18) и (19) показывает, что в то время как полуширины в обоих направлениях пропорциональны расстоянию L_S, в плоскости дифракции полуширина пропорциональна $|\chi_{hr}|$ и обратно пропорциональна $b^{1/2}$, а в перпендикулярном направлении пропорциональна $\sqrt{|\chi_{hr}|}$ и обратно пропорциональна $b^{1/4}$.

5. Примеры кривых качания

Рассмотрим Si(220) отражение при λ = 0.71 Å (17.46 кэВ) для двух углов асимметрии $\alpha = -60^\circ$ и 60° ($b = 1.96$ и 0.51) и σ-поляризации. Для этих случаев асимметрии $\mathrm{Re}\,\Lambda = 17.3$ мкм (данные для кристалла взяты из работы [1]). Во всех

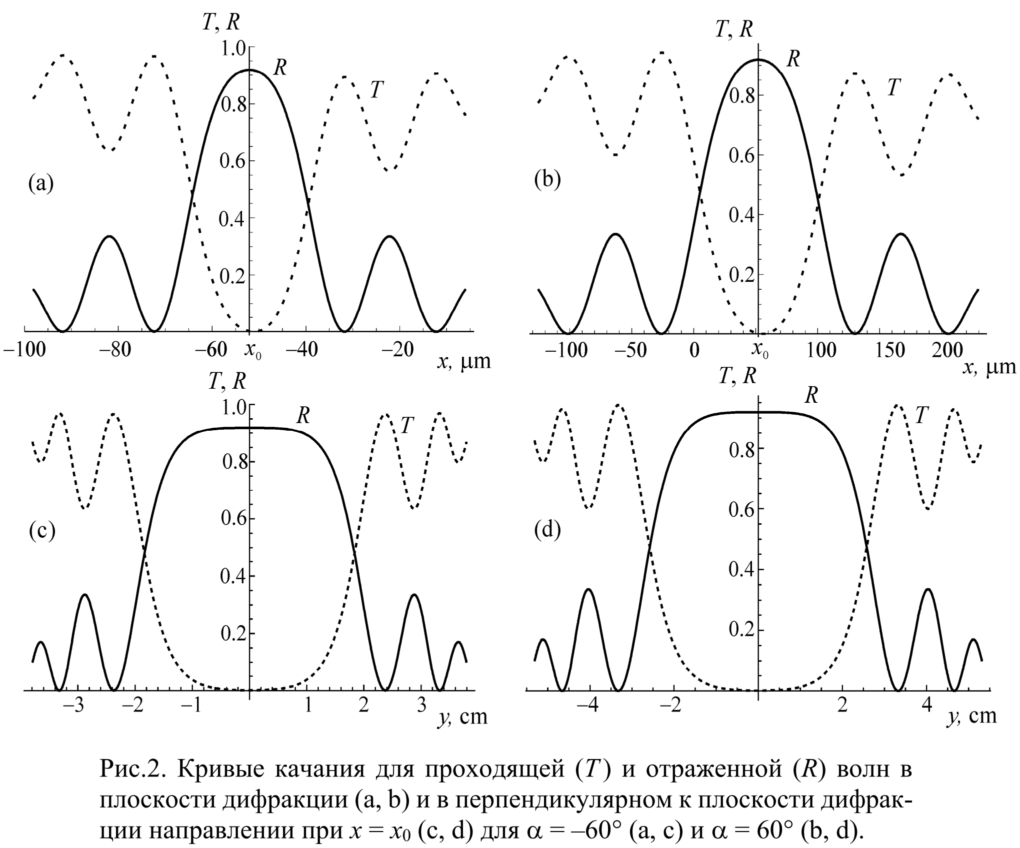

Рис.2. Кривые качания для проходящей (T) и отраженной (R) волн в плоскости дифракции (a, b) и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении при $x = x_0$ (c, d) для α = –60° (a, c) и α = 60° (b, d).

случаях толщина кристалла берется как $z = 1.5\,\mathrm{Re}\,\Lambda$, что соответствует $z = 26$ мкм. Согласно (5), соответствующие расстояния L_{S0} будут 2.84 и 0.74 м. Во всех случаях берем $L_S = 4$ м. Следует также отметить, что μz = 0.04, а x_0 = –52 и 52 мкм.

Кривые качания в плоскости дифракции, построенные с помощью приближения (14) и (15), показаны на рис.2a и 2b и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении (при $x = x_0$) показаны на рис.2c и 2d.

Из выражения (17) следует, что кривые качания в плоскости дифракции смещены на x_0, полуширина кривой качания при $\alpha = -60^\circ$ меньше, чем при $\alpha = 60^\circ$. Это согласуется с формулами (18) и (19).

Так как условие локально-плоской волны (5) наиболее точно выполняется при $\alpha = 60^\circ$, то с целью проверки точности сделанного приближения (5) на рис.3 кривые качания для отраженной волны сравниваются с более точными кривыми, вычисленными по формуле (1). Как ожидалось и видно из рис.3, приближение локально-плоской волны более точно выполняется при $\alpha = 60^\circ$ и хуже при $\alpha = -60^\circ$. На рис.4 приведены расчетные топограммы (позитивные) при $\alpha = 60^\circ$.

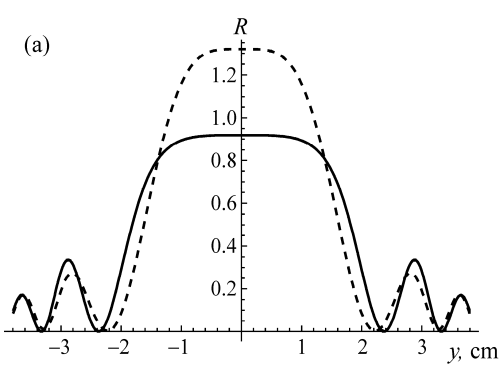

Рис.3. Сравнение кривых качания для отраженной волны в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении, вычисленных по приближенной (сплошные кривые) и точной (пунктирные кривые) формулам при $x = x_0$ для (a) $\alpha = -60^\circ$ и (b) $\alpha = 60^\circ$.

Предполагалось, что источник точечный, а падающее излучение монохроматическое. Такое допущение верно, когда выполняются условия пространственной и временной когерентности, налагаемые на падающее излучение. Оценки когерентности были даны в работе [5]. В предположении, что источник имеет одинаковые размеры в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении, эти условия приводят к следующим значениям для размера источника (пространственная когерентность) 10×10, 14×14 и 20×20 мкм^2

(для $\alpha = -60^\circ, 0$ и 60°, соответственно). Оценка временной когерентности приводит к значениям $\Delta\lambda / \lambda = 1.3 \times 10^{-5}$, 2×10^{-5} и 2.6×10^{-5} для случаев $\alpha = -60^\circ, 0$ и 60°, соответственно. Эти условия могут быть реализованы как с использованием синхротронного излучения и лазеров на свободных электронах, так и с помощью лабораторных источников рентгеновского излучения.

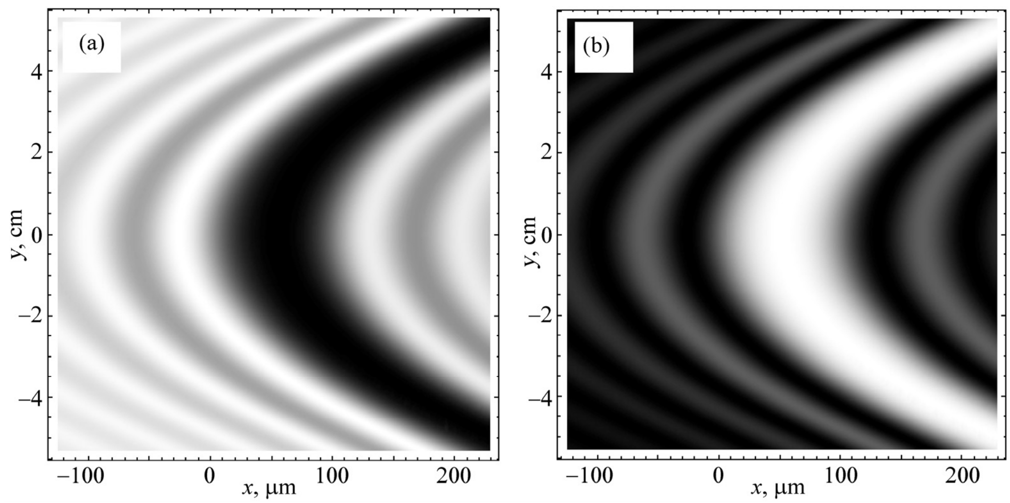

Рис.4. Расчетные топограммы для (a) проходящей и (b) дифрагированной волн при $\alpha = 60^\circ$.

5. Заключение

В общем случае интенсивности проходящей и отраженной волн на выходной поверхности кристалла при асимметричной дифракции Лауэ рентгеновской волны зависят от толщины кристаллической пластинки, от угла отклонения падающего пучка в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении от условия Брэгга и от угла асимметрии. При фиксированных значениях толщины пластинки и угла асимметрии для достаточно большого расстояния источник–кристалл, когда выполняется условие локально-плоской волны, зависимости коэффициентов прохождения и отражения от координат точки наблюдения на выходной поверхности кристалла в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении эквивалентны кривым качания по соответствующим угловым отклонениям приходящих в эту точку наблюдения лучей. Полуширины кривых качания в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении имеют различную зависимость от угла асимметрии.

ЛИТЕРАТУРА

1. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
2. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford, University Press, 2001.
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**, 446 (2014).
7. **М.К. Балян**, Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 102 (2017).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԱՆՀԱՄԱՉԱՓ ԼԱՈՒԵ-ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՃՈՃՄԱՆ ԿՈՐԵՐԸ ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՃԱԿԱՏԻ ԵՐԿՉԱՓ ԿՈՐՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Հաշվի առնելով բյուրեղի վրա ընկնող ալիքի ալիքային ճակատի երկչափ կորությունը դիտարկված է ռենտգենյան անհամաչափ Լաուե-դիֆրակցիա հարթ մուտքի մակերևույթով կատարյալ բյուրեղում: Համապատասխան Գրինի ֆունկցիայի օգտագործմամբ տեղային-հարթ ալիքի մոտավորությամբ ուսումնասիրված են ճոճման կորերը կախված ընտրված ճշգրիտ Բրեգի ուղղությունից դիֆրակցիայի հարթության մեջ և դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ անկյունային շեղումներից: Ուսումնասիրված է ճոճման կորերի կախումը դիֆրակցիայի երկրաչափության անհամաչափության աստիճանից: Ստացված են ճոճման կորերի կիսալայնության վերլուծական արտահայտություններ դիֆրակցիայի հարթության մեջ և դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ: Գնահատված են ժամանակային և տարածական կոհերենտությունների պահանջները:

ROCKING CURVES OF X-RAY ASYMMETRICAL LAUE DIFFRACTION WITH TWO-DIMENSIONAL CURVATURE OF THE WAVE FRONT

M.K. BALYAN

Taking into account two dimensional curvature of the wave front of the incident beam X-ray Laue case asymmetrical diffraction in a perfect crystal with a plane entrance surface is considered. Using the corresponding Green function in the frame of locally plane wave approximation the rocking curve dependences on the angular departure from the chosen exact Bragg direction in the diffraction plane and in the perpendicular to the diffraction plane direction are investigated. The dependence of rocking curves on asymmetry degree of diffraction geometry is investigated. The analytical expressions for rocking curves half widths in the diffraction plane and in the perpendicular to diffraction plane direction are obtained. The spatial and temporal coherency requirements are estimated.