

УДК 548.733

ДИФРАКЦИЯ СФЕРИЧЕСКИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН
В ДВУХКРИСТАЛЬНОМ ИНТЕРФЕРОМЕТРЕ

В. С. АРУТЮНЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 17 февраля 1984 г.)

На основе сферической волновой теории Като рассчитано распределение интенсивности рентгеновских волн, дифрагированных в направлении первого отражения в двухкристальном интерферометре с узким воздушным зазором, в одном из блоков которого межплоскостное расстояние d отражающих плоскостей имеет относительное изменение $\Delta d/d \sim 10^{-8} - 10^{-5}$. Задача рассмотрена при условии бормановского прохождения рентгеновских волн в обоих кристаллах для симметричного случая Лауэ.

Исследование интерференционных эффектов рентгеновских волн, вызванных наличием узкой недифрагирующей зоны (зазора) в совершенном монокристалле, имеет важное значение для однозначной интерпретации рентгенодифракционных изображений несовершенств кристаллов. Решению задач, связанных с такими интерференционными эффектами, посвящен ряд работ [1—6]. Однако в указанных работах не рассмотрены случаи, когда падающая волна является сферической, а в двухкристальной системе с узким воздушным зазором (интерферометре) в одном из блоков содержится относительное изменение межплоскостного расстояния d отражающих плоскостей или же имеют место малые ($\sim 0,01 - 1''$) взаимные повороты блоков.

В настоящей работе решается задача дифракции падающей сферической рентгеновской волны в двухкристальном интерферометре для симметричного случая Лауэ при условии, что в одном из блоков интерферометра содержится относительное изменение межплоскостного расстояния отражающих плоскостей $\Delta d/d \sim 10^{-8} - 10^{-5}$. Предполагается, что в обоих кристаллах имеет место бормановское прохождение рентгеновских волн, так что в каждом из них будем учитывать лишь слабопоглощающееся поле. На рисунке приведена геометрия дифракции рентгеновских волн в реальном пространстве. Предполагается также, что все входные и выходные поверхности кристаллов A и B параллельны. Используем сферическую волновую теорию Като [7], согласно которой до выполнения интегрирования по плоско-волновым компонентам необходимо найти выражения для этих компонент, через когерентную суперпозицию которых могут быть представлены сферические волны. Прямоугольная система координат xuz ориентирована так, как показано на рисунке. Начало системы координат совпадает с положением источника рентгеновских волн, ось Oz имеет направление, совпадающее с направлением падения рентгеновских лучей под точным углом Брэгга в кинематической теории, ось Oy перпен-

дикулярна к плоскости падения. До специальной оговорки будем рассматривать асимметричный случай Лауэ.

Пусть $E_{og'}$ и $E_{gg'}$ — плоско-волновые компоненты слабопоглощающегося волнового поля, возбужденные падающей плоской волной $E \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r})$ (E —амплитуда, \mathbf{K} —волновой вектор) и прошедшие кристалл A соответственно в направлениях прохождения и отражения и вышедшие из кристалла B в направлении первого отражения. С учетом того, что при условии бормановского прохождения рентгеновских волн основной вклад в интенсивность дают волны с σ -поляризацией, примем фактор поляризации $C=1$. Из решения граничных условий на входных и выходных поверхностях обоих кристаллов [6, 8] для плоско-волновых компонент $E_{og'}$ и $E_{gg'}$ получаем следующие выражения:

$$E_{og'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} Q \beta \exp(i2\pi\mathbf{g}'\mathbf{r}) \exp i(K_y y + K_z z) \times \\ \times \exp i[\omega\gamma_0^{-1}t + \omega(1-b^{-1})(x \operatorname{cosec} 2\theta_B - \gamma_g^{-1}r)] F_1 \times \\ \times \exp i[-sx + ast_1 + as'(t_2 + 2r) + at_1m + at_2m'], \quad (1)$$

$$E_{gg'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} Q \beta \exp(i2\pi\mathbf{g}\mathbf{r}) \exp i(K_y y + K_z z) \times \\ \times \exp i[\omega\gamma_0^{-1}t + \omega(1-b^{-1})[x \operatorname{cosec} 2\theta_B - \gamma_g^{-1}(r+t_3)]] F_2 \times \\ \times \exp i[-x + a(t+t_2+2t_3+2r)]s - at_2s' + at_1m + at_2m', \quad (2)$$

где

$$s = K(\theta - \theta_B) + \omega(1-b^{-1})/\sin 2\theta_B, \quad \omega \equiv \frac{1}{2} K\chi_0,$$

$$\beta = K(\chi_g \chi_g^-)^{1/2} b^{1/2} \operatorname{cosec} 2\theta_B, \quad \alpha = \sin 2\theta_B/2\gamma_g,$$

$$b = \gamma_0/\gamma_g, \quad \gamma_0 = \cos(\mathbf{K}_0^B, \mathbf{n}), \quad \gamma_g = \cos(\mathbf{K}_g^B, \mathbf{n}),$$

$$Q \equiv E(\chi_g/\chi_g^-)^{1/2} b^{1/2}, \quad m \equiv \sqrt{s^2 + \beta^2}, \quad m' \equiv \sqrt{(s')^2 + (\beta')^2},$$

$$r = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) \mathbf{n}, \quad K = |\mathbf{K}|, \quad t = t_1 + t_2,$$

$$F_1 \equiv (-s + m)/mm', \quad F_2 \equiv (s' + m')/mm',$$

s —параметр отклонения от точного условия Брэгга в динамической теории, θ_B —точный угол Брэгга в кинематической теории, θ —угол между направлением \mathbf{K} и отражающими плоскостями, K_y, K_z — y - и z -компоненты волнового вектора \mathbf{K} , \mathbf{K}_0^B и \mathbf{K}_g^B —волновые векторы падающей и отраженной волн, удовлетворяющих условию Брэгга в кинематической теории, \mathbf{g} и \mathbf{g}' —векторы обратной решетки соответственно в кристаллах A и B , \mathbf{n} —единичный вектор внутренней нормали к входной поверхности кристалла A , χ_g —фурье-коэффициент g -ого порядка ($g=0, g$) поляризуемости кристалла для рентгеновских волн, χ_g^- —сопряженный фурье-коэффициент поляризуемости, t_1 и t_2 —толщины соответственно кристаллов A и B , t_3 —ширина зазора, x, y, z —компоненты вектора \mathbf{r} , определяющего положение точки наблюдения, \mathbf{r}_B —вектор, определяющий положение точки на выходной поверхности кристалла B . Соответствующие ве-

личины в кристалле B , зависящие от точного угла Брэгга, обозначены штрихами.

Из условия Вульфа-Брэгга легко получить соотношение

$$\theta'_B - \theta_B = \Delta\theta_B = -\operatorname{tg} \theta_B \Delta d/d,$$

где θ'_B — точный угол Брэгга в кристалле B . С учетом того, что величина $\Delta\theta_B$ мала, в выражениях (1) и (2) сделаны приближения: $\alpha = \alpha'$, $b = b'$, $\chi_g = \chi_{g'}$ ($g = o, g$), $\chi_g = \chi_{g'}$, $\beta = \beta'$.

Сферические волновые решения, соответствующие полям $E_{og'}$ и $E_{gg'}$, после интегрирования методом стационарной фазы с использованием (1), (2) и приближения $K_z = K$ на выходной поверхности кристалла B описываются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} \Phi_{og'}(r_B) &= (i/8\pi^2) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [E_{og'}(r_B)/K_z] dK_y dK_x = \\ &= (i/16\pi) Q(\beta/K \cdot z_B)^{1/2} \exp(i2\pi g' r_B) \exp i \left(K z_B - \frac{\pi}{4} \right) \times \\ &\times \exp i [\omega \gamma_0^{-1} t + \omega (1 - b^{-1}) x_B \operatorname{cosec} 2\theta_B] \exp(-i\varepsilon) \times \\ &\times F_1(\tau_1) [f_1(\tau_1)]^{-1/2} \exp i \left[G_1(\tau_1) + \frac{\pi}{4} \right], \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{gg'}(r_B) &= (i/8\pi^2) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [E_{gg'}(r_B)/K_z] dK_y dK_x = \\ &= (i/16\pi) Q(\beta/K z_B)^{1/2} \exp(i2\pi g r_B) \exp i \left(K z_B - \frac{\pi}{4} \right) \times \\ &\times \exp i [\omega \gamma_0^{-1} t + \omega (1 - b^{-1}) (x_B \operatorname{cosec} 2\theta_B - \gamma_3^{-1} t_3)] \exp(i\varepsilon) \times \\ &\times F_2(\tau_2) [f_2(\tau_2)]^{-1/2} \exp i \left[G_2(\tau_2) + \frac{\pi}{4} \right], \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$G_k(\tau) = \beta(-\eta_{k+1}\tau + \alpha t_1 \sqrt{\tau^2 + 1} + \alpha t_2 \sqrt{(\tau + \Delta\tau)^2 + 1}) = \beta f_k(\tau), \quad (5)$$

$\tau = s/\beta$, $\tau_k \cong \eta_{k+1}/\sqrt{\eta_1^2 - \eta_{k+1}^2}$ ($k=1, 2$) — значения стационарных точек,
 $\eta_1 \cong \alpha t$, $\eta_2 \cong x_B - \alpha t$,

$$\eta_3 = x_B - \alpha(t + 2t_3), \quad \Delta\tau = -K\Delta\theta_B/\beta, \quad \varepsilon \cong \alpha t_2 K \Delta\theta_B.$$

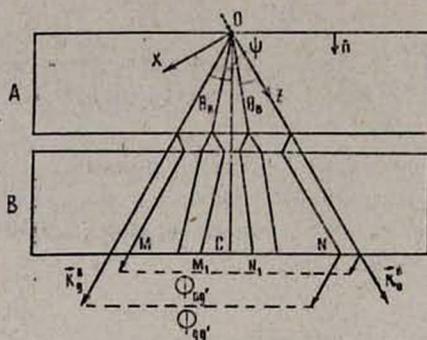
При выполнении условия $|\Delta\tau| \ll 1$ в выражении (5) член, содержащий величину $\Delta\tau$, можно разложить в ряд. Если ограничиться в этом разложении вторым членом, то в стационарных точках будем иметь

$$G_1(\tau_1) = \beta u - \varepsilon \eta_2/\eta_1, \quad u \cong \sqrt{\eta_1^2 - \eta_2^2}, \quad (6)$$

$$G_2(\tau_2) = \beta v - \varepsilon \eta_3/\eta_1, \quad v \cong \sqrt{\eta_1^2 - \eta_3^2}. \quad (7)$$

Для упрощения выражений (3) и (4) перейдем к симметричному случаю Лауэ. В этом случае $\gamma_0 = \gamma_g = \cos \theta_B$, $b = 1$, $\alpha = \sin \theta_B$. Волно-

вые поля $\Phi_{og'}$ и $\Phi_{gg'}$ накладываются в области $x_{N_1} \leq x_B \leq x_{M_1}$ (область M_1N_1 на рисунке). Малая величина зазора обеспечивается условием $t_3 \ll t_1$. Для учета поглощения примем величины χ_0 и β за комплексные.



Геометрия дифракции в реальном пространстве: MN — область наложения волновых полей $\Phi_{og'}$ и $\Phi_{gg'}$ при $\mu t \sim 1$ (случай тонких кристаллов); M_1N_1 — область наложения волновых полей $\Phi_{og'}$ и $\Phi_{gg'}$ при $\mu t \gg 10$ (аномальное прохождение) — рассматриваемый случай. Угол расходимости рентгеновских лучей в кристаллах $\psi < 2\theta_B$.

Из (3), (4), (6) и (7), учитывая условие $|\beta_i/\beta_r| \ll 1$ (β_i и β_r — соответственно мнимая и реальная части величины β), в симметричном случае Лауэ определим распределение интенсивности рентгеновских волн, дифрагированных в направлении первого отражения, на выходной поверхности второго кристалла:

$$I(x_B) = |\Phi_{og'}(x_B) + \Phi_{gg'}(x_B)|^2 = \\ = (1/16\pi)^2 E^2 (|\beta|/Kz_B) \exp(-\mu_0 t \sec \theta_B) \times \\ \times (|\xi_1|^2 \exp(-2\beta_i u) + |\xi_2|^2 \exp(-2\beta_i v) + 2|\xi_1||\xi_2| \exp[-\beta_i(u+v)] \times \\ \times \cos[\beta_r(u-v) - K\Delta\theta_B at_3 - 2\varepsilon + 2\pi\Delta g r_B]), \quad (8)$$

где $\Delta g = g' - g$, $\mu_0 = K\chi_{0l}$ — нормальный линейный коэффициент поглощения рентгеновских волн, χ_{0l} — мнимая часть величины χ_0 ,

$$|\xi_1| = \frac{(\eta_1 - \eta_2) u^{-1/2} (\beta_r \eta_1^2 - \frac{1}{2} K\Delta\theta_B \eta_2 u)}{(\eta_1 \beta_r)^{1/2} (\beta_r \eta_1^2 - 3\alpha t_1 K\Delta\theta_B \eta_2 u^3)^{1/2}}, \quad (9)$$

$$|\xi_2| = \frac{(\eta_1 + \eta_2) v^{-1/2} (\beta_r \eta_1^2 - \frac{1}{2} K\Delta\theta_B \eta_3 v) (\beta_r \eta_1 - K\Delta\theta_B v)}{(\eta_1 \beta_r)^{3/2} (\beta_r \eta_1^2 - 3\alpha t_1 K\Delta\theta_B \eta_3 v^3)^{1/2}}. \quad (10)$$

В выражении (8) первые два члена в фигурных скобках являются медленно меняющимися функциями координаты x_B , так что осцилляции распределения интенсивности обусловлены третьим членом.

1. Если в выражении (8) принять $\Delta\theta_B = 0$, то оно перейдет в распределение интенсивности для полос смещения [6].

2. При отсутствии зазора между блоками системы ($t_3 = 0$) в (8) аргумент косинуса равен $\varphi = -2\varepsilon + 2\pi\Delta g r_B$, и так как вектор Δg лежит в плоскости падения, то в случае падающей сферической волны, как и в случае плоско-волнового приближения, член $2\pi\Delta g r_B$ будет описывать муаровское дифракционное распределение интенсивности с периодом $\sigma_M = d^2/\Delta d$.

3. Если величины $\Delta\theta_B$ и t_3 отличны от нуля, то выражение (8) описывает распределение интенсивности в общем случае. В этом случае, как и в предыдущих двух, на выходной поверхности кристалла B формируются прямые полосы, перпендикулярные к плоскости падения. Для двухкристального интерферометра, состоящего из кристаллов Si с толщиной $t_1 = t_2 = 0,5$ см, с шириной зазора $t_3 = 350$ мкм, для излучения MoK_{α_1} , отражения (220), значений величины $|\Delta\theta_B| = 0, 10^{-8}, 10^{-7}, 10^{-6}, 10^{-5}$ рад (предполагается, что $\Delta\theta_B < 0$) из выражения (8) вычислены периоды $\sigma_{k, k+1}$ ($k = 0-4$) ближайших от точки C (см. рисунок) первых пяти интерференционных полос с точностью до 1 мкм. Для сравнения вычислены также периоды муаровых полос σ_M ($t_3 = 0$) при тех же значениях $\Delta\theta_B$. Результаты вычислений приведены в таблице.

Таблица

$ \Delta\theta_B $, рад	$\sigma_{k, k+1}$, мкм					σ_M , мкм
	$\sigma_{0,1}$	$\sigma_{1,2}$	$\sigma_{2,3}$	$\sigma_{3,4}$	$\sigma_{4,5}$	
0	183	179	169	157	142	
10^{-8}	176	173	165	155	142	
10^{-7}	122	122	120	118	115	384
10^{-6}	30	30	30	30	30	38
10^{-5}	4	4	4	4	4	4

Приведенные результаты показывают, что существует сильная зависимость между величиной $\Delta d/d$ и периодом полос: с ростом $|\Delta\theta_B|$ от 0 до 10^{-5} рад период полос уменьшается на два порядка. При значениях $|\Delta\theta_B| = 10^{-8}, 10^{-7}$ рад период $\sigma_{k, k+1}$, как и при $\Delta\theta_B = 0$ [1], уменьшается с ростом k , а при $|\Delta\theta_B| = 10^{-6}, 10^{-5}$ рад остается практически постоянным. При $t_3 = 0$ и $|\Delta\theta_B| = 10^{-8}$ рад полосы не возникают.

Автор выражает глубокую благодарность П. А. Безирганяну и К. Г. Труни за ценные обсуждения ряда вопросов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Authier A., Milne A. D., Savage M. Phys. Stat. Sol., 26, 469 (1968).
2. Baker J. F., Hart M., Helliar J. Z. Naturf., 28A, 553 (1973)
3. Bonse U., Hart M. Phys. Stat. Sol., 33, 351 (1969).
4. Hart M., Milne A. D. Acta Crist., A26, 223 (1970).
5. Hashizume H., Ishida H., Kohra K. Phys. Stat. Sol., A12, 453 (1972).
6. Tanemura S., Lang A. R. Z. Naturf., 28A, 668 (1973).
7. Kato N. Acta Crist., 14, 526, 627 (1961).
8. Kato N., Usami K., Katagawa T. Advances in X-ray Analysis, 10, 46 (1967).

ՌԵՏԳԵՆՅԱՆ ՍՅՆՏԻԿ ԱՆՔԵՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԵՐԿՔՑՈՒՐԵՂ ԻՆՏԵՐՖԵՐՈՍԵՏՐՈՒՄ

Վ. Ս. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Կատուի սֆերիկ ալիքային տեսության հիման վրա ստացված է ռենտգենյան ալիքների ինտերֆերոսիայի բաղադրանքը անդրադարձման ուղղությամբ լաուեի սիմետրիկ դեպքում նեղ

Ճեղքով կրկրյութեղ ինտերֆերոմետրում, որի բյուրեղներից մեկում տեղի ունի անդրադարձնող հարթությունների միջհարթությունային հեռավորության փոքր հարաբերական փոփոխություն, ենդիրը դիտարկված է սենսզիան ալիքների Բորմանի անցման դեպքում:

THE DIFFRACTION OF SPHERICAL WAVES OF X-RAYS IN BICRYSTAL INTERFEROMETRE

V. S. HARUTYUNYAN

On the basis of spherical-wave theory of Kato, the distribution of X-rays intensity was calculated in the direction of first reflection in narrow-gap bicrystal interferometre, in one of the blocks of which the interplanar distance d of reflecting plates has relative change $\Delta d/d \sim 10^{-8} \div 10^{-5}$. The problem was considered under the assumption of Borrmann transmission of X-rays through both the crystals in the symmetric Laue case. It was shown, that straight fringes normal to the plane of incidence, with spacing strongly depending on the magnitude of $\Delta d/d$, are formed on the exit surface of the second block.