05

Кинематическое приближение для коэффициента обратного рассеяния рентгеновской волны сильноизогнутым 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 15 апреля 2002 г.
В окончательной редакции 6 июня 2002 г.

Получено аналитическое выражение для коэффициента брэгговского отражения назад ($\theta_B \cong \pi/2$) рентгеновской волны сильноизогнутым тонким кристаллом. Показано, что амплитудные коэффициенты обратного отражения сильноизогнутым кристаллом и плоским кристаллом той же толщины различаются небольшим фазовым множителем.

Дифракционное отражение рентгеновских лучей плоскими и изогнутыми кристаллами в обратном направлении ($\theta_B \cong \pi/2$) исследовалось экспериментально в ряде работ [1–8].

Обратное рассеяние рентгеновского излучения выгодным образом отличается от дифракции при брэгговских углах $\theta_B < \pi/2$ наличием ряда важных свойств. Во-первых, светосила кристаллической оптики при обратном рассеянии пучка на 2–3 порядка выше, чем при $\theta_B < \pi/2$. Действительно, учитывая явный вид угловой переменной y (см., например, [9]):

$$y = \left[2\Delta\theta(\gamma_0/|\gamma_h|)\sin 2\theta_B + (1 + \gamma_0/|\gamma_h|)\chi_0\right]/2C(\chi_h\chi_{-h}\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/2} \qquad (1)$$

и то, что при обратном отражении $\sin 2\theta_B \cong 2\Delta\theta \ll 1$, легко получаем из (1) угловую ширину кривой обратного отражения:

$$\Delta\theta_{\theta\cong\pi/2} \cong (\chi_h\chi_{-h})^{1/4}(2C)^{1/2}/(\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/4}, \qquad |C| = 1,\ \gamma_0 = |\gamma_h|. \qquad (2)$$

В формуле (1) введены следующие стандартные обозначения: $\Delta\theta = \theta - \theta_B$ — отклонение от точного брэгговского угла, $\gamma_{0,h}$ — направляющие косинусы для падающей и дифрагированной волн, $\chi_{0,h,-h}$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, C — поляризационный фактор.

Из формулы (2) видно, что для обратного рассеяния ширина кривой полного отражения в$(\chi_h\chi_{-h})^{-1/4}$ раз больше, чем при $\theta_B < \pi/2$.

Вторая особенность обратного рассеяния — высокая чувствительность к степени монохроматичности $\Delta\lambda/\lambda$ излучения. Действительно, из закона Брэгга–Вульфа следует, что $\Delta\lambda/\lambda = \operatorname{ctg}\theta_B\Delta\theta \leqslant (\Delta\theta)^2$. Для узкоколлимированного пучка с $\Delta\theta \sim 10^{-5} \div 10^{-6}$ степень монохроматичности $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-10} \div 10^{-12}$.

Третье свойство — высокая чувствительность к изменению Δd межплоскостного расстояния d: $\Delta d/d \leqslant (\Delta\theta)^2$. В-четвертых, геометрические аберрации минимизированы при обратном отражении.

Однако до сих пор брэгговское отражение назад исследовалось в основном для толстых кристаллов с толщиной $l > \Lambda$. Здесь $\Lambda = \lambda/|\chi_{hr}|$ — экстинкционная длина для обратного рассеяния, λ — длина волны падающего излучения.

В настоящей работе получено выражение для амплитудного коэффициента отражения плоской волны тонким кристаллом $l \ll \Lambda$ (кинематическая дифракция) в области угловых переменных y, где можно пренебречь осцилляционным характером кривой коэффициента отражения. Исходя из известного в теории аналитического выражения для коэффициента отражения сильноизогнутым кристаллом конечной толщины, получено выражение для коэффициента обратного рассеяния этим кристаллом.

Рассмотрим сначала плоский кристалл толщиной l. Из результатов работы [10] следует, что амплитудный коэффициент отражения r_{flat} такого кристалла:

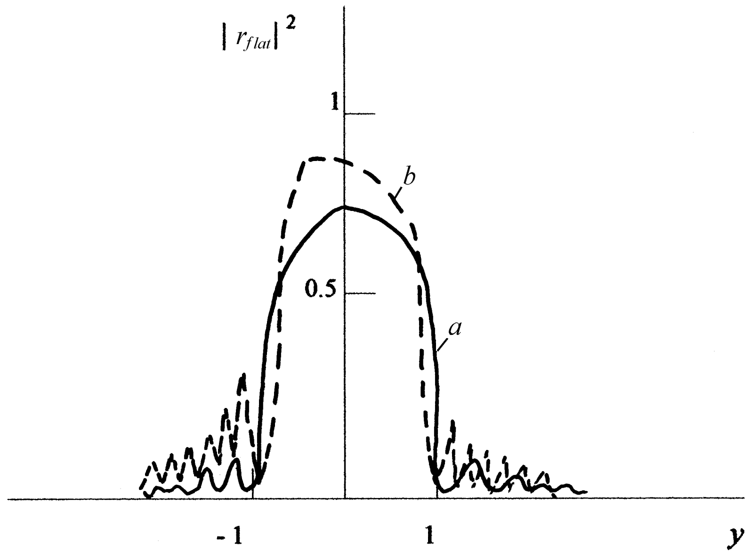
$$r_{flat} = \left[1 - \exp\{i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)l\}\right] / \left[R_2 - R_1 \exp\{i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)l\}\right]. \quad (3)$$

Здесь

$$\varepsilon_{1,2} = \pi\left[\chi_0 + C(\chi_h\chi_{-h}\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/2}(-y \pm \{y^2 - 1\}^{1/2})\right]/\lambda\gamma_0,$$

$$R_{1,2} = \left(-y \pm \{y^2 - 1\}^{1/2}\right)(\chi_h/\chi_{-h})^{1/2}. \quad (4)$$

Формулы (3), (4) применимы и для обратного рассеяния.



Зависимость коэффициента отражения $|r_{flat}|^2$ от угловой переменной y. Отражение (220), CuK_α-излучение, кристалл Si, $\Lambda = 6.28\,\mu$m. Кривая дифракционного отражения плоского кристалла толщиной l: $l = 12.56\,\mu$m, $b - l = 31.4\,\mu$m.

Из (3) видно, что при $|y| > 1$ кривая дифракционного отражения $|r_{flat}|^2$ осциллирует (см. рисунок). Период осцилляций Δy можно оценить, положив:

$$2\pi|\chi_{hr}|(y^2 - 1)l/\lambda \approx 2\pi n, \qquad n \text{ — целое число.} \tag{5}$$

Из (5) следует, что $\Delta y = \{\Lambda^2(n+1)^2/l^2 + 1\} - \{\Lambda^2 n^2/l^2 + 1\}$. Для очень тонких кристаллов $l \ll \Lambda$ получаем $\Delta y \approx \Lambda/l$. В противоположном случае $l \gg \Lambda$ имеем $\Delta y \approx \Lambda^2(2n+1)/(2l^2)$.

Пренебрежем осцилляционной структурой кривой $|r_{flat}|^2$, рассмотрев часть кривой, ограниченной значениями $|y| \ll \{\Lambda^2/(4\pi^2 l^2) + 1\}^{1/2}$. При увеличении толщины l сужается интервал $|y|$, удовлетворяющих этому неравенству.

Тогда из (3) получим:

$$r_{flat} \cong i\pi|\chi_{hr}|l/\lambda. \tag{6}$$

При выводе формулы (6) мы положили для определенности, что кристалл — центросимметричный ($\chi_h = \chi_{-h}$), а также учли, что $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)l \ll 1$.

Рассмотрим теперь изогнутый кристалл конечной толщины l. Амплитудный коэффициент отражения равен [11]:

$$r_{bent} = -(i)^{3/2}(q/4d)(\pi/2B)^{1/2}\operatorname{tg}\theta_B\left[\Phi(-t_1/2^{1/2}) - \Phi(-t_0/2^{1/2})\right] \times \exp(-t_0^2/2),$$

где $q = \pi C d\chi_h/(\lambda\sin\theta_B)$ — коэффициент отражения от атомной плоскости, $t_1 = t_0 + 4l\operatorname{ctg}\theta_B(-iB)^{1/2}$, $t_0 = (-i/4B)^{1/2}k$, $k \leqslant 2\pi\Delta\theta/\lambda$, B — градиент деформации, $\Phi(t)$ — интеграл вероятности.

Полагая, что $l \ll \pi/(4\lambda B)$, разложим разность интегралов вероятности в ряд Тэйлора, ограничиваясь первой производной функции $\Phi(t)$:

$$\Phi(-t_1/2^{1/2}) - \Phi(-t_0/2^{1/2}) \approx -2(\pi)^{-1/2}\exp(-t_0^2/2)(t_1 - t_0)/2^{1/2}. \quad (7)$$

Тогда для амплитудного коэффициента обратного отражения получим

$$r_{bent} \cong i\pi|\chi_{hr}|l\exp(-t_0^2)/\lambda. \quad (8)$$

Сравнивая выражения (6) и (8), находим:

$$r_{bent} = r_{flat}\exp(ik^2/4B). \quad (9)$$

Параметр изгиба кристалла в случае симметричной геометрии дифракции, согласно [12], равен (для σ-поляризованного излучения):

$$|v| = \pi^2|\chi_{hr}|^2/(16\lambda^2 \times B\sin^2\theta_B\cos^2\theta_B). \quad (10)$$

При обратном рассеянии $\cos\theta_B \leqslant |\chi_{hr}|^{1/2}$. Положим $\cos\theta_B = |\chi_{hr}|^{1/2}/2$. Тогда для параметра изгиба получим

$$|v|_{\theta\approx\pi/2} = \pi^2|\chi_{hr}|/(4B\lambda^2). \quad (11)$$

Условие сильного изгиба $|v| \ll 1$ дает величину необходимого градиента деформации $B \gg \pi^2|\chi_{hr}|/(4\lambda^2)$. Для $|\chi_{hr}| \sim 10^{-5}$, $\lambda \sim 1\,\text{Å}$ получим $B \gg 10^{15}\,\text{m}^{-2}$.

Отметим, что выражения (10), (11) являются частными случаями более общего выражения для параметра $|v|$:

$$|v| = \pi^2(\Delta\theta)^2/(4\lambda^2 B). \quad (12)$$

Положив величину $\Delta\theta$ равной угловой полуширине кривой отражения, получаем формулы (10) и (11).

Строго говоря, точное выражение для параметра изгиба $|v|$ при обратном рассеянии можно получить, решив задачу динамической дифракции назад в изогнутом кристалле. Однако можно использовать и формулу (12), в которой следует положить:

$$(\Delta\theta)_{\theta\approx\pi/2} = K^{1/2}|\chi_{hr}|/\sin 2\theta_B, \tag{13}$$

где в правой части $\theta_B \neq \pi/2$ и коэффициент $K \ll 1$. Величину коэффициента K надо подбирать в зависимости от величины градиента деформации B так, чтобы „слабый“ изгиб при $\theta_B \neq \pi/2$ соответствовал „сильному“ изгибу при $\theta_B \cong \pi/2$.

С учетом (9), (11) имеем $r_{bent} \cong r_{flat}\exp(i|v|^2)$. Видно, что коэффициент обратного отражения сильноизогнутым кристаллом и плоским кристаллом различаются небольшим экспоненциальным множителем.

Наличие этого множителя может влиять, например, на фокусирующие свойства рассмотренного кристалла (как одиночного, так и напыленного в качестве пленки на толстый кристалл-подложку).

В заключение заметим, что, несмотря на наличие очевидных преимуществ обратного рассеяния, экспериментальная реализация отражения назад сопряжена с довольно большими трудностями. Связано это с тем, что при точном обратном отражении дифрагированный пучок идет в направлении, антипараллельном падающему пучку. Для устранения указанной трудности необходимо выбирать угол скольжения $\geqslant \pi/2-|\chi_{hr}|^{1/2}$. При этом сумма расстояний от источника S сферической волны до нормали к кристаллу и от нормали до изображения S' равна: $\sim |\chi_{hr}|^{1/2}(L_0 + L_h)$, где L_0 и L_h — расстояния от S до кристалла и от кристалла до S' соответственно.

В случае синхротронного источника, когда $L_0 \geqslant 10$ m, источник S и его изображение S' могут быть разнесены на расстояние $\geqslant 10^{-2}$ m вдоль направления, поперечного к нормали. Тем самым снимается основная проблема, затрудняющая экспериментальную реализацию обратного рассеяния.

Использование двухосно-изогнутого кристалла в геометрии обратного отражения дает возможность резко увеличить светосилу фокусирующей рентгеновской оптики и может найти свое применение в рентгеновской спектроскопии, микроскопии и т. д.

Список литературы

[1] *Nikulin A.Yu., Davis J.R., Jones N.T.* et al. // Phys. Stat. Sol. (A). 2000. V. 179. P. 103–108.
[2] *Shvyd'ko Yu.V., Gerdau E.* // Hyperfine Interactions. 1999. V. 123/124. P. 741–776.
[3] *Shvyd'ko Yu.V., Gerdau E., Jäschke J.* et al. // Phys. Rev. (B). 1998. V. 57. P. 4968.
[4] *Graeff W., Materlik G.* // Nuvl. Instrum. and Methods. 1982. V. 195. P. 97.
[5] *Кушнир В.И., Суворов Э.В.* // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 44. С. 262.
[6] *Kushnir V.I., Suvorov E.V.* // Phys. Stat. Sol. (A). 1990. V. 122. P. 391.
[7] *Woodruff D.P., Seymour D.L., McConville C.F.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 1460.
[8] *Cusatis C., Udron D., Mazzaro I.* et al. // Acta Cryst. (A). 1996. V. 52. P. 614.
[9] *Пинскер З.Г.* Рентгеновская оптика. М.: Наука, 1982. 390 с.
[10] *Бушуев В.А., Чен Т.* // Вестник Мос. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1988. Т. 29. N 6. С. 58–63.
[11] *Чуховский Ф.Н.* // Металлофизика. 1981. Т. 3. № 5. С. 3–30.
[12] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. В. 3 (9). С. 834–846.