

РЕНТГЕНОВСКИЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ ДИФРАКЦИОННЫЙ АНАЛОГ ЭФФЕКТА ТАЛЬБОТА В СЛУЧАЕ ПАДАЮЩЕЙ ВОЛНЫ С КОНЕЧНЫМ ФРОНТОМ

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 1 апреля 2019 г.)

Исследован рентгеновский динамический дифракционный эффект Тальбота в идеальных кристаллах. Эффект проанализирован для случая падающей волны с конечным фронтом. Выявлены особенности эффекта, найдены выражения для глубины Тальбота и для точной глубины Тальбота. Результаты сравнены с полученными ранее результатами в дифрагированном пучке в случае бесконечного фронта падающей волны.

1. Введение

Экспериментальные и теоретические исследования эффекта Тальбота в свободном пространстве проводились в оптике [1–8] и в рентгеновской оптике [9–13].

Эффект Тальбота, как известно, заключается в том (см., например, [5–7]), что при некотором одномерном периодическом распределении $T(x) = T(x + D)$ с периодом D амплитуды монохроматической волны вдоль оси Ox , лежащей наперед заданной плоскости, при последующем распространении волны в перпендикулярном к плоскости направлении в свободном пространстве, значение амплитуды периодически повторяется на кратному расстоянию Тальбота z_T расстояниях $z = lz_T$ ($l = 1, 2, \dots$), где z_T дается выражением [7]

$$z_T = 2D^2/\lambda. \quad (1)$$

Здесь λ – длина волны излучения. Выражение (1) справедливо при условии $D \gg \lambda$. Когда период становится порядка длины волны, пользуются точным выражением, данным Рэлеем [2]

$$z_T = \lambda / \left(1 - \sqrt{1 - \lambda^2/D^2} \right). \quad (2)$$

Следует также сказать, что на расстояниях $z = (2l + 1)z_T / 2$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) получается первоначальное распределение амплитуды, смещенное на $D/2$ вдоль оси Ox . Этот же эффект имеет место для рентгеновских волн, распространяющихся в

свободном пространстве [9–13].

Однако в работе [14] показано, что аналог эффекта Тальбота имеет место внутри совершенного кристалла при двухволновой брэгговской динамической дифракции рентгеновских волн. В упомянутой работе эффект был исследован для случая падающей волны с бесконечным фронтом.

В данной работе, в продолжение работы [14], эффект Тальбота исследуется в дифрагированном пучке в случае падающей волны с конечным фронтом. Полученные результаты сравниваются с результатами проведенных ранее исследований динамического дифракционного эффекта Тальбота в случае падающей волны с бесконечным фронтом.

2. Основные формулы

Схема дифракции показана на рис.1. Рентгеновский пучок с волновым вектором $\mathbf{K}_0^i$ и единичной амплитудой, проходя через объект с периодическим комплексным амплитудным коэффициентом пропускания $T(x) = T(x + D)$, падает на входную поверхность совершенного кристалла под углом θ^i по отношению к атомным отражающим плоскостям RP, перпендикулярным к входной поверхности кристалла. Этот угол близок к углу Брэгга θ для вектора дифракции $\mathbf{h}$, и в кристалле возникают прошедшая и дифрагированная волны. Ось Ox выбранной системы координат антипараллельна вектору дифракции $\mathbf{h}$ для данного отражения. Ось Oz перпендикулярна к входной поверхности, а ось Oy перпендикулярна к плоскости дифракции xz.

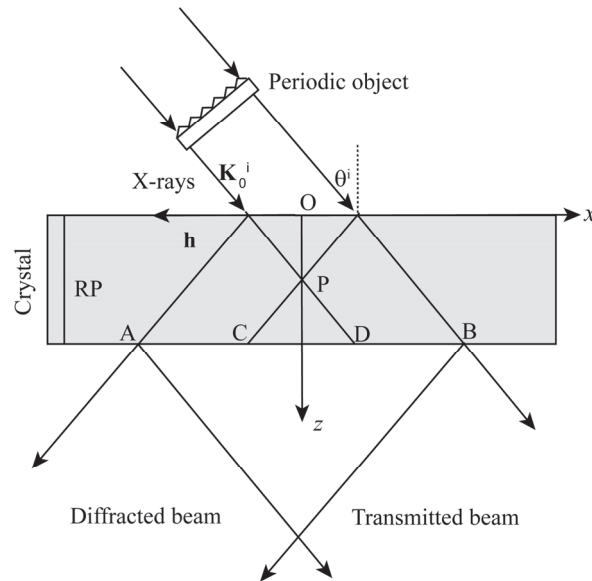


Рис.1. Схема рентгеновского динамического дифракционного эффекта Тальбота. На пути падающего пучка находится объект с периодическим комплексным амплитудным коэффициентом пропускания.

Нахождение амплитуды дифрагированной волны проведем для случая падающей волны с плоскопараллельным конечным фронтом в пределах от $-a$ до a . Разложим в ряд Фурье амплитудный коэффициент пропускания

$$T(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \exp\left(2\pi i n \frac{x}{D}\right), \quad (3)$$

$$A_n = \frac{1}{D} \int_{-D/2}^{D/2} T(x) \exp\left(-2\pi i n \frac{x}{D}\right) dx, \quad (4)$$

и используем функцию Грина динамической задачи дифракции [15–17]. Таким способом для амплитуды σ -поляризованной дифрагированной волны получим

$$E_h(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \int_{\max(x-z \tan \theta, -a)}^{\min(x+z \tan \theta, a)} G(x-x', z) \exp\left(2\pi i n \frac{x'}{D}\right) \exp(ikx' \cos \theta \Delta \theta) dx', \quad (5)$$

где функция Грина

$$G(x, z) = \frac{ik\chi_h}{4 \sin \theta} \exp\left(ik \frac{\chi_0 z}{2 \cos \theta}\right) J_0\left(\frac{\pi \cot \theta}{\Lambda} \sqrt{z^2 \tan^2 \theta - x^2}\right) H(z \tan \theta - |x|), \quad (6)$$

а $\chi_0 = \chi_{0r} + i\chi_{0i}$, $\chi_h = \chi_{hr} + i\chi_{hi}$ и $\chi_{\bar{h}} = \chi_{\bar{h}r} + i\chi_{\bar{h}i}$ – Фурье коэффициенты поляризуемости кристалла для векторов дифракции 0 , $\mathbf{h}$ и $\bar{\mathbf{h}}$ соответственно (индексы «r» и «i» относятся к действительной и мнимой частям поляризуемости кристалла, соответственно), $\Delta \theta = \theta^i - \theta$ – отклонение от точного условия Брэгга, $\Lambda = \lambda \cos \theta / \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$ ($\Lambda_r = \text{Re } \Lambda$ есть экстинкционная длина), $k = 2\pi / \lambda$, J_0 – функция Бесселя нулевого порядка, H – ступенчатая функция Хевисайда. До точки пересечения характеристик в точке Р (рис. 1), внутри треугольной области, реализуется плосковолновое решение

$$E_h(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \int_{x-z \tan \theta}^{x+z \tan \theta} G(x-x', z) \exp\left(2\pi i n \frac{x'}{D}\right) \exp(ikx' \cos \theta \Delta \theta) dx', \quad (7)$$

которое было проанализировано в работе [14]. Ниже точки пересечения Р, внутри треугольника с основанием CD, решение, согласно (5), будет

$$E_h(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \int_{-a}^a G(x-x', z) \exp\left(2\pi i n \frac{x'}{D}\right) \exp(ikx' \cos \theta \Delta \theta) dx' = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n E_{hn}. \quad (8)$$

3. Поведение дифрагированного поля в области ограниченного пучка

Нашей целью будет исследование эффекта в дифрагированном пучке в областях AC, CD и DB. Дифрагированное поле в этих областях дается решением (5). В частности, в треугольной области с основанием CD ниже точки Р (см. рис. 1) решение дается выражением (8). В рассматриваемых областях интеграл можно вычислить численно. Для приближенного, аналитического рассмотрения

вопроса, рассмотрим глубины $z \gg \Lambda_r$ и точки наблюдения, где $|x - x'| < z \tan \theta$. Дальнейший приближенный анализ проведем для области CD. Такой же анализ применим в областях AC и DB в участках, примыкающих к точкам C и D. В силу условия $z \gg \Lambda_r$ имеем $\pi c \tan \theta \left| \sqrt{z^2 \tan^2 \theta - (x - x')^2} / \Lambda \right| \gg 1$, и можно пользоваться асимптотическим выражением для функции Бесселя [18]

$$J_0(\xi) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \xi}} \cos\left(\xi - \frac{\pi}{4}\right). \quad (9)$$

После этих приближений для области CD находим

$$E_{hn} = \frac{ik\chi_h A_n}{4 \sin \theta} \exp\left(ik \frac{\chi_0 z}{2 \cos \theta}\right) \sqrt{\frac{2\Lambda}{\pi^2 \cot \theta}} \int_{-a}^a \frac{1}{[z^2 \tan^2 \theta - (x - x')^2]^{1/4}} \times \cos\left(\frac{\pi \cot \theta \sqrt{z^2 \tan^2 \theta - (x - x')^2}}{\Lambda} - \frac{\pi}{4}\right) \exp\left(2\pi i n \frac{x'}{D}\right) \exp(ikx' \cos \theta \Delta \theta) dx'. \quad (10)$$

Используя формулу $\cos \xi = [\exp(i\xi) + \exp(-i\xi)]/2$, и с точки зрения эффекта исследовав важный случай $\Delta \theta = 0$, (10) можно представить в виде

$$E_{hn} = \tilde{E}_{hn+} + \tilde{E}_{hn-}, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{hn+} &= \frac{A_n}{2} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp\left(ik \frac{\chi_0 z}{2 \cos \theta}\right) \frac{e^{i \frac{\pi z}{\Lambda_r} \Omega_{nr}} e^{\frac{\pi z}{\Lambda_r \Omega_{nr}} \frac{\Lambda_i}{\Lambda_r}}}{\Omega_{nr}} \exp\left(2\pi i n \frac{x}{D}\right), \\ \tilde{E}_{hn-} &= -\frac{A_n}{2} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp\left(ik \frac{\chi_0 z}{2 \cos \theta}\right) \frac{e^{-i \frac{\pi z}{\Lambda} \Omega_{nr}} e^{-\frac{\pi z}{\Lambda_r \Omega_{nr}} \frac{\Lambda_i}{\Lambda_r}}}{\Omega_{nr}} \exp\left(2\pi i n \frac{x}{D}\right), \end{aligned} \quad (12)$$

$p_{nr} = 2n\Lambda_r \tan \theta / D$ и $\Omega_{nr} = \sqrt{1 + p_{nr}^2}$. Интегралы в (10) содержат быстро осциллирующие экспоненты, и приближенные значения интегралов получены методом стационарной фазы [19]. Подставляя (11) в (8), имеем

$$E_h = i \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp\left(ik \frac{\chi_0 z}{2 \cos \theta}\right) \sum_{n=-N}^N (E_{hn+} + E_{hn-}) A_n \exp\left(2\pi i n \frac{x}{D}\right), \quad (13)$$

где

$$E_{hn+} = \frac{1}{2} \frac{e^{i \frac{\pi z}{\Lambda_r} \Omega_{nr}} e^{\frac{\pi z}{\Lambda_r \Omega_{nr}} \frac{\Lambda_i}{\Lambda_r}}}{\Omega_{nr}}, \quad E_{hn-} = -\frac{1}{2} \frac{e^{-i \frac{\pi z}{\Lambda_r} \Omega_{nr}} e^{-\frac{\pi z}{\Lambda_r \Omega_{nr}} \frac{\Lambda_i}{\Lambda_r}}}{\Omega_{nr}}. \quad (14)$$

В (13) сумма простирается от некоторого минимального номера до некоторого максимального N . Это связано с тем, что полученная формула приближенная и верна только для таких гармоник, стационарные точки которых лежат внутри интервала интегрирования. Гармоники, стационарные точки которых лежат вне

интервала интегрирования, дают ничтожный вклад в сумму и ими можно пренебречь. В остальном формула (13) такая же, как и полученная в плосковолновой, вышележащей от точки P , треугольной области. Поведение поля в этой области подробно исследовалось в работе [14]. Таким образом, представление поля ниже точки P , в треугольной области $z \tan \theta > a$, до некоторой глубины приблизительно имеет такой же вид, как в плосковолновой области.

4. Эффект Тальбота в области ограниченного пучка

Проведем анализ эффекта Тальбота по формуле (13) в области ниже точки P (рис.1). Во первых, заметим, что амплитуда (13) дифрагированной волны в рамках сделанных приближений оказалась периодической от координаты x функцией с тем же периодом D , что и начальное распределение $T(x)$. Вопрос в том, в какой мере и на каких глубинах эта периодическая функция совпадет с начальным распределением $T(x)$. В обычной оптике такие расстояния можно найти. Но в случае брэгговской дифракции, если отвлечься от множителей перед суммой в (13), нахождение таких глубин требует дополнительного рассмотрения. Коэффициенты Фурье A_n первоначального распределения заменяются на $A_n(E_{hn+} + E_{hn-})$, где первое слагаемое соответствует одной ветви дисперсионной поверхности, а второе – другой. Если для некоторой глубины, $E_{hn+} + E_{hn-}$ примет одно и то же значение независимо от номера n , то эту величину можно вынести из-под знака суммы и таким образом получить начальное распределение с точностью коэффициента отражения. Но согласно (14), множители $e^{\pm \pi z (\Lambda_i / \Lambda_r) / (\Lambda_r \Omega_{nr})} / \Omega_{nr}$, не являясь периодическими функциями z , не могут повторять одно и то же значение независимо от n ни на какой глубине. Что же касается множителей $\exp(\pm i \pi z \Omega_{nr} / \Lambda_r)$, то такая возможность есть, так как они являются периодическими функциями z . Следуя методу Рэлея [2], рассмотрим гармоники до $|n|=1$ включительно, считая, что ряд Фурье быстро сходится. Тогда, если на некоторой глубине z_{Td}^{cr} разность фаз между нулевой и первыми гармониками будет 2π , т.е.

$$\pi \frac{z_{Td}^{cr}}{\Lambda_r} \sqrt{1 + 4 \left(\frac{\Lambda_r \tan \theta}{D} \right)^2} - \pi \frac{z_{Td}^{cr}}{\Lambda_r} = 2\pi, \quad (15)$$

то для гармоник с номерами $-1, 0$ и 1 эти экспоненты примут одно и то же значение независимо от номера, и их можно будет вынести из-под знака суммы. Из-за этого, максимумы и минимумы первоначальной периодической функции останутся на своих местах, так как между гармониками нет дополнительной фазовой разности, но из-за неосциллирующих множителей, зависящих от номера гармоники, первоначальное распределение будет повторяться приближенно. Из (15) нетрудно найти

$$z_{Td}^{cr} = \frac{2\Lambda_r}{\sqrt{1 + 4\left(\frac{\Lambda_r \tan \theta}{D}\right)^2} - 1}. \quad (16)$$

Эта глубина Тальбота аналог расстоянию (2) обычной (небрэгговской) оптики. Если же

$$2\Lambda_r \tan \theta < D, \quad (17)$$

то из (16), обозначая приближенное значение глубины Тальбота через z_{Td} , получаем

$$z_{Td} = z_{Td}^{cr} \approx \frac{D^2}{\Lambda_r \tan^2 \theta}. \quad (18)$$

Глубина (18) – аналог расстояния Тальбота (1), известное из обычной оптики [7].

Если для глубин $z = lz_{Td}$ ($l = 2, 3, \dots$) выполнены условия применения метода стационарной фазы, то и на этих глубинах повторяется первоначальное распределение (то же верно и для глубин $z = lz_{Td}^{cr}$ ($l = 2, 3, \dots$)). Если для глубин $z = (2l + 1)z_{Td} / 2$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) выполнены условия применения метода стационарной фазы, то на таких глубинах начальное распределение повторяется со смещением $D/2$ вдоль оси Ox .

Следует еще сказать, что так как для π -поляризации $\Lambda_{\pi} = \Lambda_r / \cos 2\theta$, то глубина Тальбота в случае брэгговской дифракции, в противовес обычной оптике, зависит от поляризации.

Эти результаты совпадают с результатами, полученными в работе [14] в треугольной области выше точки P (плосковолновая область).

5. Примеры динамического дифракционного эффекта Тальбота в ограниченном пучке

Для иллюстрации выше полученных результатов, в качестве примера, рассмотрим отражение Si(220) для излучения $MoK\alpha$ ($\lambda = 0.71 \text{ \AA}$, $\theta = 10.63^\circ$), σ -поляризация. Для кремния $\chi_{0r} = -3.162 \cdot 10^{-6}$, $\chi_{0i} = 0.165 \cdot 10^{-7}$, $\chi_{hr} = \chi_{\bar{h}r} = -1.901 \cdot 10^{-6}$, $\chi_{hi} = \chi_{\bar{h}i} = 0.159 \cdot 10^{-7}$ [15]. Соответственно имеем, $\Lambda_r = 36.6 \text{ мкм}$ и $\Lambda_r \tan \theta = 6.9 \text{ мкм}$. Отклонение от точного условия Брэгга $\Delta\theta = 0$. В качестве периодического объекта возьмем объект с ограниченным Фурье спектром – косинусоидальную решетку. В этом случае

$$T(x) = \frac{1 + \cos(2\pi x/D)}{2}, \quad (19)$$

$$A_0 = 0.5, A_{\pm 1} = 0.25 \text{ и } A_n = 0 \text{ для } |n| > 1.$$

Выберем период объекта и размер пучка таким образом, чтобы удовлетворять условиям применения метода стационарной фазы на глубине $z = z_{Td}$.

Оценки показывают, что можно выбрать $D = 4\Lambda_r \tan \theta \approx 28$ мкм. В этом случае $z_{Td} \approx 609$ мкм, $z_{Td}^{cr} = 643$ мкм. Размер пучка выберем $a = 100$ мкм, что составляет примерно $3.5D$. Согласно оценкам, условие применения метода стационарной фазы соблюдается в области размером примерно $3D$ около точки $x = 0$. На рис.2а, по всей ширине области дифракции АВ (рис.1) показано распределение интенсивности $|E_h(x, z_{Td})|^2$ дифрагированного пучка на глубине z_{Td} , а на рис.2б оно сравнивается с первоначальным распределением интенсивности $T^2(x)$. Распределение интенсивности получено численным интегрированием, используя точное выражение для амплитуды (8). Видно, что, как и предсказывалось аналитическим рассмотрением, в области размером $3D$ около точки $x = 0$ начальное распределение восстанавливается с учетом коэффициентов отражения и поглощения.

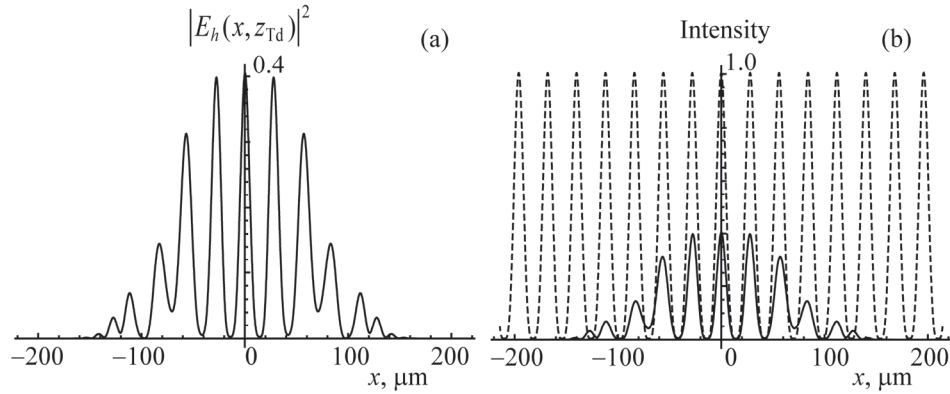


Рис.2. Динамический дифракционный эффект Тальбота. Период объекта $D = 28$ мкм. (а) Распределение интенсивности $|E_h(x, z_{Td})|^2$, численный расчет по точной формуле (8). (б) Сравнение начального распределения $T^2(x)$ (пунктир) с $|E_h(x, z_{Td})|^2$ (сплошная кривая).

В качестве второго примера рассмотрим распределение интенсивности на глубине $3z_{Td} / 2 = 913$ мкм. Опять же, исходя из условий применимости метода стационарной фазы, в этом случае выбираем $D = 4\Lambda_r \tan \theta \approx 28$ мкм, $a = 5.5D = 154$ мкм. Оценки показывают, что размер области применения метода стационарной фазы составит примерно $5D$ около точки $x = 0$.

На рис.3а, по всей ширине области дифракции АВ (рис.1), показано распределение интенсивности $|E_h(x, z_{Td})|^2$ дифрагированного пучка на глубине $3z_{Td} / 2$, а на рис.3б оно сравнивается с первоначальным распределением интенсивности $T^2(x)$. Распределение интенсивности получено на основе численного интегрирования точного выражения для амплитуды (8). Видно, что, как и предсказывалось аналитическим рассмотрением, в области размером $5D$ около точки $x = 0$ начальное распределение восстанавливается со смещением на $D/2$ с учетом коэффициентов отражения и поглощения.

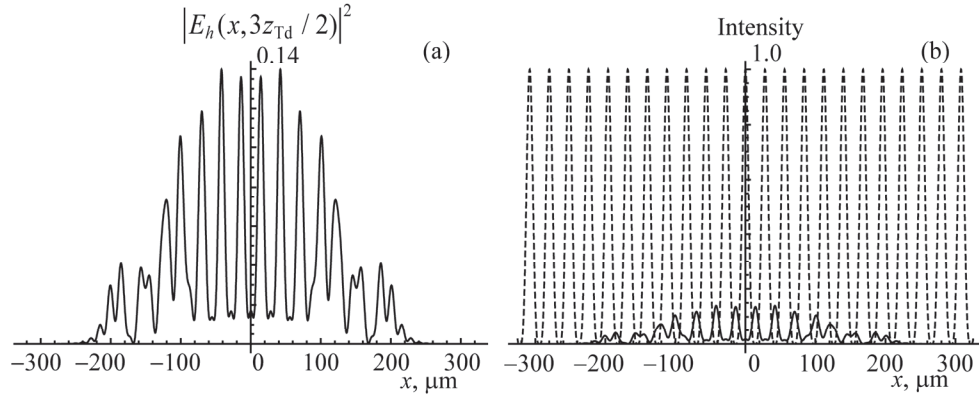


Рис.3. Динамический дифракционный эффект Тальбота. Период объекта $D = 28$ мкм. (а) Распределение интенсивности $|E_h(x, 3z_{Td}/2)|^2$, численный расчет по точной формуле (8). (б) Сравнение начального распределения $T^2(x)$ (пунктир) с $|E_h(x, 3z_{Td}/2)|^2$ (сплошная кривая).

6. Заключение

Проведен анализ рентгеновского динамического дифракционного эффекта Тальбота в дифрагированном пучке в случае падающей плоскопараллельной монохроматической волны с конечным размером фронта. Найдены выражения для глубины Тальбота и точной глубины Тальбота. Эти выражения совпадают с соответствующими выражениями случая бесконечного фронта падающей волны. В отличие от эффекта Тальбота в свободном пространстве, глубина Тальбота зависит от поляризации падающего излучения. Кроме того, за счет многократных отражений от отражающих атомных плоскостей внутри кристалла, динамически-дифракционное расстояние Тальбота в $10^5 \div 10^6$ раз меньше, чем для эффекта Тальбота в свободном пространстве для той же длины волны излучения, что очень важно с точки зрения эксперимента и прикладных задач.

Показано, что для наблюдения эффекта Тальбота необходимо соблюдать некоторые требования, которые детально анализируются. На глубинах, кратные глубины Тальбота, начальное распределение повторяется с учетом коэффициента отражения и поглощения, а на глубинах нечетно кратных половины глубины Тальбота, первоначальное распределение повторяется со смещением на половины периода периодического объекта. Сравнивая результаты эффекта Тальбота в области, где играет роль конечность фронта падающей волны со случаем эффекта Тальбота в области, где не играет роли конечность фронта падающей волны, можно сказать, что условия получения эффекта с учетом конечности фронта значительно жесткие. Кроме того, в этой области в краях картины первоначальное распределение значительно теряет контрастность из-за конечности

фронта волны и плохого выполнения условий применения метода стационарной фазы. Таким образом, эксперименты лучше проводить в области, где конечность фронта волны не играет роли.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.F. Talbot**. Phil. Mag., **9**, 401 (1836).
2. **Lord Rayleigh**, Phil. Mag., **11**, 196 (1881).
3. **R.F. Edgar**. Optica Acta, **16**, 281 (1969).
4. **G.P. Guigay**. Optica Acta, **18**, 677 (1971).
5. **M.V. Berry, S. Klein**. Journal of Modern Optics, **43**, 2139 (1996).
6. **M.V. Berry, E. Bodenschatz**. Journal of Modern Optics, **46**, 349 (1999).
7. **W. Case, M. Tomandl, S. Deachapunya, M. Arndt**. Optics Express, **17**, 20966 (2009).
8. **M. Kim, T. Scharf, C. Menzel, C. Rockstuhl, H. Herzig**. Optics Express, **21**, 1287 (2013).
9. **P. Cloetens, J.P. Guigay, S. De Martino, J. Baruchel, M. Schlenker**. Optics Letters, **22**, 1059 (1997).
10. **A. Momose, K. Shinya, K. Ichiro, H. Yoshitaka, T. Kengo, S. Yoshio**. Jpn. J. Appl. Phys., **42**, L866 (2003).
11. **A. Momose, Y. Wataru, M. Hirohide, T. Yoshihiro**. Optics Express, **17**, 12540 (2009).
12. **V.G. Kohn**. Journal of Surface Investigation, **10**, 698 (2016).
13. **V.G. Kohn**. J. Synchrotron Rad., **25**, 425 (2018).
14. **M.K. Balyan**. Journal of Optics, **21**, (2019) <https://doi.org/10.1088/2040-8986/ab1409>.
15. **A. Authier**. Dynamical theory of X-ray diffraction, Oxford, Oxford University Press, 2001.
16. **З.Г. Пинскер**. Рентгеновская кристаллооптика, Москва, Наука, 1982.
17. **И.Ш. Слободетский, Ф.Н. Чуховский**. Кристаллография, **15**, 1101 (1970).
18. **M. Abramowitz, I.A. Stegun**. Handbook of mathematical functions, Washington, National bureau of standards, 1964.
19. **Ю. Сидоров, М. Федорюк, М. Шабунин**. Лекции по теории функций комплексного переменного, Москва, Наука, 1989.

X-RAY DYNAMICAL DIFFRACTION TALBOT EFFECT IN THE CASE OF THE INCIDENT WAVE WITH RESTRICTED WAVE FRONT

M.K. BALYAN

X-ray dynamical diffraction Talbot effect is investigated in perfect crystals. The effect is investigated for an incident wave with a restricted wave front. The peculiarities of the effect are revealed, the expressions for the Talbot distance and for the exact Talbot distance are obtained. The results are compared with the results, obtained for the case of a wave with the infinite wave front, in the diffracted beam, previously.