01

К вопросу об аналитическом решении уравнений Такаги в случае обратной дифракции рентгеновского излучения на цилиндрически изогнутом кристалле

© *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 9 сентября 2003 г.

Найдено приближенное аналитическое решение уравнений Такаги для амплитуд дифрагированной и проходящей волн при обратном отражении плоской рентгеновской волны от упруго изогнутого кристалла. В случае строгой обратной дифракции найденное решение является точным.

Целью настоящего сообщения является аналитическое решение уравнений Такаги для амплитуд дифрагированной и проходящей волн при обратном отражении монохроматической рентгеновской волны от изогнутого идеального кристалла.

Пусть рентгеновская волна $E_0(\mathbf{r}, t) = E_0(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{e}_0 \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega t)$, испущенная источником S (рис. 1), прошедшая через монохроматор, выделяющий частоту ω, падает под углом φ_0 к нормали $\mathbf{n}$ к поверхности изогнутого кристалла в его центре. Здесь ω — частота волны, $\mathbf{e}_0$ — вектор поляризации для падающей волны. Рентгеновскую поляризуемость $\chi(\mathbf{r})$ кристалла разложим в ряд Фурье, оставив в нем три члена:

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{0,\pm h} \chi_h \exp\{i\mathbf{h}[\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})]\}. \tag{1}$$

Здесь $\chi_h = \chi_{hr} + i\chi_{hi}$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости идеального кристалла, $\mathbf{r}(x, y)$ — радиус-вектор атома в неизогнутом кристалле. Предположим, что $\varphi_0 \leqslant |\chi_{hr}|^{1/2}$, т. е. падающая волна полностью отражается кристаллом в обратном направлении. В случае, если $\varphi_0 \gg |\chi_{hr}|^{1/2}$, можно считать, что $\theta_B \neq \pi/2$. Аналитическое решение уравнений Такаги для этого случая получено в [1–3]. Дифракцион-

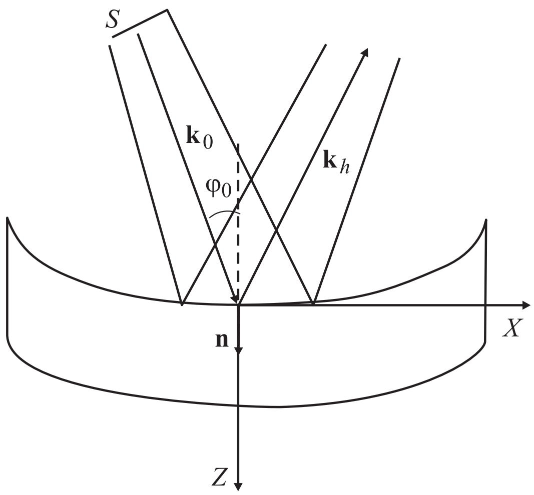

Рис. 1. Принципиальная схема отражения плоской синхротронной волны, испущенной источником S, от цилиндрически изогнутого кристалла. **n** — единичная внутренняя нормаль к поверхности кристалла.

ное отражение в направлении волнового вектора $\mathbf{k}_h$ является упругим и когерентным, т.е. $\mathbf{k}_h^2 = \mathbf{k}_0^2 = \varkappa^2$.

Рассмотрим одномерно изогнутый кристалл, когда $\mathbf{hu} = \varkappa(x^2/R_x + z^2/R_z)$. Здесь $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки идеального кристалла, $\mathbf{u}$ — вектор упругого смещения атомов кристаллической решетки, R_x — радиус изгиба кристалла в плоскости дифракции, определяемой векторами $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{n}$, радиус R_z выражается через компоненты обратного тензора модулей упругости [4,5].

В работе [6] система дифференциальных уравнений Такаги [7,8] была сведена к дифференциальному уравнению второго порядка для E_h:

$$d^2E_h/dz^2 + A(z)dE_h/dz + B(z)E_h(z) = 0, \tag{2}$$

где

$$A(z) = A_1 + A_2 z, \quad A_1 = 2i(\Delta\theta)^2, \quad A_2 = 2i\varkappa/R_z, \quad B(z) = B_1 + B_2 z,$$
$$B_1 = \varkappa^2\{\chi_0(\chi_0 + \alpha) - \chi_h\chi_{-h}\}/4, \quad B_2 = -\varkappa^2(\chi_0 - \alpha)/R_z,$$
$$\alpha = -4(\Delta\theta)^2, \quad \Delta\theta = \theta - \pi/2,$$

θ — угол скольжения для падающей плоской волны.

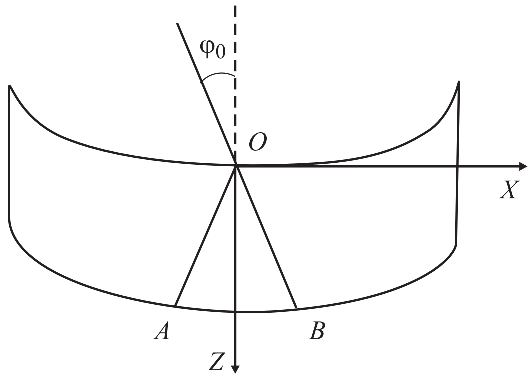

Рис. 2. Границы области применимости уравнений (2) и (10). Уравнения линий OB и OA: $|x| = 10\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 z$. Область, в которой справедливы уравнения (2) и (10) и, следовательно, полученные решения уравнений Такаги, лежат левее линии OA и правее линии OB.

Уравнение (2) было выведено для (x, z)-области внутри кристалла при условии $x \gg z\,\mathrm{tg}\,\varphi_0$, где с учетом сделанного выше замечания $\mathrm{tg}\,\varphi_0 \sim |\chi_{hr}|^{1/2}$ (рис. 2). Заметим, что при строгом обратном отражении, когда $\varphi_0 = 0$, уравнение (2) справедливо при любых x и z.

Решение уравнения (2) имеет вид:

$$E_h(z) = (2\pi)^{-1} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk G_h(k) \exp(ikz), \tag{3}$$

где

$$G_h(k) = \exp(-ik^2/2A_2 - A_1 k/A_2 + B_2 k/A_2^2)(1 + ikA_2/B_2)_3^{-A}(iB_2)^{-1}, \tag{4}$$

$$A_3 = (A_1 A_2 B_2 - B_2^2 - B_1 A_2^2 - A_2^3)/A_2^3. \tag{5}$$

Можно убедиться в том, что для идеального неизогнутого кристалла $(A_2 \to 0, B_2 \to 0) G_h(k)$ пропорциональна дельта-функции $\delta(k - \varepsilon_{1,2})$, где $\varepsilon_{1,2}$ — ошибки возбуждения для идеального кристалла:

$$\varepsilon_{1,2} = \left\{ iA_1 \pm (-A_1^2 + 4B_1)^{1/2} \right\} \Big/ 2. \tag{6}$$

Амплитуда для дифрагированной волны E_h может быть представлена как в интегральной форме (3), так и в виде бесконечного ряда Лорана. Действительно, разложим функцию $(1+ikA_2/B_2)_3^{-A}$ в ряд

$$(1+ikA_2/B_2)_3^{-A}=1+\sum_{n=0}^{\infty}\{\Gamma(n+1+A_3)/\Gamma(A_3)(n+1)!\}(-ikA_2/B_2)^{n+1}. \tag{7}$$

Здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция.

Тогда интеграл (3) равен:

$$\begin{aligned} E_h(z) = (i\pi B_2)^{-1}\Bigg\{ &\int_0^{+\infty} dk\exp(-k^2/2|A_2|)\cos(A_1k/A_2 - B_2k/A_2^2 + kz) \\ &+\sum_{n=0}^{\infty}\{\Gamma(n+1+A_3)/\Gamma(A_3)(n+1)!\}\,(-iA_2/B_2)^{n+1} \\ &\times\int_0^{+\infty} dk\exp(-k^2/2|A_2|)\cos(A_1k/A_2 - B_2k/A_2^2 + kz)k^{n+1}\Bigg\}. \end{aligned} \tag{8}$$

Учтем, что $\cos x = (\pi x/2)^{1/2}J_{-1/2}(x)$, где $J_{-1/2}(x)$ — функция Бесселя порядка $-1/2$ вещественного аргумента. Используя теперь формулу Вебера–Сонина [9] для вычисления интегралов в (8), найдем амплитуду $E_h(z)$:

$$\begin{aligned} E_h(z) = (i\pi B_2)^{-1}\Bigg\{ &(2\pi A_2)^{1/2}\exp(-a^2A_2) \\ &+\sum\Big(\Gamma(n+1+A_3)\Gamma(1+n/2)/\Gamma(A_3)(n+1)!\Big) \\ &\times(2^{-1-n/2}A_2^{-1-n/2})(-iA_2/B_2)^{n+1}{}_1F_1(1+n/2;1/2;-a^2A_2)\Bigg\}. \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь коэффициент $a = A_1/A_2 - B_2/A_2^2 + z > 0$, ${}_1F_1(\alpha;\beta;z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Полная амплитуда дифрагированной волны $E_h(\mathbf{r}) = E_h(z)E_h(x)$, где $E_h(x) = \exp(-i\varkappa x^2/R_x)$.

Для амплитуды $E_0(z)$ проходящей волны при тех же предположениях, что и при выводе уравнения (2), получаем следующее дифференциальное уравнение:

$$d^2E_0/dz^2 - A(z)dE_0(z)/dz + C(z)E_0(z) = 0, \tag{10}$$

где

$$C(z) = C_1 + C_2 z, \quad C_1 = B_1, \quad C_2 = -\varkappa^2\chi_0/R_z.$$

Конечное выражение для $E_0(z)$ определяется формулой (8), в которой надо сделать замены: $A_1 \to -A_1$, $A_2 \to -A_2$, $B_2 \to C_2$.

Диапазон углов φ_0, для которых справедливы уравнения (2) и (10), определяется неравенством: $\sin\varphi_0 E_h(z)dE_h(x)/dx \ll \cos\varphi_0 E_h(x) \times \times dE_h(z)/dz$, откуда с учетом явного вида $E_h(x)$ получаем:

$$\operatorname{tg}\varphi_0 \ll R_x(2\varkappa x)^{-1}|d\ln E_h(z)/dz|. \tag{11}$$

Неравенство (11) выполняется, в частности, для строгой обратной дифракции, когда $\varphi_0 \equiv 0$. Когда $\varphi_0 \neq 0$, неравенство (11) хорошо выполняется для $\operatorname{tg}\varphi_0 \ll x/z$. Для слабо изогнутого кристалла с большим радиусом кривизны R_x, когда отражательная способность кристалла близка к отражательной способности плоского идеального кристалла, условие (11) принимает вид: $\operatorname{tg}\varphi_0 \ll R_x\varepsilon(2\varkappa x)^{-1}$, где ε — ошибки возбуждения для идеального кристалла. Видно, что для идеального кристалла диапазон углов φ_0 очень широк и выходит за пределы области полного обратного отражения.

Заметим в заключение, что уравнения (2) и (10), а следовательно, и решения этих уравнений были получены для падения рентгеновской волны на кристалл, близкого к нормальному, т.е. $\gamma_0 = -\gamma_h \cong \cong (1-\varphi_0^2)^{1/2} \cong 1$.

Для обратной дифракции с направляющими косинусами $\gamma_0 = = -\gamma_h \ll 1 - |\chi_{hr}|/2$, т.е. далеко за пределами области полного обратного отражения, применима „обычная“ динамическая теория дифракции.

Список литературы

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

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

[3] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г.* // ЖТФ. 1980. Т. 50. С. 3.
[4] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. С. 834.
[5] *Chukhovskii F.N., Chang W.Z., Foerster E.* // J. Appl. Cryst. 1994. V. 27. P. 971.
[6] *Чен Т.* // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. В. 7. С. 38.
[7] *Takagi S.* // Acta Cryst. 1962. V. 15. P. 1311.
[8] *Takagi S.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. V. 26. P. 1239.
[9] *Iyamaga S., Kawada Y.* (Eds.) // Encyclopedic Dictionary of Mathematics. Cambridge, MA: MIT Press, 1980. P. 1474.