Известия НАН Армении, Физика, т.34, №5, с.272-281 (1999)

УДК 548.732

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПРЯМОЛИНЕЙНЫХ ТРАЕКТОРИЙ В ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИКЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Л.А. АРУТЮНЯН, К.Г. ТРУНИ

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 6 мая 1998 г.)

Рассматривается геометрическая оптика динамической дифракции рентгеновских лучей в слабодеформированном кристалле в приближении прямолинейных траекторий. Выведены условия применимости этого приближения. Показано, что в этом случае как траектории, так и интенсивности рентгеновских пучков те же, что и в случае идеального кристалла. Деформация кристалла приводит к появлению фазовой добавки в пучках, пропорциональной интегралу по траектории луча от некой функции, задаваемой полем деформации кристалла. Наличие такой фазы экспериментально может проявляться в интерференционных явлениях.

1. Введение

Динамическая дифракция рентгеновских лучей в деформированном кристалле описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка – уравнениями Такаги [1]. Однако уравнения Такаги удается решить аналитически лишь в редких случаях. Развито также приближение геометрической оптики [2-3], согласно которому рентгеновское излучение в кристалле распространяется по криволинейным траекториям. Искривление траекторий лучей обусловлено градиентом относительной деформации решетки кристалла. Критерием примененимости данной теории является малость изменения относительной деформации в пределах экстинкционной длины, что естественно, т.к. последняя является характерной длиной формирования динамического волнового поля в кристалле. Но даже в приближении геометрической оптики аналитическое вычисление дифрагированного в кристалле рентгеновского излучения удается провести лишь для отдельных видов полей деформаций кристаллов.

В настоящей работе рассматривается случай, когда искривлением лучей можно пренебречь, считая их такими, какими они являются в случае идеального кристалла. Не зависящими от поля деформации оказываются и квазиамплитуды дифрагированных пучков. Дополнительное фазовое слагаемое, обусловленное полем деформации, при таком подходе представляется интегралом по траектории луча от функции, описывающей локальное смещение от условия Брэгга. Следует отметить, что подобное приближение имеет широкое применение в оптике по исс дованию фазовых объектов неоднородных веществ, в которых нараш вание фазы волны определяется интегралом по траектории луча показателя преломления, зависящего от координат. Хотя наложенные нашем случае ограничения на поле деформации кристалла намно жестче, чем при обычной геометрической оптике (в частност налагаются ограничения не только на быстроту изменения, но и на са величину поля деформации, а также на толщину кристалла), они все х допускают деформации, приводящие к изменению фазы пучков поряд π. Из сказанного следует, что предложенное приближение можно пр менять в рентгеновской интерферометрии, для исследования очен слабых деформаций. Следует особо отметить компьютерную томо графию, для математического аппарата которой крайне важна незави симость траектории регистрируемого излучения от неоднородносте тестируемого образца.

Отметим также, что в работе [3] уже приведены аналогичны расчеты для падающей на кристалл плоской волны, при ориентации по точным углом Брэгга. Мы же рассматриваем как случай падающе плоской волны для произвольного отклонения от угла Брэгга, так случай падающей сферической волны.

2. Вывод основных уравнений

В двухволновом приближении дифрагированное рентгеновское волновое поле в упруго деформированном кристалле может быть представлено в виде суммы проходящей и отраженной квазиплоских волн:

$$D(\mathbf{r}) = D_0(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + D_h(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_h\mathbf{r} - \mathbf{h}\mathbf{U}(\mathbf{r})),$$

где $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$, $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ – поле смещений деформированного кристалла, а $\mathbf{h}$ – вектор обратной решетки данного отражения. Квазиамплитуды D_0 и D_h удовлетворяют уравнениям Такаги [1], которые, при выборе вектора $\mathbf{k}_0$ согласно условию $k_0 = k_h = k \equiv Kn$, запишутся в виде

$$\begin{cases} \dfrac{\partial D_0}{\partial z} + \dfrac{\partial D_0}{\partial x} = i\gamma_{\bar{h}} D_h, \\ \dfrac{\partial D_h}{\partial z} - \dfrac{\partial D_h}{\partial x} = i\gamma_h D_0 + i\alpha D_h, \end{cases} \tag{1}$$

где введена безразмерная координатная система (x, y) в плоскости падения:

$$x = -\frac{\pi \operatorname{ctg}\theta_{\mathrm{B}}}{\Lambda}\frac{\mathbf{hr}}{h}, \qquad z = \frac{\pi}{\Lambda}\frac{(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_h)\mathbf{r}}{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_h|}, \tag{2}$$

$\mathbf{r}$ – радиус-вектор рассматриваемой точки, $\alpha(x,z) = (\partial/\partial z - \partial/\partial x)(\mathbf{hU})$ – функция от координат, описывающая локальное отклонение от условия Брэгга из-за деформации кристалла. Постоянные γ_h и $\gamma_{\bar{h}}$ имеют следующий вид: $\gamma_h = \chi_h \big/ \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$, $\gamma_{\bar{h}} = \chi_{\bar{h}} \big/ \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$. Остальные параметры, входящие неявно в уравнения Такаги, имеют следующие значения: $\Lambda = 2\pi\cos\theta_B / KC\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}$ – экстинкционная длина, K – волновое число в вакууме, n – средний показатель преломления кристалла, χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ – **h** и **-h** коэффициенты Фурье-разложения поляризуемости кристалла (мы пренебрегаем поглощением, так что произведение $\chi_h\chi_{\bar{h}}$, входящее в определение Λ, действительная и положительная величина), C – поляризационный фактор, равный единице для σ-поляризации и $\cos 2\theta_B$ для π-поляризации, θ_B – угол Брэгга.

В случае идеального кристалла $(\alpha \equiv 0)$ решением (1) является

$$D_0(x,z) = E_0\exp(i(Px - Hz)),\;\; D_h(x,z) = E_h\exp(i(Px - Hz)),$$

для произвольного значения параметра P. Здесь амплитуды E_0 и E_h связаны соотношением $E_h/E_0 = (P-H)/\gamma_{\bar{h}}$, а $H = \pm\sqrt{1+P^2}$ (два знака в выражении для H соответствуют двум ветвям дисперсионной поверхности).

Исходя из вышесказанного, в случае слабодеформированного кристалла $(\alpha << 0)$ решение уравнений Такаги будем искать в виде квазиплоских волн:

$$\hat{D}(x,z) = \hat{E}(x,z)\exp\bigl(i(Px - Hz)\bigr), \tag{3}$$

для произвольного значения параметра P и двух ветвей дисперсионной поверхности. Здесь, для компактности, мы перешли от 0 и h компонент кристаллического поля к двумерному вектору, так что $\hat{D} = (D_0,\, D_h)^T$ и $\hat{E} = (E_0, E_h)^T$ (верхний индекс T означает транспонирование вектора). Подставляя (3) в (1), получаем векторное уравнение $(T_S + T)\hat{E} = 0$, где

$$T_S = \begin{pmatrix} H-P & \gamma_{\bar{h}} \\ \gamma_h & H+P \end{pmatrix}, \qquad T = \begin{pmatrix} i\left(\dfrac{\partial}{\partial z} + \dfrac{\partial}{\partial x}\right) & 0 \\ 0 & i\left(\dfrac{\partial}{\partial z} - \dfrac{\partial}{\partial x}\right) + \alpha \end{pmatrix}.$$

Решение последнего уравнения при малых α можно искать методом последовательных приближений (см. [3]), согласно которому

$$\hat{E} = \sum_{n=0}^{\infty}\hat{E}^{(n)}, \tag{4}$$

где слагаемые $\hat{E}^{(n)}$ определяются бесконечной системой зацепленных уравнений

$$T_S\hat{E}^{(0)} = 0, \tag{5}$$

$$T_S\hat{E}^{(n)} + T_S\hat{E}^{(n-1)} = 0 \;\; (n \ge 1). \tag{6}$$

Так как $\det(T_S) = 0$, матрица T_S имеет левый $\hat{l} = (\gamma_h, P - H)$ и правый $\hat{r} = (\gamma_{\bar{h}}, P - H)^T$ нуль-векторы. Из (5) следует, что $\hat{E}^{(0)}$ можно представить в виде $\hat{E}^{(0)}(x,z) = \sigma_0(x,z)\hat{r}$. Скалярная функция $\sigma_0(x,z)$ определяется из уравнения (6) при $n = 1$, которое после умножения слева на $\hat{l}$ приводится к

$$H\frac{\partial \sigma_0}{\partial z} + P\frac{\partial \sigma_0}{\partial x} + i(P-H)\frac{\alpha}{2}\sigma_0 = 0. \qquad (7)$$

Полученное уравнение соответствует уравнению переноса (см.[3], (6.4)) в обычной геометрической оптике. Упомянутое является уравнением в частных производных первого порядка, с коэффициентами при производных, зависящих от поля деформации кристалла и, следовательно, от координат. В нашем случае эти коэффициенты постоянные, вследствие чего траектории лучей прямые и не зависят от поля деформации. Это связано с нашим выбором эйконала, а именно, *Px-Hz* (см. фазовый множитель в (3)), не зависящего от деформации кристалла.

Решение уравнения (7) в случае симметричной геометрии Лауэ, когда входная поверхность совпадает с плоскостью $z = 0$, удобно представить в виде

$$\sigma_0(x,z) = \widetilde{\sigma}_0(x - z\,\mathrm{tg}\theta)\exp\left(\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z \alpha(\widetilde{x}(t),t)\,dt\right), \qquad (8)$$

где

$$\widetilde{x}(t) = x - (z-t)\mathrm{tg}\theta, \qquad \theta = \mathrm{arctg}\left(\frac{P}{H}\right) \quad \left(-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}\right).$$

Для члена первого порядка малости в разложении (4) из (6) при $n = 1$ и $n = 2$ имеем $\hat{E}^{(1)} = \sigma_1\hat{r} + \hat{\beta}$, где

$$\sigma_1(x,z) = \exp\left(\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z \alpha(\widetilde{x}(t),t)\,dt\right) \times \qquad (9)$$

$$\times\left[\widetilde{\sigma}_1(x - z\,\mathrm{tg}\theta) + \frac{i}{\cos\theta}\int_0^z B(\widetilde{x}(z'),z')\exp\left(-\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^{z'} \alpha(\widetilde{x}(t),t)\,dt\right)dz'\right],$$

$$\hat{\beta} = \left(\frac{i}{P-H}\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\right)E_0^{(0)},\ 0\right)^T,$$

$$B(x,z) = \frac{\cos\theta}{2H(P-H)^2}\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \sigma_0(x,z). \qquad (10)$$

Функции одного аргумента $\widetilde{\sigma}_0$ и $\widetilde{\sigma}_1$ определяются из граничных условий на входной поверхности кристалла.

3. Граничные условия

А. Случай падающей плоской волны. Пусть на кристалл падает плоская волна с волновым вектором $\mathbf{K}^{(in)}$ и амплитудой $E^{(in)}$. На входной поверхности кристалла ее можно представить в виде

$$D^{(in)}(x,z=0)=E^{(in)}e^{iPx}e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}_e},$$

где

$$P=\frac{K_x^{(in)}-k_{0x}}{\pi}\Lambda\mathrm{tg}\theta_{\mathrm{B}}, \tag{11}$$

$\mathbf{r}_e$ – радиус-вектор рассматриваемой точки на входной поверхности кристалла, а $\mathbf{K}_0$, как и вектор $\mathbf{K}^{(\mathbf{in})}$, лежит в плоскости падения (плоскость, образованная векторами $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_h$) и определяется из условий

$$|\mathbf{K}_0|=K,\quad K_{0x}=k_{0x}. \tag{12}$$

Волновое поле внутри кристалла будем искать в виде

$$D^{(cr)}=D_0^{(cr)}e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}+D_h^{(cr)}e^{i(\mathbf{k}_h\mathbf{r}-\mathbf{h}\mathbf{U})},\quad \hat{D}^{(cr)}\equiv\left(D_0^{(cr)},D_h^{(cr)}\right)^{\mathrm{T}}=\sum_{j=1}^{2}\hat{E}^{(j)}e^{i(Px-Hz)},$$

где суммирование по индексу j соответствует двум ветвям дисперсионной поверхности, а параметр P определяется выражением (11). Граничные условия на входной поверхности кристалла с учетом (12) запишутся в виде $\sum\limits_{j=1}^{2}\hat{E}^{(j)}(x,z=0)=\left(E^{(in)},0\right)^{\mathrm{T}}$. Последнее, если ограничиться членами первого порядка малости в разложении (4), будет удовлетворено, если

$$\sum_{j=1}^{2}\widetilde{\sigma}_0^{(j)}(x)\hat{r}^{(j)}=\left(E^{(in)},0\right)^{\mathrm{T}},\qquad \sum_{j=1}^{2}\left(\widetilde{\sigma}_1^{(j)}(x)\hat{r}^{(j)}+\hat{\beta}^{(j)}(x,z=0)\right)=(0,0)^{\mathrm{T}}.$$

Из последнего с учетом (8-10) получаем

$$\sigma_0(x,z)=\gamma_h\frac{P+H}{2H}E^{(in)}\exp\left(\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z\alpha(\widetilde{x}(t),t)dt\right),$$

$$\sigma_1(x,z)=-\frac{P}{2H^2}\alpha(x-z\mathrm{tg}\theta,0)\sigma_0(x,z)-\frac{P+H}{4H^2}\sigma_0(x,z)\int_0^z V(\widetilde{x}(z'),z')dz',$$

$$\hat{\beta}(x,z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\cdot\frac{\gamma_{\bar{h}}}{2H}\sigma_0(x,z)\left(\alpha(x,z)+(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z\alpha_x(\widetilde{x}(t),t)dt\right),$$

где

$$V(\xi,\eta)=\alpha_z(\xi,\eta)+(2-\mathrm{tg}\theta)\alpha_x(\xi,\eta)+(1-\mathrm{tg}\theta)^2\int_0^\eta \alpha_{xx}\left(\xi-(\eta-t)\mathrm{tg}\theta,t\right)dt+$$

$$+\frac{i}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\left[\alpha\xi,\eta)+(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^\eta \alpha_x\left(\xi-(\eta-t)\mathrm{tg}\theta,t\right)dt\right]^2.$$

Нижний индекс x или z у функции α означает дифференцирование по первому или второму аргументу соответственно.

Как видно из приведенных формул, при выполнении условий

$$z\gg 1,\quad |\alpha|_{\max} z\sim 1,\quad \frac{|\mathrm{grad}\alpha|_{\max}}{|\alpha|_{\max}}z\sim 1,\quad \frac{|\alpha_{xx}|_{\max}}{|\alpha|_{\max}}z^2\sim 1 \tag{13}$$

имеют место неравенства $|\sigma_1/\sigma_0|\ll 1$, $|\beta_0/\sigma_0|\ll 1$ и можно ограничиться членом нулевого порядка в примененном нами методе последовательных приближений. В этом случае для квазиамплитуд кристаллического волнового поля получаем $\hat{D}^{(cr)}\cong\sum_{j=1}^{2}\hat{D}^{(j)}$, где

$$\hat{D}^{(j)}(x,y)=\begin{pmatrix}\dfrac{P+H}{2H}\\ -\dfrac{\lambda_h}{2H}\end{pmatrix}\cdot E^{(in)}\exp\left\{i\left(Px-Hz+\frac{1}{2}(1-\mathrm{tg}\theta)\int_0^z \alpha(\widetilde{x}(t),t)dt\right)\right\}. \tag{14}$$

Выражение (14) отличается от точного решения уравнения Такаги для идеального кристалла лишь добавочным фазовым членом, пропорциональным $\int_0^z \alpha(\widetilde{x}(t),t)dt$, который является интегралом от α по прямому отрезку, параллельному вектору Пойнтинга, от входной поверхности кристалла до точки наблюдения. Естественно эту прямую интерпретировать как траекторию распространения волны. Отметим, что она не зависит от поля деформации кристалла.

Б. Случай падающей сферической волны. Пусть на входную поверхность кристалла падает монохроматическая сферическая волна, излучаемая от источника, удаленного на вектор $(-\mathbf{K}_0/K)R$ от начала координат:

$$D^{(in)}(\mathbf{r})\equiv D_0^{(in)}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}_0\mathbf{r}}=(R/l)e^{iKl}.$$

Здесь $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки наблюдения, а l – расстояние от точечного источника до точки наблюдения. Разлагая l в ряд по малому параметру x/R, для квазиамплитуды падающего излучения $D_0^{(in)}$ на входной поверхности кристалла z = 0 получаем $D_0^{(in)}(x,z=0)=$ $=\exp\left(iKR+i\,x^2/(2R_0)\right)$, где R_0 – так называемое приведенное вакуумное расстояние:

$$R_0 = \frac{\pi^2}{K\Lambda^2 \sin^2 \theta_B} R\,.$$

Представим падающее излучение на $z=0$ как суперпозицию плоских волн:

$$D^{(in)}(x, z=0) = \int_{-\infty}^{+\infty} E_0^{(in)}(P) e^{i(\mathbf{K}_0 \mathbf{r}_e + Px)} dP\,, \tag{15}$$

где $E_0^{(in)}(P)$ – Фурье-образ квазиамплитуды падающего излучения:

$$E_0^{(in)}(P) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} D_0^{(in)}(x, z=0) e^{-iPx} dx = \sqrt{\frac{R_0}{2\pi}} \exp\left(i \left(KR - \frac{R_0}{2} P^2 + \frac{\pi}{4} \right) \right). \tag{16}$$

Представив дифрагированное волновое поле в кристалле как суперпозицию откликов отдельных плосковолновых компонент падающего излучения, согласно (14-16), для квазиамплитуд кристаллического волнового поля получаем

$$\hat{D}^{(j)}(x, z) = A \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(P, x, z) \exp(izF(P, x, z))\, dP\,, \tag{17}$$

где

$$\hat{f}(P, x, z) = \begin{pmatrix} \dfrac{P+H}{2H} \\ -\dfrac{\gamma_h}{2H} \end{pmatrix} \exp\left(\frac{i}{2}(1 - \operatorname{tg}\theta) \int_0^z \alpha(\tilde{x}(t), t)\, dt \right),$$

$$F(P, x, z) = \mp\sqrt{1+P^2} - \frac{R_0}{2z} P^2 + \frac{x}{z} P, \quad A = \sqrt{\frac{R_0}{2\pi}} \exp\left(iKR + i\frac{\pi}{4} \right)$$

(верхний знак соответствует ветви дисперсионной поверхности с $j = 1$, нижний – $j = 2$).

С учетом условий (13), интеграл (17) в точках, далеких от каустик и фокусов, можно вычислить асимптотическим методом стационарной фазы [4]. Согласно последнему

$$\hat{D}^{(j)}(x, z) = A \sqrt{\frac{2\pi}{z|F_0''|}} \hat{f}(P_0, x, z) \exp\left(izF(P_0, x, z) + i\nu\frac{\pi}{4} \right),$$

где

$$F_0'' = \left. \frac{\partial^2 F}{\partial P^2} \right|_{P=P_0}, \qquad \nu = \begin{cases} 1, & F_0'' > 0, \\ -1, & F_0'' < 0, \end{cases}$$

точка стационарной фазы P_0 определяется из условия

$$\left. \frac{\partial F}{\partial P} \right|_{P=P_0} \equiv \mp \frac{P_0}{\sqrt{1+P_0^2}} - \frac{R_0}{z} P_0 + \frac{x}{z} = 0\,. \tag{18}$$

Аналогичным образом можно рассматривать случаи, соответствующие другим видам падающих на кристалл неоднородных волновых пакетов.

Семейства траекторий кристаллического волнового поля определяются из условия $P_0 = \text{const}$ и, согласно (18), имеют вид прямых

$$x = \pm \frac{P_0}{\sqrt{1+P_0^2}} z + R_0 P_0 \qquad (-\infty < P_0 < +\infty),$$

не зависящих от поля деформации кристалла. Наличие деформации приводит лишь к появлению добавочной фазы в квазиамплитудах кристаллического поля, пропорциональной интегралу от $\alpha(x,z)$ по траектории луча – $\int\limits_0^z \alpha(\tilde{x}(t),t)dt$.

Заметим также, что не зависят от деформации и распределения амплитуд дифрагированных рентгеновских полей, соответствующие отдельным ветвям дисперсионной поверхности. Однако общее распределение интенсивностей дифрагированных волновых пакетов все же зависит от поля деформации кристалла, т.к. оно представляется интерференцией полей, соответствующих обоим ветвям дисперсионной поверхности.

4. Обсуждение результатов

Таким образом, мы вычислили дифрагированное волновое поле внутри кристалла при падающей плоской и сферической волне. В обоих случаях выражения для квазиамплитуд кристаллических полей $\hat{D}^{(i)}$ отличаются от аналогичных выражений для идеального кристалла только добавочным фазовым членом

$$\Phi = \frac{1}{2}(1 - \text{tg}\theta)\int\limits_0^z \alpha(\tilde{x}(t),t)dt.$$

Входящий неявно в это выражение параметр P в случае падающей плоской волны определяется выражением (11), а в случае сферической – условием стационарной фазы (18). В обоих случаях добавочная фаза пропорциональна интегралу от функции, описывающей поле деформации кристалла $\alpha(x,z)$ вдоль траектории луча внутри кристалла. Эта траектория прямая и не зависит от деформации кристалла.

Рассмотрим подробно область применения вышеизложенной теории – ограничения (13). С учетом (2), условие (13.1) (под обозначением (13.i) имеется ввиду i-ое условие в системе (13)) означает, что толщина кристалла должна быть намного больше экстинкционной длины. Такое требование естественно, т.к. роль длины волны при динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах играет экстинкционная длина. В условиях (13.2-4), налагающих ограничения на функцию, описывающую поле деформации кристалла, как множитель входит толщина кристалла z. Следовательно, для произвольной, заранее заданной функции $\alpha(x,z)$, неограниченное увеличение толщины кристалла приводит к нарушению условий (13). Согласно (13.1-2) $|\alpha|_{\max} \ll 1$. Такое ограничение, когда пренебрегается влиянием деформации кристалла на траектории лучей, естественно, если учитывать, что $\alpha(x,z)$ описывает локальное отклонение от условия Брэгга и, следовательно, изменение направления траектории лучей, обусловленное деформацией кристалла. Условия (13.3-4) требуют гладкости функции $\alpha(x,z)$ в смысле его первой и второй производных. Они, конечно же, включают в себя основное требование обычной геометрической оптики (оптики криволинейных траекторий), согласно которому характерная длина изменения поля деформации L должна быть намного больше экстинкционной длины. В нашем случае L должна быть порядка или больше толщины кристалла.

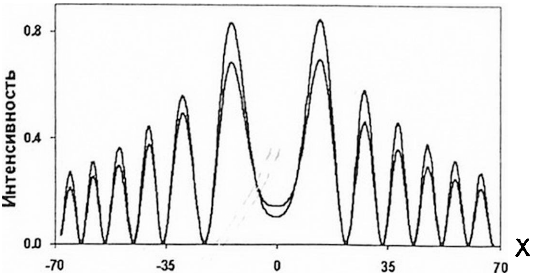

Рис.1. Пространственное распределение интенсивности в отраженном от кристалла рентгеновском пучке, рассчитанное с применением предложенного приближения (верхняя кривая) и непосредственно из уравнений Такаги путем численного интегрирования (нижняя кривая).

Хотя условия (13) намного жестче, чем ограничения обычной геометрической оптики, они все же допускают деформации, при которых фазовая добавка Ф, обусловленная наличием деформации, порядка π. Из сказанного следует, что вышеизложенная теория может найти применение для исследования слабодеформированных кристаллов методами, при которых регистрируемое распределение интенсивности обусловлено интерференцией. К таким методам относится рентгеновская интерферометрия, а также исследование дифракции на не сильнопоглощающем кристалле, где в образовании дифракционного поля принимают участие обе ветви дисперсионной поверхности.

В качестве примера рассмотрено образование так называемых аномальных Pendellösung полос [5] (случай падающей на кристалл сферической волны, когда $R_0 > z$) в отраженных от плоскопараллельной кристаллической пластины рентгеновских лучах, при наличии в кристалле краевой дислокации, перпендикулярной входной поверхности кристалла, и с вектором Бюргерса, параллельным оси x. На рис.1 приведено пространственное распределение аномальных Pendellösung полос, рассчитанное с применением вышеизложенной теории (верхняя кривая) и численным интегрированием уравнений Такаги (нижняя кривая). Большая интенсивность в первом случае обусловлена пренебрежением поглощения в наших расчетах, однако общий вид и расположение экстремумов интерференционных полос на обеих кривых совпадают. Расчеты проведены для излучения AgK_{α_1}, отражения Si[220] и величины вектора Бюргерса $b = a/\sqrt{2}$ (a – постоянная кристаллической решетки). Расстояние линии дислокации от плоскости падения было 16,7 мкм. Значения других параметров следующие: $R_0 = 40$, $z = 19$ (последнее соответствует толщине кристалла 283,2 мкм), проекция линии дислокации на плоскость рассеяния пересекает ось x при $x = -38$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S.Takagi**. J. Phys. Soc. Japan, **26**, 1239 (1969).
2. **F.N.Chukhovskii** and **A.A.Shtolberg**. Phys. stat. sol., **41**, 815 (1970).
3. **В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуховский**. УФН, **107**, 229 (1972).
4. **М.В.Федорюк**. Асимптотика: Интегралы и ряды. М., Наука, 1987.
5. **V.V.Aristov**, **V.I.Polovinkina**, **A.M.Afanas'ev**, and **V.G.Kohn**. Acta Cryst., **A36**, 1002 (1980).

ՈՒՂՂԱԳԻԾ ՀԵՏԱԳԾԵՐԻ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ԵՐԿՐԱՉԱՓԱԿԱՆ ՕՊՏԻԿԱՅՈՒՄ

Լ. Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Կ. Գ. ԹՐՈՒՆԻ

Դիտարկվում է ռենտգենյան ճառագայթների դինամիկ դիֆրակցիայի երկրաչափական օպտիկան թույլ դեֆորմացված բյուրեղներում, ուղղագիծ հետագծերի մոտավորությամբ: Դուրս են բերված այդ մոտավորության կիրառման պայմանները: Ցույց է տրված, որ այդ դեպքում ռենտգենյան փնջերի թե ինտենսիվությունները, թե հետագծերը նույնն են, ինչ կատարյալ բյուրեղի դեպքում: Բյուրեղում դեֆորմացիայի առկայությունը բերում է փնջերում լրացուցիչ փազային հավելման, որը համեմատական է բյուրեղի դեֆորմացիայի դաշտով որոշվող ֆունկցիայից ինտեգրալի, ըստ ճառագայթի հետագծի: Փորձարարական տեսանկյունից այսպիսի ֆազի առկայությունը կարող է դրսեւորվել ինտերֆերենցիոն երևույթներում:

RECTILINEAR PATH APPROACH IN GEOMETRIC OPTICS OF DYNAMIC DIFFRACTION OF X-RAYS

L. A. HAROUTUNYAN, K. G. TROUNI

The geometric optics of dynamic diffraction of X-rays in weakly distorted crystals in the approach of rectilinear trajectories is considered. The condition of applicability of this approach is derived. It is shown that in this approach the paths of rays as well as their intensities are same as those for the ideal crystal. The distortion of crystal gives rise to an additional phase of the beam proportional to the integral of some function given by the field of deformation of crystal along the ray path. From the experimental point of view the presence of such phase can be revealed in interferometric phenomena.