05

Приближенное аналитическое решение уравнений Такаги в случае обратной дифракции сферической рентгеновской волны цилиндрически изогнутым идеальным кристаллом

© Т. Чен

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова
E-mail: docent65@mtu-net.ru, ttchen@e-mail.ru

Поступило в Редакцию 10 октября 2002 г.

Теоретически рассмотрена динамическая дифракция сферической рентгеновской волны цилиндрически изогнутым кристаллом в обратном направлении. Получено приближенное аналитическое решение дифференциальных уравнений Такаги при определенном условии, налагаемом на координаты атома внутри кристалла.

Динамическая теория брэгговской дифракции жесткого рентгеновского излучения на упругоизогнутых кристаллах была развита в работах [1–3]. В частности, было получено точное аналитическое решение уравнений Такаги для брэгговских углов $\theta_B \neq \pi/2$ в случае произвольного радиуса изгиба кристалла. Однако развитая в [1–3] теория не совсем корректно описывает случай дифракции рентгеновской волны в *обратном* направлении.

Целью настоящей работы является аналитическое решение уравнений Такаги для сферической волны, обратно дифрагированной цилиндрическим изогнутым кристаллом в одном частном случае.

Рассмотрим монохроматическую сферическую рентгеновскую волну $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega t)$, исходящую из точечного источника, расположенного на оси z, совпадающей с внутренней нормалью к поверхности кристалла в его центре, и падающую на цилиндрически изогнутый кристалл. Здесь ω — частота падающей волны,

$|\mathbf{k}_0| = \varkappa = \omega/c = 2\pi/\lambda$, c — скорость света, λ — длина рентгеновской волны.

Предположим, что величина угла φ_0 между $\mathbf{k}_0$ и нормалью $\mathbf{n}$ к отражающей поверхности кристалла в его центре находится в пределах $|\chi_{hr}| \leqslant \varphi_0 \leqslant |\chi_{hr}|^{1/2}$. Тогда можно пренебречь влиянием многоволновых эффектов на обратную дифракцию.

Волновое поле в кристалле при двухволновом приближении когерентно слагается из суммы полей проходящей и обратнодифрагированной волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_h(\mathbf{r}, t), \tag{1}$$

где $\mathbf{E}_h(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_h(\mathbf{r}, \omega)\exp(i\mathbf{k}_h\mathbf{r} - i\omega t)$ — электрическое поле дифрагированной волны, $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$, $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки идеального неизогнутого кристалла, $|\mathbf{k}_h|^2 \approx |\mathbf{k}_0|^2 = \varkappa^2$, $\mathbf{r}(x, y, z)$ — радиус-вектор произвольного атома в кристаллической решетке, $\mathbf{E}_{0,h}(\mathbf{r}, \omega) = E_{0,h}(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{e}_{0,h}$, где $\mathbf{e}_{0,h}$ — единичные векторы поляризации.

Волновое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения Максвелла, которое запишем в виде:

$$-(\nabla^2 + \varkappa^2)\mathbf{E} = \varkappa^2\chi(\mathbf{r}). \tag{2}$$

Здесь $\chi(\mathbf{r})$ — рентгеновская поляризуемость кристалла, которую разложим в ряд Фурье общепринятым образом, ограничившись тремя членами разложения:

$$\chi(\mathbf{r}) = \chi_0 + \chi_h\exp\{i\mathbf{hr} - i\mathbf{hu}(\mathbf{r})\} + \chi_{-h}\exp\{-i\mathbf{hr} + i\mathbf{hu}(\mathbf{r})\}. \tag{3}$$

В формуле (3) вектор $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ описывает смещение атомов кристаллической решетки при упругом изгибе кристалла. Как известно [1–3], в этом случае $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ представляет собой квадратичную функцию координат x и y атомов в неизогнутом кристалле. В настоящей работе нас будет интересовать лишь z-компонента вектора $\mathbf{u}$:

$$u_z = -x^2/2R_x - z^2/2R_z, \tag{4}$$

R_x — радиус изгиба кристалла в плоскости дифракционного отражения, радиус R_z определяется определенной комбинацией компонент обратного тензора модулей упругости. Для дифракции назад:

$$\mathbf{hu} = \varkappa\big(x^2/R_x + z^2/R_z\big).$$

Подставляя (1) и (3) в уравнение (2) и считая амплитуды $E_{0,h}$ медленно меняющимися на расстоянии λ, получаем систему двух дифференциальных уравнений Такаги:

$$2i(1-\gamma_0^2)^{1/2}\partial E_0/\partial x + 2i\gamma_0 \partial E_0/\partial z + \varkappa\chi_0 E_0 + \varkappa C\chi_{-h}\exp(i\mathbf{hu})E_h = 0, \quad (5)$$

$$2i(1-\gamma_h^2)^{1/2}\partial E_h/\partial x + 2i\gamma_h \partial E_h/\partial z + \varkappa(\chi_0-\alpha)E_h + \varkappa C\chi_h\exp(-i\mathbf{hu})E_0 = 0.$$

Здесь $\gamma_0 = (\mathbf{k}_0\mathbf{n})/\varkappa = -\gamma_h = -(\mathbf{k}_h\mathbf{n})/\varkappa$, $C = (\mathbf{k}_0\mathbf{k}_h)/\varkappa^2 = -1$ — поляризационный фактор для обратно дифрагированной волны, $\alpha = (\mathbf{k}_h^2 - \mathbf{k}_0^2)/\varkappa^2 = 2(\Delta\theta)^2$, $\Delta\theta = \theta - \pi/2$, θ — угол скольжения для падающей плосковолновой гармоники.

Рассмотрим теперь симметричную дифракцию рентгеновской волны в обратном направлении. В этом случае можно положить: $\gamma_0 = -\gamma_h = 1 - \varphi_0^2/2$, где $\varphi_0 \ll 1$. Тогда $(1-\gamma_0^2)^{1/2} = (1-\gamma_h^2)^{1/2} \cong \varphi_0$. Пусть $\varphi_0 = D|\chi_{hr}|^{1/2}$, где D — безразмерный числовой коэффициент. Ниже рассмотрим случай, когда $D = \pm 1$, что соответствует краю кривой полного обратного отражения.

Допустим, что $|\chi_{hr}|^{1/2}\partial E_{0,h}/\partial x \ll \partial E_{0,h}/\partial z$ для точки x, z внутри кристалла, а также и на его поверхности. Отсюда имеем условие применимости всех нижеследующих выражений. А именно, $x \gg |\chi_{hr}|^{1/2} z$. Для обратного отражения (199) от Si-кристалла ($|\chi_{hr}| \cong 2.39 \cdot 10^{-7}$) это условие достаточно хорошо выполняется для $0 < z < 100\,\mu$m, $x \gg 5 \cdot 10^{-8}$ m. Для атомов, сместившихся на расстояние $u_z = -x^2/2R_x$, где $x \cong l_x/2$, $l_x \leqslant 10^{-2}$ m — размер кристаллической пластины вдоль оси x, $R_x \geqslant 10$ m, вышеуказанное условие также справедливо с точностью до расстояний порядка или немного больше межатомных расстояний.

Пренебрегая в уравнениях Такаги слагаемыми, связанными с частными производными по переменной x, и представляя амплитуды следующим образом: $E_{0,h}(x,z) = E_{0,h}(x)E_{0,h}(z)$, систему (5) уравнений Такаги сведем к дифференциальному уравнению второго порядка для амплитуды $E_h(z)$ дифрагированной волны:

$$d^2E_h/dz^2 + A(z)dE_h/dz + B(z)E_h(z) = 0. \quad (6)$$

Здесь

$$A(z) = A_1 + A_2 z, \quad A_1 = 2i\varkappa(\Delta\theta)^2, \quad A_2 = 2\varkappa/R_z.$$

$$B(z) = B_1 + B_2 z, \quad B_1 = \varkappa^2\{\chi_0(\chi_0+\alpha) - \chi_h\chi_{-h}\}/4,$$

$$B_2 = i(\chi_0+\alpha)\varkappa^2/R_z, \quad \alpha = 2(\Delta\theta)^2. \quad (7)$$

Решение уравнения (6) ищем в виде фурье-интеграла:

$$E_h(z) = (2\pi)^{-1} \int dk G_h(k) \exp(ikz) \tag{8}$$

с граничным условием $E_h(z \to \infty) \to 0$.

Для фурье-компоненты $G_h(k)$ получаем дифференциальное уравнение первого порядка:

$$(-A_2 k + iB_2)\partial G_h/\partial k - (k^2 - ikA_1 - B_1 - A_2)G_h = 0 \tag{9}$$

с условием $G_h(k \to \pm\infty) \to 0$.

Решение уравнения (9) является следующая функция:

$$G_h(k) = \exp(-k^2/2A_2 + iA_1 k/A_2 - iB_2 k/A_2^2)(1 + ikA_2/B_2)^{(-A_3)}, \tag{10}$$

где

$$A_3 = (A_1 A_2 B_2 - B_2^2 - B_1 A_2^2 - A_2^3)/A_2^3. \tag{11}$$

Функция $G_h(k)$ для идеального неизогнутого кристалла ($A_2 \to 0$, $B_2 \to 0$) сводится к дельта-функции $\delta(k - \varepsilon_{1,2})$, где $\varepsilon_{1,2}$ — ошибки возбуждения для идеального кристалла:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2} &= \left\{iA_1 \pm (-A_1^2 + 4B_1)^{1/2}\right\}/2 \\ &= \varkappa(2)^{-1} \left\{(-\alpha/2) \pm \left[(\chi_0 + \alpha/2)^2 - \chi_h \chi_{-h}\right]^{1/2}\right\}. \end{aligned} \tag{12}$$

Зависящая от x амплитуда дифрагированной волны равна $E_h(x) = \exp(-i\varkappa x^2/R_x)$.

Для амплитуды проходящей волны можно получить дифференциальное уравнение второго порядка, аналогичное (6).

Список литературы

[1] *Chukhovskii F.N., Gabrielyan K.T., Petrashen' P.V.* // Acta Cryst. 1978. A34. P. 610.

[2] *Чуховский Ф.Н., Габриелян К.Т., Петрашень П.В.* // ДАН СССР. 1978. Т. 238. С. 81.

[3] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. С. 834.