
Э. Г. ШИНСКЕР

ДИНАМИЧЕСКОЕ
РАССЕЯНИЕ
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ
В ИДЕАЛЬНЫХ
КРИСТАЛЛАХ

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ

ИНСТИТУТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ им. А. В. ШУБНИКОВА

З. Г. ПИНСКЕР

ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ
В ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ



ИЗДАТЕЛЬСТВО • НАУКА • МОСКВА • 1974



Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. П и н с к с р З. Г. М., изд-во «Наука», 1974.

В последнее время важное значение приобрели методы исследования и контроля различных нарушений идеальной структуры кристаллов, основанные на динамическом рассеянии, в связи с возросшим потреблением монокристаллов в полупроводниковой технике, квантовой электронике и т. д.

В монографии впервые дается полное систематическое изложение теории наиболее прецизионных экспериментальных методов и важнейших результатов, относящихся к динамическому рассеянию рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. Наряду с этим приводятся в кратком изложении основы современной теории рассеяния в кристаллах с дефектами.

Книга рассчитана на читателей, имеющих подготовку в объеме программ физических факультетов университетов и инженерно-физических вузов.

Илл. 108. Табл. 13. Библ. 170 назв.

О т в е т с т в е н н ы й р е д а к т о р

член-корреспондент АН СССР **Б. К. ВАЙНШТЕЙН**

ПРЕДИСЛОВИЕ

На протяжении последних пятнадцати лет получены важные результаты большого числа теоретических и экспериментальных работ, посвященных дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с весьма совершенной структурой. Хотя существенное содержание динамической теории рассеяния в подобных кристаллах было разработано еще в 1913—1917 гг. Дарвином и Эвальдом, новые данные, имеющие принципиальный характер, привели к возникновению особого раздела физики твердого тела.

Помимо обобщенной теории следует отметить исследования интерференционных эффектов и рассеяния в поглощающих кристаллах, а также надежные и прецизионные измерения параметров рассеяния. Особое значение имеет использование обобщенной теории для разработки задач рассеяния в несовершенных кристаллах, в частности на кристаллических дефектах различного типа. Изложение соответствующих работ не входит в содержание данной монографии.

Столь интенсивное развитие этой области физики в значительной степени обязано возрастающей роли монокристаллических материалов в самых передовых областях современной техники. К таким материалам предъявляются высокие требования в отношении совершенства их кристаллической структуры, о чем рентгеновская дифракция дает богатейшую информацию.

Однако широко распространенные методы рентгеновской топографии являются чисто эмпирическими и обычно характеризуются качественной, иногда неоднозначной, интерпретацией получаемых картин. Совершенно очевидно, что основой этих методов должна быть полная и строгая теория рассеяния как в идеальных кристаллах, так и в кристаллах с дефектами в совокупности с надежным и прецизионным количественным изучением дифракционных эффектов.

Настоящая монография, насколько автору известно, является первым¹ в нашей и зарубежной литературе систематическим и пол-

¹ *Примечание при корректуре.*

Уже во время печатания настоящей монографии вышла книга В. И. Иверонской, Г. П. Ревкевич «Теория рассеяния рентгеновских лучей», Изд-во МГУ, 1972, в которой имеется раздел, посвященный основам динамической теории.

ным изложением теории, экспериментальных методов и результатов в области динамического рассеяния рентгеновских лучей в идеальных кристаллах.

Следует отметить, что глава 11 в основном написана Ф. Н. Чуховским, которому я выражаю благодарность также за просмотр и обсуждение некоторых других частей текста.

З. Г. Пинскер

Москва, 1973 г.

Глава 1

ИСТОРИЧЕСКИЙ ОБЗОР

Открытие дифракции рентгеновских лучей в кристаллах Лауэ, Фридрихом и Книппингом в 1912 г. [1] послужило отправной точкой развития научных исследований в ряде важнейших направлений. Рассмотрим некоторые из них.

Как известно, это открытие окончательно доказало наличие волновых свойств у рентгеновского излучения. Вместе с ранее установленной электромагнитной природой излучения это привело к важному выводу о том, что рентгеновские лучи составляют коротковолновую часть электромагнитного спектра. Это открытие было первым и решающим экспериментальным доказательством периодической структуры кристаллов. Фактически к этому представлению уже пришла теоретическая кристаллография, прежде всего как к следствию теории пространственных групп симметрии Федорова [2] и Шенфлиса [3].

Из оптики видимого света было известно, что дифракция на периодических объектах типа оптических решеток наблюдается на излучении, длина волны которого порядка периодов, в случае кристаллических решеток — порядка межатомных расстояний. Ясной стала причина того, что видимый свет с длинами волн, примерно в 500—1000 раз большими, чем периоды кристаллических решеток, не позволил вскрыть с помощью дифракционного эксперимента периодическую структуру кристаллов.

В это время Лауэ работал над главой о дифракции и интерференции для энциклопедии математических наук и нашел простую форму для теории двумерных оптических решеток. Результат эксперимента Фридриха и Книппинга побудил его сделать следующий шаг и построить простейшую теорию пространственной или трехмерной дифракции и интерференции. Такая теория получила наименование геометрической или кинематической теории.

Одним из первых и наиболее известных направлений работ, получивших бурное развитие в результате открытия 1912 г., является рентгеновский анализ атомной структуры кристаллов. Огромный экспериментальный материал рентгеноструктурных исследований, накопленный в течение более чем полувекового перио-

да, представляет одно из важнейших условий развития физики и химии твердого тела, с одной стороны, и получения, переработки, использования многих материалов современной техники, с другой [4].

Вместе с тем очевидно, что открытие дифракции рентгеновских лучей положило начало новой и в высшей степени интересной главе оптики. Если в оптике видимого света кристаллическая среда рассматривается как континуум, характеризующийся анизотропией, то оптика рентгеновских лучей должна быть несравненно ближе к периодической атомной структуре. Однако, к сожалению, блестящие успехи рентгеноструктурного анализа мало способствовали развитию этой новой оптики. Кинематическая теория рассеяния была впоследствии дополнена более правильными расчетами интенсивностей и атомных амплитуд, учетом влияния тепловых колебаний, методом определения фаз структурных амплитуд, основанным на аномальной дисперсии, и т. д. В таком виде она вполне удовлетворяла требованиям, которые предъявляли ей исследователи атомной структуры кристаллов.

Характерной чертой кинематической теории является учет взаимодействия каждого атома только с первичной, или преломленной, волной в кристалле. Эта теория пренебрегает взаимодействием атома с тем волновым полем, которое создается в кристалле совокупным рассеянием всех атомов. Другими словами, не учитывается многоволновое рассеяние, в частности взаимодействие элементарных волн с преломленной.

Заметим, что в настоящее время проблема многоволнового рассеяния становится более актуальной в связи с исследованием структуры белковых кристаллов. Это связано с соотношением длин волн используемого рентгеновского излучения и периодов решеток подобных структур.

Наиболее грубым дефектом кинематической теории является пренебрежение законом сохранения энергии, так как энергия проходящей через кристалл первичной волны считается неизменной, несмотря на то, что часть ее сообщается рассеянными волнам. Впрочем, указанный недостаток получил разумное объяснение впоследствии, к чему мы еще вернемся.

Первым, кто обратил внимание на схематичность кинематической теории и сделал успешную попытку более строго рассмотреть рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах, был Дарвин [5]. С теорией Дарвина можно познакомиться по книгам Комптона, Алисона [6], Г. С. Жданова [7] и Джеймса [8].

В его теории многоволновое рассеяние получило наглядную, хотя и недостаточно строгую, интерпретацию многократного отражения, что было связано с представлениями английской школы, возглавляемой Брэггами. Отражение рентгеновских лучей от кристалла рассматривалось как последовательное прохождение и многократное отражение от параллельных плоскостей, составляющих кристалл. При этом не учитывалось многократное рас-

сеяние внутри данной плоскости. Несмотря на неполноту такого рассмотрения, Дарвин получил правильную форму максимума отражения от идеального кристалла, который рассеивает не только под углом Вульфа — Брэгга, но и в некотором конечном угловом интервале.

В этот период времени, 1913—1914 гг., Дарвин работал вместе с Мозли в Манчестере у Резерфорда, изучая интенсивности рассеянных лучей. Проверяя соответствие экспериментальной интенсивности той величине, которая была определена им теоретически, он установил, что первая примерно в 10 раз сильнее. Тогда он выдвинул совершенно новую идею, согласно которой несовершенный кристалл состоит из слегка дезориентированных, но обладающих внутренней совершенной структурой субъединиц, или блоков, т. е., согласно современной терминологии, обладает мозаичной структурой (термин, введенный позже Эвальдом).

При построении своей теории Дарвин предсказал явление *первичной экстинкции*, которое заключается в полном отражении рентгеновских лучей совершенным кристаллом в некоторой области максимума отражения, а следовательно, в быстром экспоненциальном затухании волн в кристалле. В отличие от этого в мозаичном кристалле следует ожидать возникновения *вторичной экстинкции*, т. е. ограниченного проникновения падающего излучения вследствие постепенного отражения от отдельных блоков, надлежащим образом ориентированных по отношению к падающему пучку.

Эти результаты сыграли важную роль в последующем развитии. Во-первых, был дан толчок к значительному усовершенствованию методов измерения интенсивностей. Во-вторых, был указан путь к переходу от строгой теории рассеяния к кинематической, как к теории рассеяния в мозаичном кристалле. Впрочем, широко используемые понятия: идеально или неидеально мозаичный кристалл не отличаются ясностью и необходимой четкостью. Во всяком случае, впоследствии Лауэ, Захариасен и другие исследователи показали, что кинематические формулы получаются из формул для совершенного кристалла при предельном переходе к малым кристалликам.

Далее, идея блочной или мозаичной структуры реальных кристаллов послужила исходной точкой развития самостоятельного направления в физике твердого тела и важных технических применений рентгенографии. К этому мы вернемся в дальнейшем. Следует отметить, что представление о реальном кристалле как о мозаике получило своеобразный резонанс в среде физиков. Распространялось представление, согласно которому совершенных кристаллов заметных размеров вообще не существует и создать их невозможно.

Глубокий анализ явлений, протекающих при распространении «коротких» волн в кристаллах, был проведен Эвальдом [9], который уже с 1911 г., т. е. еще до открытия дифракции рентге-

новских лучей, работал над проблемой построения теории дисперсии света в кристалле, обладающем правильной периодической структурой. Эта работа сыграла существенную роль в формировании тех физических идей, которые были внесены Эвальдом в динамическую теорию рассеяния рентгеновских лучей [10].

Основы теории Эвальда изложены в книге Джеймса [8]. Здесь мы приведем некоторые замечания Эвальда [4], которые поясняют его подход к явлениям рассеяния излучения в кристалле.

Типичная задача кристаллооптики — определение коэффициента преломления — рассматривается как проблема собственных значений, аналогичная задаче вычисления частот колебательного спектра механической системы в стационарном состоянии.

Колебания резонаторов, возникновение и распространение вызванных этими колебаниями элементарных волн в бесконечном, неограниченном кристалле рассматриваются не как вынужденные, а как *собственные колебания* системы. Существенной чертой такой колеблющейся системы является *самосогласованность*. Она проявляется в том, что каждый резонатор приходит в колебание под влиянием волнового поля, образованного суперпозицией элементарных волн всех остальных резонаторов. Другими словами, волновое поле предполагает наличие связи между колеблющимися резонаторами, а резонаторы — наличие связи между излучениями, т. е. общее волновое поле. Соответствие между двумя типами связи является условием, определяющим показатель преломления n . Если задана частота ν , самосогласованность предопределяет величину λ или фазовую скорость q оптических волн в данном кристалле, а следовательно, и показатель преломления среды $n = c/q$.

Роль фазовой скорости q как регулятора, обеспечивающего конечную величину амплитуды в бесконечном, неограниченном кристалле, очевидна. Действительно, наличие фазовой скорости $q < c$ эквивалентно утверждению, что элементарные волны от некоторых атомных плоскостей, распространяясь, допустим, в направлении x , будут интерферировать с последующими элементарными волнами с некоторым сдвигом фаз. Таким образом, амплитуда суммарной волны будет пропорциональна $(c - q)^{-1}$. При $q = c$ амплитуда бесконечного кристалла обращается в бесконечность. Следовательно, фазовая скорость q при правильном ее значении определит «способность» системы резонаторов к образованию волнового поля надлежащей силы в «самосогласованном» режиме.

Теория Эвальда, опубликованная в 1916—1917 гг., медленно и с трудом воспринималась физиками, почти не привлекла к себе внимания даже в период после окончания войны 1914—1918 гг. Как представлялось в то время, эта теория приводила к тем же результатам, что и теория Дарвина, но несравненно более сложным путем.

В действительности, однако, теория Эвальда, изложенная в [10], имела более богатое содержание. Она включала дисперсию падающей волны внутри кристалла и естественный переход к многоволновому рассеянию; детальное рассмотрение двухволнового случая и использование дисперсионной поверхности, что принципиально позволяет предугадать аномальное прохождение в поглощающих кристаллах; симметричное и асимметричное отражения; отражение по Лауэ; наконец, маятниковое решение и, следовательно, основные интерференционные эффекты при рассеянии в идеальных кристаллах.

В последующих работах теория Эвальда получила несколько иную форму.

Как известно, в этой теории кристалл рассматривался как периодическая структура, состоящая из *точечных* резонаторов или диполей. Под влиянием внешней волны в кристалле возникает и распространяется возбуждение диполей, приходящих в колебание. Эта дипольная волна, в свою очередь, порождает электромагнитную волну. Используемая в этой теории модель точечных атомов-излучателей в какой-то мере не соответствовала тому уровню представлений, которые стали складываться с конца 20-х и начала 30-х годов. Во-первых, в рентгеноструктурном анализе начал использоваться метод Фурье-анализа распределения электронной плотности на основе экспериментальных значений структурных амплитуд. При этом получались картины непрерывного распределения электронной плотности, максимумы которой соответствовали положениям центров тяжести атомов.

Эти результаты находились в соответствии с новой физической картиной микромира, которая отвечала волновой, или квантовой, механике Луи де Бройля — Гейзенберга, получившей в 1926 г. свое первое завершение в работах Шредингера. В 1927—1928 гг. Венцель, Валлер и, в особенности, Хартри и Фок начали вычислять на основе квантовой механики атомные амплитуды рассеяния рентгеновских лучей с использованием модели непрерывного распределения электронной плотности внутри атома.

К этому надо добавить, что в 1928 г. была опубликована фундаментальная работа Бете [11], в которой, по аналогии с динамической теорией рассеяния рентгеновских лучей Эвальда, была предложена динамическая теория рассеяния электронов. Эта работа была вызвана открытием дифракции электронов в 1927 г. В теории Бете в качестве «рассеивающей материи» для электронов принималось непрерывное трехкратно периодическое распределение внутреннего потенциала кристалла.

Все это побудило Лауэ [12] выступить в 1931 г. с работой, в которой дается иная исходная модель в теории Эвальда, именно, вместо точечных резонаторов рассматривается непрерывно распределенная электронная плотность при наличии положительных зарядов, локализованных в центрах атомов. Под влиянием электрического поля падающей волны возникает поляризация,

пропорциональная в каждой точке локальной величине электрической напряженности.

Несколько позже (в 1933 г.) сотрудник Лауэ Коолер [13] опубликовал важную работу, в которой была дана квантовомеханическая интерпретация указанной модели, использованная в изложении динамической теории, данной Лауэ в монографии [14].

Тот же подход был использован Захариасеном в гл. III его монографии [15]. Ясное и сжатое изложение и удачный выбор переменных и параметров рассеяния принесли большую популярность этой главе книги. Многие теоретики и экспериментаторы, работающие в области динамического рассеяния рентгеновских лучей, использовали эту книгу и ссылались на нее.

По тем или иным причинам динамическая теория в изложении Захариасена, а несколько позже и в изложении Лауэ, в последнем издании его книги 1960 г. [14], и в обзорах Отье [16], Джеймса [17], Баттермана и Кола [18] получила более широкое распространение, чем прежняя форма теории Эвальда.

Сопоставляя результаты кинематического и динамического рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах, исследователи в период времени между двумя войнами сводят различия между ними к двум пунктам: в направлениях и угловой ширине дифрагированных пучков и в величинах интегрального отражения. Что касается геометрии интерференции, то в течение указанного периода было выполнено значительное число работ, посвященных отклонению от формулы Вульфа — Брэгга; измерениям коэффициента преломления методами, перенесенными из оптики видимого света; определению универсальных констант, таких, как заряд электрона; абсолютному определению длин волн и других величин. Эти исследования, выполненные Парратом, Бирдином, Бергеном и Дэвисом, Ларссоном, Бэклином, Стенстремом, Реннингером и другими авторами, показали с полной убедительностью справедливость формул динамической теории. Вместе с тем полученные результаты имели во многих случаях скорее качественный, чем количественный характер [14].

Еще более отчетливо качественный характер экспериментальных доказательств справедливости динамической теории выражен в исследованиях полуширины максимумов отражений и величин интегрального отражения. В известных работах Джеймса, Бриндлея и Вуда, Вагнера и Куленкампа и Реннингера было показано с несомненностью, что в большинстве случаев рассеяние рентгеновских лучей от кристаллических образцов, в том числе «монокристаллов», находящихся в распоряжении экспериментаторов, либо стоит ближе к значениям, предписываемым кинематической теорией, либо носит промежуточный характер между кинематическим и динамическим [7].

На пути к созданию экспериментальных возможностей для точного воспроизведения динамического рассеяния и измерения его параметров стояло два наиболее серьезных препятствия.

Первое заключалось в необходимости получить пучок рентгеновских лучей, который по спектральному разбросу и угловой расходимости отвечал бы тому приближению падающей плоской волны, которое лежит в основе теорий Дарвина и Эвальда. Решение этой задачи потребовало более полувека, если учесть пионерскую работу Комптона [19] 1917 г., который использовал кристалл-монохроматор, и принять во внимание, что и в настоящее время превосходные схемы для получения указанных пучков, использованные Реннингером, Отье, Бубаковой, Хильдебрандтом и Баттерманом и Коора [20], все еще требуют усовершенствования по тем или иным причинам.

Весьма существенным является то обстоятельство, что преодоление указанного первого препятствия тесно связано со вторым препятствием — отсутствием достаточно совершенных кристаллов. Что касается естественных образцов, то, как было установлено Парратом, Бирдином и др. еще в 1932—1933 гг., а затем в важной серии работ Брэгеном (1952—1954 гг.), среди естественных кристаллов кальцита и кварца имеются образцы с весьма совершенной структурой, вполне пригодные для количественной проверки динамической теории. Искусственно выращенные кристаллы хлористого натрия были исследованы Реннингером и обнаружили более или менее сильно выраженную мозаичную структуру.

Таким образом, общим итогом упомянутых исследований было убедительное доказательство справедливости динамической теории. Однако при этом создавалось впечатление, что формулы этой теории в основном, а именно в геометрии интерференций, приводят большей частью к результатам, которые отличаются от значений, предписываемых кинематической теорией, на ничтожные углы порядка нескольких угловых секунд. Другими словами, динамическая теория имеет весьма узкую и специальную область применения. Что касается интенсивностей, значения которых различаются в некоторых случаях больше, чем на порядок величин, то и это различие не имеет существенного значения, так как относится к редчайшим экземплярам кристаллов.

Обратимся теперь к послевоенному периоду.

На фоне общего научно-технического прогресса, темпы которого особенно усилились после перерыва, вызванного второй мировой войной, выделяется возникновение и развитие промышленности, связанной с полупроводниковыми материалами, приборами и различными устройствами, включающими полупроводниковые приборы. Исходными условиями возникновения этой промышленности были два взаимосвязанных фактора: развитие физики полупроводников и разработка технологии получения сверхчистых полупроводниковых материалов и, в особенности, изготовления весьма совершенных монокристаллов, прежде всего Ge, Si и GaAs. Далее было установлено, что полупроводниковые монокристаллы обладают нужными свойствами и выполняют те или иные заданные функции либо при ничтожных специально

введенных добавках, либо в сверхчистом состоянии, но во всяком случае — при максимально возможном совершенстве кристаллической структуры. Естественно, бурное развитие получили методы исследования подобных монокристаллов. Потребности практики вызвали большой интерес, в частности, к динамическому рассеянию рентгеновских лучей, как к одному из основных методов исследования и контроля степени совершенства кристаллов.

Использование монокристаллических материалов в современной технике, как известно, не ограничивается полупроводниками. Большое значение имеют монокристаллы кварца и других веществ в квантовой электронике и радиотехнике.

В этих условиях существенную роль сыграли интенсивные теоретические и экспериментальные исследования, выполненные на протяжении последних 15—20 лет и относящиеся как к динамическому рассеянию в идеальных кристаллах, так и к рассеянию в слегка искаженных кристаллах.

Важным этапом в разработке динамической теории было рассмотрение случая поглощающего кристалла и вывод формул для коэффициентов и интегральных величин отражения и прохождения. Существенно отметить, что один из важнейших эффектов, наблюдаемых при динамическом рассеянии в идеальных кристаллах, именно, эффект аномального прохождения в области максимума, не был предсказан теоретически, а обнаружен чисто экспериментально в работах 1941 г. и главным образом 1951 г. и был назван эффектом Бормана по имени автора этих работ [21]. Между тем Захариасен в своей книге [15] (1945 г.) ничего не говорит об аномальном прохождении, хотя приведенные им формулы при незначительном преобразовании однозначно указывают на наличие такого эффекта. Фактически в работе Лауэ 1949 г. [22] эффект Бормана показан как очевидный вывод из динамической теории.

Аномальное прохождение рентгеновских лучей в толстом поглощающем кристалле имеет важное принципиальное и практическое значение.

Как известно, в основе динамической теории Эвальда — Лауэ лежит квазиклассическое уравнение Максвелла, решением которого является так называемая блоховская волна, которая в двухволновом приближении аппроксимируется двумя плоскими волнами. Дальнейший анализ приводит к двум волновым полям (модам) в кристалле для каждого из двух стандартных состояний поляризации. Эффект Бормана заключается в том, что для одного из полей поглощение резко возрастает, а для другого резко снижается против нормального, что и приводит для этого поля к аномальному прохождению. Аномальное прохождение одного поля и поглощение другого находят свое выражение в своеобразных формах максимумов прохождения при различных условиях эксперимента.

Наряду с исследованием поглощающего кристалла, на протяжении главным образом 60-х годов началось всестороннее изучение интерференционных эффектов, сопровождающих динамическое рассеяние в кристаллах со слабо выраженным поглощением. Эти интерференционные эффекты, представляющие большой интерес с чисто физической точки зрения, открывают совершенно новые пути для точных определений важных количественных параметров как волнового поля в кристалле, так и самого кристалла. Значение интерференционных эффектов, в частности, определяется тем, что они позволяют измерить не только параметры идеальных кристаллов, но и характеристики различных искажений в реальных кристаллах.

Впервые интерференционные эффекты были обнаружены экспериментально в 1959 г. Като и Лангом при исследовании динамического рассеяния на *клиновидных участках* некоторых кристаллов [23]. При детальном анализе полученного экспериментального материала Като показал, что одно из фундаментальных исходных положений динамической теории во всех ее формах, а именно, падение на кристалл *плоской волны*, требует обобщения. Им было установлено, что определенный тип наблюдаемых интерференционных картин может образоваться только, если на кристалл падает расходящийся пучок волн. В связи с этим Като разработал вариант динамической теории в приближении падающей сферической волны [24, 25].

В дальнейшем, в 1968—1970 гг., в работах Хильдебрандта и Баттермана, Отье, Лефельд-Сосновской и Мальгранж и других авторов были получены интерференционные эффекты, обязанные рассеянию падающей плоской волны. Следует отметить, что аналогичные интерференционные эффекты наблюдались при динамическом рассеянии электронов значительно раньше (начиная с 1939—1940 гг.) [26, 27].

Замечательно, что интерференционные эффекты при динамическом рассеянии, о которых идет речь, были предсказаны Эвальдом в его динамической теории в 1916 г., но не могли быть реализованы экспериментально в течение примерно 43 лет, во всяком случае для рентгеновских лучей.

Таким образом, мы имеем здесь пример глубокого теоретического предвидения, на много лет опередившего возможности физического эксперимента.

Дальнейшим развитием работ, посвященных изучению динамических интерференционных явлений, следует считать создание и использование Бонзе и Хартом рентгеновских интерферометров [28]. Как и оптические интерферометры, их рентгеновские аналоги позволяют получать когерентные волны, но рентгеновского диапазона. Эти вновь созданные приборы открывают интересную перспективу сверхпрецизионных и сверхчувствительных измерений как параметров идеальных и реальных кристаллов, так и различных длин и физических величин за пределами кристалла. Рентге-

новские интерферометры, в которых используются наиболее совершенные монокристаллические материалы, работают в точном соответствии с динамической теорией рассеяния рентгеновских лучей и наиболее общими соотношениями электромагнитной оптики.

Интересный и важный класс явлений, обнаруженных экспериментально впервые Реннингером в 1937 г. [29], а впоследствии существенно дополненных работой Бормана и Хартвига [30] в 1965 г., относится к динамическому рассеянию с учетом нескольких взаимодействующих волн в кристалле. При этом наблюдается заметное изменение характера и величины эффектов аномального прохождения в поглощающих кристаллах. Соответствующая теория разработана Эвальдом и другими авторами [31—33].

Существенную роль в рассеянии рентгеновских лучей в кристаллах, в том числе и в динамическом рассеянии, играют тепловые движения атомов, а также диффузное рассеяние, частично также зависящее от тепловых колебаний. Влияние неупругого рассеяния на коэффициенты отражения и прохождения в динамическом режиме изучали теоретически ряд авторов, в частности Отски [34], Афанасьев и Каган [35]. По-видимому, в теории двух последних авторов получено наиболее ясное физически и полное решение проблемы. Диффузное рассеяние, имеющее несколько различных аспектов, продолжает служить предметом теоретических и экспериментальных исследований [36].

Наряду с упомянутыми экспериментальными исследованиями, направленными к строгому количественному изучению динамического рассеяния, с конца 50-х годов начала развиваться *рентгеновская дифракционная топография* монокристаллов. Методы топографии, позволяющие непосредственно наблюдать изображения различных дефектов в данном образце, приобрели важное практическое значение и широко распространены в настоящее время. Расшифровка топограмм, основанная на качественной трактовке динамического рассеяния, хотя и не всегда однозначна, но во многих случаях дает полезную информацию о реальной структуре объектов исследования. Отметим, что анализ рентгеновских топограмм имеет много общего с расшифровкой электронно-микроскопических снимков, что является существенным ввиду значительных успехов динамической теории рассеяния электронов в деформированных кристаллах. Развитие рентгеновской топографии за последние 10—15 лет связано с именами Ланга, Отье, Ньюкирка, Бонзе, Швутке, Елистратова, Миускова и других авторов. Общая характеристика методов рентгеновской топографии и библиография содержатся в сборнике [37], вышедшем под редакцией и с послесловием Елистратова.

Таким образом, разработка теории (Эвальда — Лауэ) рассеяния рентгеновских лучей в идеальных кристаллах в приближении падающей плоской волны, дополненная теорией Като [24] в приближении сферической волны, позволила охватить широкий круг явлений динамического рассеяния в идеальных кристаллах.

Количественное согласие с экспериментом в подавляющем большинстве случаев тем лучше, чем совершеннее экспериментальная техника и точнее использованные атомные и тепловые параметры.

Важнейшая очередная проблема, а именно, динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами, начала разрабатываться с 60-х годов.

В работах Пеннинга и Полдера [38] и Като [39] по аналогии с геометрической оптикой было развито лучевое приближение теории Эвальда — Лауэ и были получены удовлетворительные результаты в построении динамической теории рассеяния в упругодеформированных кристаллах.

В эти же годы Хови и Уилен [40] для электронов и Такаги [41]² для рентгеновских лучей начали разработку динамической теории, которую можно рассматривать как более строгую форму теории Дарвина.

Характерные для теории Дарвина рекуррентные соотношения, связывающие амплитуды преломленной и дифрагированной волн для двух последовательных плоскостей внутри кристалла, преобразуются в теории Хови и Уилена в систему из двух дифференциальных уравнений для указанных амплитуд, зависящих только от глубины z . Эта форма теории, соответствующая так называемому колонковому приближению, хотя и не является строгой, но с удовлетворительной точностью описывает распространение волн для случая дифракции электронов. Достоинством этой теории являются ее простота и возможность непосредственного перехода от рассеяния в идеальном кристалле к рассеянию в кристалле с дефектами. Важно подчеркнуть, что в *двухволновом приближении* уравнения Хови и Уилена могут быть использованы для описания рассеяния рентгеновских лучей в *идеальном* кристалле в случае падающей плоской волны.

Более общей и строгой является обобщенная теория, основанная на уравнениях Такаги, в которых волновое поле в кристалле зависит от двух переменных x и z , отвечающих плоскости, образованной векторами преломленной и дифрагированной волн.

В работе Топэна [42] уравнения Такаги были выведены из уравнений Максвелла. Этот результат можно рассматривать, в частности, как доказательство эквивалентности двух форм динамической теории *для идеального кристалла*: Эвальда — Лауэ и обобщенной. Вместе с тем эта последняя имеет по меньшей мере два существенных преимущества. Прежде всего она непосредственно позволяет перейти от приближения плоской падающей волны к общему случаю *падающего волнового пакета*, возбуждающего в кристалле пространственно неоднородное волновое поле. Это было показано одновременно и независимо в работах Слобо-

² Строгий вывод уравнений Хови и Уилена из уравнений Шредингера был дан Такаги в работе 1969 г.

децкого, Чуховского и Инденбома [43] и Отье и Симона [44]. В частном случае бесконечно узкой щели получаются результаты, соответствующие теории Като в приближении падающей сферической волны. В указанных работах рассмотрен случай Лауэ.

В 1969 г. одновременно и независимо Афанасьев и Кон [45] и Урагами [46] решили указанные уравнения для случая Брэгга при отражении от тонкой плоскопараллельной кристаллической пластинки. Результаты, полученные в обеих работах, вполне идентичны. Из работ [42—46], в частности, следует, что наряду с маятниковым решением динамической задачи, предсказанным Эвальдом в 1916 г., при использовании падающей волны с ограниченным волновым фронтом следует ожидать осцилляций интенсивности на краях волнового поля. Эти осцилляции, по-видимому, аналогичны френелевской дифракции.

Схема построения обобщенной теории применительно к идеальному кристаллу изложена в обзоре Инденбома и Чуховского [47].

Существенное значение имеет использование уравнения Такаги для непосредственного перехода от волнового поля в идеальном кристалле к полю в кристалле с дефектами; при этом входящая в уравнения функция угла падения будет также зависеть от координат x и z . Тем самым положено основание динамической теории рассеяния рентгеновских лучей в деформированном кристалле.

ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ И ЕГО РЕШЕНИЕ ДЛЯ ПРОЗРАЧНОГО НЕОГРАНИЧЕННОГО КРИСТАЛЛА

2.1. Волновое уравнение и его решение

Физическая модель распространения электромагнитных рентгеновских волн, положенная в основу излагаемой теории [14], сводится к следующему. Мы пренебрегаем действием рентгеновских волн на ядра атомов. При отсутствии внешнего поля можно считать кристалл нейтральным. Однако при прохождении падающей электромагнитной волны должно наблюдаться смещение отрицательных зарядов и, следовательно, некоторая поляризация.

Таким образом, под влиянием внешнего поля в кристалле возникает возмущенная электронная плотность, а значит, и дополнительный шредингеровский ток, или ток вероятности. Электромагнитное волновое поле в кристалле связано именно с распространением упомянутого возмущения и описывается методами электродинамики с помощью уравнений Максвелла.

Полная величина возмущенной электронной плотности в каждой точке $\rho(\mathbf{r})$ получается суммированием величин, относящихся к каждому электрону, так как это делается в одноэлектронном приближении. Итак, имеем

$$\rho(\mathbf{r}) = -e\psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

где e — заряд электрона; $\psi(\mathbf{r})$ — волновая функция и $\psi^*(\mathbf{r})$ — соответствующая комплексно-сопряженная величина. Здесь $\rho(\mathbf{r})$ — плотность числа электронов в кристалле, усредненная по квантовомеханическому электронному состоянию и по статистическому распределению теплового движения ядер в решетке. Связанные с величиной $\rho(\mathbf{r})$ шредингеровский ток \mathbf{J} и диэлектрическая проницаемость ϵ , так же как и $\rho(\mathbf{r})$, являются непрерывными функциями координат. Таким образом, наша величина ϵ существенно отличается от обычной диэлектрической постоянной в макроскопической теории диэлектриков.

Обращаемся к уравнениям Максвелла в обычном виде:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -c^{-1} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, & \operatorname{rot} \mathbf{H} &= c^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \mathbf{J} \right), \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon}, & \operatorname{div} \mathbf{H} &= 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Объемная плотность энергии W и вектор потока энергии электромагнитного поля в вакууме \mathbf{S} выражаются известными формулами

$$W = \frac{1}{8\pi} (|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{H}|^2), \quad (2.3)$$

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E}\mathbf{H}]. \quad (2.4)$$

Скалярная величина интенсивности электромагнитной волны составляет среднее значение модуля вектора $|\mathbf{S}|$ за период времени, достаточно большой по сравнению с периодом рентгеновских колебаний ν^{-1} .

Уравнение непрерывности для наших возмущенных зарядов можно получить, если взять дивергенцию $\text{rot } \mathbf{H}$ (2.2), тогда

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div } \mathbf{J} = 0. \quad (2.5)$$

Векторы \mathbf{E} и \mathbf{H} в общем случае выражаются через векторный потенциал \mathbf{A} и скалярный потенциал φ следующим образом:

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad } \varphi. \quad (2.7)$$

Так как φ в волновом поле обращается в нуль, мы получаем для \mathbf{E} :

$$\mathbf{E} = -c^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (2.8)$$

Смещение отрицательного электричества, вызываемое электромагнитной волной, описывается поляризацией \mathbf{P} , которая здесь является непрерывной функцией координат, и индукцией

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}, \quad (2.9a)$$

причем для волнового поля

$$\text{div } \mathbf{D} = 0. \quad (2.9b)$$

Очевидно, что

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}. \quad (2.10)$$

Продолжая аналогию с полем в диэлектрике, можно написать

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \varepsilon\mathbf{E}, \quad \varepsilon = 1 + 4\pi \left| \frac{\mathbf{P}}{\mathbf{E}} \right|. \quad (2.11)$$

Перейдем теперь к выводу волнового уравнения для поперечной волны индукции поля. Используя (2.9), перепишем первое уравнение Максвелла в виде

$$\text{rot } (\mathbf{D} - 4\pi\mathbf{P}) = -c^{-1} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (2.12)$$

Используя известную формулу векторного анализа

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{D} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{D} - \Delta \mathbf{D}, \quad (2.13)$$

найдем ротор от (2.12):

$$\Delta \mathbf{D} = c^{-1} \partial (\operatorname{rot} \mathbf{H}) / \partial t = -4\pi \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{P}. \quad (2.14)$$

Перепишем теперь второе уравнение Максвелла в виде:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (2.15)$$

Откуда

$$\Delta \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} + 4\pi \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{P} = 0. \quad (2.16)$$

Для того чтобы преобразовать полученную форму волнового уравнения к более удобному виду, обратимся вновь к значению величины тока \mathbf{J} . Как известно, с учетом возмущенной электронной плотности общее выражение для преддингеровского тока имеет вид

$$\mathbf{J} = \frac{eh}{4\pi im} (\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*) - \frac{e^2}{mc^2} \mathbf{A} \psi \psi^*, \quad (2.17)$$

где второй член описывает томсоновское рассеяние. При прохождении электромагнитной волны первый член в скобках также меняется, но при частотах падающей волны, далеких от собственных частот рассеивающих электронов, этим изменением можно пренебречь. Другое допущение, которое мы делаем, заключается в том, что во втором члене мы используем величину ρ , согласно (2.1) относящуюся к невозмущенным атомам в решетке. Таким образом,

$$\mathbf{J} \approx - \frac{e^2}{mc^2} \mathbf{A} \psi \psi^* \equiv \frac{e}{mc} \rho \mathbf{A}. \quad (2.18)$$

Далее, принимая для вектора \mathbf{A}

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{K} \mathbf{r})], \quad \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 2\pi i v \mathbf{A} \quad (2.19)$$

и учитывая (2.8), перепишем (2.18) в виде

$$\mathbf{J} = - \frac{e\rho}{2\pi imv} \mathbf{E}. \quad (2.20)$$

Сопоставляя (2.20) и (2.10) и используя для \mathbf{P} функции типа (2.19), получим

$$\mathbf{P} = \frac{e\rho}{4\pi^2 m v^2} \mathbf{E} \quad (2.21)$$

и согласно (2.9а)

$$\mathbf{D} = \left[1 + \frac{e\rho}{4\pi^2 m v^2} \right] \mathbf{E}. \quad (2.22)$$

Откуда для диэлектрической постоянной среды, где второй член описывает обратное влияние рассеяния на поле в среде, получаем

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 + \frac{e\rho(\mathbf{r})}{\pi m v^2}. \quad (2.23)$$

Введем теперь новую скалярную функцию решетки χ (см. (2.9a))

$$4\pi\mathbf{P} \approx \chi\mathbf{D}, \quad \chi = 1 - \varepsilon^{-1}. \quad (2.24)$$

Принимая, что \mathbf{D} есть также функция типа (2.19), т. е.

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \frac{4\pi^2 v^2}{c^2} \mathbf{D} = 4\pi^2 |\mathbf{K}|^2 \mathbf{D}, \quad |\mathbf{K}| = \frac{1}{\lambda}, \quad (2.25)$$

получаем преобразованную форму волнового уравнения для индукции

$$\Delta \mathbf{D} + 4\pi^2 |\mathbf{K}|^2 \mathbf{D} + \text{rot rot}(\chi \mathbf{D}) = 0. \quad (2.26)$$

Введенная нами функция χ , очевидно, аналогична поляризуемости и может быть вычислена следующим образом.

Обозначим через N число электронов в единице объема. В таком случае имеем для ε из уравнения (2.23) ($\rho = \bar{\rho} = -|e|N$):

$$\varepsilon = 1 + \frac{e\rho}{\pi m v^2} = 1 - \frac{e^2 N \lambda^2}{m c^2 \pi}. \quad (2.27)$$

Так как $e^2/mc^2 = 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см}$, $\lambda^2 \approx 10^{-16} \text{ см}^2$ и $N \approx 10^{23} - 10^{25} \text{ см}^{-3}$, то второй член справа в уравнении (2.27) порядка $< 10^{-4}$. Таким образом, мы можем разложить величину χ в (2.24) в ряд по степеням малой величины $e\rho/\pi m v^2$:

$$\chi = \frac{e\rho}{\pi m v^2} - \left(\frac{e\rho}{\pi m v^2} \right)^2 + \dots \quad (2.28)$$

и с достаточной точностью ограничиться первым членом разложения, принимая

$$\chi = \frac{e\rho}{\pi m v^2} < 0. \quad (2.29)$$

Поляризуемость χ , будучи непрерывной периодической функцией координат, может быть разложена в ряд Фурье вида

$$\chi = \sum_m \chi_m \exp[-2\pi i(\mathbf{h}_m \mathbf{r})], \quad (2.30)$$

где \mathbf{h}_m — радиус-вектор обратной решетки:

$$\mathbf{h}_m = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3; \quad (2.31)$$

суммирование производится по всем векторам обратной решетки.

Коэффициенты разложения (2.30) выражаются формулами

$$\chi_m = \Omega^{-1} \int_{\text{яч}} \chi \exp [2\pi i (\mathbf{h}_m \mathbf{r})] d\tau, \quad (2.32)$$

$$\chi_0 = \Omega^{-1} \int_{\text{яч}} \chi d\tau. \quad (2.33)$$

Индексы m могут принимать как положительные, так и отрицательные значения, причем χ_m и $\chi_{\bar{m}}$ являются комплексно-сопряженными величинами; χ_0 — среднее значение χ по всей решетке — действительная величина.

В дальнейшем используются выражения χ_m и χ_0 в функции от структурных амплитуд F_m :

$$\chi_m = -\frac{e^2}{\pi m v^2 \Omega} \int_{\text{яч}} -\frac{\rho}{e} \exp 2\pi i (\mathbf{h}_m \mathbf{r}) d\tau = -\frac{e^2 F_m}{\pi m v^2 \Omega}, \quad (2.34)$$

$$\chi_0 = -\frac{e^2 F_0}{\pi m v^2 \Omega} = -\frac{e^2 N}{\pi m v^2}. \quad (2.35)$$

Очевидно, что $\chi_0 > \chi_m$, так как рассеивающая способность атома падает с углом отклонения от направления первичного пучка, поскольку суммирование по элементарной ячейке в случае χ_0 всегда производится при фазах, одинаковых для всех атомов.

Решением волнового уравнения (2.26) динамической задачи является блоховская волна:

$$\mathbf{D} = \exp [2\pi i (\mathbf{v}t - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r}))] \sum_m \mathbf{D}_m \exp [-2\pi i (\mathbf{h}_m \mathbf{r})]. \quad (2.36)$$

Коэффициенты \mathbf{D}_m являются комплексными векторами. Выражение (2.36) можно рассматривать как плоскую волну с волновым вектором \mathbf{k}_0 и периодически изменяющейся амплитудой, причем в идентичных точках различных элементарных ячеек величина $|\mathbf{D}|^2$ имеет одинаковое значение.

Другая интерпретация блоховской волны основана на условии

$$\mathbf{k}_m = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_m, \quad (2.37)$$

откуда

$$\mathbf{D} = \exp [2\pi i \mathbf{v}t] \sum_m \mathbf{D}_m \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_m \mathbf{r})]. \quad (2.38)$$

В этом случае блоховская волна описывает волновое поле, состоящее из бесчисленного множества плоских волн с волновыми векторами \mathbf{k}_m . Следовательно, уравнение (2.38) описывает упомянутое во введении многоволновое решение динамической теории. Там же было указано, что для рассеяния рентгеновских лучей наибольшее значение имеет двухволновое приближение, которое будет подробно рассмотрено в 2.2.

Для проверки предложенного решения необходимо ближе исследовать и преобразовать последние члены в уравнениях (2.16) и (2.26). Для этого представим в виде тройного ряда Фурье величину поляризации

$$P = \exp 2\pi i vt \sum_m P_m \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r})]. \quad (2.39)$$

С другой стороны, сравнивая упомянутые последние члены и используя разложения (2.30) и (2.36), получаем

$$4\pi P \approx \chi D = \exp [2\pi i (vt - (\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}))] \times \\ \times \sum_q \sum_n D_n \exp [-2\pi i (\mathbf{h}_q + \mathbf{h}_n, \mathbf{r})]. \quad (2.40)$$

Так как в разложении (2.38) пределы суммирования распространены на бесконечность, оно остается справедливым, если, например, все индексы m увеличить на одну и ту же величину n , при этом индекс 0 переходит в p . Очевидно далее, что вектор

$$\mathbf{h}_{q+n} = \mathbf{h}_q + \mathbf{h}_n \quad (2.41)$$

также является вектором обратной решетки. Выражение (2.40) можно переписать поэтому иначе, если ввести $m = q + n$:

$$\chi D = \exp [2\pi i (vt - (\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}))] \sum_q \sum_n \chi_{m-n} D_n \exp [-2\pi i (\mathbf{h}_m \cdot \mathbf{r})], \quad (2.42)$$

$$\chi D = \exp 2\pi i vt \sum_m \sum_n \chi_{m-n} D_n \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r})]. \quad (2.43)$$

Отсюда получаем значения коэффициентов Фурье-разложения (2.39).

$$P_m = (4\pi)^{-1} \sum_n \chi_{m-n} D_n. \quad (2.44)$$

Теперь для того чтобы подставить в волновое уравнение (2.16) значения входящих в него членов и установить условия приемлемости решений (2.36) и (2.38), проведем дифференцирование:

$$\Delta D = -4\pi^2 \exp 2\pi i vt \sum_m k_m^2 D_m \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r})] = \\ = -4\pi^2 \exp [2\pi i (vt - (\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}))] \sum_m k_m^2 D_m \exp [-2\pi i (\mathbf{h}_m \cdot \mathbf{r})]. \quad (2.45)$$

Далее [см. (2.39)]

$$\text{rot } P = -2\pi i \exp 2\pi i vt \sum_m [\mathbf{k}_m P_m] \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r})],$$

$$\text{rot rot } P = -4\pi^2 \exp 2\pi i vt \sum_m [\mathbf{k}_m [\mathbf{k}_m P_m]] \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r})]. \quad (2.46)$$

Преобразуем тройное векторное произведение в правой части (2.46) по известному правилу:

$$[A[BC]] = B(AC) - C(AB) \quad (2.47a)$$

и получаем

$$[k_m[k_m P_m]] = k_m(k_m P_m) - P_m k_m^2. \quad (2.47b)$$

Очевидно, что в первом члене справа мы имеем слагаемое P_m , параллельное k_m и не представляющее для нас интереса при описании поперечных волн; второй член содержит слагаемое P_m , перпендикулярное к k_m . Обозначим его через $P_{m[m]}$.

Подставляя в уравнение (2.16) новые значения всех трех членов из (2.25), (2.45) и (2.46), получим уравнение, которое должно удовлетворяться тождественно, т. е. для каждого из m в отдельности. Условие равенства нулю коэффициентов при каждом слагающем колебании (или моде) будет иметь вид

$$\begin{aligned} -4\pi^2 k_m^2 D_m + 4\pi^2 K^2 D_m + 4\pi^2 P_{m[m]} k_m^2 &= 0, \\ (k_m^2 - K^2) D_m / k_m^2 &= 4\pi P_{m[m]}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

или с учетом (2.44)

$$\frac{k_m^2 - K^2}{k_m^2} D_m = \sum_n \chi_{m-n} D_{n[m]}. \quad (2.49)$$

Слагаемое $D_{n[m]}$ — индукция волн n , перпендикулярных к волновому вектору данной волны k_m .

Уравнения (2.49) называются фундаментальными уравнениями динамической теории.

Заметим, что уравнения (2.2), (2.9a) и (2.15) позволяют уточнить взаимное расположение важнейших векторов этих волн.

Действительно, из (2.2) и из Фурье-представления магнитной напряженности

$$H = \exp 2\pi i v t \sum_m H_m \exp[-2\pi i(k_m r)] \quad (2.50)$$

получаем

$$\operatorname{div} H = -2\pi i \exp(2\pi i v t) \sum_m (k_m H_m) \exp[-2\pi i(k_m r)] = 0. \quad (2.51)$$

Очевидно, что равенство нулю суммы является тождественным, т. е. все $(k_m H_m)$ обращаются в нуль, а следовательно, магнитные напряженности отдельных волн перпендикулярны к своим волновым векторам.

Аналогичным путем доказывается перпендикулярность волновым векторам векторов индукции D_m , что видно из уравнения (2.49).

Наконец, из уравнения (2.15) следует

$$\begin{aligned} & -2\pi i \exp(2\pi i vt) \sum_m [\mathbf{k}_m \mathbf{H}_m] \exp[-2\pi i (\mathbf{k}_m \mathbf{r})] = \\ & = 2\pi i K \exp(2\pi i vt) \sum_m \mathbf{D}_m \exp[-2\pi i (\mathbf{k}_m \mathbf{r})], \end{aligned}$$

откуда

$$\mathbf{D}_m = -K^{-1} [\mathbf{k}_m \mathbf{H}_m]. \quad (2.52)$$

Таким образом, в «плоских» волнах m векторы \mathbf{H}_m , \mathbf{D}_m и \mathbf{k}_m образуют правовинтовую ортогональную систему совершенно так же, как в электромагнитной оптике видимого света в анизотропных средах [48].

Чисто поперечными являются лишь волны индукции \mathbf{D} . Аналогия с оптикой относится и к вектору напряженности электрического поля \mathbf{E} , который, оставаясь перпендикулярным к \mathbf{H} , лежит в плоскости, проходящей через \mathbf{k} и \mathbf{D} . Это следует из первого уравнения Максвелла (2.2), которое приводит к условию

$$\mathbf{H}_m = K^{-1} [\mathbf{k}_m \mathbf{E}_m], \quad (2.53)$$

а также из уравнений (2.9) и (2.24), дающих значение \mathbf{E}_m в виде

$$\mathbf{E}_m = \mathbf{D}_m - \sum_n \chi_{m-n} \mathbf{D}_n. \quad (2.54)$$

Вместе с тем следует подчеркнуть, что представление блоховской волны в виде плоских волн является лишь аппроксимацией. Как показывают уравнения (2.37) и (2.49), в действительности «плоские» волны возникают лишь совместно, образуя единое волновое поле. Кроме того, излагаемая здесь форма динамической теории является недостаточно строгой и в другом отношении. Использование индукции \mathbf{D} вместо напряженности \mathbf{E} является недостаточно обоснованным, поскольку в данной теории \mathbf{D} есть функция координат, а не макроскопический параметр¹.

Как следует из сделанных выше замечаний, решение (2.38) волнового уравнения в кристалле, так же как и система фундаментальных уравнений (2.49), описывает волновое поле, состоящее из бесконечно большого числа отдельных плоских волн. Очевидно, что решение в такой форме не может быть фактически вычислено и, следовательно, сопоставлено с экспериментом. Однако опыт дает нам характер приближенного решения, которое позволяет провести до конца все расчеты и построить соответствующую теорию. Для того чтобы сформулировать это приближение, обратим-

¹ Впрочем, как показал Вагенфельд [49], использование Эвальдом в его теории электрического вектора \mathbf{E} для описания волнового поля в кристалле также основано на приближении: $\mathbf{E} \approx \mathbf{D} = \text{rot rot } \mathbf{Z}$ (\mathbf{Z} -- вектор Герца). Это приближение не более обосновано, чем приближение Лауэ (2.24): $4\pi \mathbf{P} = \chi \mathbf{E} \approx \approx \chi \mathbf{D}$.

ся к хорошо известной из кинематической теории схеме сфeры отражения в обратной решетке (рис. 1). Построение предполагает, что по крайней мере два узла обратной решетки в точности ложатся на сферу, построенную радиусом K , равным λ^{-1} волновому вектору в вакууме. Один из них отвечает началу координат (точка O), узлу или отражению (000) , т. е. падающей волне. Другой — узлу или отражению hkl (точка H). В динамической теории это построение несколько меняется. Если радиус сфeры равен волновому вектору в вакууме K , то начало координат должно отстоять от центра сфeры L на величину $k_m \neq K$, вследствие того, что коэффициент преломления рентгеновских лучей слегка отличается от единицы.

Для образования отражений в динамической теории не требуется выполнения столь сильного условия, как уравнение Вульфа — Брэгга. Для данных условий эксперимента, т. е. данного положения центра сфeры и самой сфeры в обратной решетке, принципиально любой узел может отвечать определенному отражению и волновой вектор этой отраженной волны k_m , будучи подставлен в фундаментальное уравнение (2.49), дает значение вектора D_m в функции от всех $D_{n[m]}$. Необходимо, однако, принять во внимание, что сумма в правой части всех уравнений типа (2.49) должна быть примерно постоянной и почти все узлы обратной решетки находятся от центра на расстояниях, больших и очень больших по сравнению с K , т. е. вообще $K \ll k_m$ и, следовательно, $(k_m^2 - K^2)/k_m^2 \approx 1$. Однако для узла, лежащего близко к сфeре, указанная дробь будет очень малой величиной. Следовательно, отвечающая ей волна D_m будет, наоборот, очень большой сравнительно со всеми другими D_n .

Другими словами, наше приближение является *двухволновым*: одна из волн может рассматриваться как падающая, точнее, преломленная, другая — как отраженная.

Отстояние узлов обратной решетки от сфeры характеризуется величиной ошибки возбуждения

$$\epsilon_m = \frac{(|k_m| - |K|)}{|K|} . \tag{2.55}$$

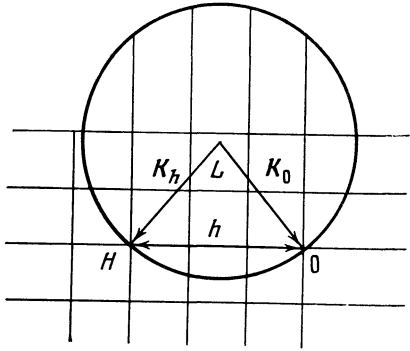


Рис. 1. Сфера отражения в обратном пространстве (кинематическое приближение)

В динамической теории более существенное значение имеет построение не сфeры, а дисперсионной поверхности в обратном пространстве. Если рассматривать в общем случае систему фун-

даментальных уравнений (2.49) как подлежащую решению системе уравнений с p неизвестными векторами \mathbf{D} , то, очевидно, она распадается на $3p$ скалярных уравнений. Однако так как компоненты \mathbf{D}_m , параллельные соответствующим волновым векторам \mathbf{k}_m , не образуют поперечных электромагнитных волн, остается только $2p$ уравнений. Условием существования нетривиального решения будет равенство нулю детерминанта этой системы. Полученное уравнение и будет описывать указанную дисперсионную поверхность.

В качестве переменной в этом уравнении может фигурировать $\epsilon_{m=0}$ из уравнения (2.55) или другая величина, связанная с геометрией дисперсионной поверхности. Высшая степень этой переменной и, следовательно, степень уравнения будет $2p$. От найденных корней для переменной можно перейти с помощью уравнения (2.55) к соответствующим волновым векторам $\mathbf{k}_0^{(i)}$, $\mathbf{k}_h^{(i)}$ и, наконец, $\mathbf{D}_0^{(i)}$ и $\mathbf{D}_h^{(i)}$, где $i = 1, 2, 3 \dots p$. Следующее мысленное построение поясняет сказанное с помощью образа дисперсионной поверхности.

Построим в обратном пространстве векторы $\mathbf{k}_0^{(i)}$, сходящиеся в начале координат обратной решетки. Их направления и величины будут определяться данным углом падения и показателем преломления, различным для разных i [см. далее (3.21)]. Начальные точки этих векторов будем называть точками возбуждения (по Лауэ), или точками связи (по Эвальду). Меняя угол падения вблизи угла Вульфа—Брэгга, мы тем самым будем слегка покачивать волновые векторы, оставляя неподвижными их конечные точки в начале координат. При этом их начальные точки будут описывать некоторые поверхности, которые составят $2p$ -листную дисперсионную поверхность. Каждый лист этой поверхности следует рассматривать как геометрическое место точек возбуждения. Если из одной из точек листа номер i провести векторы $\mathbf{k}_h^{(i)}$ ко всем точкам обратной решетки ($h = 1, 2, \dots$), то это множество, совместно с исходным вектором $\mathbf{k}_0^{(i)}$, будет относиться к некоторому волновому полю или моде динамической задачи. Таких полей всего будет $2p$ — по числу скалярных уравнений нашей фундаментальной системы (2.49). Термин *точка возбуждения* отражает эффект возбуждения волнового поля в кристалле под влиянием внешней вакуумной волны для данного значения угла падения.

Однако, рассматривая волновое поле в неограниченном кристалле, мы не можем принципиально выделить из множества волн ту, которая соответствует преломленной волне \mathbf{k}_0^i . Колебания в неограниченном кристалле рассматриваются как собственные, но не вынужденные. Этому представлению отвечает термин *точка связи* (tie point [4]). В общем случае найденные волновые векторы могут быть комплексными векторами

$$\mathbf{k}_0^{(i)} = \mathbf{k}_{0r}^{(i)} + i\mathbf{k}_{0i}^{(i)}. \quad (2.56)$$

Известно, что комплексное значение волнового вектора приводит к появлению в выражении для волны множителя затухания:

$$\exp[-2\pi i (\mathbf{k}_0^{(i)} \mathbf{r})] = \exp[-2\pi i (\mathbf{k}_{0r}^{(i)} \mathbf{r})] \exp[2\pi (\mathbf{k}_{0i}^{(i)} \mathbf{r})]. \quad (2.57)$$

В выражении для интенсивности мы получим квадрат этого множителя

$$\begin{aligned} \exp[-2\pi i (\mathbf{k}_{0r}^{(i)} + i\mathbf{k}_{0i}^{(i)}, \mathbf{r})] \exp[+2\pi i (\mathbf{k}_{0r}^{(i)} - i\mathbf{k}_{0i}^{(i)}, \mathbf{r})] = \\ = \exp 4\pi (\mathbf{k}_{0i}^{(i)} \mathbf{r}), \end{aligned}$$

$$|\mathbf{k}_{0i}^{(i)}| = -k_{0iz} < 0. \quad (2.58)$$

Наше фундаментальное уравнение (2.49) написано для векторов электрической индукции \mathbf{D}_m . Разумеется, оно может быть с помощью несложного преобразования представлено в виде уравнения для магнитных векторов \mathbf{H}_m . Умножим векторно уравнение (2.52) на \mathbf{k}_m . В таком случае справа мы будем иметь

$$[\mathbf{k}_m [\mathbf{k}_m \mathbf{H}_m]] = k_m^2 \mathbf{H}_m,$$

и уравнение примет вид

$$\mathbf{H}_m = \frac{K}{k_m^2} = [\mathbf{k}_m \mathbf{D}_m]. \quad (2.59)$$

Теперь умножим векторное уравнение (2.49) на $\mathbf{k}_m K$. Согласно (2.59), слева мы получим $(k_m^2 - K^2) \mathbf{H}_m$, а справа $\sum \chi_{m-n} K [\mathbf{k}_m \mathbf{D}_n]$ (значок m можно опустить, так как здесь мы имеем векторное произведение, куда входит только слагающая \mathbf{D}_n , перпендикулярная \mathbf{k}_m). Заменяя в этом векторном произведении \mathbf{D}_n его значением согласно (2.52) и переходя от тройного векторного произведения к разности скалярных, получим

$$(k_m^2 - K^2) \mathbf{H}_m = \sum_n \chi_{m-n} \{ \mathbf{H}_n (\mathbf{k}_m \mathbf{k}_n) - \mathbf{k}_n (\mathbf{k}_m \mathbf{H}_n) \}. \quad (2.60)$$

Это есть фундаментальное уравнение для векторов магнитного поля.

2.2. Двухволновое приближение. Дисперсионная поверхность

Прежде чем перейти к детальному изложению теории для двух сильных волн, рассмотрим рассеяние при отсутствии правильного отражения, т. е. когда угол падения первичной волны достаточно далек от угла Вульфа — Брэгга. В этом случае система (2.49) вырождается в одно уравнение, индекс m обращается в нуль, и тогда n тоже принимает значение нуль. Волновой вектор для этого случая прохождения первичной волны без отражения обозначим через \mathbf{k} . Уравнение принимает вид $(k^2 - K^2)k^{-2} - \chi_0 = 0$.

Ввиду малости χ_0 пренебрегаем ее квадратом и преобразуем полученное уравнение нижеуказанным образом:

$$k^2(1 - \chi_0) = K^2, \quad |k| \approx \frac{K}{(1 - 1/2 \chi_0)} \approx K(1 + 1/2 \chi_0). \quad (2.61)$$

Введем величину показателя преломления

$$n = \frac{k}{K} = 1 + 1/2 \chi_0 = \left(1 - \frac{e^2 N}{2\pi m v^2}\right) < 1. \quad (2.62)$$

Значение n из (2.62) совпадает с результатом вычисления показателя преломления рентгеновских лучей в классической теории дисперсии. Как известно, экспериментальная проверка этого значения для частот больших, сравнительно с K -краем поглощения, дает согласие с точностью до нескольких процентов. Это является подтверждением применимости допущений и самой физической модели, положенной в основу излагаемой теории.

Очевидно, в рассматриваемом случае дисперсионная поверхность вырождается в сферу с радиусом

$$|k| = K(1 + 1/2 \chi_0) < K. \quad (2.62a)$$

Переходим теперь к двухволновому приближению. Если, непрерывно меняя угол падения первичной волны на поверхность кристалла, мы попадаем в область максимума непосредственно вблизи угла Вульфа — Брэгга, в кристалле возникает блоховская волна, которую в данном случае можно представить в виде совокупности четырех плоских волн, двух преломленных и двух отраженных, так как $i = 1, 2$. Это относится к каждому из двух состояний поляризации наших электромагнитных волн.

Для более точного и полного описания процесса рассеяния введем в рассмотрение *плоскость отражения*, проходящую через векторы $k_0^{(i)}$ и $k_h^{(i)}$ указанных волн в кристалле.

Мы будем рассматривать наиболее простую и часто реализуемую на опыте схему, в которой плоскость отражения совпадает с плоскостью падения.

В том случае, когда частоты падающих волн велики по сравнению с K -краем поглощения, величины поляризуемостей χ_0 и χ_h являются истинными скалярами, и рассматриваемая плоскость будет плоскостью симметрии процесса рассеяния.

Обратимся к уравнениям (2.49). В нашем двухволновом приближении в первом уравнении следует принять $m = 0$, во втором $m = h$; n в правой части обоих уравнений последовательно принимает значение 0 и h . Что касается векторов D_m , точнее D_0 и D_h , то мы разлагаем их, так же как и векторы H_0 и H_h , по двум направлениям: перпендикулярно и параллельно плоскости отражения. Таким образом, мы будем дальше иметь дело со скалярными уравнениями. Для колебаний векторов индукции перпендикулярно

к плоскости отражения (σ -поляризация) получим

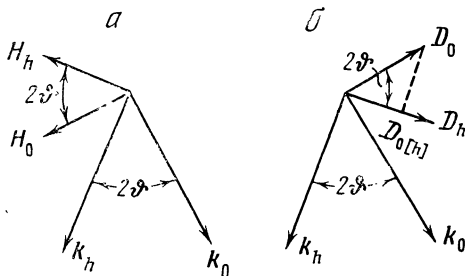
$$\frac{k_0^2 - K^2}{k_0^2} D_0 = \chi_0 D_0 + \chi_h D_h,$$

$$\frac{k_h^2 - K^2}{k_h^2} D_h = \chi_h D_0 + \chi_0 D_h. \quad (2.63)$$

Волны с другим состоянием (π -поляризация) можно описать с помощью фундаментальных уравнений для магнитных векторов,

Рис. 2. Взаимное расположение векторов индукции в двух состояниях поляризации

a — σ -поляризация; векторы индукции перпендикулярны к плоскости отражения и взаимно параллельны; *b* — π -поляризация; векторы индукции лежат в плоскости, параллельной плоскости отражения



именно для слагающих этих векторов, перпендикулярных к исходной плоскости. Используем уравнение (2.60).

В этом случае m принимает значение 0 и h и n — также 0 и h . Нетрудно видеть, что второй член в скобках в правой части (2.60) обращается в нуль, а скалярное произведение при H_h дает множитель $\cos 2\vartheta$, где ϑ — угол Вульфа — Брэгга. Система принимает вид

$$\frac{k_0^2 - K^2}{k_0^2} H_0 = \chi_0 H_0 + \chi_h \cos 2\vartheta H_h,$$

$$\frac{k_h^2 - K^2}{k_h^2} H_h = \chi_h \cos 2\vartheta H_0 + \chi_0 H_h. \quad (2.64)$$

Очевидно, что π -поляризацию можно описать и с помощью уравнений для слагающих D_0 и D_h , лежащих в исходной плоскости; уравнения получаются заменой величин H_0 и H_h на $D_{0\parallel}$ и $D_{h\parallel}$, как это легко видеть из рис. 2.

Заметим, что в то время как слагающие $D_{0\perp}$ и $D_{h\perp}$, $H_{0\perp}$ и $H_{h\perp}$ попарно параллельны, это не имеет места для величин $D_{0\parallel}$ и $D_{h\parallel}$.

В дальнейшем мы будем иметь дело главным образом с величинами $D_{0\perp}$ и $D_{h\perp}$, перпендикулярными к плоскости отражения (σ -поляризация), с которыми мы будем обращаться (так же как и с величинами $D_{0\parallel}$ и $D_{h\parallel}$) как со скалярами, так как их направления определены однозначно.

Преобразуем теперь систему уравнений (2.63). Для этого с достаточным приближением примем

$$k_0^2 - K^2 - k_0^2 \chi_0 \approx k_0^2 + K^2 (1 + 1/2 \chi_0)^2 = k_0^2 - k^2, \quad (2.65)$$

$$k_h^2 - K^2 - k_h^2 \chi_0 \approx k_h^2 - k^2, \quad (2.66)$$

$$\frac{k_0^2}{2K} \approx \frac{k_h^2}{2K} \approx 1/2 K, \quad k_0 + k \approx k_h + k \approx 2K \quad (2.67)$$

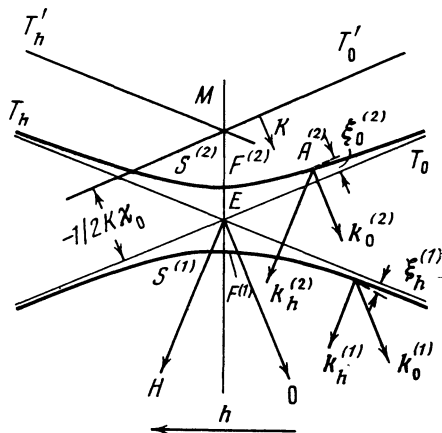


Рис. 3. Дисперсионная поверхность в обратном пространстве при двухволновом приближении (неограниченный кристалл)

вокруг оси $ОН$, где O и H — соответствующие узлы обратной решетки. Часть сечения этой поверхности плоскостью отражения показана на рис. 3 (гиперболы $S^{(1)}$, $S^{(2)}$). На этом рисунке при выбранном масштабе не помещаются узлы O и H , а тем более противоположная, относительно оси $ОН$, часть сечения. Описывая из точек O и H сферы радиусом $k = K (1 + 1/2 \chi_0)$, мы получим на нашем сечении линии T'_0 и T'_h соответственно и точку их пересечения M . Ввиду удаленности точек O и H линии T и T' в малом угловом интервале могут рассматриваться как прямые.

Очевидно, что точка M , удаленная от точек O и H на величину $K = \lambda^{-1}$ (λ — длина волны в вакууме), соответствует центру сферы распространения в кинематической теории, т. е. отражению при точном значении угла Вульфа — Брэгга и неизменной длине волны.

Точка E также может рассматриваться как центр сферы, построенной для отражения при точном значении угла Вульфа — Брэгга, однако при величине волнового вектора k , включающего

и перепишем уравнения (2.63) в следующем виде:

$$(k_0 - k) D_0 - 1/2 K \chi_h D_h = 0, \quad (2.68)$$

$$-1/2 K \chi_h D_0 + (k_h - k) D_h = 0.$$

Детерминант этой системы, будучи приравнен нулю:

$$\Delta = \begin{vmatrix} k_0 - k & -1/2 K \chi_h \\ -1/2 K \chi_h & k_h - k \end{vmatrix} = 0, \quad (2.69)$$

образует уравнение дисперсионной поверхности в обратном пространстве. Эта поверхность является (в принятом приближении) двухлистной поверхностью вращения (гиперболическим цилиндром)

поправку на преломление¹. Наконец, точки $F^{(1)}$ и $F^{(2)}$ на двух ветвях гиперболы отвечают уже динамическому отражению при частном значении угла отражения, именно угле Вульфа — Брэгга. Эти точки отстоят от узлов O и H на величины $k_0^{(1)} = k_h^{(1)}$ и $k_0^{(2)} = k_h^{(2)}$ соответственно. Для этого частного случая волновые векторы с индексами 0 и h оказываются равными.

Дисперсионная поверхность, на нашем сечении гиперболы, есть геометрическое место точек возбуждения. Поэтому случаю динамического отражения под углами, слегка отличными от угла Вульфа — Брэгга, будет отвечать смещение точек $F^{(1)}$ или $F^{(2)}$, или обеих, вдоль кривых $S^{(1)}$ и $S^{(2)}$. Пусть точками возбуждения окажутся точки $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$. Соединим их с узлами O и H . Введем в рассмотрение отрезки $\xi_0^{(i)}$ и $\xi_h^{(i)}$, которые имеют следующие значения (см. рис. 3):

$$\xi_0^{(i)} = k_0^{(i)} - k, \quad \xi_h^{(i)} = k_h^{(i)} - k, \quad i = 1, 2. \quad (2.70)$$

Величины $\xi_0^{(i)}$ и $\xi_h^{(i)}$ будут далее считаться положительными, если они образуют острые углы с положительным направлением векторов k и $k^{(i)}$. Напомним, что векторы K , k и $k^{(i)}$ направлены от точек M , E или $A^{(i)}$ к O и H . Таким образом, мы имеем

$$\xi_0^{(i)} = \mp |\xi_0^{(i)}|, \quad \xi_h^{(i)} = \mp |\xi_h^{(i)}|. \quad (2.71)$$

Теперь мы можем переписать уравнение дисперсионной поверхности (2.69) в виде

$$\Delta = \begin{vmatrix} \xi_0 & -1/2 K \chi_{\bar{h}} \\ -1/2 K \chi_h & \xi_h \end{vmatrix} = 0, \quad (2.72)$$

$$\xi_0 \xi_h = \frac{1}{4} K^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (2.73)$$

Очевидно, если мы напишем уравнение типа (2.68) для другого состояния поляризации с магнитными векторами, перпендикулярными к исходной плоскости, мы получим в соответствии с (2.64)

$$\xi_0 \xi_h = 1/4 K^2 (\cos 2\vartheta)^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (2.73a)$$

Поэтому в дальнейшем мы будем вводить в наши формулы множитель C , имеющий следующий смысл:

$$C = \begin{cases} 1 & \text{— для } \sigma\text{-поляризации,} \\ \cos 2\vartheta & \text{— для } \lambda\text{-поляризации.} \end{cases} \quad (2.74)$$

¹ В литературе по инициативе Эвальда (см. [4]) точка M иногда называется точкой Лауэ La, так как она соответствует концу вектора K , который используется в кинематической теории при описании волнового поля в кристалле. Для точки E Эвальд предложил название точки Лорентца Lo, так как она возникает при учете преломления на границе раздела вакуум—кристалл. Как известно, формула (2.62) может быть получена из формулы Лоренц — Лорентца в теории дисперсии из условия $\omega_0 - \omega \approx -\omega$.

Очевидно далее, что

$$C = |C|(-1)^\tau, \quad (2.74a)$$

где $\tau = 0$ для σ -поляризации и $\tau = 1$ для π -поляризации при $2\theta > \pi/2$ ¹.

В соответствии с этим уравнение дисперсионной поверхности приобретает вид

$$\xi_0 \xi_h = \frac{1}{4} K^2 C \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (2.75)$$

Исключая k_0 из уравнений (2.55) и (2.70) и используя (2.61), получаем соотношение между величинами ϵ_0 и ξ_0

$$\xi_0 = K (\epsilon_0 - 1/2 \chi_0). \quad (2.76)$$

Напоминаем, что χ_0 является величиной существенно отрицательной.

Уравнение дисперсионной поверхности можно рассматривать как уравнение гиперболы на плоскости отражения.

Величины ξ_F , проведенные из точек $F^{(i)}$ на действительном диаметре гиперболы, имеют значение

$$(\xi_0^{(i)})_F = (\xi_h^{(i)})_L = \frac{KC}{2} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}. \quad (2.77)$$

Если исходить из уравнения гиперболы, отнесенной к осям

$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad (2.78)$$

то величина действительной полуоси

$$a = \frac{\xi_F}{\cos \theta} = \frac{KC}{2 \cos \theta} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \quad (2.79)$$

и мнимой полуоси

$$b = \frac{KC}{2 \sin \theta} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \quad (2.80)$$

и уравнение гиперболы (2.78) примет вид

$$x^2 \cos^2 \theta - y^2 \sin^2 \theta = \frac{K^2 C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}{4} = \xi_0 \xi_h. \quad (2.81)$$

Нетрудно видеть из (2.79), что для колебаний вектора индукции, перпендикулярных плоскости отражения, действительная ось $2a$ больше, чем для состояния π -поляризации в $(\cos 2\theta)^{-1}$ раз (рис. 4).

Введем теперь величины $c^{(i)}$, выражающие отношения величин $D_h^{(i)}/D_0^{(i)}$. Из уравнений (2.68) и (2.70) следует

$$c^{(i)} = \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(i)}} = \frac{2\xi_0^{(i)}}{K\chi_{\bar{h}}C} = \frac{K\chi_h C}{2\xi_h^{(i)}} = \sqrt{\frac{|\xi_0^{(i)}|}{|\xi_h^{(i)}|}}. \quad (2.82)$$

¹ Проще пользоваться условием $C = |\cos 2\theta|$ для π -поляризации.

Выражения (2.82) определяют отношения амплитуд в волновых полях внутри кристалла. Пользуясь последним соотношением, представляющим $c^{(i)}$ с функции от переменных $\xi^{(i)}$, мы можем проследить, как меняются величины $c^{(i)}$ при непрерывном изменении угла падения внутри области максимума.

Очевидно, вся область максимума отвечает интервалу углов от одного до другого края дисперсионных кривых (соответственно поверхностей).

На нижней ветви при переходе от отрицательных смещений от угла ϑ (слева) к положительным (справа) величина отношения

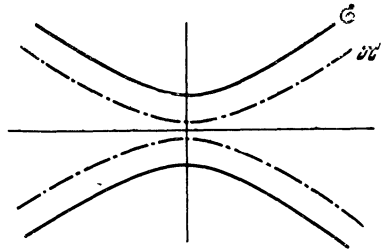


Рис. 4. Дисперсионные поверхности для σ - и π -поляризаций

$c^{(1)} = D_h^{(1)}/D_0^{(1)}$ возрастает от $\sim 0,01$ до 100 (на правом краю схемы), обращаясь в единицу в точке $F^{(1)}$ (рис. 3). Для $c^{(2)}$, т. е. для верхней ветви, мы получаем в точности обратный ход, т. е. уменьшение отношения $D_h^{(2)}/D_0^{(2)}$ при переходе слева направо. Однако эти особенности функций (2.82) являются не столь характерными и существенными, как соотношение абсолютных величин $D_h^{(i)}$ и $D_0^{(i)}$ (см. (3.22), (3.23)).

Следует помнить, что двухволновое приближение, для которого применима схема рис. 3, заключается в том, что среди бесчисленно множества волн динамической задачи две волны, D_0 и D_h , предполагаются достаточно сильными. Поэтому при углах падения, близких к границам максимума, т. е. к границам дисперсионных кривых, когда одна из волн, именно D_h , становится слабой, двухволновое приближение и данная схема становятся неприменимыми. Следовательно, уточнять соотношения (2.82) применительно к условиям, отвечающим краям рис. 3, не следует. Существенно, что вне области максимума мы попадаем в условия, отвечающие одной волне, которая распространяется в кристалле без отражения. Направление этой волны, с точностью до показателя преломления, совпадает с направлением падающей волны в вакууме. Таким образом, мы имеем в этих случаях переход от двух волн в кристалле к одной волне. Нетрудно видеть, что дисперсионная поверхность с точки зрения такого перехода является промежуточной областью пересечения двух сфер распространения (рис. 5).

Качественный анализ соотношений (2.82) и рис. 3 позволяет установить относительные фазы волн индукции двух полей в

каждом из состояний поляризации. Как указывалось выше, χ_h является комплексной величиной. Пусть

$$\chi_h = |\chi_h| \exp(i\eta_h), \quad \chi_{\bar{h}} = |\chi_h| \exp(-i\eta_h), \quad (2.83)$$

откуда ¹

$$\chi_h \chi_{\bar{h}} = |\chi_h|^2, \quad \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} = \exp i\eta_h,$$

$$\left| \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \right|^2 = \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \sqrt{\frac{\chi_h^*}{\chi_{\bar{h}}^*}} = 1, \quad (2.84a)$$

$$\chi_h = \chi_{\bar{h}}^*, \quad \chi_h^* = \chi_{\bar{h}}. \quad (2.84b)$$

В частном случае centrosимметричного кристалла

$$\eta_h = \pi, \quad \exp i\eta_h = -1, \quad \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| = 1. \quad (2.85)$$

В уравнении (2.82) знаки величин $c^{(i)}$, определяющие фазовые соотношения колебаний D_0 и D_h , будут зависеть от знаков как ξ_0 , так и χ_h . Так как при данном значении η_h все χ_h становятся отрицательными, то $c^{(1)} > 0$ и $c^{(2)} < 0$, т. е. $D_h^{(1)}$ колеблется в фазе с $D_0^{(1)}$, а $D_h^{(2)}$ в противофазе с $D_0^{(2)}$.

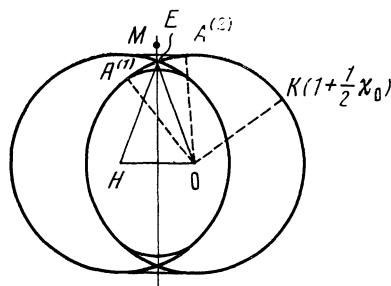


Рис. 5. Дисперсионная поверхность — область пересечения двух сфер распространения

Таким образом, динамическая теория в *двухволновом* приближении приводит к образованию внутри кристалла в области максимума четырех волновых полей (по два поля для каждого состояния поляризации), причем в каждом поле по две волны D_0 и D_h — итого восемь волн.

Здесь необходимо сделать еще одну ^{*}очень важную оговорку. Рис. 3 и анализ, проведенный в связи с ним, относятся к прохождению рентгеновых лучей, т. е. к случаю Лауэ. Систематическое рассмотрение случая Брэгга будет дано в гл. 7 и 8.

¹ Эти соотношения относятся к частному случаю прозрачных кристаллов, в которых атомы имеют действительные атомные амплитуды. В поглощающих кристаллах, как будет показано в гл. 4, комплексно-сопряженными являются лишь пары величин: χ_{hr} и $\chi_{\bar{h}\bar{r}}$, χ_{hi} и $\chi_{\bar{h}\bar{i}}$.

ПРОХОЖДЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ЧЕРЕЗ ПРОЗРАЧНУЮ КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ ПЛАСТИНКУ. ОТРАЖЕНИЕ ПО ЛАУЭ

3.1. Волновые поля внутри кристалла

1. Полукристалл. Связь с условиями эксперимента. Эффект преломления.

До сих пор мы фактически рассматривали распространение блоховских волн в неограниченном кристалле. С этим связана неопределенность в локализации действительных центров возбуждения на дисперсионной поверхности, а следовательно, и невозможность определения действующих волновых векторов $K_0^{(i)}$ и $K_h^{(i)}$. Указанная неопределенность устраняется, если ввести в рассмотрение поверхность раздела вакуум-кристалл и на ней падающую волну, представленную волновым вектором $K_0^{(a)}$ с углом падения ψ_0 , и отражающую плоскость с углом φ относительно поверхности раздела или входной грани.

При теоретическом рассмотрении границы раздела кристалл — вакуум может возникнуть опасение, что ввиду малой, порядка периодов решетки, длины волны рентгеновских лучей реальная структура поверхности, с ее ступеньками, окисными или адсорбированными пленками и другими отклонениями от идеализированной картины, может внести существенное искажение в схему граничных условий. Однако вопрос решается опытом. По-видимому, схема, использующая математическую границу кристалл — вакуум, хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными. Таким образом, мы переходим от неограниченного кристалла к полубесконечному кристаллу.

Волновое поле в кристалле порождается падающей волной, причем волна K_0 является прямым продолжением в кристалле падающей волны $K_0^{(a)}$. В таком случае фазовые скорости вдоль поверхности раздела, а следовательно, и тангенциальные компоненты волновых векторов должны быть равны.

Можно показать, что если в трех условиях Лауэ для образования максимумов трехмерной интерференции два условия написать для векторов, лежащих в плоскости входной поверхности, то эти условия будут выполняться и в динамической теории. Это следует из упомянутой¹ непрерывности тангенциальных слагающих вол-

новых векторов на границе. Что касается третьего условия, то в кинематической теории оно выполняется только для определенного угла падения, причем тем точнее, чем больше рассеивающий кристалл. В отличие от этого динамическая теория делает третье условие не столь строгим даже и для сколь угодно большого рассеивающего кристалла.

Внесем теперь в схему рис. 3 параметры, описывающие условия на границе. Прямая PP' на рис. 6 указывает положение (единичной) нормали к поверхности раздела. Направление вектора

нормали выбирается внутрь кристалла. Так как направление волнового вектора $\mathbf{K}_0^{(a)}$ падающей волны в вакууме отвечает отрезку, проведенному от точки P на прямой T'_0 к узлу O обратной решетки, то угол $P'PO$, который мы обозначаем через ψ_0 , и будет углом падения. Заметим, что ввиду удаленности точек O и H прямые, сходящиеся в одной из этих точек на рис. 3 и 6, представлены параллельными. Волновые векторы волн в кристалле $\mathbf{k}_0^{(i)}$ и $\mathbf{k}_h^{(i)}$ проводятся из точек $A^{(i)}$ к узлам O и H .

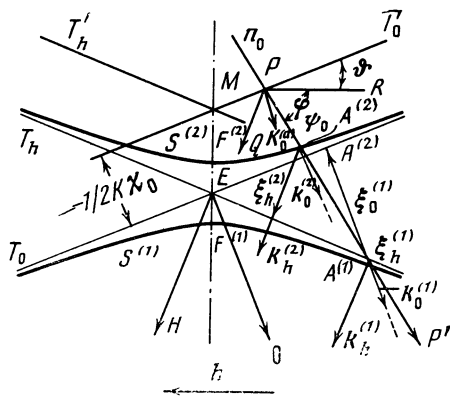


Рис. 6. Дисперсионная поверхность в обратном пространстве (полукристалл)

Равенство тангенциальных слагающих волновых векторов на границе кристалл — вакуум требует, чтобы векторы $\mathbf{K}_0^{(a)}$ и $\mathbf{k}_0^{(i)}$ на рис. 6 опирались на общую нормаль \mathbf{n}_0 , лежащую на PP' . Это можно записать в виде векторных уравнений

$$\mathbf{K}_0^{(a)} = K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0 + \mathbf{k}_0^{(i)}, \quad \mathbf{k}_0^{(i)} = \mathbf{K}_0^{(a)} - K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0, \quad (3.1)$$

где $K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0$ представлены отрезками $PA^{(i)}$, направленными от точки P . На рис. 3 и 6 мы рассматриваем плоскость отражения с положительной стороны, на которую обращен вектор $[\mathbf{k}_h\mathbf{k}_0]$. Угол φ между отражающей плоскостью ME и входной гранью на рис. 6 представлен углом между прямой $RP \parallel OH$ ($OH \equiv \mathbf{h}$) и нормалью \mathbf{n} . Этот угол может изменяться в пределах от $-\pi/2$ до $+\pi/2$ и будет считаться положительным, если векторное произведение $[\mathbf{h}\mathbf{n}_0]$ обращено в ту же сторону, что и $[\mathbf{k}_h\mathbf{k}_0]$. Угол падения ψ_0 также может меняться от $-\pi/2$ до $+\pi/2$ и считаться положительным, если векторное произведение $[\mathbf{K}_0^{(a)}\mathbf{n}_0]$ обращено в ту же сторону, т. е. на рис. 6 к читателю.

Таким образом, наклон нормали \mathbf{n}_0 к прямой T'_0 определяется углами ϑ и φ .

Что касается положения нормали на T'_0 , то оно определяется углом падения. Если угол падения ψ_{0k} отвечает кинематической теории, т. е. углу Вульфа — Брэгга для отражения от данной плоскости, то нормаль пройдет через точку M , с которой точка P совпадает. Из рис. 6 следует непосредственно

$$\psi_{0k} = \frac{\pi}{2} - \varphi - \vartheta. \quad (3.2)$$

По мере отклонения угла падения от этого значения нормаль n_0 смещается вдоль T'_0 вправо или влево от точки M . Приращение величины ψ_0 , которое мы обозначаем через η , может быть представлено на рис. 6 углом MOP .

В дальнейшем мы принимаем

$$\gamma_0 = \cos \psi_0 = \cos (\psi_{0k} + \eta) \approx \cos \psi_{0k} \quad (3.3)$$

и аналогично

$$\gamma_h = \cos \psi_h = \cos (\psi_{hk} + \eta) \approx \cos \psi_{hk}. \quad (3.4)$$

Для приращения η получаем

$$\eta = \psi_0 - \frac{\pi}{2} + \varphi + \vartheta. \quad (3.5)$$

При проведении сфeры из точки P , как из центра, радиусом K она пройдет через узел O , но не через H . Отстояние сфeры от узла H по радиусу равно отрезку \overline{PQ} . Очевидно,

$$\overline{PQ} = K\alpha = K\eta \sin 2\vartheta. \quad (3.6)$$

Существенным результатом проведения на нашей схеме нормали PP' является образование на дисперсионных кривых двух точек возбуждения $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$.

Теперь нашей задачей является определение величин аккомодации $\delta^{(i)}$ и затем вычисление коэффициентов отражения $c^{(i)}$ внутри кристалла в функции от экспериментальных параметров. Для этого удобно выписать значение модулей векторов $K\delta^{(i)}n_0$, используя величины отрезков $\xi_0^{(i)}$ и $\xi_h^{(i)}$. Согласно определению (2.71), они будут иметь положительные значения для второго поля и отрицательные для первого. Из рис. 6 получаем

$$\begin{aligned} \overline{PA}^{(i)} &= |K\delta^{(i)}n_0| = \gamma_0^{-1} \left\{ -\xi_0^{(i)} - \frac{1}{2} K\chi_0 \right\} = \\ &= \gamma_h^{-1} \left\{ -\xi_h^{(i)} - \frac{1}{2} K\chi_0 + K\alpha \right\}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Эти уравнения решаем совместно с (2.75) и получаем квадратное уравнение для $\xi_0^{(i)}$:

$$\xi_0^{(i)2} + \frac{K}{2} \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \left[2\alpha - \chi_0 \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right) \right] \xi_0^{(i)} - \frac{1}{4} K^2 \chi_h \chi_h C^2 \frac{\gamma_0}{\gamma_h} = 0. \quad (3.8)$$

Введем новую угловую переменную

$$\beta = 2\alpha - \chi_0 \left[1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]. \quad (3.9)$$

В таком случае решением уравнения (3.8) для $\xi_0^{(i)}$ будет

$$\xi_0^{(i)} = \frac{K}{4} \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \beta \mp \sqrt{\frac{K^2}{16} \frac{\gamma_0^2}{\gamma_h^2} \beta^2 + \frac{K^2}{4} \chi_h \chi_{\bar{h}} C^2 \frac{\gamma_0}{\gamma_h}}. \quad (3.10)$$

При рассмотрении корней (3.10) следует различать два случая. Случай Лауэ — дифракция на прохождение, когда $\gamma_h > 0$, случай Брэгга — дифракция на отражение, когда $\gamma_h < 0$. В рассматриваемом здесь случае Лауэ второй член под корнем в (3.10) имеет знак плюс и корень является действительной величиной. Рассматривая далее выражение (3.10) в целом, замечаем, что при положительном знаке перед корнем $\xi_0^{(i)} > 0$, а при отрицательном знаке $\xi_0^{(i)} < 0$. Имея в виду условия (2.71), мы получаем в (3.10) $\xi_0^{(1)}$ при отрицательном знаке перед корнем и $\xi_0^{(2)}$ при положительном знаке.

Теперь мы можем записать выражения для величин $c^{(i)}$ внутри кристалла в функции от экспериментальных параметров. Для этого достаточно воспользоваться уравнением (2.82), а $\xi_0^{(i)}$ взять из (3.10). Получаем

$$c^{(i)} = - \frac{\beta \pm \sqrt{\beta^2 + 4\chi_h \chi_{\bar{h}} C^2 (\gamma_h/\gamma_0)}}{2\chi_{\bar{h}} (\gamma_h/\gamma_0) C (-1)^\mp} \quad (3.11)$$

или

$$\left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right)^{1/2} \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(i)}} = - \frac{\beta \pm \sqrt{\beta^2 + 4\chi_h \chi_{\bar{h}} C^2 (\gamma_h/\gamma_0)}}{2\chi_{\bar{h}} (\gamma_h/\gamma_0)^{1/2} C (-1)^\mp}. \quad (3.12)$$

Имея в виду дальнейшее изложение, введем новые угловые координаты

$$y = \operatorname{sh} v = \frac{\beta}{2C (\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} (\gamma_h/\gamma_0)^{1/2}}, \quad (3.13)$$

где для гиперболических функций v имеем известные соотношения

$$\operatorname{ch} v = \sqrt{1 + \operatorname{sh}^2 v}, \quad \operatorname{sh} v \pm \operatorname{ch} v = \pm \exp(\pm v).$$

Используя новые переменные, получаем для $\xi_0^{(i)}$ и $\xi_h^{(i)}$

$$|\xi_0^{(i)}| = m (\sqrt{1 + y^2} \pm y) = m \exp(\pm v), \quad (3.14)$$

$$|\xi_h^{(i)}| = m \frac{\gamma_h}{\gamma_0} (\sqrt{1 + y^2} \mp y) = m \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \exp(\mp v), \quad m = \frac{KC |\chi_h|}{2} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}}.$$

Перепишем выражение (3.12)

$$\sqrt{\frac{\bar{\gamma}_h D_h^{(i)}}{\gamma_0 D_0^{(i)}}} = - \sqrt{\frac{\bar{\chi}_h}{\chi_h}} (y \pm \sqrt{1+y^2}) (-1)^\tau, \quad (3.15)$$

$$\sqrt{\frac{\bar{\gamma}_h D_h^{(i)}}{\gamma_0 D_0^{(i)}}} = \mp \sqrt{\frac{\bar{\chi}_h}{\chi_h}} \exp(\pm v) (-1)^\tau. \quad (3.16)$$

Используя (2.83)'—(2.85), перепишем формулы (3.15) и (3.16) следующим образом. Для кристалла без центра симметрии

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\bar{\gamma}_h D_h^{(i)}}{\gamma_0 D_0^{(i)}}} &= - (-1)^\tau (y \pm \sqrt{1+y^2}) \exp(i\eta_h) = \\ &= \mp \exp(i\eta_h \pm v) (-1)^\tau. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Для кристалла с центром симметрии

$$\sqrt{\frac{\bar{\gamma}_h D_h^{(i)}}{\gamma_0 D_0^{(i)}}} = (-1)^\tau (y \pm \sqrt{1+y^2}) = \pm \exp(\pm v) (-1)^\tau. \quad (3.18)$$

Очевидно, положительный знак отношения $D_h^{(i)}/D_0^{(i)}$ указывает на совпадение фаз этих амплитуд и относится к первому полю, в то время как отрицательный знак означает, что соответствующие амплитуды во втором поле находятся в противофазе (см. раздел 2.2).

Средняя точка максимума соответствует значениям $\beta = y = v = 0$. В этом случае

$$\gamma_h^{1/2} |D_h^{(i)}| = \gamma_0^{1/2} |D_0^{(i)}| \quad (3.19)$$

и для интенсивностей

$$\gamma_h |D_h^{(i)}|^2 = \gamma_0 |D_0^{(i)}|^2, \quad (3.20)$$

т. е. равенство ежесекундных потоков энергии, так как наличие множителей $\gamma_h = \cos \psi_h$ и $\gamma_0 = \cos \psi_0$ связано с изменением поперечных сечений при отражении.

Амплитудные коэффициенты отражения $c^{(i)}$ даны в (3.12) и (3.15) в функции от величин β , y или v , которые, в свою очередь, зависят от величины η . При этом весьма существенной является неоднозначность названных угловых функций в общем случае при данном значении η .

Внимательное рассмотрение формул (3.6), (3.9) и (3.13) позволяет дать им наглядное геометрическое истолкование и выявить своеобразный эффект преломления, который наблюдается в случае Лауэ.

Заметим, что формула (2.62), определяющая величину коэффициента преломления при падении волны под углами, лежащими за пределами какого-либо максимума отражения, соответствует уменьшению модуля волнового вектора вакуумной волны K на ве-

личину $(1/2)K|\chi_0|$ (см. рис. 3 или 6). При падении той же волны в пределах максимума возникает волновое поле, характеризующееся дисперсией. Обозначая совершенно формально коэффициенты преломления для проходящих и дифрагированных волн в кристалле через $n_0^{(i)}$ и $n_h^{(i)}$, можно написать для волновых векторов и величин $n^{(i)}$ следующие выражения:

$$\begin{aligned} k_0^{(i)} &= K(1 + 1/2 \chi_0) + \xi_0^{(i)}, & n_{0\perp}^{(i)} &= 1 + 1/2 \chi_0 + (\xi_0^{(i)}/K), \\ k_h^{(i)} &= K(1 + 1/2 \chi_0) + \xi_h^{(i)}, & n_h^{(i)} &= 1 + 1/2 \chi_0 + (\xi_h^{(i)}/K). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Величину $n_h^{(i)}$ можно рассматривать как коэффициент преломления при переходе отраженных волн из кристалла в вакуум. В отличие от n величины $n_0^{(i)}$ и $n_h^{(i)}$ могут быть как меньше, так и больше единицы. С другой стороны, полный эффект преломления в частном случае плоскопараллельной пластинки можно определить величиной

$$\xi_h^{(i)} - \xi_0^{(i)} \frac{\gamma_h}{\gamma_0} = \frac{K\beta}{2}. \quad (3.22)$$

Правая часть этого выражения получается подстановкой в левую часть значений $\xi_h^{(i)}$ и $\xi_{0\perp}^{(i)}$, согласно (3.14), и, далее, заменой y на его значение (3.13).

Левая часть (3.22) является разностью проекций векторов $k_h^{(i)}$ и $k_0^{(i)}$ на нормали к входной и выходной граням (здесь совпадают), спроектированной на направление k_h , практически совпадающее с направлением $K_h^{(d)}$ — вектора дифрагированной волны в вакууме.

Обращаясь к геометрической интерпретации величины β (или $K\beta/2$), замечаем, что, как показывает рис. 7, при симметричном отражении

$$\left(\xi_h^{(i)} - \xi_0^{(i)} \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right)_s = K\eta \sin 2\vartheta; \quad (3.23)$$

это вполне согласуется с (3.9) при $\gamma_h = \gamma_0$. Общий случай асимметричного отражения представлен на рис. 8. Проектируя последовательно отрезок $\overline{N^I N^{II}}$ на $\overline{MR} \parallel n_0$ и затем \overline{MR} на $\overline{N^{III} N^V}$, мы замечаем, что

$$\overline{N^{IV} N^V} = \overline{FF''} = -\frac{1}{2} K\chi_0 \left[1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]$$

добавляется к отрезку $\overline{F''C} = \overline{PQ} = \eta \sin 2\vartheta$ так, что

$$\overline{F''C} = K\eta \sin 2\vartheta - \frac{1}{2} K\chi_0 \left[1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right] = \frac{K\beta}{2}. \quad (3.24)$$

Построение разности (3.22) в общем случае показано на рис. 9, где дана ближайшая окрестность точки $A^{(i)}$.

Рис. 10 показывает характерные частные случаи положения нормали, т. е. величины η и одного из параметров β , y , ϑ . Так, на рис. 10, *a* нормаль пересекает верхнюю ветвь дисперсионной гиперболы в точке $F^{(2)}$. В этом случае, как нетрудно видеть, $\overline{DD'}$, равное вообще $1/2 K\beta$, принимает частное значение

$$\overline{DD'} = \frac{1}{2} K |\chi_h| \left[1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right],$$

$$\overline{PQ} = K\eta \sin 2\vartheta = \frac{1}{2} K (|\chi_0| - |\chi_h|) \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} - 1 \right] < 0. \quad (3.25)$$

Отрицательное значение \overline{QP} связано со смещением нормали от точки M влево. На рис. 10, *b* показан случай падения вакуумной волны при значениях $\beta = y = \vartheta = 0$. Здесь отрезок

$$\overline{N^{III}P_0} = -K\eta \sin 2\vartheta = \frac{1}{2} K |\chi_0| \left[1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right]. \quad (3.26)$$

Непосредственное определение эффекта преломления дается значением η , выраженным, например, в виде функции от y , так как результаты теории, в частности кривые отражения и прохождения, даются в функции от y . Из (3.13) получаем

$$\eta = ay + b, \quad a = \frac{C |\chi_h| (\gamma_h/\gamma_0)^{1/2}}{\sin 2\vartheta},$$

$$b = \frac{|\chi_0| [(\gamma_h/\gamma_0) - 1]}{2 \sin 2\vartheta}. \quad (3.27)$$

При симметричном отражении $\eta = ay$, или в угловых секундах

$$\eta''_s = \frac{C |\chi_h| y}{\sin 2\vartheta} \frac{1}{4,85 \cdot 10^{-6}}. \quad (3.28)$$

Так как C и $\sin 2\vartheta$ — величины порядка единицы и $|\chi_h| \approx 10^{-5} \div 10^{-6}$, то при симметричном отражении значение y близко к значению η''_s и имеет тот же знак.

В общем случае асимметричного отражения согласно (3.27) как знаки, так и соотношение величин y и η'' могут быть различными в зависимости от отношения b/a . При малых скользящих углах, т. е. больших φ_0 , величина b может заметно превысить a , что отражает возрастающий эффект преломления. В результате возникает два интересных эффекта. Во-первых, смещение максимума отражения относительно угла Вульфа — Брэгга ϑ и, во-вторых, зависимость этого смещения от знака индексов. Другими словами, указанное смещение будет различно для отражений hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$.

Еще раз отметим, что обсуждаемый здесь эффект можно назвать преломлением несколько условно, так как, например, связь между величинами η и y , согласно (3.27), одинаково относится как к отраженной волне, так и к проходящей. Заметим также, что,

используя (3.27) для оценки угловой протяженности дисперсионных гипербол, представленных на рис. 3 и 6, получим величины порядка $10''$ — $15''$ для симметричного отражения и несколько большие значения и асимметрию рисунка (относительно центра гиперболы) при асимметричном отражении.

2. Амплитуды волн. Маятниковое решение. Экстинкция. Квазистоячие волны

Переходим теперь к пограничным условиям для амплитуд. Эти условия существенно отличаются от тех, которые используются в электромагнитной теории света, в двух отношениях. Во-первых, ввиду ничтожного отличия показателя преломления от единицы в случае рентгеновских лучей мы можем ограничиться условием непрерывности слагающих векторов индукции. Во-вторых, по той же причине мы не учитываем зеркально-отраженной обратно в вакуум волны, что, очевидно, следует из соответствующей формулы Френеля.

Вместе с тем, как известно, при скользющем падении рентгеновских лучей под углами $(\pi/2) - \psi_0$ порядка критических углов для полного внешнего отражения величина коэффициента отражения принимает значения, которыми нельзя пренебречь. Поэтому в этих специальных условиях необходимо выполнить соответствующий расчет для динамического рассеяния. Интерес к случаю малых скользящих углов возрос за последние годы в связи с созданием спектрометров с асимметричным отражением по Брэггу. Следует оговориться, что в подобных устройствах скользящие углы падения $(\pi/2) - \psi_0$ превышают $1-2^\circ$, что позволяет пренебречь отраженной волной.

Заметим, что столь малые скользящие углы падения используются при отражении по Брэггу.

Обращаясь к формулировке пограничных условий, заметим, что здесь мы рассматриваем частный случай плоскопараллельной кристаллической пластинки, на входную поверхность которой под углом $\psi_0 \pm \eta$ падает плоская монохроматическая волна. Пластика принимается непоглощающей и ее толщина малой сравнительно с фронтом падающей волны. В таком случае волновые поля в кристалле остаются неразделенными.

Таким образом, условия на входной поверхности имеют вид следующих уравнений:

$$D_0^{(1)} + D_0^{(2)} = D_0^{(a)}, \quad (3.29a)$$

$$D_h^{(1)} + D_h^{(2)} = 0, \quad (3.29b)$$

если начало отсчета для распространения волн выбрать где-либо на этой поверхности. Уравнение (3.29b) указывает, что здесь мы имеем случай Лауэ, так как в случае Брэгга дифрагированная волна выходит обратно через ту же поверхность.

Решая совместно уравнения (3.29а, б), (3.17) и (3.18), получаем значения амплитуд $D_h^{(i)}$ и $D_0^{(i)}$ внутри кристалла, выраженные через амплитуды $D_0^{(a)}$ падающей вакуумной волны:

$$D_0^{(i)} = \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{y}{(1+y^2)^{1/2}} \right) D_0^{(a)} = \frac{\exp(\mp v)}{2 \operatorname{ch} v} D_0^{(a)}, \quad (3.30)$$

$$\sqrt{\gamma_h} D_h^{(i)} = \mp (-1)^\tau \frac{\exp i\eta_h}{(1+y^2)^{1/2}} \sqrt{\gamma_0} D_0^{(a)} = \mp (-1)^\tau \frac{\exp i\eta_h}{2 \operatorname{ch} v} \sqrt{\gamma_0} D_0^{(a)}. \quad (3.31)$$

В частном случае рассеяния в centrosymmetric кристалле

$$\sqrt{\gamma_h} D_h^{(i)} = \pm \frac{(-1)^\tau}{(1+y^2)^{1/2}} \sqrt{\gamma_0} D_0^{(a)} = \pm \frac{(-1)^\tau}{2 \operatorname{ch} v} \sqrt{\gamma_0} D_0^{(a)}. \quad (3.32)$$

Рассматривая волновое поле внутри кристалла, следует прежде всего различить два случая. Если падающая волна не поляризована, то два состояния поляризации будут независимыми колебаниями в том смысле, что между ними не будет постоянных фазовых соотношений. Очевидна связь между двумя состояниями поляризации в том случае, когда падающая волна является плоскополяризованной.

Что касается соотношений колебаний двух волновых полей с одинаковым состоянием поляризации, то они будут взаимно когерентны в силу связывающих их пограничных условий (3.29). Если к тому же сохраняется указанное выше условие неразделенности полей внутри кристалла, то общее волновое поле для колебаний с одинаковым типом поляризации может быть описано парой выражений типа

$$\sum_i D_0^{(i)} \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0^{(i)} \mathbf{r})], \quad (3.33)$$

$$\sum_i D_h^{(i)} \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_h^{(i)} \mathbf{r})],$$

из которых первое относится к полю преломленной волны и второе — к полю дифрагированной волны в кристалле.

Эти выражения можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_i D_0^{(i)} \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0^{(i)} \mathbf{r})] = \\ = \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})] \sum_i D_0^{(i)} \exp (\pm \pi i \Delta k z), \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \sum_i D_h^{(i)} \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_h^{(i)} \mathbf{r})] = \\ = \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_h \mathbf{r})] \sum_i D_h^{(i)} \exp (\pm \pi i \Delta k z), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_0 &= \mathbf{k}_0^{(1)} + \frac{\Delta \mathbf{k}}{2}, & \mathbf{k}_h &= \mathbf{k}_h^{(1)} + \frac{\Delta \mathbf{k}}{2}, \\ \Delta \mathbf{k} &= \mathbf{k}_0^{(2)} - \mathbf{k}_0^{(1)} = \mathbf{k}_h^{(2)} - \mathbf{k}_h^{(1)}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Для вычисления модуля $|\Delta \mathbf{k}|$ можно использовать соотношение

$$|\Delta \mathbf{k}| = \frac{1}{\gamma_0} \{ |\xi_0^{(1)}| + |\xi_0^{(2)}| \} = \frac{1}{\gamma_h} \{ |\xi_h^{(1)}| + |\xi_h^{(2)}| \}. \quad (3.36)$$

Значения величин $|\xi|$ можно взять из (3.14), используя угловые переменные y и v согласно (3.13). Окончательно получим

$$|\Delta \mathbf{k}| = \frac{KC |\chi_h|}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} \sqrt{1 + y^2} = \frac{KC |\chi_h|}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \operatorname{ch} v. \quad (3.37)$$

Начнем анализ волнового поля в прозрачном кристалле с рассмотрения вклада в максимумы преломленной и дифрагированной волн каждого из полей. Это может быть сделано на основе уравнений (3.30), (3.32) с помощью рис. 6 и 11.

При возрастании положительных значений угловых функций y или v , т. е. смещении по дисперсионной поверхности вправо от прямой ME , точка $A^{(2)}$ приближается к асимптоте T_0 и, как легко видеть из (3.30), $|D_0^{(2)}|$ возрастает, приближаясь к величине $|D_0^{(a)}|$.

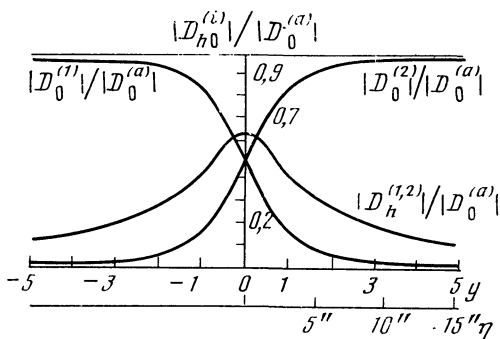


Рис. 11. Изменения величин $D_{0,h}^{(i)}/D_0^{(a)}$ в области максимума

Действительно, это справедливо для нижнего знака в этих уравнениях, т. е. положительных значений y и v , и

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{y}{(1 + y^2)^{1/2}} = 1, \quad \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{\exp v}{2 \operatorname{ch} v} = 1.$$

Наоборот $|D_0^{(1)}|$ при этих условиях стремится к нулю. Нетрудно видеть, что в области отрицательных значений y и v , т. е. по левую сторону от прямой ME на рис. 6, знак изменения амплитуд $|D_0^{(2)}|$ и $|D_0^{(1)}|$ будет обратным. Другими словами, в области положитель-

ных значений y и v преобладает второе поле проходящей волны, в области отрицательных y и v преобладает первое поле.

В отличие от двух амплитуд преломленной волны модули обеих амплитуд дифрагированной волны согласно уравнениям (3.31) остаются равными между собой во всей области максимума, который, таким образом, будет для обоих полей симметричным относительно равных нулю значений y и v .

Еще раз отметим, что на концах максимума $|D_h^{(i)}|$ обращаются в нуль, так же как и одна из $|D_0^{(i)}|$; мы будем наблюдать явление распространения одной волны в кристалле, претерпевающей преломление на входной грани. В средней точке максимума, при $\beta = y = v = 0$, получаем

$$D_0^{(1)} = D_0^{(2)} = \frac{1}{2} D_0^{(a)}, \quad D_h^{(1)} = D_h^{(2)} = \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \right)^{1/2} \frac{1}{2} D_0^{(a)}. \quad (3.38)$$

Наконец, при симметричном отражении от плоскости, перпендикулярной входной грани,

$$D_h^{(1)} = D_h^{(2)} = \frac{1}{2} D_0^{(a)}. \quad (3.39)$$

Эти результаты поясняет рис. 11, который построен для отражения 200 NaCl, при $\vartheta = 54^\circ$ и $(\gamma_0/\gamma_h)^{1/2} = 1,23$, CuK α -излучения. При этом поглощение не учитывалось. Пространственное распределение максимумов волнового поля в кристалле может быть определено анализом уравнений (3.34). Если использовать значения $D_0^{(i)}$ и $D_h^{(i)}$ из (3.30) и (3.31), а в значениях Σ уравнений (3.34) перейти от показательных к тригонометрическим функциям, мы получим следующие выражения:

$$D_0^{(a)} \left[\cos \pi \Delta k z - i \frac{y}{(1+y^2)^{1/2}} \sin \pi \Delta k z \right] \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})], \quad (3.40)$$

$$D_0^{(a)} \left[-i \frac{1}{(1+y_r^2)^{1/2}} \sin \pi \Delta k z \right] \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_h \mathbf{r})]. \quad (3.41)$$

Более простой вид, удобный для качественного физического анализа, эти выражения приобретают, если от общего случая перейти к точке $y = 0$,

$$D_0^{(a)} [\cos \pi \Delta k z] \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})], \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} D_0^{(a)} [-i \sin \pi \Delta k z] \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})] = \\ = D_0^{(a)} [\sin \pi \Delta k z] \exp \left\{ 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})] - i \frac{\pi}{2} \right\}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

где величина $-i = \exp(-i\pi/2)$ перенесена из амплитуды в фазовый множитель и \mathbf{k}_h заменено на \mathbf{k}_0 .

Вектор $\Delta \mathbf{k}$, согласно определению (3.35), направлен антипараллельно вектору нормали \mathbf{n}_0 . Его модуль равен расстоянию между

двумя точками возбуждения на ветвях гиперболы. В частном случае симметричного отражения при $y = 0$ он переходит в вектор

$$\Delta k_0 = \frac{1}{(1 + y_r^2)^{1/2}} \Delta k, \quad (3.44)$$

модуль которого равен действительному диаметру дисперсионной гиперболы [см. (2.79)]:

$$|\Delta k_0| = \frac{KC |\chi_n|}{\cos \phi} = 2a. \quad (3.45)$$

Обращаясь к выражениям (3.42) и (3.43), замечаем, что они описывают колебания с амплитудами (в квадратных скобках), которые являются периодическими функциями глубины проникновения z -излучения в кристалл. Другими словами, постоянные значения амплитуд имеют место на плоскостях, параллельных входной границе.

Максимумы волновой функции дифрагированной волны (3.43) при $y = 0$ будут лежать на глубинах

$$z_n = \frac{2n + 1}{2\Delta k_0}, \quad (3.46)$$

причем первый максимум при $n = 0$ приходится на плоскость, находящуюся на глубине, равной половине характерной величины экстинкционной глубины:

$$\tau_0 = |\Delta k_0|^{-1}. \quad (3.47)$$

Величина τ_0 — расстояние между двумя смежными плоскостями с максимальными значениями волновой функции дифрагированной волны. Согласно (3.42) расстояние между максимумами проходящей волны такое же. При этом одно семейство плоскостей смещено относительно другого на половину глубины экстинкции $(2|\Delta k_0|)^{-1}$.

Заметим, что описанная структура волнового поля в кристалле напоминает, но не совпадает полностью с системой стоячих волн. Отличие связано с тем, что экспоненты в (3.42) и (3.43) зависят от координат x и y и от времени. Следовательно, для каждого данного значения z указанные уравнения описывают бегущую в плоскости (xy) волну с амплитудой, величина которой зависит от z .

Существенной чертой такого волнового поля является периодическая «перекачка» энергии от проходящей волны к дифрагированной и обратно по мере проникновения излучения внутрь кристалла, а также (что очень важно) в стационарном волновом поле, порожденном падающей вакуумной волной. Это замечательное физическое явление, которое обнаруживается с помощью надлежащих интерференционных экспериментов, было впервые предсказано Эвальдом на основе его динамической теории. По аналогии со взаимодействием связанных и колеблющихся маятников, в результате которого происходит периодический обмен энергией

колебаний между ними, Эвальд назвал это явление маятниковым решением (Pendellösung) динамической задачи. В это решение входит также образование побочных максимумов, которое мы рассмотрим ниже в связи с анализом и численными оценками выражений для интенсивностей проходящей и дифрагированной волн в вакууме.

Приведем теперь численные оценки значений экстинкционных глубин. При $y = 0$ экстинкционная глубина

$$\tau_0 = \frac{\lambda \cos \vartheta}{C |\chi_h|} = \frac{\pi m c^2}{e^2} \frac{\cos \vartheta}{\lambda} \frac{\Omega}{|F_h|}. \quad (3.48)$$

Так как маятниковое решение рассматривается в этой главе для случая прозрачного кристалла, то наибольший интерес при численных оценках для сопоставления с экспериментом имеет рассеяние коротковолнового излучения в кристаллах, состоящих из атомов легких и средних элементов. В табл. 1 приведены примеры,

Таблица 1. Значение экстинкционных глубин τ_0 в мк при рассеянии излучений $\text{AgK}\alpha$, $\text{MoK}\alpha$ и $\text{CuK}\alpha$ кристаллами кремния, кварца и германия

Вещество	Отражение	Излучение		
		$\text{AgK}\alpha$	$\text{MoK}\alpha$	$\text{CuK}\alpha$
Кремний	220		35,4	15,5
	422		42,0	14,6
	333		61,5	22,6
Кварц	10 $\bar{1}$ 1	84,5		31,0
	11 $\bar{2}$ 0	121,5		44,0
	20 $\bar{2}$ 1	250,0		86,5
	10 $\bar{1}$ 2	123,0		42,5
Германий	220		15,9	6,9
	333		31,2	10,0
	444		22,3	4,3

относящиеся к рассеянию $\text{MoK}\alpha$ -, $\text{CuK}\alpha$ - и $\text{AgK}\alpha$ -излучений в кристаллах кремния, германия и кварца.

Следует иметь в виду, что приведенные значения экстинкционных глубин относятся к случаю $y = 0$, что при симметричном отражении соответствует углу ν . С отклонением от ϑ , согласно (3.44), экстинкционная глубина уменьшается по закону $\tau = \tau_0 (1 + y^2)^{-1/2}$, что соответствует при $y = 3$ $\tau \approx 0,32 \tau_0$.

В связи с изложенным анализом выражений для волновых полей в кристалле (3.33), (3.34) и (3.40) — (3.43), следует сделать оговорку, представляющую особый интерес для рассеяния в по-

глощающем кристалле (см. гл. 4). Каждое из волновых полей в отдельности, очевидно, может быть описано с помощью выражения типа (2.36), пригодного для двухволнового приближения:

$$D^{(i)} = \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})] \{D_0^{(i)} + D_h^{(i)} \exp [-2\pi i (\mathbf{h} \mathbf{r})]\}. \quad (3.49)$$

Это уравнение можно интерпретировать как уравнение волны с амплитудой (в фигурных скобках), которая является периодической функцией координат. В отличие от аналогичных задач для произвольной среды, где геометрические параметры волнового поля определяются длинами волн колебаний, здесь колебания приспособляются к периодичности решеток. Действительно, в данном уравнении экстремальные значения амплитуды будут наблюдаться при целочисленных значениях скалярного произведения $(\mathbf{h} \mathbf{r})$. Такие значения соответствуют атомным плоскостям и n плоскостям, лежащим между ними, где целое число n есть отношение индексов интерференции к миллеровским индексам. Будут ли на этих плоскостях наблюдаться максимумы или минимумы амплитуд, зависит от соотношений знаков или фаз $D_0^{(i)}$ и $D_h^{(i)}$.

Для первого поля знаки $D_0^{(1)}$ и $D_h^{(1)}$ совпадают, и, таким образом, на атомных плоскостях будут наблюдаться максимумы. Наоборот, для второго поля на этих плоскостях будут наблюдаться минимумы, в то время как посередине между ними, при значениях $(\mathbf{h} \mathbf{r})$, равных -1 , — максимумы.

Такая структура каждого из двух полей имеет существенное значение в явлениях прохождения рентгеновских лучей в поглощающих кристаллах. Так как главным механизмом истинного поглощения рентгеновских лучей является фотоэлектрический эффект, поглощение существенно локализовано на атомах и, следовательно, на атомных плоскостях. Сильнее будет поглощаться то поле, которое имеет максимумы на атомных плоскостях.

В непоглощающих и слабо поглощающих кристаллах описанная структура каждого из полей в отдельности не проявляется. Более существенными становятся взаимодействия между проходящими ($D_0^{(i)}$) и дифрагированными ($D_h^{(i)}$) волнами обоих полей, рассмотренные ниже.

3.2. Коэффициенты прохождения и отражения.

Анализ маятникового решения в случае плоскопараллельной пластинки

Перейдем теперь к вычислению волновых функций волн, выходящих в вакуум из нижней, или выходной, поверхности кристалла, и коэффициентов прохождения и отражения.

Условие (3.29б) для величин $D_h^{(i)}$ на входной грани перепишем

в виде

$$c^{(1)}D_0^{(1)} + c^{(2)}D_0^{(2)} = 0, \quad (3.50)$$

где $c^{(i)}$ даны в уравнении (3.11)¹.

Условия на выходной грани должны включать фазовые множители, отвечающие распространению волн по толщине пластинки t (начало отсчета на входной поверхности)

$$\begin{aligned} D_0^{(1)} \exp[-2\pi i t k_{0z}^{(1)}] + D_0^{(2)} \exp[-2\pi i t k_{0z}^{(2)}] = \\ = D_0^{(d)} \exp[-2\pi i t K_{0z}^{(d)}], \end{aligned} \quad (3.50a)$$

$$\begin{aligned} D_h^{(1)} \exp[-2\pi i t k_{hz}^{(1)}] + D_h^{(2)} \exp[-2\pi i t k_{hz}^{(2)}] = \\ = D_h^{(d)} \exp[-2\pi i t K_{hz}^{(d)}]. \end{aligned} \quad (3.50b)$$

Решая совместно (3.50) и (3.29a), получим

$$D_0^{(1)} = \frac{c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)}, \quad D_0^{(2)} = -\frac{c^{(1)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)}, \quad (3.51)$$

$$D_h^{(1)} = c^{(1)} D_0^{(1)} = \frac{c^{(1)} c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)}, \quad D_h^{(2)} = -\frac{c^{(1)} c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)}. \quad (3.52)$$

Подставляя значения $D_0^{(i)}$ и $D_h^{(i)}$ в условия (3.50), получим

$$\begin{aligned} D_0^{(d)} \exp[-2\pi i t K_{0z}^{(d)}] = \frac{c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)} \exp[-2\pi i t k_{0z}^{(1)}] - \\ - \frac{c^{(1)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)} \exp[-2\pi i t k_{0z}^{(2)}], \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} D_h^{(d)} \exp[-2\pi i t K_{hz}^{(d)}] = \frac{c^{(1)} c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} D_0^{(a)} \exp[-2\pi i t k_{hz}^{(1)}] + \\ + \frac{c^{(1)} c^{(2)}}{c^{(1)} - c^{(2)}} D_0^{(a)} \exp[-2\pi i t k_{hz}^{(2)}]. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Так как (см. (3.1)) $k_{0z}^{(0)} = K_{0z}^{(a)} - K\delta^{(i)}$, и в случае плоскопараллельной пластинки

$$K_0^{(d)} = K_0^{(a)}, \quad (3.55)$$

¹ В работах 1971—1972 гг. группа авторов [50, 51] исследует отражения по Брэггу и по Лауэ, возникающие при очень малых скользких углах падения или отражения, порядка угловых минут. При теоретическом рассмотрении подобных экспериментов авторы учитывают в пограничных условиях динамической задачи зеркально отраженную волну на входной грани. В результате получается модифицированная форма динамической теории. Эксперименты, описанные в указанных работах, находятся в согласии с выведенными соотношениями.

перепишем (3.53) в следующем виде:

$$D_0^{(d)} = D_0^{(a)} \frac{1}{c^{(2)} - c^{(1)}} \exp [\pi i t K (\delta^{(1)} + \delta^{(2)})] \times \\ \times \{c^{(2)} \exp [\pi i t K (\delta^{(1)} - \delta^{(2)})] - c^{(1)} \exp [-\pi i t K (\delta^{(1)} - \delta^{(2)})]\}. \quad (3.56)$$

Аналогичное преобразование можно сделать с выражением (3.54), поскольку

$$K_{hz}^{(d)} - k_{hz}^{(i)} = K_0^{(a)} - k_{0z}^{(i)} = \delta^{(i)}. \quad (3.57)$$

Из уравнений (3.7) и (3.10) следует

$$K (\delta^{(1)} + \delta^{(2)}) = \frac{K}{2\gamma_h} \beta - \frac{K\chi_0}{\gamma_0}, \quad K (\delta^{(1)} - \delta^{(2)}) = \frac{K}{2\gamma_h} W; \\ W = \sqrt{\beta^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \chi_h \chi_{\bar{h}}} = 2C \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{1 + y^2}. \quad (3.58)$$

Переходя от волновых функций к значениям коэффициентов прохождения T и отражения R , умножаем правые части (3.56) и аналогичного выражения для $D_h^{(d)}$ на соответствующие комплексно-сопряженные выражения. Комплексными являются величины $c^{(i)}$, содержащие комплексные дроби $\chi_h/\chi_{\bar{h}}$. Произведения $\chi_h \chi_{\bar{h}}$, представленные в (3.11) и (3.13), являются действительными величинами, так же как и величины y и v .

Для коэффициента прохождения получаем

$$T = \frac{|D_0^{(d)}|^2}{|D_0^{(a)}|^2} = \frac{1}{|c^{(2)} - c^{(1)}|^2} \{ |c^{(2)}|^2 + |c^{(1)}|^2 - c^{(1)}c^{(2)*} \exp(-i2\alpha) - \\ - c^{(1)*}c^{(2)} \exp i2\alpha \},$$

или, переходя от экспоненциальных к тригонометрическим функциям,

$$T = \frac{1}{|c^{(2)} - c^{(1)}|^2} \{ |c^{(2)}|^2 + |c^{(1)}|^2 + 2c^{(1)}c^{(2)*} \cos 2\alpha \}. \quad (3.59)$$

Аналогичным путем получаем для коэффициента отражения

$$R = \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \frac{|c^{(1)}|^2 |c^{(2)}|^2}{|c^{(2)} - c^{(1)}|^2} \{ 2 - 2 \cos 2\alpha \}, \quad (3.60)$$

$$\alpha = \pi t K (\delta^{(1)} - \delta^{(2)}) = \pi t \frac{KC}{\gamma_0 \gamma_h} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{1 + y^2} = A \sqrt{1 + y^2}. \quad (3.61)$$

И окончательно, используя соотношения (3.17) и (3.18), получаем явные выражения для T и R в функции от y и v :

$$T(y) = \frac{|D_0^{(d)}|^2}{|D_0^{(a)}|^2} = \frac{1}{1+y^2} [y^2 + \cos^2 A \sqrt{1+y^2}], \quad (3.62)$$

$$R(y) = \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \frac{|D_h^{(d)}|^2}{|D_0^{(a)}|^2} = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \frac{\sin^2 A \sqrt{1+y^2}}{1+y^2}, \quad (3.63)$$

$$T(v) = \frac{\text{ch}^2 v - \sin^2 [A \text{ch } v]}{\text{ch}^2 v} = 1 - R(v), \quad (3.64)$$

$$R(v) = \frac{\sin^2 [A \text{ch } v]}{\text{ch}^2 v} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, \quad (3.65)$$

$$A = \pi t \frac{KC}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}. \quad (3.66)$$

Рассматривая выражения (3.64) и (3.65), замечаем прежде всего, что сумма любой соответственной пары величин T и R для любого данного значения углового аргумента y или v равна единице. Очевидно, это отвечает нашему рассмотрению рассеяния в прозрачном кристалле, в котором энергия падающей волны делится на энергию проходящей и отраженной волн. Напоминаем, что в формулах (3.63) и (3.65) в случае centrosимметричных кристаллов величина отношения $|\chi_h| / |\chi_{\bar{h}}|$ обращается в единицу.

Уравнения (3.62) — (3.65) имеют маятниковое решение. Действительно, через посредство переменной A эти выражения являются периодическими функциями толщины кристалла t . Дополнительность T и R проявляется в том, что для любого данного значения t определенные значения y будут соответствовать максимуму T и минимуму R , или наоборот. Так, при $t = (2n + 1)/2 |\Delta k_0|$ в средней точке максимума, т. е. при $y = 0$, коэффициент отражения R достигает максимального значения — единицы. При значениях $t = 2n/2 |\Delta k_0|$ в средней точке максимума $R = 0$ и $T = 1$. Аналогичное периодическое изменение значений R и T с толщиной имеет место и при других, отличных от нуля, значениях y и v . Заметим, что при значениях $y \neq 0$ максимальные значения R уже не достигают единицы.

Очевидно, что особенно наглядно маятниковое решение полученных уравнений проявится в случае рассеяния на клинообразной пластинке. При этом указанное периодическое изменение величин T и R будет непосредственно наблюдаться на участках выходной грани, соответствующих критическим значениям t . Кроме того, что особенно существенно, интервалы между максимумами обеих величин возрастают в некоторых схемах эксперимента в отношении $\sim (\sin \mu)^{-1}$ или $\sim (\text{tg } \mu)^{-1}$, где μ — угол клина. Соответствующая геометрическая теория изложена ниже.

Помимо зависимости от толщины коэффициенты R и T являются также квазипериодическими функциями от угловых переменных

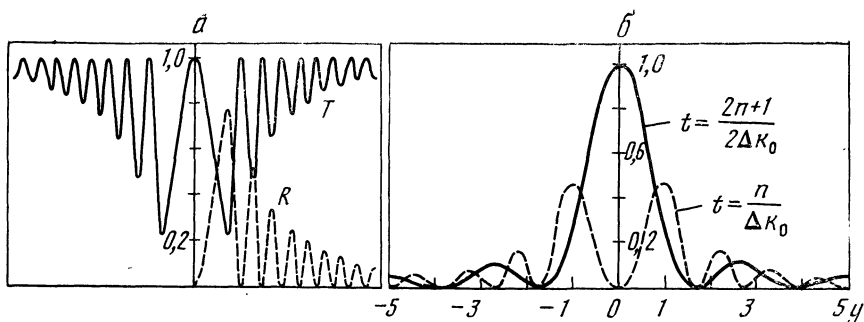


Рис. 12. Изменения величин T и R в области максимума в случае прозрачного кристалла

a — кривые R и T соответствуют $t = 2n/\Delta k_0$; b — кривые R при различных значениях толщины кристалла t ; показаны побочные максимумы маятникового решения

y и v . Наличие множителя $(1 + y^2)^{-1} = \text{ch}^{-2}v$ приводит к монотонному спаду гребенки на кривых R и T (рис. 12). При больших значениях угловых переменных R обращается в нуль и T — в единицу. Таким образом, маятниковое решение для R и T , как функций угла падения, приводит к образованию тонкой структуры или побочных максимумов.

Угловое распределение побочных максимумов коэффициента отражения R определяется из условия

$$\frac{\pi t C |\chi_h|}{\lambda (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \sqrt{1 + y_h^2} = \frac{2n + 1}{2} \pi \quad (3.67)$$

или

$$y_h^2 = \left(\frac{2n + 1}{2} \right)^2 \frac{\lambda^2 \gamma_0 \gamma_h}{C^2 |\chi_h|^2 t^2} - 1. \quad (3.68)$$

Так как для типичных условий эксперимента

$$\frac{\lambda^2 \gamma_0 \gamma_h}{C^2 |\chi_h|^2 t^2} \equiv \varphi(|\chi_h|, t) \ll 1, \quad (3.69)$$

то для второго и последующих побочных максимумов $\left[\left(\frac{2n + 1}{2} \right)^2 \geq \frac{25}{4} \right]$ с достаточной точностью можно пренебречь единицей в (3.68), и в таком случае отстояние между соседними побочными максимумами составит

$$\Delta y \approx \frac{\lambda (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}}{t C |\chi_h|} = \frac{\tau_0}{t}. \quad (3.70)$$

При симметричном отражении условия (3.68) и (3.70) позволяют представить

$$\varphi(|\chi_h|, t) = \varphi_1(t) - \varphi_2(\chi_h), \quad (3.71)$$

что, очевидно, важно для экспериментальной проверки теории.

Действительно, для симметричного отражения [см. (3.27)]

$$\eta = \frac{C |\chi_h| y}{\sin 2\theta}$$

и, переходя в (3.68) от угловой функции y к аргументу η , получим

$$\eta_h^2 = \left(\frac{2n+1}{2} \right)^2 \frac{d_h^2}{t^2} - \frac{C^2 |\chi_h|^2}{\sin^2 2\theta}. \quad (3.72)$$

Для максимумов, следующих после первого, по-прежнему можно использовать (3.70), которое преобразуется для симметричного отражения к виду

$$\Delta \eta_s'' = \frac{d_h}{t \cdot 4,85 \cdot 10^{-6}}. \quad (3.73)$$

Таким образом, сопоставляя измерения углового расположения первого максимума (3.72) и последующих (3.73), можно отдельно определить как толщину данной кристаллической пластинки, так и величину $|\chi_h|$ или структурную амплитуду $|F_h|$ данного отражения [52].

В случае асимметричного отражения (3.70) можно преобразовать к виду

$$\Delta \eta = \frac{d_h \gamma_h}{t \cos \theta} = \Delta \eta_s \frac{\cos \psi_h}{\cos \theta}. \quad (3.74)$$

Для численных оценок тонкой структуры максимумов, связанной маятниковому решению, применим (3.73) к отражениям 220 и 333 излучения $\text{CuK}\alpha$ от монокристаллических пластинок Si. Если задаться угловым интервалом $\sim 1''$, то необходимая толщина пластинок составит 40 и 22 мк соответственно. Для получения большого интервала необходимо использовать еще более тонкие пластинки, что представляет большие экспериментальные трудности.

Сопоставляя обе формы маятникового решения: полосы равной толщины и побочные максимумы, отметим некоторые интересные различия этих явлений [52]. Прежде всего обратим внимание на возможность отдельного определения толщины пластинки t и величины $|\chi_h|$ в случае побочных максимумов, согласно (3.68) — (3.73). В случае же полос равной толщины в формуле (3.44) имеется параметр y , не всегда поддающийся точному независимому определению. Далее следует указать, что принципиально число тех и других максимумов различно. В случае полос равной толщины число полос не может превышать величины t/τ_0 . Между тем, как следует из формул (3.68) и (3.70), число побочных максимумов неограниченно.

Наконец, интересно рассмотреть модель, представляющую маятниковое решение, как эффект интерференции волн от двух (фиктивных) источников.

Фиктивные источники используются в оптике видимого света для интерпретации классических интерференционных экспериментов. Однако в отличие от оптических схем, где фиктивные источники вводятся для расчета взаимодействия волн в реальное пространство, здесь используются точки возбуждения $A^{(i)}$ (см., например, рис. 6) в обратном пространстве. Отвлекаясь от различия амплитуд $D_0^{(i)}$ или $D_h^{(i)}$ и выбрав в качестве направления распространения интерферирующих в кристалле волн $D_0^{(i)}$ направление вектора $K_0^{(a)}$, близкое к направлениям $k_0^{(1)}$ и $k_0^{(2)}$

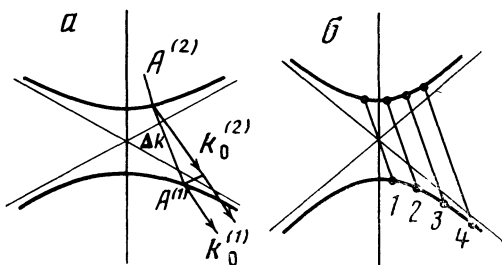


Рис. 13. Разность хода волн в кристалле
 а — при образовании полос равной толщины;
 б — побочных максимумов

(рис. 13, а), запишем разность фаз волн $D_0^{(i)}$:

$$2\pi |\Delta k| \gamma_0 = 2\pi \frac{\gamma_0}{\tau} . \quad (3.75)$$

Эта разность фаз отвечает первому экстинкционному расстоянию в кристалле. Используя выражение (3.37), выпишем значение разности хода двух интерферирующих волн, соответствующей n -му экстинкционному расстоянию или n -й полосе (максимуму):

$$\Delta l_n = \frac{1}{2\pi/\lambda} 2\pi \frac{\gamma_0}{n\tau} = \frac{C |x_h|}{n} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sqrt{1 + y^2} = \frac{\Delta l_1}{n} , \quad (3.76)$$

где Δl_1 — разность хода, отвечающая первой полосе. Таким образом, с возрастанием номера полосы равной толщины разность хода интерферирующих волн уменьшается. Иная картина наблюдается при образовании побочных максимумов. В этом случае выражение (3.75) отвечает разности фаз интерферирующих волн для некоторого определенного *побочного максимума*, т. е. определенного положения нормалей 1—4 на рис. 13, б или определенного значения y_n ($n = 1, 2, \dots$). Нулевой максимум ($y = 0$), очевидно, соответствует положению нормали 1 на том же рисунке. Из рисунка видно, что разность хода, отвечающая n -му максимуму,

$$\Delta l_n = C |x_h| \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sqrt{1 + y_n^2} \quad (3.77)$$

возрастает с увеличением номера максимума.

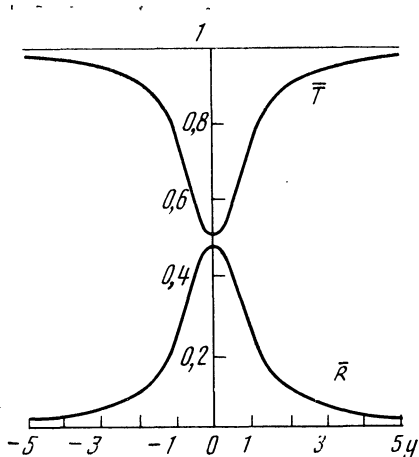
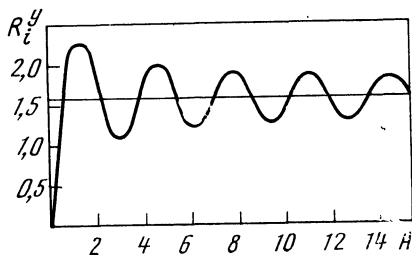


Рис. 14. Профили максимумов усредненных функций \bar{R} и \bar{T}

Рис. 15. Кривая изменения интегрального отражения $R_i^y(A)$



Дальнейший анализ эффектов маятникового решения, связанный, в частности, с экспериментальным определением структурных амплитуд, приводится для приближения падающей сферической волны в гл. 6 и 9, для приближения падающей плоской волны — в гл. 9.

Из сказанного ясно, что экспериментальное наблюдение и измерение эффектов, связанных с маятниковым решением, представляет трудную задачу. Фактически оно осуществлено лишь в самые последние годы, как это показано в гл. 9. Поэтому до сих пор по преимуществу использовались выражения (3.62) — (3.65) в таком виде, чтобы они отвечали доступным условиям измерений. Речь идет об усреднении функций R и T по t и y . Для получения \bar{R} достаточно, например, в (3.63) заменить величину квадрата синуса его средним значением по полному периоду колебаний. Среднее значение T получим вычитанием \bar{R} из единицы:

$$\bar{R} = \frac{1}{2(1+y^2)}, \quad \bar{T} = 1 - \frac{1}{2(1+y^2)}. \quad (3.78)$$

Кривые для \bar{R} и \bar{T} представлены на рис. 14.

Полуширина максимума w или его ширина при значении $\bar{R} = 1/2 \bar{R}_{\max}$ определяются из условия $2y = 2$. Переходя опять к абсолютным величинам η , получаем (см. (3.27))

$$w(\eta) = 2\eta_{1/2s} = \frac{2C |\chi_h| (\gamma_h/\gamma_0)^{1/2}}{\sin 2\theta}. \quad (3.79)$$

Если варьировать длину волны применяемого излучения, т. е. принять, что данной величине $\Delta\eta$ соответствует определенный интервал $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_b$, где λ_b — длина волны, точно отвечающая условию Вульфа — Брэгга, то можно выразить полуширину

максимума в интервалах длин волн:

$$2\Delta\lambda_s = \frac{\lambda_B C |\chi_h| (\gamma_h/\gamma_0)^{1/2}}{\sin^2 \vartheta}. \quad (3.80)$$

Переходим к определению интегрального отражения

$$R_i^y = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 A \sqrt{1+y^2}}{1+y^2} dy. \quad (3.81a)$$

Этот интеграл вычисляется дифференцированием подынтегрального выражения по параметру A :

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin [2A \sin \varphi]}{\sin \varphi} d\varphi,$$

к которому можно привести правую часть в (3.81a).

Далее используется определение

$$\frac{\pi}{2} J_0(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(x \sin \varphi) d\varphi,$$

и результат имеет вид (принимаям $|\chi_h|/|\chi_{\bar{h}}| = 1$)

$$R_i^y = \frac{\pi}{2} \int_0^{2A} J_0(x) dx = \pi \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(2A). \quad (3.81b)$$

Здесь J_0 и J_n обозначают, как обычно, функции Бесселя нулевого и соответственно n -го порядков.

Для численного расчета интегрального отражения по (3.81b) можно использовать либо асимптотические свойства ряда

$$\sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(2A) = \begin{cases} A & (A \ll 1), \\ \frac{1}{2} & (A \gg 1), \end{cases} \quad (3.81v)$$

либо, согласно Де-Марко и Вейссу [53], использовать данные в приложении 1 значения интеграла $\int_0^{2A} J_0(x) dx$ для $A < 5$.

Для $A > 5$ достаточно точные результаты дает функция

$$\int_0^{2A} J_0(x) dx = 1 - \frac{1}{\sqrt{2A}} \left[P(A) \cos \left(2A + \frac{\pi}{4} \right) + \right. \\ \left. + Q(A) \sin \left(2A + \frac{\pi}{4} \right) \right],$$

$$P(A) = 0,7979 - \frac{0,2010}{A^2} + \frac{0,4575}{A^4},$$

$$Q(A) = \frac{0,2493}{A} - \frac{0,2586}{A^3} + \frac{1,0332}{A^5}. \quad (3.81г)$$

Кривая изменений функции $R_i^y(A)$ дана на рис. 15. При малых значениях величины A , пропорциональной толщине кристалла t , наблюдается монотонное возрастание интегрального отражения, что находится в согласии с кинематической теорией. С дальнейшим ростом A обнаруживается эффект экстинкции, а именно, периодическое изменение интегрального отражения с постепенным понижением амплитуды колебаний относительно среднего значения $\pi/2$. Нетрудно видеть, что то же среднее значение $\pi/2$ получается при интегрировании величины \bar{R} из (3.78):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{R} dy = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (1 + y^2)^{-1} dy = \frac{\pi}{2}. \quad (3.81д)$$

Следует также иметь в виду, что при больших толщинах t кристаллической пластинки приближение прозрачного кристалла неприменимо, и необходимо использовать формулы (4.124) — (4.126), приведенные в гл. 4. Численная оценка критических толщин для такого перехода может быть сделана на основе теории, изложенной в гл. 4.

Принимая указанное среднее значение интегрального отражения, выпишем следующие окончательные значения:

$$R_i^y = \frac{\pi}{2}, \quad R_i^n = \frac{C |\chi_h|}{\sin 2\theta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \frac{\pi}{2}. \quad (3.82а)$$

В случае падающего неполяризованного излучения

$$R_i^n = \frac{|\chi_h|}{\sin 2\theta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \frac{\pi}{2} \frac{1 + |\cos 2\theta|}{2}. \quad (3.82б)$$

При асимметричном отражении максимумы отражения R (и соответственно минимумы T) смещаются из положений, отвечающих кинематической теории. Смещение максимумов определяется из (3.27) при $y = 0$

$$\eta_0 = \frac{|\chi_0| \left[\left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right) - 1 \right]}{2 \sin 2\theta}. \quad (3.83)$$

Используя (2.62) и вводя

$$\delta_D = 1 - n = -1/2 \chi_0, \quad (3.84)$$

перепишем (3.83) в виде

$$\eta_0 = -\frac{\delta_D}{\sin 2\theta} \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right) = \frac{\chi_0}{2 \sin 2\theta} \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right). \quad (3.85)$$

Эффект смещения, таким образом, не связан с собственно динамическим рассеянием (не зависит от χ_h) и определяется рассмотренным в 3.1 своеобразным преломлением при прохождении через плоскопараллельную пластинку. Интересно отметить, что при переходе от hkl к $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ величина смещения изменяется. Действительно, изменение знаков индексов отражения эквивалентно переходу к отражению от другой стороны той же системы плоскостей. При этом меняются значениями величины γ_0 и γ_h .

Следует иметь в виду, что увеличение η означает возрастание угла ψ_0 , т. е. уменьшение скользящего угла падения.

Наконец, отметим, что при асимметричной съемке угловая полуширина максимумов $w = 2\eta_{1/2}$ отражений с противоположными знаками индексов становится различной. В результате если при симметричном отражении угловое положение и полуширина максимумов R_h и $R_{\bar{h}}$ полностью одинаковы, то при асимметричном отражении эти максимумы приобретают различную угловую полуширину и расходятся в разные стороны от точки, отвечающей $\eta = 0$.

Что касается численных оценок, то описанные эффекты, вообще говоря, незначительны и измеряются величинами порядка угловой секунды, что впрочем вполне доступно современным возможностям регистрации (см. гл. 9).

Так, при отражении 444 и $\bar{4}\bar{4}\bar{4}$ $MoK\alpha$ -излучения от плоскопараллельной пластинки Si, ограниченной сверху и снизу плоскостями (100), смещения центров максимумов отражения составляет для $R_{444} \eta_0 = -0,45''$ и для $R_{\bar{4}\bar{4}\bar{4}} \eta_0 = 0,84''$; соответственно $w_{444} = 0,34''$, $w_{\bar{4}\bar{4}\bar{4}} = 0,66''$. Эффекты более сильно выражены для отражения с минусами, что связано с условием

$$\psi_0^{\bar{4}\bar{4}\bar{4}} > \psi_0^{444},$$

а следовательно, с уменьшением скользящего угла падения при переходе к $\bar{4}\bar{4}\bar{4}$.

3.3. Прохождение через клиновидную пластинку

До сих пор мы рассматривали прохождение рентгеновской волны через плоскопараллельную пластинку. Если при этом сохраняется условие широкого фронта падающей волны по сравнению с толщиной пластинки и, следовательно, волновые поля внутри кристалла остаются неразделенными, то из кристалла в вакуум выходит одна общая волна $D_a^{(d)}$ и одна волна $D_h^{(d)}$.

Нетрудно показать, что если кристаллическая пластинка будет не плоской, а клиновидной, следует ожидать некоторого рас-

хождения выходящих в вакуум волн, которые порождаются различными волновыми полями внутри кристалла. При этом на выходной грани волны по обе стороны поверхности раздела будут связаны не соотношениями (3.29), а пограничными условиями для каждого поля в отдельности. То же относится к условию непрерывности тангенциальных слагающих волновых векторов (3.1).

Рассмотрим прохождение неполяризованной рентгеновской волны через клиновидную кристаллическую пластинку, наибольшая толщина которой значительно меньше волнового фронта падающей вакуумной волны. Пограничные условия на входной грани, а также волновое поле внутри кристалла, которое формируется соответственно этим пограничным условиям, остаются неизменными и, следовательно, описываются в соответствии с вышеизложенным детальным анализом. Однако теперь в вакуум из кристалла выйдет по четыре волны для каждого состояния поляризации.

Рассмотрим π - и σ -колебания вектора индукции. Амплитуды и волновые векторы падающей волны в вакууме и четырех волн, выходящих из кристалла, обозначим в этом разделе следующим образом:

$$D_0^{(\alpha)}, D_{0d}^{(1)}, D_{0d}^{(2)}, D_{hd}^{(1)}, D_{hd}^{(2)}, \quad (3.86)$$

$$K_{0\alpha}, K_{0d}^{(1)}, K_{0d}^{(2)}, K_{hd}^{(1)}, K_{hd}^{(2)}.$$

Выведем теперь выражения для волновых векторов в вакууме, например, $K_{hd}^{(i)}$. Для этого используем пограничные условия для волновых векторов, сначала на входной, затем на выходной границах. Обращаясь к (3.1), добавим в обе части уравнения вектор \mathbf{h} :

$$\mathbf{k}_h^{(i)} = \mathbf{K}_{0\alpha} + \mathbf{h} - K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0. \quad (3.87)$$

Привлекая далее (3.7) и (3.14), получим

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_h^{(i)} = & \mathbf{K}_{0\alpha} + \mathbf{h} \mp \frac{n_3}{\gamma_h} \frac{KC}{2} |\chi_h| \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \times \\ & \times (\sqrt{1+y^2} + y) + \frac{n_0}{\gamma_h} \frac{K\chi_0}{2} \frac{\gamma_h}{\gamma_0}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Для формулировки пограничных условий на выходной грани используется схема (рис. 16). Через точки возбуждения $A^{(i)}$ проведены прямые $A^{(i)}P^{(i)}$, параллельные нормали \mathbf{n}_d к выходной грани. Направление нормали — из кристалла в вакуум. Пограничные условия на выходной грани для каждого из векторов в вакууме можно записать следующим образом:

$$\mathbf{K}_{hd}^{(i)} = \mathbf{k}_h^{(i)} + \overline{KP^{(i)}A^{(i)}} \mathbf{n}_d, \quad (3.89)$$

где, по аналогии с (3.7),

$$K \overline{P^{(i)} A^{(i)}} \mathbf{n}_d = (-\xi_h^{(i)} - 1/2 K \chi_0 + K \alpha_i) \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(i)}}, \quad K \alpha_i = \overline{P^{(i)} Q^{(i)}}. \quad (3.90)$$

Окончательное выражение для $K_{hd}^{(i)}$ получаем, подставляя в (3.89) значения $k_h^{(i)}$ из (3.88) и используя (3.14) и (3.90),

$$K_{hd}^{(1)} = K_{01} + \mathbf{h} - m_1 \left\{ \frac{\mathbf{n}_0}{\gamma_h} (\sqrt{1+y^2} + y) - \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(1)}} (\sqrt{1+y^2} - y) \right\} + \frac{K \chi_0}{2} \left(\frac{\mathbf{n}_0}{\gamma_h} - \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(1)}} \right) + \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(1)}} K \alpha_1, \quad (3.91)$$

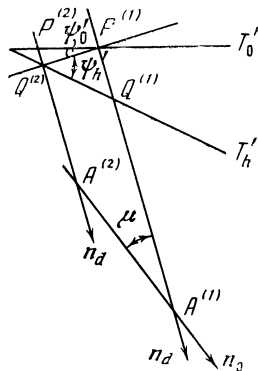
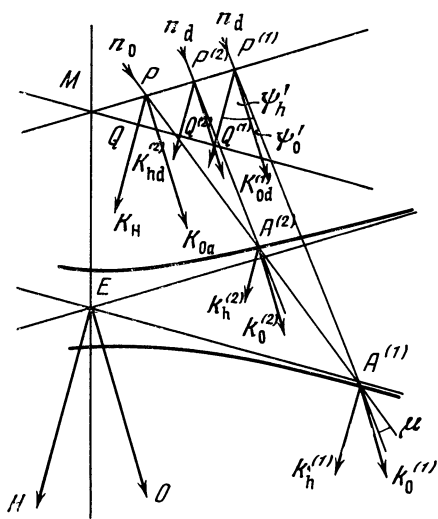
$$K_{hd}^{(2)} = K_{02} + \mathbf{h} + m_1 \left\{ \frac{\mathbf{n}_0}{\gamma_h} (\sqrt{1+y^2} - y) - \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(2)}} (\sqrt{1+y^2} + y) \right\} + \frac{K \chi_0}{2} \left(\frac{\mathbf{n}_0}{\gamma_h} - \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(2)}} \right) + \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma_h^{(2)}} K \alpha_2,$$

$$m_1 = m \frac{\gamma_h}{\gamma_0}. \quad (3.92)$$

Вычислим теперь значения углов между парами волновых векторов, т. е. κ_0 между $K_{0d}^{(i)}$ и κ_h между $K_{hd}^{(i)}$. Для этого обратимся к рис. 17, который в увеличенном виде изображает соответствующую деталь рис. 16. Угол $\kappa_0 \approx K^{-1} \overline{P^{(1)} P^{(2)}}$, где отрезок $\overline{P^{(1)} P^{(2)}}$ примерно перпендикулярен к векторам $K_{0d}^{(i)}$. Аналогично, угол

Рис. 16. Дисперсионная поверхность в обратном пространстве для клиновидной пластинки

Рис. 17. К выводу формул для значений углов κ_0 и κ_h



$\kappa_h \approx K^{-1} \overline{Q^{(1)}Q^{(2)}}$, где отрезок $\overline{Q^{(1)}Q^{(2)}}$ почти перпендикулярен к $\mathbf{K}_{hd}^{(i)}$.

В соответствии с соотношением (3.35) вектор $\overline{A^{(2)}A^{(1)}}$, представляющий вектор $K\delta^{(1)}\mathbf{n}_0 - K\delta^{(2)}\mathbf{n}_0$, вместе с тем является векторной разностью $\mathbf{k}_0^{(2)} - \mathbf{k}_0^{(1)}$ или равной ей $\mathbf{k}_h^{(2)} - \mathbf{k}_h^{(1)}$. Из пограничных условий для волновых векторов на выходной грани следует

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_0^{(2)} - \mathbf{k}_0^{(1)})_{\text{танг}} &= (\mathbf{k}_h^{(2)} - \mathbf{k}_h^{(1)})_{\text{танг}} = \\ &= (\mathbf{K}_{0d}^{(2)} - \mathbf{K}_{0d}^{(1)})_{\text{танг}} = (\mathbf{K}_{hd}^{(2)} - \mathbf{K}_{hd}^{(1)})_{\text{танг}}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Эти равенства становятся понятными из рис. 17, где отрезки $\overline{A^{(2)}A^{(1)}}$, $\overline{P^{(2)}P^{(1)}}$ и $\overline{Q^{(2)}Q^{(1)}}$, представляющие соответственно $|\Delta k_0^{(i)}|$ и $|\Delta k_h^{(i)}|$, $|\Delta \mathbf{K}_{0d}|$, $|\Delta \mathbf{K}_{hd}|$, имеют равные проекции на прямую $P^{(1)}Q^{(2)}$. Эта прямая, перпендикулярная к вектору \mathbf{n}_d , параллельна выходной грани.

Используя из (3.37) значение $|\Delta \mathbf{k}| \equiv \overline{A^{(2)}A^{(1)}}$, получаем из рис. 17:

$$\overline{P^{(1)}Q^{(2)}} = \overline{A^{(2)}A^{(1)}} \sin \mu = \frac{KC |\chi_h|}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \sqrt{1 + y^2} \sin \mu. \quad (3.94)$$

Для определения приближенных значений углов κ_0 и κ_h введем средние значения ψ_0 для углов

$$\angle(\mathbf{k}_0^{(1)} \mathbf{n}_d) \approx \angle(\mathbf{K}_{0d}^{(1)} \mathbf{n}_d), \quad \angle(\mathbf{k}_0^{(2)} \mathbf{n}_d) \approx \angle(\mathbf{K}_{0d}^{(2)} \mathbf{n}_d), \quad (3.95)$$

ψ_h для углов

$$\angle(\mathbf{k}_h^{(1)} \mathbf{n}_d) \approx \angle(\mathbf{K}_{hd}^{(1)} \mathbf{n}_d), \quad \angle(\mathbf{k}_h^{(2)} \mathbf{n}_d) \approx \angle(\mathbf{K}_{hd}^{(2)} \mathbf{n}_d) \quad (3.96)$$

и обозначения

$$\cos \psi'_0 \equiv \gamma'_0, \quad \cos \psi'_h \equiv \gamma'_h. \quad (3.97)$$

В таком случае для указанных углов получаем

$$\kappa_0 \approx \frac{1}{K} \overline{P^{(2)}P^{(1)}} = \frac{1}{K\gamma'_0} \overline{Q^{(2)}P^{(1)}} = \frac{C |\chi_h|}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \sqrt{1 + y^2} \frac{\sin \mu}{\gamma'_0}, \quad (3.98)$$

$$\kappa_h \approx \frac{1}{K} \overline{Q^{(2)}P^{(1)}} = \frac{C |\chi_h|}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \sqrt{1 + y^2} \frac{\sin \mu}{\gamma'_h}. \quad (3.99)$$

Используя выражения (2.34), (2.35) и (2.62), можно написать

$$|\chi_h| = |\chi_0| \frac{|F_h|}{N} = 2(1-n) \frac{|F_h|}{F_0}, \quad (3.100)$$

откуда

$$\kappa_0 = P \frac{\sin \mu}{\gamma'_0}, \quad \kappa_h = P \frac{\sin \mu}{\gamma'_h}, \quad (3.101)$$

$$P = \frac{2C(1-n)}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \frac{|F_h|}{F_0} \sqrt{1 + y^2}.$$

Полученные формулы позволяют рассчитать углы расхождения волн $\mathbf{K}_{0d}^{(i)}$ и $\mathbf{K}_{hd}^{(i)}$ при прохождении рентгеновских волн через клиновидную пластинку.

Весьма интересным, с точки зрения эксперимента, является наблюдение и расчет интерференционных явлений в слабо расходящихся парах $\mathbf{K}_{h0}^{(i)}$ и $\mathbf{K}_{hd}^{(i)}$. Эта интерференция относится к полосам равной толщины, т. е. разность фаз, отвечающая наблюдаемым при этом периодическим изменениям интенсивности, связана с величиной $\Delta\mathbf{k}$ согласно (3.37).

Точное значение периода интерференционной картины определяется величиной $(|\Delta\mathbf{K}_{hd}|)^{-1}$, т. е. вычитанием (3.94) из (3.92). Принимая

$$\gamma_h^{(1)} \approx \gamma_h^{(2)} \approx \gamma'_h, \quad \alpha_1 \approx \alpha_2, \quad (3.102)$$

получаем

$$\Lambda_h = (|\Delta\mathbf{K}_{hd}|)^{-1} = \lambda \left\{ C |\chi_h| \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{1+y^2} \left(\left| \frac{\mathbf{n}_0}{\gamma_h} - \frac{\mathbf{n}_d}{\gamma'_h} \right| \right) \right\}^{-1}. \quad (3.103)$$

Выражение для Λ_h в явном виде определяется, очевидно, величиной векторной разности в круглых скобках, в правой части (3.103). Эта величина определяется одной из возможных экспериментальных схем [23]: 1) ребро клина перпендикулярно к плоскости, в которой лежат нормали \mathbf{n}_0 и \mathbf{n}_d к входной и выходной граням; 2) ребро клина наклонно к указанной плоскости. Здесь мы рассмотрим только первый случай. Схемы эксперимента будут различаться соотношениями углов φ и φ' между отражающей плоскостью, и пограничными плоскостями. Наконец, в каждой схеме возможны два хода лучей, которые различаются взаимными направлениями векторов:

$$[\mathbf{k}_h \mathbf{k}_0], \quad [\mathbf{n}_0 \mathbf{n}_d]. \quad (3.104)$$

Это условие эквивалентно отражениям от двух противоположных сторон отражающей плоскости. Схемы представлены на рис. 18, 19.

Вывод выражения (3.103) в явном виде, т. е. вычисление модуля разности векторов в правой части (3.103), облегчается рассмотрением рис. 20. На этом рисунке:

$$\overline{A^{(1)}A^{(2)}} = |\Delta\mathbf{k}|, \quad \overline{A^{(2)}F} = |\Delta\mathbf{k}| \frac{\gamma_h}{\gamma'_h},$$

$$\overline{A^{(1)}F} = \overline{Q^{(2)}Q^{(1)}} = |\Delta\mathbf{K}_{hd}|, \quad \psi_h = \psi'_h + \mu.$$

Величина отрезка $A^{(1)}F$ определяется из треугольника $A^{(2)}A^{(1)}F$:

$$\overline{FA^{(1)}} = |\Delta\mathbf{k}| \frac{1}{\gamma_h} \left(n_0 - \frac{n_d}{\gamma'_h} \gamma_h \right) =$$

$$= \frac{|\Delta\mathbf{k}|}{\gamma_h} \sqrt{1 + \frac{\gamma_h^2}{\gamma'^2_h} - 2 \frac{\gamma_h}{\gamma'_h} \cos \mu}, \quad (3.105)$$

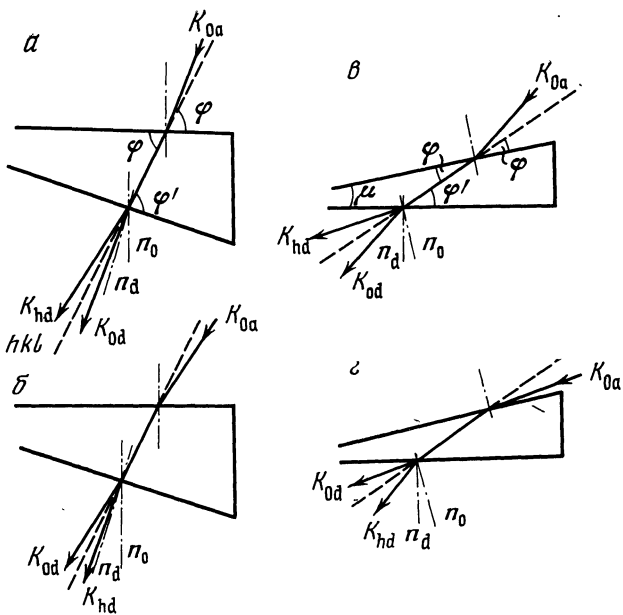


Рис. 18. Схемы прохождения через клиновидную пластинку

а, $e \rightarrow \uparrow$, $\varphi' = \varphi + \mu$, $\psi_h = \psi_0 + 2\theta$, $\psi_0 = \pi/2 - \varphi - \theta$, $\psi_h' = \psi_h$;
 б, $e \rightarrow \downarrow$, $\varphi' = \varphi + \mu$, $\psi_h = \psi_0 - 2\theta$, $\psi_0 = \pi/2 - \varphi + \theta$, $\psi_h' = \psi_h - \mu$

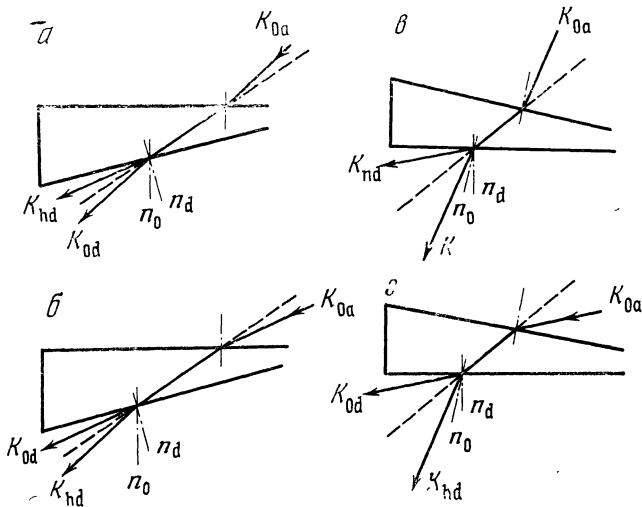


Рис. 19. Схемы прохождения через клиновидную пластинку

а, $e \rightarrow \uparrow$, $\varphi' = \varphi - \mu$, $\psi_h = \psi_0 + 2\theta$, $\psi_0 = \pi/2 - \varphi - \theta$, $\psi_h' = \psi_h + \mu$;
 б, $e \rightarrow \downarrow$, $\varphi' = \varphi - \mu$, $\psi_h = \psi_0 - 2\theta$, $\psi_0 = \pi/2 - \varphi + \theta$, $\psi_h' = \psi_h + \mu$

откуда, подставляя значение $|\Delta k|$ из (3.37), получаем

$$\Lambda_h = \{|\Delta K_{hd}|\}^{-1} = \lambda \gamma'_h \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} \times \\ \times \{C|\chi_h| \sqrt{1+y^2} \sqrt{\gamma_h^2 + \gamma_h'^2 - 2\gamma_h \gamma_h' \cos \mu}\}^{-1}. \quad (3.106)$$

Это выражение упрощается в частных случаях схем (3.104) и рис. 18, б при $\psi_h \approx \mu$, рис. 19, б при $\psi'_h \approx \mu$.

При использовании схем рис. 18, б принимаем $\gamma_h \approx \cos \mu$ и подбираем отражение с $\gamma'_h \approx 1$, откуда

$$\Lambda_h \approx \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} \{C|\chi_h| \sqrt{1+y^2} \sin \mu\}^{-1}. \quad (3.107)$$

С другой стороны, в схемах рис. 19, г принимаем $\gamma'_h \approx \cos \mu$ и подбираем отражение с $\gamma_h \approx 1$, в результате

$$\Lambda_h \approx \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} \{C|\chi_h| \sqrt{1+y^2} \operatorname{tg} \mu\}^{-1}. \quad (3.108)$$

При малых μ выражения (3.107) и (3.108) практически эквивалентны. Наконец, используя (3.104), получаем из (3.108)

$$\Lambda_h = \lambda \kappa_h^{-1}. \quad (3.109)$$

Явления интерференции на клине будут рассматриваться в гл. 6 в связи с приближением сферической падающей волны, а также в гл. 9 в связи с экспериментальной проверкой динамической теории. В частности, будет рассмотрен эффект модуляции периода Λ_h , вызванный биениями двух колебаний, соответствующих двум состояниям поляризации, а следовательно, и двум значениям C в формулах (3.106) — (3.108).

Рассматривая в этой главе распространение рентгеновских волн через кристаллическую пластинку, мы исходили из модели, включающей два важных условия: падающая волна является плоской монохроматической и ширина ее фронта велика сравнительно с толщиной пластинки. Однако во многих случаях мы встречаемся с иной картиной. Падающее излучение в действительности представлено пучком волновых векторов в угловом интервале, превышающем угловую ширину динамического максимума, и протяженность фронта падающего излучения на входной грани значительно меньше толщины пластинки. Детальное рассмотре-

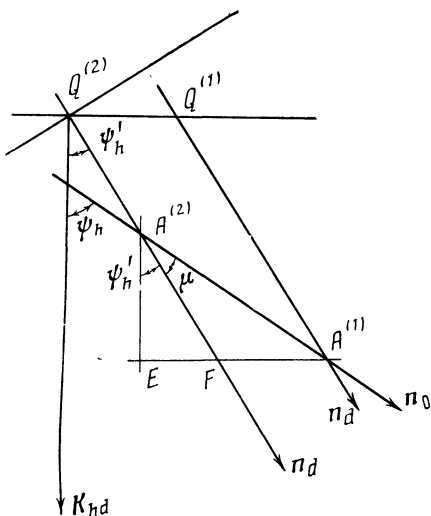


Рис. 20. К выводу формулы (3.106)
Случай $\psi_h = \psi'_h + \mu$

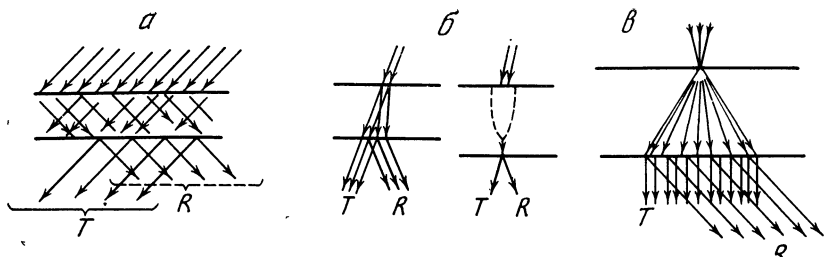


Рис. 21. Различные случаи прохождения через плоскопараллельную пластинку *а* — широкий фронт плоской падающей волны; *б* — узкий фронт плоской падающей волны, слева — в прозрачном кристалле, справа — в поглощающем; *в* — пучок лучей, проходящий через узкую щель

ние волнового поля в кристалле и вакуумных волн, выходящих через заднюю грань, в случае подобной схемы падения изложено в гл. 6.

Здесь мы ограничимся лишь некоторыми замечаниями по этому вопросу.

В 3.1—3.3 мы рассматривали условия, при которых оба поля в кристалле перекрываются. В 3.4 мы имели дело с волновым полем в клиновидной пластинке, и пограничные условия на выходной грани формулировались для каждого из полей в отдельности, хотя волновые поля внутри пластинки остались неразделенными. Это было результатом того, что фронт падающей вакуумной волны был принят широким сравнительно с толщиной пластинки (рис. 21, *а*). Иное должно наблюдаться при падении волны с узким фронтом, например, через щель. Если бы при этом можно было обеспечить параллельность волновых векторов по ширине щели, т. е. по-прежнему принимать вполне определенный угол падения, то внутри кристалла следовало бы ожидать разделения обоих волновых полей, причем в каждом из них разделялись бы волны с различным состоянием поляризации. На выходной грани кристалла каждое поле должно давать свой вклад как в прошедшую, так и в дифрагированную волны (см. рис. 21, *б*). Разделение полей внутри толстого кристалла является следствием того, что распространение энергии рентгеновских волн в кристалле, так же как и в случае кристаллооптики видимого света, происходит по направлениям векторов Пойнтинга, не совпадающим с направлениями волновых векторов. Эти вопросы подробно рассматриваются в гл. 5.

Однако в действительности использование щелей влечет за собой образование веера лучей. Собственно говоря, аналогичную структуру имеет и пучок лучей от рентгеновской трубки. В обоих случаях лучшим приближением является не плоская волна, а сферическая, как будет подробно показано в гл. 6. Здесь мы только обратим внимание на то, что в связи с наличием в падающем пучке

одновременно всех направлений или всех углов падения, во всяком случае в пределах максимума, в кристалле образуется широкий веер лучей или направлений распространения рентгеновских волн (рис. 21, *в*).

Вместе с тем показанные на рис. 21 наглядные модели должны рассматриваться как частные случаи падения на кристалл волны с произвольной шириной фронта, которая соответствует более общему представлению волнового пакета. Подобное представление рассматривается в обобщенной теории на основе уравнений Такаги и излагается в кратких чертах в гл. 12, а также частично в гл. 7 и 10.

РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ПОГЛОЩАЮЩЕМ КРИСТАЛЛЕ. ОТРАЖЕНИЕ ПО ЛАУЭ

Теория рассеяния, изложенная в гл. 2 и 3, относится к прозрачному кристаллу без поглощения. Такое приближение является разумным и находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными, если рассеивающий кристалл достаточно тонок и не содержит атомов тяжелых элементов, а рассеянное излучение имеет длину волны малую по сравнению с краями поглощения элементов, входящих в состав кристалла. Типичным примером является рассеяние излучений $MoK\alpha$ или $AgK\alpha$ в тонких пластинках кристалла кремния, на котором изучались эффекты, связанные с маятниковым решением (см. гл. 3, 6, 9). Очевидно, что переход к широкому кругу явлений, сопровождающих прохождение рентгеновского излучения с любой длиной волны через более толстые кристаллы, требует учета дисперсии и поглощения рентгеновских лучей.

В соответствии с этим изложением теории рассеяния в поглощающем кристалле мы предпосылаем краткое рассмотрение обобщенного атомного рассеяния, включающего поглощение.

4.1. Атомное рассеяние и поглощение

Точное вычисление атомного рассеяния в указанном общем смысле требует использования многоэлектронных волновых функций атомов. В таком случае при построении динамической теории для шредингеровского тока должно быть использовано уравнение (2.17), включая первый член справа.

К сожалению, в настоящее время многоэлектронные функции неизвестны и соответствующие точные расчеты пока невыполнимы.

Поэтому, используя приближенные методы, различные авторы вычисляют *дисперсионные поправки* к атомному рассеянию, а теория рассеяния в *поглощающем кристалле* строится на основе метода, применяемого в классической теории дисперсии, т. е. *введением комплексных параметров* рассеяния [54].

Атомное рассеяние рентгеновских лучей с учетом дисперсии и собственно поглощения удобно рассматривать с помощью

определения Джеймса [8, 55]:

$$f = f_0 + \Delta f' + i\Delta f'', \quad f = f_r + if_i, \quad (4.1)$$

где f_0 — рассеяние излучения с длиной волны, много короче края поглощения; $\Delta f'$ и $\Delta f''$ — рассеяние, зависящее от дисперсионных эффектов, т. е. от частоты падающего излучения, причем $\Delta f'' \equiv f_i$ определяется поглощением¹.

Обзор работ, относящихся к определению величин $\Delta f'$ и $\Delta f''$, примерно до 1950 г. приведен в монографии Джеймса [8]. В течение последних лет опубликованы новые работы, в которых достигнут определенный прогресс в теоретическом и экспериментальном определении параметров, входящих в (4.1). Здесь мы не будем останавливаться на определении величин $\Delta f'$ и лишь кратко рассмотрим методы теоретического вычисления указанных поправок.

Классическая теория дисперсии заменяет реальный процесс рассеяния атомами падающего излучения моделью колеблющихся диполей, обладающих определенными собственными частотами. Фактически учитываются лишь колебания электронов. Обозначая через $\omega_s = 2\pi\nu_s$ собственную (круговую) частоту диполя, через ω — частоту падающего излучения и вводя коэффициент затухания p , нетрудно получить для амплитуды волны, рассеянной диполем на расстоянии единицы в экваториальной плоскости

$$A = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\omega_s E_0}{\omega_s^2 - \omega^2 + ip\omega}. \quad (4.2)$$

Для свободного электрона это выражение переходит в формулу Томсона для рассеяния одним электроном $A_T = -\left(\frac{e^2}{mc^2}\right) E_0$. Таким образом, рассеяние диполем в электронных единицах или функция рассеяния диполем

$$f = \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_s^2 - ip\omega}. \quad (4.3)$$

Знак f зависит от соотношения между ω и ω_s и противоположен знаку амплитуды A , член $ip\omega$ имеет заметное значение только в специальном случае, когда $\omega \approx \omega_s$.

¹ Крамер и Мавн дали значения атомных амплитуд f_0 для нейтральных атомов всех элементов, а также для многих ионов в виде коэффициентов к следующей функции:

$$f_0 \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right)_{\parallel} = \sum_{i=1}^{14} A_i \exp \left[-B_i \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} \right] + C.$$

Эта функция с большой точностью передает значения f_0 , вычисленные по методу Хартри — Фока [55a].

Разделение действительной и мнимой частей в (4.3) приводит к следующим выражениям:

$$f_r = \frac{\omega^2 (\omega^2 - \omega_s^2)}{(\omega^2 - \omega_s^2)^2 + p^2 \omega^2}, \quad (4.4a)$$

$$f_i = \frac{p\omega^3}{(\omega^2 - \omega_s^2)^2 + p^2 \omega^2}. \quad (4.4b)$$

Для того чтобы установить соотношение между f_i и атомным коэффициентом поглощения μ_a , можно использовать значение показателя преломления n , согласно (2.62). Как указано в 3.1, формула (2.62) относится к случаю падения вакуумной волны на кристалл под углом, не попадающим в пределы какого-либо максимума отражения.

Величина электронного заряда в единице объема ρ в выражении для коэффициента преломления

$$n = 1 - \frac{e\rho\lambda^2}{2\pi n c^2} \quad (4.5)$$

может быть представлена в виде

$$\rho = eZ = Nef_0, \quad (4.6)$$

где Z — число электронов в единице объема; N — число атомов в единице объема и f_0 — атомная амплитуда рассеяния в направлении падения начального пучка. Таким образом, получаем

$$n = 1 - \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{2\pi} Nf_0. \quad (4.7a)$$

Так как для случая прохождения в поглощающей среде фазовый множитель распространяющейся волны

$$\exp[-2\pi i(\mathbf{K}n, \mathbf{r})]$$

при вычислении интенсивности не исчезает полностью, а преобразуется в множитель поглощения согласно (2.58), мы можем совершенно формально разделить как n , так и f_0 на две части (действительную и мнимую)

$$n_r = 1 - \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{2\pi} Nf_{0r}, \quad (4.7b)$$

$$n_i = - \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{2\pi} Nf_{0i}. \quad (4.7b)$$

В соответствии с этим множитель поглощения будет иметь вид

$$\exp 4\pi(\mathbf{K}n_i, \mathbf{r}) = \exp(-\mu r). \quad (4.8)$$

Если теперь ввести атомный коэффициент поглощения μ_a , то согласно (4.8) и (4.7b) получим

$$\mu = \frac{1}{\Omega} \sum_{\text{яч}} \mu_a, \quad \mu_a = \frac{e^2}{mc^2} 2\lambda f_{0i}. \quad (4.9)$$

Еще раз подчеркнем формальный характер рассуждений, приведших к формуле (4.9), как впрочем и исходного соотношения (4.1). Действительно, в то время как рассеивающая способность атома f_{0r} пропорциональна электронной плотности или числу электронов (для f_0 просто совпадает с числом атомных электронов), f_{0i} определяется вероятностями переходов, возникающих при возбуждении и ионизации атомных электронов. При этом f_{0i} для определенных видов излучения заведомо меньше полного числа электронов в атоме данного элемента.

Для действительной части атомной амплитуды, в случае, когда ω не слишком близок к ω_s , можно в (4.4а) пренебречь коэффициентом затухания p и написать

$$f_r = \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_s^2}. \quad (4.10)$$

Это выражение можно преобразовать, используя весьма полезное понятие силы осциллятора.

Атом представляется в виде совокупности осцилляторов, разбитых на группы, каждая с определенным значением собственной частоты. Число осцилляторов с некоторой частотой ω_s , обозначаемое $g(s)$, называется силой осциллятора. В таком случае атомное рассеяние (4.10) может быть представлено в виде

$$f_r = \sum_s \frac{g(s) \omega^2}{\omega^2 - \omega_s^2} = \sum_s g(s) - \sum_s \frac{g(s) \omega_s^2}{\omega_s^2 - \omega^2}. \quad (4.11)$$

Классическому понятию силы осциллятора можно сопоставить вполне определенную величину в квантовой механике.

В результате квантовомеханического рассмотрения когерентного рассеяния рентгеновских лучей на атоме с одним электроном можно получить следующее выражение:

$$f_r = f_{nn} - \sum_k \left[\frac{2m}{\hbar^2} \omega_{kn} |x_{nk}|^2 \frac{\omega_{kn}^2}{\omega_{kn}^2 - \omega^2} \right], \quad (4.12)$$

где $\hbar = h/2\pi$. В этом выражении для частот падающего излучения $\omega \gg \omega_{kn}$, f_{nn} представляет полную величину когерентного рассеяния атома в состоянии n . В общем случае приходится учитывать дисперсию. Сравнивая (4.12) с (4.11), замечаем, что классической величине силы осциллятора $g(s)$ отвечает величина

$$g(k, n) = \frac{2m}{\hbar^2} \omega_{kn} |x_{nk}|^2. \quad (4.13)$$

Величина x_{nk} пропорциональна вероятности самопроизвольного квантового перехода атома из состояния k в состояние n , которое будем считать нормальным. Для одноэлектронного атома состояния k могут быть квантованными, так как верхние уровни свободны. В случае многоэлектронного атома состояния k могут включать непрерывную область, т. е. отвечать фотоэффекту. В от-

личие от классической модели осциллятора в ее квантовом эквиваленте сила осциллятора пропорциональна не числу осцилляторов, а вероятности перехода.

Наряду с силой осциллятора $g(s)$ используется понятие плотности осциллятора, существенное для непрерывной области состояний. Величина $dg/d\omega$ представляет число осцилляторов, приходящееся на частоты в пределах от ω до $\omega + d\omega$. Полная сила осцилляторов, приходящаяся на данную атомную оболочку, очевидно, определяется из интеграла

$$g(s) = \int_0^{\infty} \left(\frac{dg}{d\omega} \right)_s d\omega, \quad (4.14)$$

причем для каждой оболочки имеет место специальный вид функции $g(\omega)$. В соответствии с (4.14) и (4.11) можно написать

$$\Delta f' = \sum_s \int_{\omega_s}^{\infty} \frac{\omega^2 (dg/d\omega)_s}{\omega_i - \omega} d\omega, \quad (4.15)$$

где ω_i — круговая частота падающего излучения.

Наконец, рассматривая долю, поглощаемую атомом из всей падающей энергии, можно показать, что плотность осциллятора следующим образом связана с атомным коэффициентом поглощения:

$$dg/d\omega = \frac{mc}{2\pi^2 e^2} \mu_a(\omega). \quad (4.16)$$

Далее из (4.9) и (4.16) получаем для f_i :

$$f_i = \sum_s \frac{\pi}{2} \omega \left(\frac{dg}{d\omega} \right)_s. \quad (4.17)$$

Для вычисления $dg/d\omega$ из (4.16) необходимо знание закона изменения $\mu(\omega)$ с частотой в пределах данной электронной оболочки. Некоторые авторы использовали следующий эмпирический закон:

$$\mu(\omega) = \left(\frac{\omega_s}{\omega} \right)^r \mu(\omega_s), \quad (4.18)$$

здесь значок s означает, что данная величина относится к краю поглощения. На основе тех или иных соображений выбиралось определенное значение r , которое зависит также и от порядкового номера элемента.

Поправки $\Delta f'$ и $\Delta f''$, вычисленные с помощью (4.16), (4.17) и (4.18), вошли в расширенном виде в международные таблицы [56]. Наряду с этими данными мы здесь отметим три работы, посвященные вычислению теоретических величин $\Delta f'$ и $\Delta f''$. Далее мы сопоставим вычисленные значения $\Delta f''$ с наиболее надежными экспериментальными значениями для Ge.

Крамер [57], стремясь обойти необходимость использования экспериментальных значений μ_α , вычислял сначала значения силы осциллятора, а затем из уравнения (4.16) теоретическое значение μ_α . Величины $\Delta f''$ и $\Delta f'$ определялись из (4.17) и (4.15). В выражении (4.15) плотность осциллятора может быть выражена также через величину μ_α .

При вычислении квантовомеханического эквивалента g_K для K -оболочки использовалось выражение

$$g_{n'l'j'}^{n'lj''} = \frac{1}{3} \Delta E \max(l, l') (2j + 1) \left[W \left(l, j, l', j'; \frac{1}{2}, 1 \right) \right]^2 \times \\ \times F' \left[\int_0^\infty P_{n', l'}^* r P_{n, l} dr \right]^2, \quad (4.19)$$

в котором ΔE — разность энергий двух состояний; $(2j + 1)$ — кратность конечного состояния; W — поправка, используемая при вычислении сложных спектров; F' — частичная занятость конечного состояния; P — радиальные функции Хартри, которые были в расчете заменены на релятивистские атомные функции. С деталями расчета можно познакомиться в литературе, приведенной в работе Крамера.

Несмотря на более строгий расчет используемых волновых функций, в работе Крамера, как отмечает сам автор, точность вычисления $\Delta f'$ и $\Delta f''$ была существенно ограничена использованием зависимости μ_α от ω согласно (4.18). Автор приводит таблицы вычисленных им значений $\Delta f'$ и $\Delta f''$ для элементов с атомными номерами от 10 до 98 и пяти характеристических излучений: Sr, Fe, Cu, Mo, Ag $K\alpha$.

В работах Хэнля [58] и Вагенфельда [59] использовались для расчета водородоподобные атомные волновые функции.

Хэнль воспользовался результатами работ Сугиура [60], который вычислил плотность осциллятора в K -континууме для одноэлектронного атома. В пределах отношения $\omega/\omega_K = z_K$ от 1 до 4 величина $g(z)$, согласно Хэнлю, составляет

$$g(z) \approx \frac{\exp(-4)}{3} (4z - 1), \quad (4.20)$$

в то время как плотность осциллятора по Сугиура

$$\frac{dg}{dz} = \frac{2^7}{3} \frac{g(z)}{Z^4}. \quad (4.21)$$

Для перехода от водородоподобного к реальному атому Хэнль ввел ряд поправок. Во-первых, была введена поправка на экранирование заряда ядра. Эффективный заряд ядра для K -электронов был принят $Z - s$, где s — константа Слейтера, равная 0,3. Во-вторых, влияние внешних электронов было сведено к дополнительному потенциалу в области K -оболочки. Наконец, в выражении для энергии ионизации к величине $(Z - s)^2$ добавлялась реляти-

вистская поправка вида $\alpha^2 (Z - s)^4/4$, где α — постоянная тонкой структуры оптического спектра. В результате исправленная частота края поглощения $\omega_K = \omega_K (1 - \delta_K)$, где $\delta_K = (1 - 911/\lambda_K A)$, λ_K в ангстремах, $A = (Z - 0,3)^2 + 1,33 \times 10^{-5} (Z - s)^4$.

Формулы для вычисления величин $\Delta f'$ и $\Delta f''$, которые были использованы Джеймсом, получаются при подстановке значения $dg/d\omega$ из (4.21) в (4.16) и (4.17), причем значение $g(z)$ в (4.21) берется из (4.20) и $z = \omega/\omega_K$:

$$\Delta f'_K = \frac{2^7}{9} \exp(-4) \left\{ \frac{4 \ln |z^2 - 1|}{(1 - \delta_K)^2 z^2} - \frac{1}{(1 - \delta_K)^3} \left(\frac{2}{z^2} + \frac{1}{z^3} \ln \left| \frac{z - 1}{z + 1} \right| \right) \right\}, \quad (4.22)$$

$$\Delta f''_K = \frac{2^7}{9} \exp(-4) \pi \left\{ \frac{4}{z^2 (1 - \delta_K)^2} - \frac{1}{z^3 (1 - \delta_K)^3} \right\}, \quad z > 1, \\ \Delta f''_K = 0, \quad z < 1. \quad (4.23)$$

Таблицы значений $\Delta f'$ и $\Delta f''$ для K -оболочки в функции от δ_K и λ/λ_K приведены в приложении III монографии Джеймса [8].

Переходим к методу расчета μ_a , использованному Вагенфельдом. Для вычисления поперечного сечения поглощения σ или совпадающего с этой величиной μ_a применялось общее выражение, получаемое на основе водородоподобной функции,

$$\mu_a = \frac{\lambda h^2 e^2}{\pi m c^2} \sum_{l', m', n'} \sum_{l, m, n} |\langle \rho' | \frac{\partial}{\partial y} \exp(2\pi i K x) | \rho \rangle|^2. \quad (4.24)$$

Здесь ρ — начальное состояние с квантовыми числами n, l, m связанного электрона; ρ' — конечное состояние выбитого свободного электрона с квантовыми числами n', l', m' . Для того чтобы определить пространственное распределение выбитых фотоэлектронов, необходимо анализировать множитель запаздывания $\exp(2\pi i K x)$, в котором x есть направление распространения рентгеновской волны, а в качестве направления электрического вектора выбрана ось y . Указанный множитель может быть представлен в виде ряда

$$\exp(2\pi i K x) = 1 + i2\pi K x - 2\pi^2 K^2 x^2 + \dots \quad (4.25)$$

Это разложение можно связать с определенной физической моделью: его члены соответствуют излучению диполя, квадруполью и т. д. Будучи предложено еще в 1930 г., оно было подробно рассмотрено в упомянутой работе Хэнля [58], который сделал численную оценку вклада отдельных членов ряда (4.25) и отметил пренебрежимо малый вклад квадрупольного, а тем более последующих слагаемых. Однако квадрупольные члены могут быть использованы для вычисления величин χ_{hi} , как будет показано далее.

При вычислении отдельных членов (4.25) были использованы

известные правила перехода: для диполя $l \rightarrow l' = l \pm 1$, в частности для K -поглощения $l' = 1$; для квадрупольного $l \rightarrow l' = l \pm 2$, для K -поглощения $l' = 2$. В отличие от Хэнля Вагенфельд приводит формулы для вычисления σ_a или μ_a для поглощения на K -, L - и M -оболочках. Однако в работе Гутмана и Вагенфельда [61] фактически вычислены лишь коэффициенты поглощения на K - и L -оболочках. Как отмечают эти авторы, существенный прогресс в надежности и точности расчетов, основанных на водородоподобной модели, стал возможным благодаря опубликованию более точных значений длин волн характеристического излучения большинства элементов (см. [59]). Эти данные позволили вычислить константы экранирования s_n не только для K -поглощения, как в расчетах Хэнля, но и для L - и M -поглощения.

Расчетные формулы, которые были использованы автором [59] для вычисления поперечного сечения поглощения на данной оболочке, легко вывести (например, для K -оболочки — дипольный член) следующим образом. Для квантовомеханического выражения силы осциллятора используется не приближенное соотношение Хэнля (4.20), а более точная формула Сугиура:

$$g(z) = \frac{\exp[-(4/\sqrt{z-1})\operatorname{arctg}(z-1)^{1/2}]}{1 - \exp(-2\pi/(z-1)^{1/2})},$$

$$z = \sqrt{\frac{\lambda}{\lambda_K - \lambda}}. \quad (4.26)$$

Из (4.9) и (4.17) следует

$$\mu_K = \lambda \frac{e^2}{mc^2} \pi\omega \left(\frac{dg}{d\omega} \right)_K. \quad (4.27)$$

Так как $\frac{dg}{d\omega} = \omega_K^{-1} \frac{dg}{dz}$, то, используя (4.21), (4.27) можно переписать в виде (для двух электронов)

$$\mu_K^D = \frac{2^3}{3} \frac{\pi e^2}{mc^2} \lambda \left(\frac{\lambda}{\lambda_K} \right)^3 g_K(z), \quad (4.28)$$

где $g(z)$ определяется из (4.26), и

$$\lambda_K = (Z - s_K)^2 R_\infty, \quad R_\infty = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3 c}. \quad (4.29)$$

Квадрупольный член для K -поглощения

$$\mu_K^Q = \frac{2}{5} \mu_K^D \frac{\lambda_c}{\lambda} \left(4 - \frac{3\lambda}{\lambda_K} \right), \quad (4.30)$$

где $\lambda_c = h/mc$ — комптоновская длина волны.

Аналогично для \dot{L} -поглощений

$$\mu_L^D = \mu_{2s}^D + \mu_{2p}^D = \frac{2}{3} \frac{11 \pi e^2}{mc^2} \lambda \psi^3 (1 + 3\psi) g_L(z) + \\ + 2^{11} \frac{\pi e^2}{mc^2} \lambda \psi^4 \left(1 + \frac{8}{3} \psi \right) g_L(z), \quad (4.31)$$

$$\mu_L^Q = \mu_{2s}^Q + \mu_{2p}^Q = \frac{8}{5} \mu_{2s}^D \frac{\lambda_c}{\lambda} (\psi - 1)^2 + \\ + \frac{4}{5} \mu_{2p}^D \frac{\lambda_c}{\lambda} \frac{(11 - 6\psi)(1 + 3\psi)}{(3 + 8\psi)}, \quad (4.32)$$

где $\psi = \lambda/\lambda_L$, $g_L(z)$ отличается от $g_K(z)$ тем, что z в (4.26) является функцией от λ_L . Релятивистские поправки в этих расчетах не вводились.

Таблицы, вычисленные Гутманом и Вагенфельдом, содержат значения атомного поглощения в отдельности для дипольного и квадрупольного членов, а также их суммы

$$\mu_a \approx \mu_a^D + \mu_a^Q, \quad \mu_a^D = \mu_K^D + \mu_L^D, \quad \mu_a^Q = \mu_K^Q + \mu_L^Q. \quad (4.33)$$

Указанные величины вычислены для элементов с атомными номерами от 11 до 84 для излучений от $AgK\beta_1$ (0,4975 Å) до $CrK\alpha_1$ (2,2897 Å).

Следует подчеркнуть, что методы расчета, использованные Хэнлем, Крамером и Гутманом и Вагенфельдом, не позволяют с необходимой надежностью и точностью вычислить величины $\Delta f'$ и $\Delta f''$ в непосредственной близости к краям поглощения соответствующих элементов. Кроме того, несмотря на учет релятивистских эффектов в работах Хэнля и Крамера, соответствующие методы расчета, строго говоря, неприменимы к тяжелым элементам.

Важно далее отметить, что какая-либо теоретическая оценка надежности и точности изложенных методов расчета величин $\Delta f'$ и f_i представляет трудную и нерешенную задачу. Поэтому, особое значение приобретает экспериментальная проверка величин, вычисленных в упомянутых работах.

Не останавливаясь на детальном анализе опубликованных работ, посвященных экспериментальным определениям коэффициентов поглощения рентгеновских лучей, заметим, что такие определения связаны с рядом непреодоленных до сих пор трудностей и не отличаются достаточной точностью.

Существенный прогресс достигнут в работе Гримвалл и Персон [62], которые измерили линейные коэффициенты поглощения в Ge ряда излучений. В табл. 2 указанные экспериментальные данные сопоставлены с теоретическими значениями μ_{Ge} , вычисленными авторами работ [55—58, 61]. Как можно видеть из приведенных величин $\Delta\%$, экспериментальные данные для $\lambda < \lambda_K$ лучше всего согласуются с теоретическими, полученными в работе [58], в то время как для $\lambda > \lambda_K$ наилучшее соответствие имеет

Таблица 2. Сопоставление теоретических значений μ_{Ge} ($см^{-1}$) с экспериментальными для Ge

Излучение	μ^D [62]	μ^T [58]	Δ , %	μ^T [61]	Δ , %	μ^T [57]	Δ , %	$\frac{\mu_a^Q}{\mu_a^D + \mu_a^Q}$, %
K-поглощение								
AgK β $\lambda = 0,497$	125	108,2	13,5	126,7	1			4,3
AgK α $\lambda = 0,559$	147	148,8	1	174,8	12	179,5	12,2	3,6
MoK β $\lambda = 0,6323$	210	197	6	244	16			2,8
MoK α $\lambda = 0,709$	274	290	6	332	21	409	50	2,2
L-поглощение								
CuK β $\lambda = 1,392$	296,5			253,5	6			0,8
CuK α $\lambda = 1,541$	352			338	4	400	14	0,6
FeK β $\lambda = 1,756$	510			494	3			0,45
FeK α $\lambda = 1,936$	670			652	2,8			0,35
CrK β $\lambda = 2,085$	827			806	2,5			0,3
CrK α $\lambda = 2,29$	1090			1055	3	1060	2,5	0,2

место для данных работы [61]. Последний столбец таблицы дает оценку точности и надежности теоретических расчетов величин χ_{hi} .

4.2. Комплексная форма параметров динамического рассеяния [63]

Обратимся теперь к параметрам динамического рассеяния в идеальных поглощающих кристаллах.

Величины поляризуемости и коэффициенты ее Фурье-разложения становятся в этом случае комплексными:

$$\chi = \chi_r + i\chi_i, \quad \chi_0 = \chi_{0r} + i\chi_{0i}, \quad \chi_h = \chi_{hr} + i\chi_{hi}. \quad (4.34)$$

Волновые векторы волн в кристалле также становятся комплексными.

При падении вакуумной волны за пределами области максимумов отражения мнимая часть волнового вектора будет связана только с нулевой слагающей Фурье-разложения χ , именно с χ_0 [см. (2.61)]:

$$k = K(1 + 1/2 \chi_{0r} + i 1/2 \chi_{0i}), \quad (4.35)$$

$$K_i = 1/2 K \chi_{0i}. \quad (4.36)$$

Фазовый множитель для такой волны в кристалле при переходе к интенсивностям преобразуется согласно (2.58).

Если угол падения попадает внутрь какого-либо максимума, волновые векторы волны в кристалле $k_0^{(i)}$ и $k_h^{(i)}$ становятся комплекс-

ными через посредство как χ_0 , так и χ_h . В соответствии с (3.1) можно написать

$$\mathbf{k}_0^{(i)} = \mathbf{K}_0^{(a)} - K\delta_r^{(i)}\mathbf{n}_0 - iK\delta_i^{(i)}\mathbf{n}_0. \quad (4.37)$$

Аналогичное соотношение можно написать для вектора $\mathbf{k}_h^{(i)}$, причем, как это следует из соотношений (3.7), вектор $\mathbf{k}_h^{(i)}$ также становится комплексным из-за функции $\delta^{(i)}$. Таким образом,

$$\mathbf{k}_{hi}^{(i)} = K\delta_i^{(i)}\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}_{0i}^{(i)}. \quad (4.38)$$

Сопоставляя (4.8), (4.35) и (4.36), можно написать

$$\chi_{0i} = -\frac{\mu}{2\pi K} < 0. \quad (4.39)$$

Обратимся к соотношениям (4.34) и используем аналогию между амплитудами рассеяния f_r и F_{hr} и поглощения f_i и F_{hi} .

Для действительной части χ и χ_h можно написать очевидные выражения

$$\chi_r = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi} \int \left(-\frac{\rho}{e} \right) \exp 2\pi i \mathbf{k}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}) d\tau = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi} f_r \quad (4.40)$$

(где f_r должно включать как дисперсионную поправку, так и фактор Дебая — Валлера),

$$\chi_{hr} = \frac{1}{\Omega} \int \chi_r \exp 2\pi i(\mathbf{r}\mathbf{h}) d\tau = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi\Omega} F_{hr}. \quad (4.41)$$

При $h = 0$ мы получаем выражение (2.35). Аналогично (4.40) мы можем написать для χ_i следующее выражение, формально вводя мнимую атомную амплитуду f_i :

$$\chi_i = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi} f_i, \quad (4.42)$$

$$\chi_{0i} = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_{\text{яч}} f_{0i} = -\frac{\mu}{2\pi K}. \quad (4.43)$$

С другой стороны, из (4.9) получаем

$$f_{0i} = \frac{mc^2}{e^2} \frac{1}{2\lambda} \mu_a, \quad f_{hi} = \frac{mc^2}{e^2} \frac{1}{2\lambda} \mu_a^{(h)}. \quad (4.44)$$

Весьма существенной является угловая зависимость f_i , а следовательно и μ_a .

В работе Хэнля [58] было показано, что отдельные составляющие по мультипольностям в (4.25) имеют, вообще говоря, различные поляризаационные множители. Таким образом, следует различать μ_a^\perp и μ_a^\parallel , где значки сверху обозначают состояние поляризации падающего излучения относительно плоскости отражения. В соот-

ветствии с этим можно записать [59] [сравните с (4.33)]

$$\begin{aligned}\mu_a^\perp &= \mu_a^D + \mu_a^Q |\cos 2\vartheta|, \\ \mu_a^\parallel &= \mu_a^D |\cos 2\vartheta| + \mu_a^Q |\cos 4\vartheta|.\end{aligned}\quad (4.45)$$

Кроме поляризационных множителей следует учесть для χ_{hi} (но не для χ_{oi} !) температурную поправку. Мы введем температурный множитель Дебая — Валлера $\exp(-M)$, тот же, который вводится в действительную часть атомной амплитуды (см. также [35]). Таким образом, для неполяризованного падающего излучения следует написать

$$\chi_{hi} = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi\Omega} \sum_{яч} f_i(\vartheta, T) \exp 2\pi i(\mathbf{hr}), \quad (4.46)$$

или с учетом приведенных соотношений

$$\begin{aligned}\chi_{hi} &= -r \sum_{яч} \mu_a^{(h)} \exp 2\pi i(\mathbf{hr}) \exp(-M), \\ \mu_a^{(h)} &= (\mu_a^\perp + \mu_a^\parallel), \quad r = (2\pi K\Omega)^{-1}.\end{aligned}\quad (4.47)$$

Заменяя показательную функцию на тригонометрические и принимая, что температурный фактор включается в величины f и $\mu_a^{(h)}$, выпишем следующие формальные соотношения. Для отражения hkl (j — номер атома в базисе):

$$\begin{aligned}\chi_h &= (\chi_{hr} + i\chi_{hi}) = -\Gamma \left[\sum_{яч} (f_{rj} + if_{ij})(\cos \varphi_j + i \sin \varphi_j) \right], \\ \chi_{hr} &= -\Gamma \sum_{яч} (f_{rj} \cos \varphi_j + if_{rj} \sin \varphi_j), \\ \chi_{hi} &= -\Gamma \sum_{яч} (f_{ij} \cos \varphi_j + if_{ij} \sin \varphi_j) = \\ &= -r \sum_{яч} (\mu_{aj}^{(h)} \cos \varphi_j + i\mu_{aj}^{(h)} \sin \varphi_j).\end{aligned}\quad (4.48)$$

Для отражения $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$:

$$\begin{aligned}\chi_{\bar{h}} &= \chi_{\bar{h}r} + i\chi_{\bar{h}i} = -\Gamma \sum_{яч} (f_{rj} \cos \varphi_j - if_{rj} \sin \varphi_j) - \\ &- ir \sum_{яч} (\mu_{aj}^{(h)} \cos \varphi_j - i\mu_{aj}^{(h)} \sin \varphi_j),\end{aligned}\quad (4.49)$$

$$\begin{aligned}\Gamma &= \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi\Omega}, \\ \varphi_j &= 2\pi(\mathbf{hx}_j + \mathbf{ky}_j + \mathbf{lz}_j).\end{aligned}\quad (4.50)$$

Очевидно, что величины χ_{or} и χ_{oi} , не содержащие фазовых множителей, являются действительными, в то время как χ_{hr} и χ_{hi} — комплексными.

Далее, из выражений (4.48) и (4.49) следует, что

$$\chi_{hr}^* = \chi_{\bar{hr}}, \quad \chi_{hi}^* = \chi_{\bar{hi}}. \quad (4.51)$$

Причем, в отличие от параметров прозрачного кристалла, при отсутствии центра симметрии,

$$\chi_h^* \neq \chi_{\bar{h}}. \quad (4.52)$$

Используемая форма записи комплексных величин χ_{hr} и χ_{hi} сопоставляется с другой формой:

$$\chi_{hr} = |\chi_{hr}| \exp i\eta_h, \quad \chi_{\bar{hr}} = |\chi_{hr}| \exp(-i\eta_h), \quad (4.53)$$

$$\chi_{hi} = |\chi_{hi}| \exp i\omega_h, \quad \chi_{\bar{hi}} = |\chi_{hi}| \exp(-i\omega_h).$$

Сопоставление (4.48), (4.49) и (4.53) позволяет определить фазы η_h и ω_h (опускаем значки j)

$$\cos \eta_h = \frac{-1}{|F_{hr}|} \sum f_r \cos \varphi, \quad \sin \eta_h = \frac{-1}{|F_{hr}|} \sum f_r \sin \varphi, \quad (4.54a)$$

$$\cos \omega_h = \frac{-1}{|F_{hi}|} \sum f_i \cos \varphi = \frac{-1}{|\Sigma \mu_a^{(h)}|} \sum \mu_a^{(h)} \cos \varphi,$$

$$\sin \omega_h = \frac{-1}{|F_{hi}|} \sum f_i \sin \varphi = \frac{-1}{|\Sigma \mu_a^{(h)}|} \sum \mu_a^{(h)} \sin \varphi, \quad (4.54b)$$

$$|F_{hr}| = \sqrt{(\sum f_r \cos \varphi)^2 + (\sum f_r \sin \varphi)^2},$$

$$|\Sigma \mu_a^{(h)}| = \sqrt{(\sum \mu_a^{(h)} \cos \varphi)^2 + (\sum \mu_a^{(h)} \sin \varphi)^2},$$

$$|F_{hi}| = \sqrt{(\sum f_i \cos \varphi)^2 + (\sum f_i \sin \varphi)^2}. \quad (4.54в)$$

Следует обратить внимание на то, что $|F_{hr}|$ и $|F_{hi}|$ — величины безразмерные, $|\Sigma \mu_a^{(h)}|$ согласно (4.54в) имеет размерность μ_a , т. е. $[см^2]$. Введение этой величины диктуется удобством использования таблицы значений μ_a [61].

Рассмотрим теперь значения $\chi_h \chi_{\bar{h}}$ и $|\chi_h / \chi_{\bar{h}}|$, которые войдут в формулы для T и R . Как указано [см. (4.52)], в поглощающих кристаллах χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ не являются комплексно-сопряженными. Используя (4.48)—(4.51), получаем

$$\chi_h \chi_{\bar{h}} = (\chi_{hr} + i\chi_{hi})(\chi_{\bar{hr}} + i\chi_{\bar{hi}}) \equiv (\chi_{hr} + i\chi_{hi})(\chi_{hr}^* + i\chi_{hi}^*).$$

На основании (4.53)

$$\begin{aligned} \chi_h \chi_{\bar{h}} &= |\chi_{hr}|^2 - |\chi_{hi}|^2 + |\chi_{hr}| |\chi_{hi}| \exp[-i\nu_h] + \\ &+ i |\chi_{hr}| |\chi_{hi}| \exp[+i\nu_h] = \Phi_h + i\Psi_h, \end{aligned}$$

$$\Phi_h = |\chi_{hr}|^2 - |\chi_{hi}|^2; \quad \Psi_h = 2 |\chi_{hr}| |\chi_{hi}| \cos \nu_h; \quad \nu_h = \eta_h - \omega_h. \quad (4.55)$$

Далее

$$\left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| = \frac{\sqrt{(\chi_{hr} + i\chi_{hi})(\chi_{hr}^* - i\chi_{hi}^*)}}{\sqrt{(\chi_{\bar{h}r} + i\chi_{\bar{h}i})(\chi_{\bar{h}r}^* - i\chi_{\bar{h}i}^*)}} = \frac{\sqrt{(\chi_{hr} + i\chi_{hi})(\chi_{\bar{h}r} - i\chi_{\bar{h}i})}}{\sqrt{(\chi_{\bar{h}r} + i\chi_{\bar{h}i})(\chi_{hr} - i\chi_{hi})}} \approx 1 + 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h, \quad (4.56a)$$

аналогично

$$\left| \frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \right| \approx 1 - 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h. \quad (4.56b)$$

При выводе (4.56) величины $|\chi_{hi}/\chi_{hr}|^2$ отбрасывались как величины второго порядка малости. Согласно (4.54),

$$\cos \nu_h = \{ |F_{hr}| |\sum \mu_a^{(h)}| \}^{-1} \Delta_1, \quad \Delta_1 = \left| \begin{array}{cc} \sum f_r \cos \varphi & \sum \mu_a^{(h)} \sin \varphi \\ - \sum f_r \sin \varphi & \sum \mu_a^{(h)} \cos \varphi \end{array} \right|, \quad (4.57)$$

$$\sin \nu_h = \{ |F_{hr}| |\sum \mu_a^{(h)}| \}^{-1} \Delta, \quad \Delta = \left| \begin{array}{cc} \sum f_r \sin \varphi & \sum f_r \cos \varphi \\ \sum \mu_a^{(h)} \sin \varphi & \sum \mu_a^{(h)} \cos \varphi \end{array} \right|.$$

Заметим, что величины $\cos \nu_h$ и $\sin \nu_h$ являются безразмерными, как и должно быть. Для centrosимметричных структур η_h и ω_h обращаются в 0 или π , и тогда $\cos \nu_h = \pm 1$ и $\sin \nu_h = 0$.

Используя эти соотношения, преобразуем (4.56) следующим образом:

$$\left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \approx 1 + \left(\lambda \frac{e^2}{mc^2} \right)^{-1} \frac{\Delta}{|F_{hr}|^2}, \quad \left| \frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \right| \approx 1 - \left(\lambda \frac{e^2}{mc^2} \right)^{-1} \frac{\Delta}{|F_{hr}|^2}. \quad (4.58)$$

Таким образом, соотношение между модулями обоих отношений определяется знаком детерминанта или согласно (4.56) знаком $\sin \nu_h$.

Наряду с коэффициентом линейного поглощения μ , относящегося к любому направлению в кристалле, в дальнейшем используется линейный коэффициент поглощения в направлении нормали к входной поверхности:

$$\sigma_0 = - \frac{2\pi K |\chi_{0i}|}{\gamma_0} = \frac{\mu}{\gamma_0} > 0. \quad (4.59)$$

Наконец, для комплексной угловой функции β можно написать

$$\beta = \beta_r + i\beta_i, \quad \beta_r = 2\eta \sin 2\theta + |\chi_{0r}| \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right),$$

$$\beta_i = |\chi_{0i}| \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \right). \quad (4.60)$$

Таблица 3. Значения линейного коэффициента поглощения μ (в см^{-1}) и действительной и мнимой частей нулевого члена Фурье-разложения поляризуемости $|\chi_o| \cdot 10^6$

Элемент	Параметр	Излучение			Элемент	Параметр	Излучение		
		CuK α	MoK α	AgK α			CuK α	MoK α	AgK α
Si	μ	143,0	14,3	11,2	Ge	μ	352,0	290,0	148,8
	χ_{or}	14,862	3,156	1,963		χ_{or}	30,438	6,461	4,024
	χ_{oi}	0,351	0,0162	0,00998		χ_{oi}	0,863	0,328	0,133

В табл. 3, 4 приведены значения $|\chi_{or}|$, $|\chi_{hr}|$, μ , $|\chi_{oi}|$ и $|\chi_{hi}|$ для Si и Ge и трех характеристических излучений AgK α , MoK α и CuK α .

Значения $|\chi_{or}|$ и $|\chi_{hr}|$ в табл. 3, 4 вычислялись по величинам f_r , взятым из [56]. В эти значения были внесены поправки на аномальную дисперсию, вычисленные с помощью таблицы в работе [8], и множитель Дебая — Валлера. Значения дебаевской температуры приняты для Si 543° и для Ge 296°. Значения линейного коэффициента поглощения были определены из таблицы работы [61] для Si и из наших табл. 3, 4 для Ge. При этом для излучений AgK α и MoK α использовались величины $\mu = 148,8 \text{ см}^{-1}$ и $290,0 \text{ см}^{-1}$, а для CuK α — 352 см^{-1} . Из значений μ непосредственно по формуле (4.39) вычислялись χ_{oi} .

Для определения величин $|\chi_{hi}|$, относящихся к Si, и для излучения Cu K α — к Ge, согласно (4.45), вычислялись μ_a^\perp и μ_a^\parallel , причем μ_a^D и μ_a^Q брались из таблицы работы [61]. Далее использовалась формула (4.47) для определения $\mu_a^{(h)}$ и (4.48) — для вычисления $|\chi_{hi}|$.

Определение величин $|\chi_{hi}|$ для Ge в случае излучений AgK α и MoK α этим путем невозможно, так как соответствующие отдельные значения μ_a^D и μ_a^Q , взятые из работы [61], дают в сумме величину, приводящую к $\mu = 174,8$ и 332 см^{-1} , что значительно превышает соответствующие экспериментальные значения 148,8 и 290 см^{-1} . Эти данные приведены в табл. 2. Поэтому, используя указанные величины μ_a^D и μ_a^Q , мы приходим к нелепому результату $|\chi_{oi}| < |\chi_{hi}|$. В качестве приближенных значений $|\chi_{hi}|$ мы приводим в табл. 5 величины, основанные на допущении $\epsilon_0 = \chi_{hi}/\chi_{oi} = 1$. Эти величины вычислялись по формуле (4.48), $\mu_a^{(h)}$ — по (4.47), в (4.45) принималось $\mu_a^\perp \approx \mu_a \approx \mu_a^D$, $\mu_a^\parallel \approx \mu_a \approx \mu_a^D \cos 2\theta$ или

$$\mu_a^{(h)} \approx \mu_a (1 + |\cos 2\theta|)/2.$$

Таблица 4. Значения действительной и мнимой частей коэффициентов Фурье-разложения поляризуемости $|\chi_h| \cdot 10^6$

Элемент	Излучение	Отражение			
		111	220	311	400
$ \chi_{hr} \cdot 10^6$					
Si	CuK α	8,09	9,74	6,29	8,17
	MoK α	1,70	2,04	1,32	1,74
	AgK α	1,06	1,27	0,82	1,06
Ge	CuK α	17,62	21,36	14,22	18,16
	MoK α	3,95	4,84	3,23	4,16
	AgK α	2,45	2,99	2,00	2,57
$ \chi_{hi} \cdot 10^6$					
Si	CuK α	0,245	0,340	0,237	0,327
	MoK α	0,0113	0,0168	0,0110	0,0152
	AgK α	0,00436	0,00608	0,00422	0,00583
Ge	CuK α	0,586	0,810	0,565	0,781

Элемент	Излучение	Отражение			
		331	333	440	444
$ \chi_{hr} \cdot 10^6$					
Si	CuK α	5,56	5,41	6,64	6,22
	MoK α	1,17	1,13	1,39	1,17
	AgK α	0,72	0,70	0,86	0,72
Ge	CuK α	12,11	10,78	14,16	11,61
	MoK α	2,79	2,50	3,31	2,77
	AgK α	1,72	1,54	2,04	1,70
$ \chi_{hi} \cdot 10^6$					
Si	CuK α	0,228	0,222	0,308	0,295
	MoK α	0,0106	0,103	0,0142	0,0134
	AgK α	0,00403	0,00398	0,00550	0,00516
Ge	CuK α	0,545	0,526	0,730	0,684

В заключение заметим, что величины $|\chi_{hi}|$ и $|\chi_{oi}|$, приведенные в табл. 3—5, вполне удовлетворяют условию $|\chi_{hi}| \ll \ll |\chi_{hr}|$ ($h = 0, h$) и относятся лишь к легким и средним элементам и к излучениям, заметно отличающимся по длинам волн от краев поглощения этих элементов.

Таблица 5. Значения мнимой части Фурье-разложения поляризуемости $|\chi_{hi}| \cdot 10^6$ для Ge

Излучение	Отражение							
	111	220	311	400	331	333	440	444
MoK α	0,229	0,317	0,221	0,306	0,214	0,207	0,287	0,268
AgK α	0,033	0,129	0,030	0,124	0,087	0,084	0,116	0,109

4.3. Вывод точных формул для коэффициентов прохождения T и отражения R в случае поглощающего кристалла

Здесь мы рассматриваем случай неразделенных полей, который соответствует падению вакуумной волны с шириной фронта, превышающей толщину кристаллической пластинки. Вывод указанных формул аналогичен тому, который использовался в случае прозрачного кристалла и изложен в 3.3. Однако расчет осложняется ввиду комплексного характера переменных $c^{(i)}$, $\delta^{(i)}$ и W .

Точные формулы для T и R , относящиеся к общему случаю рассеяния в кристалле без центра симметрии и при любом соотношении между модулями $|\chi_{hr}|$ и $|\chi_{hi}|$, были выведены Зелинской-Рогозинской [64]. Наше изложение очень близко к выводу, данному этим автором, однако мы сохранили тот смысл обозначений χ_{hr} и χ_{hi} , который, следуя Лауэ, мы ввели ранее.

Исходим из формулы (3.11) для $c^{(i)}$:

$$c^{(i)} = -\frac{\beta \pm W}{2C(\gamma_h/\gamma_0)\chi_{\bar{h}}}, \quad (4.61)$$

$$\beta \pm W = (\beta_r \pm W_r) + i(\beta_i \pm W_i), \quad (4.62)$$

где W определяется по (3.58). Умножая числитель и знаменатель дроби на $\chi_{\bar{h}}^*$, получим

$$c^{(i)} = -\frac{(\chi_{\bar{h}r} - i\chi_{\bar{h}i})[(\beta_r \pm W_r) + i(\beta_i \pm W_i)]}{2C(\gamma_h/\gamma_0)|\chi_{\bar{h}}|^2}, \quad i = 1, 2 \quad (4.63)$$

Заменяя знаменатель в правой части (4.63) буквой p , выпишем в явной форме значения четырех величин $c_r^{(i)}$ и $c_i^{(i)}$

$$\begin{aligned} c_r^{(1)} &= -p^{-1}[\chi_{\bar{h}r}(\beta_r + W_r) + \chi_{\bar{h}i}(\beta_i + W_i)], \\ c_i^{(1)} &= -p^{-1}[\chi_{\bar{h}r}(\beta_i + W_i) - \chi_{\bar{h}i}(\beta_r + W_r)], \\ c_r^{(2)} &= -p^{-1}[\chi_{\bar{h}r}(\beta_r - W_r) + \chi_{\bar{h}i}(\beta_i - W_i)], \\ c_i^{(2)} &= -p^{-1}[\chi_{\bar{h}r}(\beta_i - W_i) - \chi_{\bar{h}i}(\beta_r - W_r)]. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Точные выражения для величин W_r и W_i можно получить, применяя правило извлечения корня из комплексного числа:

$$W_r = \left\{ \frac{1}{2} [V \overline{a^2 + b^2} + a] \right\}^{\frac{1}{2}} > 0, \quad W_i = \left\{ \frac{1}{2} [V \overline{a^2 + b^2} - a] \right\}^{\frac{1}{2}} > 0, \quad (4.65)$$

$$a = \beta_r^2 - \beta_i^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h, \quad b = 2\beta_r \beta_i + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Psi_h. \quad (4.66)$$

Приведем явные выражения для величин $(\delta^{(1)} + \delta^{(2)})$ и $(\delta^{(1)} - \delta^{(2)})$, являющихся теперь комплексными. Из уравнений (3.10) следует

$$\frac{1}{\gamma_0} \xi_0^{(i)} = - \frac{K}{4\gamma_h} [(\beta_r \pm W_r) + i(\beta_i \pm W_i)], \quad (4.67)$$

и тогда [см. (3.7)]

$$\delta_r^{(i)} = \left(\frac{\beta_r}{4\gamma_h} - \frac{\chi_{0r}}{2\gamma_0} \right) \pm \frac{1}{4\gamma_h} W_r, \quad \delta_i^{(i)} = \left(\frac{\beta_i}{4\gamma_h} - \frac{\chi_{0i}}{2\gamma_0} \right) \pm \frac{1}{4\gamma_h} W_i. \quad (4.68)$$

Подставим эти величины в суммы и разности $\delta^{(i)}$:

$$\begin{aligned} \delta^{(1)} + \delta^{(2)} &= (\delta_r^{(1)} + \delta_r^{(2)}) + i(\delta_i^{(1)} + \delta_i^{(2)}), \\ \delta^{(1)} - \delta^{(2)} &= (\delta_r^{(1)} - \delta_r^{(2)}) + i(\delta_i^{(1)} - \delta_i^{(2)}). \end{aligned} \quad (4.69)$$

Получим для действительных и мнимых составляющих

$$\delta_r^{(1)} + \delta_r^{(2)} = \frac{\beta_r}{2\gamma_h} - \frac{\chi_{0r}}{\gamma_0}, \quad \delta_i^{(1)} + \delta_i^{(2)} = \frac{\beta_i}{2\gamma_h} - \frac{\chi_{0i}}{\gamma_0} = - \frac{\chi_{0i}}{2} \left(\frac{1}{\gamma_h} + \frac{1}{\gamma_0} \right), \quad (4.70)$$

$$\delta_r^{(1)} - \delta_r^{(2)} = \frac{W_r}{2\gamma_h}, \quad \delta_i^{(1)} - \delta_i^{(2)} = \frac{W_i}{2\gamma_h}. \quad (4.71)$$

Необходимо также учесть, что

$$\begin{aligned} i\pi Kt [(\delta_r^{(1)} + \delta_r^{(2)}) + i(\delta_i^{(1)} + \delta_i^{(2)})] &= \pi Kt \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \frac{\chi_{0i}}{2} + \\ &+ i\pi Kt \left(\frac{\beta_r}{2\gamma_h} - \frac{\chi_{0r}}{\gamma_0} \right), \end{aligned} \quad (4.72)$$

$$i\pi Kt [(\delta_r^{(1)} - \delta_r^{(2)}) + i(\delta_i^{(1)} - \delta_i^{(2)})] = - \pi Kt \frac{W_i}{2\gamma_h} + i\pi Kt \frac{W_r}{2\gamma_h}. \quad (4.73)$$

Повторяя теперь вывод, изложенный в 3.3, перепишем формулы (3.53) и (3.54) для волновых функций преломленной и диффра-

гированной волн применительно к кристаллу с поглощением

$$\begin{aligned}
 D_0^{(d)} = & D_0^{(a)} \frac{1}{(c_r^{(2)} - c_r^{(1)}) + i(c_i^{(2)} - c_i^{(1)})} \cdot \exp \left[\pi K t \frac{\chi_{0i}}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right] \times \\
 & \times \exp \left[i\pi K t \left(\frac{\beta_r}{2\gamma_h} - \frac{\chi_{0r}}{\gamma_0} \right) \right] \left\{ (c_r^{(2)} + ic_i^{(2)}) \exp \left[-\pi K t \frac{W_i}{2\gamma_h} \right] \times \right. \\
 & \times \exp \left[i\pi K t \frac{W_r}{2\gamma_h} \right] - (c_r^{(1)} + ic_i^{(1)}) \exp \left[\pi K t \frac{W_i}{2\gamma_h} \right] \times \\
 & \left. \times \exp \left[-i\pi K t \frac{W_r}{2\gamma_h} \right] \right\}, \quad (4.74)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_h^{(d)} = & D_0^{(a)} \frac{(c_r^{(1)} + ic_i^{(1)})(c_r^{(2)} + ic_i^{(2)})}{(c_r^{(2)} - c_r^{(1)}) + i(c_i^{(2)} - c_i^{(1)})} \cdot \exp \left[\pi K t \frac{\chi_{0i}}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \right] \times \\
 & \times \exp \left[i\pi K t \left(\frac{\beta_r}{2\gamma_h} - \frac{\chi_{0r}}{\gamma_0} \right) \right] \left\{ \exp \left[-\pi K t \frac{W_i}{2\gamma_h} \right] \times \right. \\
 & \left. \times \exp \left[i\pi K t \frac{W_r}{2\gamma_h} \right] - \exp \left[\pi K t \frac{W_i}{2\gamma_h} \right] \exp \left[-i\pi K t \frac{W_r}{2\gamma_h} \right] \right\}. \quad (4.75)
 \end{aligned}$$

Переходя к величинам T и R , умножаем приведенные уравнения на сопряженные комплексные величины. При этом используем соотношение (4.43) и в интерференционных членах используем тригонометрические функции.

Точные формулы для T и R имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 T = \left| \frac{D_0^{(d)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 = & \frac{\exp \left[-(\mu/2) (\gamma_0^{-1} + \gamma_h^{-1}) t \right]}{|c_r^{(1)} - c_r^{(2)}|^2 + |c_i^{(1)} - c_i^{(2)}|^2} \left\{ |c^{(2)}|^2 \exp \left[-\pi K t \frac{W_i}{\gamma_h} \right] + \right. \\
 & + |c^{(1)}|^2 \exp \left[\pi K t \frac{W_i}{\gamma_h} \right] + 2(c_r^{(1)}c_r^{(2)*} + c_i^{(1)}c_i^{(2)*}) \cos \left[\pi K t \frac{W_r}{\gamma_h} \right] + \\
 & \left. + 2(c_i^{(1)*}c_r^{(2)} - c_r^{(1)}c_i^{(2)*}) \sin \left[\pi K t \frac{W_r}{\gamma_h} \right] \right\}, \quad (4.76)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R = & \frac{|c^{(1)}|^2 |c^{(2)}|^2}{|c_r^{(1)} - c_r^{(2)}|^2 + |c_i^{(1)} - c_i^{(2)}|^2} \exp \left[-\frac{\mu}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) t \right] \times \\
 & \times \left\{ \exp \left[-\pi K t \frac{W_i}{\gamma_h} \right] + \exp \left[\pi K t \frac{W_i}{\gamma_h} \right] - 2 \cos \left[\pi K t \frac{W_r}{\gamma_h} \right] \right\}. \quad (4.77)
 \end{aligned}$$

Несмотря на достаточно сложный характер этих выражений и трудность их качественного анализа, все же они ясно показывают одну замечательную черту явления прохождения рентгеновских лучей через совершенный поглощающий кристалл, а именно — эффект Бормана.

Действительно, рассматривая эти формулы, можно заметить, что члены в фигурных скобках описывают последовательно волны, принадлежащие первому и второму полям и их интерференции. Поглощение представлено общим множителем, стоящим перед

скобками, и дополнительными множителями, относящимися к каждому из двух полей. При этом дополнительный множитель при первом члене в скобках, относящийся к первому полю, имеет знак показателя степени, совпадающий со знаком показателя общего множителя перед скобкой, в то время как дополнительный множитель при втором члене имеет обратный знак. Следовательно, если относить общий множитель к «среднему арифметическому» между поглощением проходящей и дифрагированной волн в кристалле,

$$-\sigma_m = -\left(\frac{\mu}{2}\right)(\gamma_0^{-1} + \gamma_h^{-1}), \quad (4.78)$$

то при падении вакуумной волны в области максимума возникает дополнительное или «интерференционное» поглощение:

$$\mp \pi K t \frac{\dot{W}_i}{\gamma_h}. \quad (4.79)$$

Его характерной чертой является различие в знаке, что приводит к усилению поглощения одного поля и существенному ослаблению поглощения другого поля. Другими словами, при рассеянии рентгеновских лучей в поглощающем кристалле возникает аномальное поглощение одного поля и аномальное прохождение рентгеновских лучей другого поля. При достаточной толщине t кристаллической пластинки проходящая и дифрагированная волны в вакууме будут формироваться только за счет одного из полей в кристалле.

4.4. Вывод приближенных формул для коэффициентов прохождения T и отражения R

В настоящее время основным материалом, на котором ведется количественное экспериментальное исследование динамического рассеяния рентгеновских лучей, являются монокристаллы Si, GaAs, кварца, кальцита, Ge, Cu. Эти монокристаллы состоят из атомов легких и средних элементов периодической системы. Можно полагать, что при рассеянии в таких кристаллах излучения с длиной волны λ , не очень близкой к краю поглощения на K - или L -оболочках рассеивающих атомов, выполняются условия

$$|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|, \quad |\chi_{0i}| \ll |\chi_{0r}|, \quad |\Psi_h| \ll |\Phi_h|. \quad (4.80)$$

Кроме того, взаимодействие падающего рентгеновского излучения с атомами в таких кристаллах (сравнительно с рассеянием на атомах тяжелых элементов) лучше удовлетворяет приближенным методам расчета параметров поглощения, изложенным в 4.1. Как было показано Захариасеном [15] и Лауэ [12], использование этих условий и пренебрежение квадратами мнимых составляющих при наличии квадратов действительных компонентов χ_{0r} и χ_{hr}

позволяет вывести более простые формулы для T и R . Такие формулы удобны для проведения детального качественного анализа явления и фактически с успехом используются для достаточно точного количественного сопоставления с экспериментом. Вывод приближенных формул может быть сделан путем простых преобразований.

Будем пользоваться в качестве угловых переменных величинами y и v , которые здесь должны рассматриваться как комплексные функции. На основе уравнений (3.13), (4.60) и условий (4.80) можно написать для y

$$y = y_r + iy_i = \frac{\beta_r + i\beta_i}{2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} (\Phi_h + i\Psi_h) \right]^{1/2}} \approx \frac{\beta_r + i\beta_i}{2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right]^{1/2}} \left[1 - i \frac{\Psi_h}{2\Phi_h} \right], \quad (4.81)$$

$$y_r \approx \frac{\beta_r}{2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right]^{1/2}}, \quad y_i \approx \frac{\beta_i - (\beta_r \Psi_h / 2\Phi_h)}{2C \left[\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right]^{1/2}}.$$

Значение мнимой части угловой переменной v_i получаем при помощи тождества

$$\operatorname{sh} v = \operatorname{sh} v_r \cos v_i + i \operatorname{ch} v_r \sin v_i. \quad (4.82)$$

На основе приближения

$$\cos v_i \approx 1, \quad \sin v_i \approx v_i \quad (4.83)$$

можно написать

$$(\operatorname{sh} v)_r \approx \operatorname{sh} v_r, \quad v_i \approx \sin v_i = \frac{(\operatorname{sh} v)_i}{\operatorname{ch} v_r}. \quad (4.84)$$

Откуда, используя (4.81) и (3.13), получим

$$\begin{aligned} v_i &\approx \frac{y_i}{(1 + y_r^2)^{1/2}} = \frac{\beta_i - (\beta_r \Psi_h / 2\Phi_h)}{2C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right)^{1/2} (1 + y_r^2)^{1/2}} = \\ &= \left(\frac{\beta_i}{2C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right)^{1/2}} - \frac{y_r \Psi_h}{2\Phi_h} \right) \frac{1}{(1 + y_r^2)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Для величин W_r и W_i используются приближенные значения, которые получаются из точных следующим простым преобразованием. Пренебрегая в (4.66) величиной β_i^2 по сравнению с β_r^2 [см. (4.60)], получим для W_r

$$W_r \approx W'_r = \sqrt{\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h}. \quad (4.86)$$

Приближенное выражение для \bar{W}_i можно получить, умножив и разделив второе уравнение (4.65) на W_r и заменив в знаменателе W_r на W'_r :

$$W_i \approx W'_i = \frac{b}{2W'_r} = \frac{\beta_r \beta_i + 2C^2 (\gamma_h / \gamma_0) \Psi_h}{\sqrt{\beta_r^2 + 4C^2 (\gamma_h / \gamma_0) \Phi_h}}. \quad (4.87)$$

Вывод приближенных выражений для T и R можно выполнить, используя метод, изложенный в 3.3, как это было сделано выше для точных значений указанных коэффициентов, но с привлечением приближенных значений функций, входящих в эти выражения.

Для величин $c^{(i)}$ используем сначала (3.15) в следующей форме:

$$c^{(i)} = \mp \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp[\pm (v_r + iv_i)],$$

$$c^{(i)*} = \mp \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp[\pm (v_r - iv_i)]. \quad (4.88)$$

Квадраты модулей величин $(c^{(2)} - c^{(1)})$ и $c^{(2)}c^{(1)}$ могут быть записаны в форме [см. (4.83)]

$$|c^{(2)} - c^{(1)}|^2 = \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \{ \exp[2v_r] + \exp[-2v_r] + 2 \cos 2v_i \} \approx$$

$$\approx \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \frac{|\chi_h|}{|\chi_{\bar{h}}|} 4 \operatorname{ch}^2 v_r, \quad (4.89)$$

$$|c^{(1)}c^{(2)}|^2 = \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_h} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \right)^2. \quad (4.90)$$

Далее, экспоненты $\pi i K t (\delta^{(1)} + \delta^{(2)})$ и $\pi i K t (\delta^{(1)} - \delta^{(2)})$ преобразуются согласно (4.72) и (4.73). Первые члены в правой стороне этих выражений при умножении на комплексно-сопряженные величины войдут в экспоненты множителей поглощения (с заменой W_r и W_i на W'_r и W'_i). Второй член справа в (4.72) сокращается, так же как и второй член справа в (4.73), при величинах $|c^{(i)}|^2$. Что касается членов $c^{(1)}c^{(2)*}$ и $c^{(2)}c^{(1)*}$, то здесь мы получим

$$c^{(1)}c^{(2)*} \exp \left[i \pi K t \frac{W'_r}{2\gamma_h} \right] + c^{(1)*}c^{(2)} \exp \left[-i \pi K t \frac{W'_r}{2\gamma_h} \right] =$$

$$= -2 \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \cos \left[\pi K t \frac{W'_r}{\gamma_h} - 2v_i \right]. \quad (4.91)$$

Согласно (4.55) и (4.80), напомним

$$\Phi_h \approx |\chi_{hr}|^2, \quad \Psi_h = 2 |\chi_{hr}| |\chi_{hi}| \cos v_h. \quad (4.92)$$

И в таком случае на основании приведенных выше соотношений

$$\begin{aligned} \pi K \frac{W'_i}{\gamma_n} &= \pi K \chi_{0i} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \frac{\beta_r}{\left(\beta_r^2 + 4C^2 \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \bar{\Phi}_h \right)^{1/2}} + \\ &+ \frac{2\pi KC |\chi_{hi}| \cos v_h}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} (1 + y_r)^{1/2}} = \sigma'_h + \sigma_h. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Таким образом, помимо среднего коэффициента поглощения σ_m , значение которого дано в (4.78), при отражении возникают два дополнительных коэффициента

$$\sigma'_h = -\frac{\mu}{2} (\gamma_0^{-1} - \gamma_h^{-1}) \operatorname{th} v_r, \quad \sigma_h = \frac{2\pi KC |\chi_{hi}| \cos v_h}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} \operatorname{ch} v_r}. \quad (4.94)$$

Наконец,

$$\pi K t \frac{W'_r}{\gamma_h} = \frac{2\pi KC t |\chi_{hr}|}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} \operatorname{ch} v_r = 2A \operatorname{ch} v_r = 2a. \quad (4.95)$$

Здесь величина A имеет то же значение (3.66), что и для прозрачного кристалла ($|\chi_{hr}| \equiv |\chi_h|$).

Итак, точные формулы (4.76) и (4.77) для R и T преобразуются в приближенные формулы Лауэ, имеющие следующий вид (сохраняем прежние обозначения для T и R):

$$T(v) = \frac{\exp[-\sigma_m t]}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} \{ \operatorname{ch} [2v_r + (\sigma_h + \sigma'_h) t] + \cos [2a - 2v_i] \}. \quad (4.96a)$$

В отличие от T коэффициент отражения R в общем случае кристалла без центра симметрии будет различным для отражений hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$. Заменяя величины $|\chi_h|$ / $|\chi_{\bar{h}}|$ и $|\chi_{\bar{h}}|$ / $|\chi_h|$ их значениями согласно (4.56) или (4.58), получим для двух коэффициентов отражения

$$R_{\pm h}(v) = \frac{\exp[-\sigma_m t]}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} \{ \operatorname{ch} [(\sigma_h + \sigma'_h) t] - \cos 2a \} \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h \right). \quad (4.96b)$$

Другая форма записи выражений для T и R , в функции от угловой переменной y , имеет вид

$$\begin{aligned} T(y) &= \frac{\exp[-\sigma_m t]}{4(1 - y_r^2)} \left\{ (y_r - \sqrt{1 + y_r^2})^2 \exp[-(\sigma_h + \sigma'_h) t] + \right. \\ &\left. + (y_r + \sqrt{1 + y_r^2})^2 \exp[(\sigma_h + \sigma'_h) t] + 2 \cos \left(2a - \frac{2y_i}{\sqrt{1 + y_r^2}} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.97a)$$

$$R_{\pm h}(y) = \frac{\exp[-\sigma_m t]}{2(1 + y_r^2)} \{ \operatorname{ch} [(\sigma_h + \sigma'_h) t] - \cos 2a \} \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h \right). \quad (4.97b)$$

Приведем также выражения для T и R (в наших обозначениях), данные Захариасеном в его книге [15]. Эти выражения легко получить с помощью простейших преобразований из (4.97):

$$T(y) = \exp[-\sigma_m t] \left\{ 1 - \frac{1}{1+y_r^2} \sin^2 \alpha + \frac{1+2y_r^2}{1+y_r^2} \times \right. \\ \left. \times \operatorname{sh}^2 \left[(\sigma_h + \sigma'_h) \frac{t}{2} \right] + \frac{y_r}{\sqrt{1+y_r^2}} \operatorname{sh} [(\sigma_h + \sigma'_h) t] \right\}, \quad (4.98a)$$

$$R(y) = \frac{\exp[-\sigma_m t]}{1+y_r^2} \left\{ \sin^2 \alpha + \operatorname{sh}^2 \left[(\sigma_h + \sigma'_h) \frac{t}{2} \right] \right\} \times \\ \times \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h \right). \quad (4.98b)$$

Если в формулах Лауэ типа (4.96a) или (4.97a) в фигурных скобках выписываются последовательно члены, относящиеся к первому и второму полям, и интерференции между ними, то в формулах Захариасена выписываются сначала члены, относящиеся к прозрачному кристаллу, а затем к поглощающему. Заметим, что в (4.98a) не учитывается дополнительная фаза $2v_i \equiv \frac{2y_i}{(1+y_r^2)^{1/2}}$.

Очевидно, что в формулах Лауэ более отчетливо, в явной форме, обнаруживается «эффект Бормана».

4.5. Анализ приближенных формул для коэффициентов прохождения T и отражения R

Выражения (4.96) и (4.97), так же как и (4.76) и (4.77), ясно показывают наличие интерференционного поглощения, различного для обоих полей. Полная величина коэффициента поглощения в направлении нормали к входной грани составляет

$$\sigma = \sigma_m \pm (\sigma_h + \sigma'_h). \quad (4.99)$$

Она будет одинакова как для преломленной, так и для диффрактированной волн, так как согласно (4.35) и (4.38) определяется мнимой частью волнового вектора $k_{oi}^{(i)}$.

Вместе с тем соотношение коэффициентов T и R существенно определяется условиями эксперимента. Наиболее важными являются значение произведения $\sigma_m t$ (для симметричного отражения μt), условия $\varphi = \pi/2$ (симметричное отражение) или $\varphi \neq \pi/2$ (асимметричное отражение), и, наконец, наличие или отсутствие центра симметрии в рассеивающем кристалле. Следует также иметь в виду замечания, сделанные в 4.1, о неприменимости изложенной теории к рассеянию кристаллами, состоящими из атомов тяжелых элементов, и к излучению с длиной волны, близкой к краю поглощения. Обращаясь к формуле (4.99), отметим, что собствен-

но интерференционное поглощение, зависящее от χ_{hi} , представлено величиной σ_h , обладающей максимумом при $y_r = 0$. Что касается σ'_h , то эта величина согласно (4.94) определяется подобно σ_m линейным коэффициентом поглощения μ и при этом зависит от различия между углами падения ψ_0 и отражения ψ_h , обращаясь в нуль при симметричном отражении.

Наличие осциллирующих членов в формулах для T и R означает, что при небольших значениях произведения $\sigma_m t$ (до ~ 2) в поглощающих кристаллах, так же как и в прозрачных, наблюдаются побочные максимумы маятникового решения. При этом наличие дополнительной фазы $2v_i$ в косинусном члене формулы для T приводит к некоторым особенностям рассеяния в поглощающем кристалле. Во-первых, побочные максимумы T несколько смещаются относительно таковых на R -кривой, в результате чего нарушается строгая дополнительность обеих кривых, характерная для рассеяния в прозрачном кристалле. Во-вторых, так как v_i зависит от y_r в первой степени, кривая T , содержащая побочные максимумы, приобретает небольшую дополнительную асимметрию относительно средней точки.

С переходом к бóльшим значениям резко возрастает аномальное поглощение одного из полей, в результате чего ослабляются и затем совсем исчезают побочные максимумы. Это определяется возросшим «собственным» поглощением интерференционной части (косинусного члена).

Очевидно, эффект поглощения влияет также на периодические изменения амплитуд преломленной и дифрагированной волн с глубиной. Напомним физическую модель, с помощью которой в гл. 3 было дано объяснение интерференционных эффектов маятникового решения. Интерференция между преломленными волнами обоих полей в кристалле приводит к периодическому изменению амплитуды суммарной волны с глубиной. Такая же интерференция имеет место для дифрагированных волн обоих полей. При этом, хотя период изменений амплитуды с глубиной в обоих случаях одинаков, так как определяется величиной вектора Δk , относительные положения плоскостей максимумов и минимумов смещены на половину экстинкционной глубины $\tau = |\Delta k|^{-1}$. В результате возникает эффект перекачки энергии от преломленной волны к дифрагированной и обратно.

С другой стороны, совокупность обеих волн в каждом из двух полей также образует модулированную амплитуду, но с периодом модуляции порядка межатомных расстояний, т. е. примерно в 10^4 раз меньшим экстинкционной глубины. В прозрачном кристалле эта модуляция не проявляет себя. Так как в первом поле максимумы лежат на атомных плоскостях, его поглощение быстро растет с глубиной или толщиной кристаллической пластинки. При этом в первом члене в формулах (4.96) и (4.97) для R и T появляется множитель аномального поглощения $\exp[-(\sigma_m + \sigma_h + \sigma')t]$, в то время как в интерференционном члене вслед-

ствие взаимной компенсации дополнительного интерференционного поглощения обоих полей остается множитель нормального поглощения $\exp(-\sigma_m t)$. Таким образом, для оценки возможности сохранения в поглощающем кристалле эффекта периодического обмена энергий между преломленной и дифрагированной волнами с глубиной можно сопоставить глубину экстинкции с относительным ослаблением энергии поля, представленной вторым и третьим членами в указанных формулах, вследствие поглощения. Для определенных частных случаев это сопоставление сделано в табл. 6.

Таблица 6. Значения множителей поглощения при симметричной съемке кристаллов Ge в CuK_α -излучении ($C = 1$, $y_r = 0$, $\mu = 352 \text{ см}^{-1}$)

Слагающие	μt					
	0,25	0,5	1,0	6,0	10,0	20,0
Отражение 220, $\tau_j = 6,75 \cdot 10^{-4} \text{ см}$						
Первое поле	0,614	0,376	0,144	$8 \cdot 10^{-6}$	$3,1 \cdot 10^{-9}$	0,450
Второе поле	0,992	0,981	0,962	0,786	0,670	
Отражение 333, $\tau_0 = 13,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}$						
Первое поле	0,670	0,450	0,202	$67 \cdot 10^{-3}$	$11 \cdot 10^{-8}$	$4,1 \cdot 10^{-4}$
Второе поле	0,910	0,824	0,678	0,037	0,0204	
Интерференционная часть	0,782	0,607	0,368	0,0025	$45,5 \cdot 10^{-6}$	

Перейдем к более детальному анализу формул для R и T . *Симметричное отражение* [63, 65, 66, 69, 70]. В случае симметричного отражения параметры рассеяния принимают следующие частные значения. Дополнительный индекс означает принадлежность данного параметра к симметричному случаю:

$$\gamma_{0s} = \gamma_{hs} = \cos \vartheta, \quad \beta_{rs} = 2\eta \sin 2\vartheta, \quad \beta_{is} = 0, \quad \sigma'_{hs} = 0,$$

$$\sigma_{ms} = \frac{\mu}{\cos \vartheta} = \sigma_0, \quad (4.100)$$

$$\sigma_{hs} = \frac{2\pi KC |\chi_{hi}|}{\cos \vartheta} \frac{\cos v_h}{(1 + y_{rs}^2)^{1/2}}, \quad y_{rs} = \frac{\eta \sin 2\vartheta}{C |\chi_{hr}|}, \quad (4.101)$$

$$y_{is} = -y_{rs} \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \cos v_h, \quad v_{is} = -\frac{y_{is}}{(1 + y_{rs}^2)^{1/2}}, \quad (4.102)$$

$$\alpha_s = A_s \sqrt{1 + y_{rs}^2}, \quad A_s = A. \quad (4.103)$$

Выпишем выражения для коэффициентов прохождения и отражения:

$$T_s = \frac{1}{4(1+y_{rs}^2)} \left\{ (y_{rs} - \sqrt{1+y_{rs}^2})^2 \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \left(1 + \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1+y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right] + \right. \\ \left. + (y_{rs} + \sqrt{1+y_{rs}^2})^2 \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \left(1 - \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1+y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right] + \right. \\ \left. + 2 \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \right] \cos(2\alpha_s - 2v_{is}) \right\}, \quad (4.104)$$

$$R_s = \frac{1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h}{4(1+y_{rs}^2)} \left\{ \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \left(1 + \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1+y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right] + \right. \\ \left. + \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \left(1 - \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1+y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right] - 2 \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \right] \cos 2\alpha_s \right\}. \quad (4.105)$$

Проследим теперь за изменением формы кривых T_s и R_s с возрастанием произведения μt . Возрастание μt может быть связано либо с увеличением толщины кристаллической пластинки при фиксированном значении μ для используемого излучения, либо с переходом к другим, более мягким излучениям, поглощение которых в данном кристалле возрастает и происходит на других электронных оболочках атома. Как показывает эксперимент (см. гл. 9), оба случая обнаруживают далеко идущее сходство.

Следует также иметь в виду, что сам по себе параметр μt не является достаточно универсальным. Как следует из формул (4.96), (4.97), (4.104) и (4.105), произведение μt непосредственно определяет множитель поглощения лишь для интерференционного члена. Что же касается относительных значений множителей поглощения, то здесь удобно сопоставление следующих величин:

$$-\mu t(1+\varepsilon), \quad -\mu t(1-\varepsilon), \quad -\mu t, \quad \varepsilon = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right|. \quad (4.106)$$

Величина ε может существенно меняться при переходе от первых отражений к последующим как из-за уменьшения температурного фактора $\exp(-M)$, так и главным образом в соответствии с изменением геометрического структурного множителя. Типичным примером может служить рассеяние $\text{CuK}\alpha$ излучения на Ge: $\varepsilon_{220} = 0,96$ и $\varepsilon_{333} = 0,61$. Соответствующие значения множителей поглощения приведены в табл. 6.

Изменение формы кривых \bar{T} и \bar{R} представлено на рис. 22 и 23 [12, 17]. Кривые при малых значениях μt соответствуют значениям \bar{R} и \bar{T} без косинусного члена; N — интенсивность пучка, прошедшего через пластинку данной толщины за пределами максимума.

Что касается кривой прохождения, то при малых $\mu t \approx 0,1-0,2$ она обнаруживает характерный минимум, слегка смещенный от нулевой точки. Далее, с возрастанием μt асимметрия кривой T становится значительной, кривая «деформируется» и постепенно образует максимум.

Эти изменения легко объясняются с помощью качественного анализа формулы (4.104). Асимметрия кривой объясняется различием множителей поглощения для первого и второго полей, представленных соответственно первым и вторым слагаемыми в фигурных скобках. Можно сказать, что начальная кривая при малых μt характеризует аномальное поглощение по сравнению с «фоном» или значением $\mu t / \cos \theta$, действующим за пределами максимума и

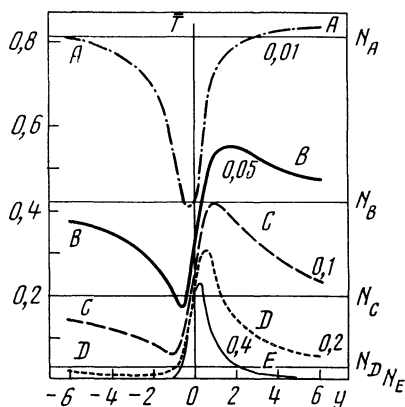
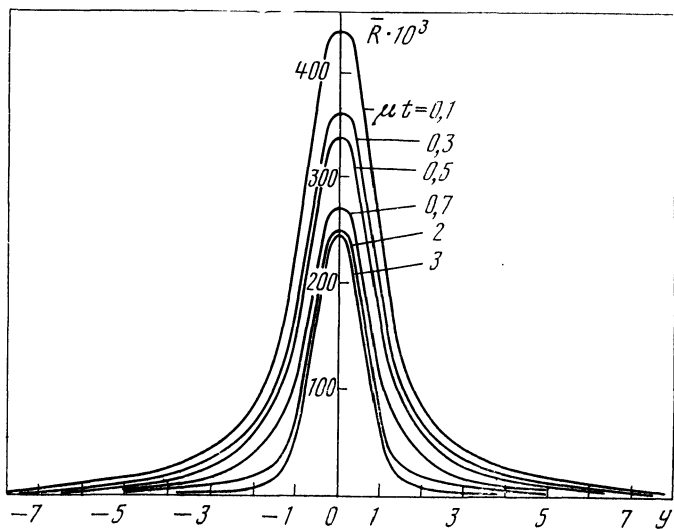


Рис. 22. Максимумы прохождения \bar{T} для поглощающего кристалла при симметричной съемке для ряда возрастающих значений t ($\text{CuK}\alpha$, 200, NaCl , $\mu = 160 \text{ см}^{-1}$)

Рис. 23. Максимумы отражения \bar{R} для поглощающего кристалла при симметричной съемке для ряда возрастающих значений t ($\text{MoK}\alpha$, 220, Si , $\mu = 13,4 \text{ см}^{-1}$)



обозначенным на рис. 22 прямыми N . Это аномальное поглощение несколько сильнее для первого поля, которое эффективно при $y_{rs} < 0$. При возрастающих μt более отчетливо выражается аномальное прохождение, имеющее место только для второго поля, т. е. справа от оси $y = 0$.

Кривые T при средних значениях μt описывают суперпозицию функций $\frac{[y_{rs} - (1 + y_{rs}^2)^{1/2}]^2}{4(1 + y_{rs}^2)}$ слева и $\frac{[y_{rs} + (1 + y_{rs}^2)^{1/2}]^2}{4(1 + y_{rs}^2)}$ справа, медленно меняющихся с изменением $|y_{rs}|$, и множителя поглощения второго поля.

В отличие от кривых прохождения кривые отражения (рис. 23) во всем интервале значений μt сохраняют симметричные форму и положение относительно оси $y_{rs} = 0$. Это объясняется тем, что функции $D_h^{(1)}$ и $D_h^{(2)}$ симметричны относительно этой оси.

Рассмотрим область приближения толстого кристалла при симметричном отражении. Как показывает табл. 6, при значениях $\mu t \approx 5 \div 6$ и более, первое поле, а также интерференционная часть настолько ослабевают, что величина и форма кривых T и R определяется практически лишь вторым полем. Здесь мы вступаем в область приближения толстого кристалла.

Формулы для T и R записываются в виде

$$T_s^e \approx \frac{(y_{rs} + \sqrt{1 + y_{rs}^2})^2}{4(1 + y_{rs}^2)} \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \left(1 - \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1 + y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right], \quad (4.107)$$

$$R_s^e \approx \frac{1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h}{4(1 + y_{rs}^2)} \exp \left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} \left(1 - \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1 + y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right]. \quad (4.108)$$

Рассмотрение траектории вектора плотности потока энергии, проведенное в гл. 5, показывает, что в толстом поглощающем кристалле происходит сужение волнового поля по мере проникновения вглубь.

При симметричном отражении энергия волнового поля распространяется вдоль отражающей плоскости, поэтому некоторые авторы используют выражения для R_s^e и T_s^e типа (4.108) и (4.107) без $\cos \vartheta$ в показателе степени множителя поглощения. Отмеченная выше суперпозиция функций для T_s^e все в большей степени, с возрастанием μt сводится к преобладанию экспоненциальной функции

$$\exp \left[-\mu t \left(1 - \frac{C\varepsilon \cos v_h}{(1 + y_{rs}^2)^{1/2}} \right) \right]. \quad (4.109)$$

Как показывает нижняя кривая T_s на рис. 22, соответствующая $\mu t = 6,4$, максимум определяется функцией (4.109). С дальнейшим возрастанием μt максимум T , уменьшаясь и смещаясь ближе к

нулевой оси, при значениях $\mu t \approx 40 \div 60$ по положению и форме совпадает с максимумом R . Характерным параметром для переходной области и в особенности для области приближения толстого кристалла является величина смещения точки T_{\max} относительно оси $y_r = 0$. Эта величина определяется из кубического уравнения

$$\frac{\partial T}{\partial y_{rs}} = y_{rs}^3 - \alpha y_{rs}^2 + y_{rs} - p^{-1} = 0, \quad \alpha = \frac{4 + p^2}{4p}, \quad p = \mu t \varepsilon. \quad (4.110)$$

Уравнение (4.110) решается точно. На рис. 24 приведены значения

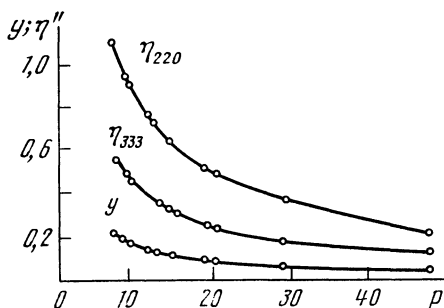


Рис. 24. Смещения максимумов T на шкале y и в угловых секундах в функции от p для отражений 220 и 311 $\text{CuK}\alpha$ -излучения от Ge

смещения y_{rs} , а также смещения точки T_{\max} в угловых секундах η'' для частных случаев отражений 220 и 311 $\text{CuK}\alpha$ -излучения от Ge , при возрастающих значениях $\mu t \varepsilon$.

Другим важным параметром кривых T_s^e и R_s^e является их полуширина, которая при рассеянии в достаточно толстых кристаллах примерно одинакова. Значение полуширины $2y_{1/2}$ или $w = 2\eta_{1/2}$ может быть определено из уравнения

$$\mu t \varepsilon \log e \left(1 - \frac{1}{(1 + y_{rs}^2)^{1/2}} \right) = \log \frac{2}{(1 + y_{rs}^2)}, \quad (4.111)$$

которое решается методом последовательных приближений. Так как (4.111) основано на учете только одного поля, значения $y_{1/2}$ для $\mu t < 6$ являются оценочными (табл. 7).

Величина коэффициента поглощения в формулах (4.107), (4.108) в простейшем случае кристалла с центром симметрии и σ -поляризации имеет минимальную величину

$$\sigma_{\min} = \frac{\mu}{\cos \vartheta} (1 - \varepsilon) = \frac{\mu}{\cos \vartheta} \left(1 - \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right).$$

Сравнивая ряд отражений с возрастающим $\sin \vartheta / \lambda$ для данного кристалла, данного излучения и $h + k + l = \text{const}$, мы, очевидно, получим (качественное) подобие для отношений χ_{hi} / χ_{oi} и χ_{hr} / χ_{or} . В первом случае спад определяется действием температурного множителя, во втором случае — дополнительно еще спадом

Таблица 7. Значения $y_{1/2}$ и полуширины $w = 2\eta_{1/2}''$ для кривой симметричного отражения R $\text{CuK}\alpha$ -излучения от Ge

$2y_{1/2}$	220 ($\epsilon = 0,96$)		333 ($\epsilon = 0,61$)	
	μt	w''	μt	w''
$\sim 1,2$	3,12	~ 6	4,92	~ 2
$\sim 1,0$	5,21	~ 5	8,2	$\sim 1,6$
$\sim 0,72$	10,42	~ 4	16,4	$\sim 1,2$
0,60	15,63	3,3	24,6	1,0
0,52	20,80	2,8	32,8	0,9
0,46	26,05	2,5	41,0	0,8
0,42	31,27	2,3	49,2	0,7
0,33	52,03	1,8	82,0	0,6

функции $f(\sin \theta / \lambda)$. Поэтому для дальних отражений подобие будет ухудшаться.

Между тем отношения χ_{hr} / χ_{or} согласно (2.61) и (2.77), а также рис. 6 равны отношениям действительного полудиаметра дисперсионной гиперболы к величине $1/2 K |\chi_0|$, т. е. тем больше, чем ближе точка пересечения гиперболы с осью ME (рис. 6) к точке Лауэ — M .

Таким образом, из рис. 6 можно установить и сопоставить значения интерференционного (и полного) поглощения, т. е. эффект Бормана.

Этот путь был указан Эвальдом в 1958 г. [67] и может быть назван *критерием Эвальда*. В трехволновом случае, как будет показано в гл. 12, он также является существенным.

Асимметричное отражение [63] обнаруживает ряд интересных особенностей, которые формально в значительной степени связаны с влиянием величины σ'_h . Эти особенности выражены тем сильнее, чем резче асимметрия съемки. Сопоставим нижеследующие выражения для величин σ_h и σ'_h :

$$\sigma_h = \frac{2\pi KC |\chi_{hi}| \cos v_h}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_n} \sqrt{1 + y_r^2}}, \quad \sigma'_h = - \frac{2\pi K |\chi_{oi}| y_r}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h} \sqrt{1 + y_r^2}} q, \\ q = \frac{\gamma_h - \gamma_0}{2\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}. \quad (4.112)$$

Величины $\cos v_h$ и y_r (при условии $y_r \leq 1$) по модулю близки. Что касается «множителя асимметрии» q , то в практически реализуемых условиях его модуль может существенно отличаться от нуля, принимая (при $|y_r| \approx 1$) значения, равные ~ 1 . Учитывая далее, что $|\chi_{oi}|$ для дальних отражений может значительно превышать $|\chi_{hi}|$, мы приходим к заключению, что при больших

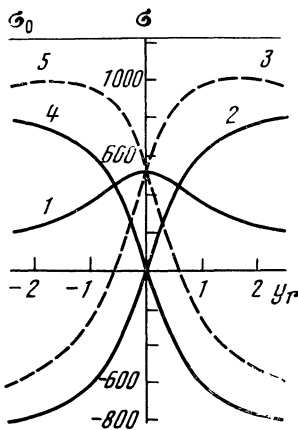


Рис. 25. Кривые изменения коэффициентов поглощения в области максимума при асимметричной съемке
 1 — σ_h ; 2, 4 — σ'_h ; 3, 5 — $\sigma_h + \sigma'_h$
 (2, 3—для отражения $\overline{333}$, 4, 5 — для 333)

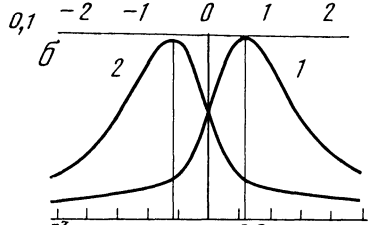
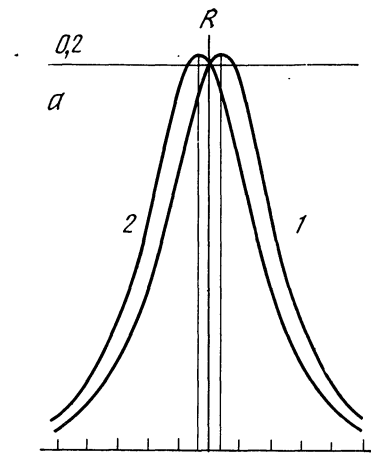


Рис. 26. Максимумы отражения R при асимметричной съемке (Ge, отражение $\{100\}$, $\text{CuK}\alpha$ -излучение)
 а — $\sigma_m t = 1$; $\mu t = 0,29$;
 б — $\sigma_m t = 3$; $\mu t = 0,87$;
 в — $\sigma_m t = 20,72$; $\mu t = 6$;
 1 — отражение 333; 2 — $\overline{333}$

$|y_r| \sigma'_h$ может значительно превышать σ_h . Такой случай представлен кривыми σ_h , σ'_h и $\sigma_h + \sigma'_h$ на рис. 25. Кривые относятся к отражениям 333 и $\overline{333}$ $\text{CuK}\alpha$ -излучения от кристаллической пластинки Ge, ограниченной плоскостями $\{111\}$.

Существенно отметить две особенности этого графика: смещение максимума суммы $\sigma_h + \sigma'_h$ от нулевой точки и обращение кривых при перемене знака индексов отражения. Первая может быть объяснена тем, что в определенных пределах σ'_h и сумма $\sigma_h + \sigma'_h$ растут с увеличением $|y_r|$. Вторая объясняется зависимостью σ'_h от y_r в первой степени. Допустим, что для некоторого отражения $hkl \gamma_0 > \gamma$. В таком случае $q < 0$ и положительные значения σ'_h и суммы $\sigma_h + \sigma'_h$ будут наблюдаться при $y_r > 0$. Так как перемена знака индексов отражения эквивалентна переходу к отражению от другой стороны той же плоскости, γ_0 и γ_h меняются значениями

и σ'_h и $\sigma_h + \sigma'_h$ будут положительными уже при отрицательных значениях y_r .

Обратимся к коэффициенту отражения \bar{R} , который даже при небольших значениях $\sigma_m t$ практически совпадает с R , так как из-за достаточно сильного поглощения пропадает тонкая структура или побочные максимумы маятникового решения. Поэтому в дальнейшем мы опустим черту над R (так же как и над T).

Как было показано в гл. 3, максимумы асимметричного отражения от прозрачного кристалла \bar{R} имеют симметричную форму относительно средней точки $y = 0$ и совпадают для отражений с обоими знаками индексов. При переходе к шкале η обнаруживается эффект смещения кривых \bar{R} относительно угла ϕ , что вызывается преломлением, причем смещение для hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ имеет противоположный знак. Однако эффект смещения в случае прозрачного кристалла является незначительным, порядка $1''$. В отличие от этого при асимметричном отражении от поглощающего кристалла указанное смещение R -кривых является их характерной чертой. Это смещение сопровождается искажением их формы, которая становится асимметричной относительно R_{\max} . Для отражений с противоположными знаками индексов величины смещений максимумов на шкале y_r равны по величине и противоположны по знаку, так что кривые R_{hkl} и $R_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ оказываются зеркально-симметричными (для центросимметричного кристалла). В толстом кристалле

$$R^e \approx \frac{\left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h \right)}{4(1 + y_r^2)} \exp[-(\sigma_m - \sigma_h - \sigma'_h)t]. \quad (4.113a)$$

Естественно, от выражения (4.113a) можно перейти к (4.108) для симметричного случая.

Обращаясь опять к форме и положению кривых R , замечаем, что смещение этих кривых и их асимметрия растут с увеличением произведения $\sigma_m t$ (рис. 26). Как показывает рис. 26, в, в случае выбранного примера отстояние максимумов при $\sigma_m t \approx 21$ составляет величину 2,3 по шкале y_r , т. е. превосходит полуширину максимума R при отражении от прозрачного кристалла. Очевидно, что смещение этих кривых обязано смещению максимума функций $(\sigma_h + \sigma'_h)$, представленных на рис. 28. Не останавливаясь здесь на вычислении интегрального отражения, заметим, что в случае центросимметричных кристаллов, для которых множитель

$$1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h = 1,$$

несмотря на различие кривых $R_h(y)$ и $R_{\bar{h}}(y)$, их интегральные отражения будут равны

$$\int R_h(y) dy = \int R_{\bar{h}}(y) dy. \quad (4.113б)$$

Это равенство не будет выполняться при отражении от кристаллов без центра симметрии. Зеркальная симметрия в смещении максимумов и условие (4.113б) для центросимметричных кристаллов сохраняются при возрастании $\sigma_m t$. Это связано с тем, что, несмотря на поглощение одного из полей, вклад любого из них в отраженную волну внутри кристалла согласно формуле (3.31) и рис. 11 остается симметричным относительно оси $y_r = 0$.

Что касается T -кривых, то они при асимметричной съемке также испытывают смещение по шкале y , противоположное по

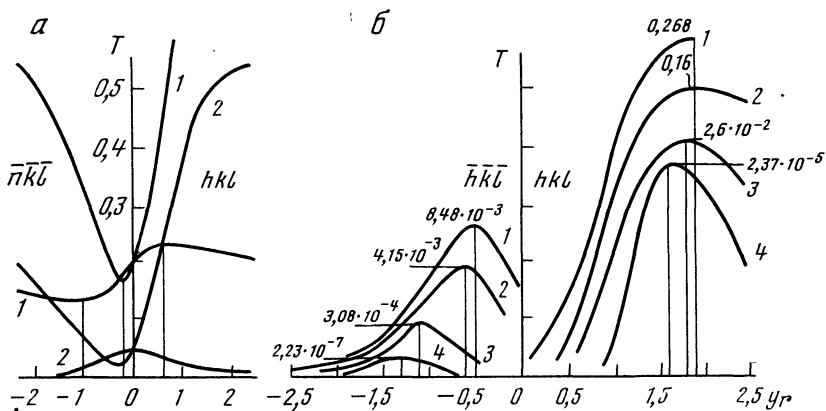


Рис. 27. Кривые коэффициента прохождения T при асимметричной съемке (Ge, $\text{CuK}\alpha$)

а: 1, 2 — $\sigma_m t = 1, 3$; б: 1 — $\sigma_m t = 7$; 2 — 10; 3 — 20, 72; 4 — 62, 16

знаку для отражений hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$. Однако наиболее существенным эффектом является различие в значениях T_{hkl} и $T_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$, возрастающее с толщиной или, точнее, произведением $\sigma_m t$. При $\sigma_m t = 62$ или, в том же примере отражений 333 и $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$ $\text{CuK}\alpha$ -излучения от Ge, $\mu t = 18$, отношение $T_{hkl}/T_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ достигает 100.

Этот эффект является следствием асимметрии вклада каждого из полей в кристалле $D_D^{(i)}$ в общую величину коэффициента прохождения T . Как следует из формулы (3.30) и рис. 11, вклад первого поля преобладает при $y < 0$ и вклад второго поля — при $y > 0$. Таким образом, в результате сильного поглощения первого поля величина прохождения для отражений hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ определяется лишь вторым полем в кристалле. Между тем в результате смещения максимумов функции $(\sigma_h + \sigma'_h)$ от средней точки $y_r = 0$ максимумы функций T смещаются в противоположные стороны, и, в то время как T_{hkl}^{max} в нашем примере асимметричного отражения смещен в сторону максимального значения $|D_0^{(2)}|^2$, максимум $T_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ смещается в сторону отрицательных значений y_r , где

величина $|D_0^{(2)}|^2$ очень мала. На рис. 27 показаны кривые T с соответствующими числовыми значениями основных параметров.

Параметром, определяющим области приближения тонкого, промежуточного и толстого кристаллов при асимметричной съемке, является произведение

$$\sigma_m t = \frac{\mu}{2} (\gamma_0^{-1} + \gamma_h^{-1}) t.$$

С возрастанием степени асимметрии, когда одна из величин γ_0 и γ_h много меньше единицы, $\sigma_m t$ может значительно превосходить μt , в результате чего упомянутые области приближения тонкого и толстого кристаллов существенно смещаются в сторону меньших толщин.

4.6. Интегральные значения отражения R_i и прохождения T_i в случае поглощающего кристалла [66]

Величины R_i и T_i являются важнейшими параметрами рассеяния, наряду с коэффициентами R и T , в особенности при рассеянии поглощающим кристаллом. Их регистрация представляет более простую экспериментальную задачу, чем получение полных кривых отражения, и привлекает к себе внимание многих исследователей.

Исследование функций R_i и T_i для некоторых частных случаев было дано в монографии Захариасена [15] и работе Хирша [68]. Однако более полное решение задачи вычисления этих интегральных величин и анализ результатов содержатся в работах Рамачандрана [69] и Като [70]. Полезная дискуссия, в особенности применительно к толстому кристаллу, а также учет периодических составляющих имеется в работе [71]. В нашем изложении, следуя главным образом ходу расчета, изложенного в работе Като, незначительным изменением значений переменных и последовательным учетом периодических составляющих выводятся общие выражения для интегральных величин R_i и T_i . Вместе с тем приведенные выводы относятся к случаям, когда $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$, так как выполняется интегрирование выражений Захариасена — Лауэ (4.96) и (4.97). Далее следует отметить, что если интегральное отражение R_i вычисляется совершенно точно, вернее, соответствующие интегралы являются собственными, то при вычислении T_i мы встречаемся с несобственными интегралами, для которых, однако, возможно нахождение главного значения. Расходимость указанных интегралов отражает особенности подынтегральной функции на границах максимума. Как уже отмечалось в гл. 2 при анализе соотношений (2.82), на границах максимума, когда волна D_h становится очень слабой, двухволновое приближение неприемлемо.

Итак, по определению [см. (4.81)]

$$R_i^y = \int_{-\infty}^{\infty} R(y_r) dy_r, \quad R_i^n = \frac{C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right)^{1/2}}{\sin 2\theta} R_i^y, \quad (4.114a)$$

$$T_i^y = \int_{-\infty}^{\infty} \{T(y_r) - \exp[-\sigma_0 t]\} dy_r, \quad T_i^n = \frac{C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right)^{1/2}}{\sin 2\theta} T_i^y. \quad (4.114b)$$

В соответствии с этим, используя (4.98б), запишем следующее выражение для интегрального отражения:

$$R_i^y = \int_{-\infty}^{\infty} R(y_r) dy_r = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \exp[-\sigma_m t] \{W + V\}, \quad (4.115a)$$

где

$$W = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 A \sqrt{1 + y_r^2}}{1 + y_r^2} dy_r, \quad V = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + y_r^2} \operatorname{sh}^2 \left[(\sigma_h + \sigma'_h) \frac{t}{2} \right] dy_r. \quad (4.115b)$$

Значения A , σ_h , σ'_h определяются из уравнений (4.93) и (4.95). Интеграл W , в согласии с анализом, проведенным в 3.3, выражается следующим образом:

$$W = \pi \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(2A) = \begin{cases} \pi A, & A \ll 1, \\ \frac{\pi}{2}, & A \gg 1. \end{cases} \quad (4.116)$$

Что касается гиперболической подынтегральной функции в выражении (4.115б) для V , то ее аргумент является общим и для гиперболических функций, которые подлежат интегрированию при вычислении T_i (см. далее). Для приведения соответствующих интегралов к стандартному виду используются следующие подстановки:

$$h = \frac{\mu t}{2\gamma_0 \gamma_h} S, \quad \operatorname{tg} \beta = \frac{2C\varepsilon \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} \cos v_h}{\gamma_0 - \gamma_h},$$

$$\cos \beta = \frac{\gamma_0 - \gamma_h}{S} = \frac{q}{\sqrt{C^2 \varepsilon^2 \cos^2 v_h + q^2}}, \quad (4.117)$$

$$S = |2 \sqrt{\gamma_0 \gamma_h (C^2 \varepsilon^2 \cos^2 v_h + q^2)}|, \quad \varepsilon = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right|.$$

Здесь «множитель асимметрии» q задан выражением (4.112). Далее

$$h \cos \beta = \frac{\mu t q}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}} = \sigma'_h t \operatorname{cth} v_r, \quad h \sin \beta = \sigma_h t \operatorname{ch} v_r,$$

$$y_r = \operatorname{sh} v_r = -\operatorname{ctg} \theta. \quad (4.118)$$

В таком случае указанный аргумент гиперболических функций преобразуется следующим образом:

$$(\sigma_h + \sigma'_h)t = \frac{2\pi KC |\chi_{hi}| t \cos v_h}{(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} (1 + y_r^2)^{1/2}} \left\{ 1 + \frac{y_r(\gamma_0 - \gamma_h)}{2C\varepsilon (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} \cos v_h} \right\} = \\ = h \sin \beta \sin \theta \{ 1 - \operatorname{ctg} \beta \operatorname{ctg} \theta \} = h \cos(\theta + \beta). \quad (4.119)$$

Переходя от $\operatorname{sh}^2 [(\sigma_h + \sigma'_h)t/2]$ к $\operatorname{ch} [(\sigma_h + \sigma'_h)t]$ и от переменной интегрирования y_r к переменной θ , получаем

$$V = 1/2 \int_0^\pi \{ \operatorname{ch} [h \cos(\theta + \beta)] - 1 \} d\theta. \quad (4.120)$$

Этот интеграл решается с помощью функций Бесселя от мнимого аргумента $I_n(h)$. Общее выражение, а также функции нулевого и первого порядков имеют вид

$$I_n(h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!(n+k)!} \left(\frac{h}{2} \right)^{n+2k}, \\ I_0(h) = 1 + \frac{h^2}{4} + \frac{h^4}{2^2 \cdot 16} + \frac{h^6}{6^2 \cdot 64} + \frac{h^8}{24^2 \cdot 256} + \frac{h^{10}}{120^2 \cdot 1024} + \dots, \\ I_1(h) = \frac{h}{2} + \frac{h^3}{2 \cdot 8} + \frac{h^5}{12 \cdot 32} + \frac{h^7}{144 \cdot 128} + \frac{h^9}{24 \cdot 120 \cdot 512} + \\ + \frac{h^{11}}{120 \cdot 720 \cdot 1024} + \dots \quad (4.121)$$

При переходе к толстым кристаллам используются асимптотические выражения для $I_n(h)$, имеющие хорошую сходимость при достаточно больших значениях n . Приведем такие выражения для функций нулевого и первого порядков:

$$I_0(h) \approx F(h) \sum_i A_i h^{-i}, \quad I_1(h) \approx F(h) \sum_i A'_i h^{-i}, \quad (4.122a)$$

$$\sum_i A_i h^{-i} = 1 + \frac{1}{8h} + \frac{9}{128h^2} + \frac{75}{16 \cdot 64h^3} + \frac{75 \cdot 49}{8 \cdot 64^2 \cdot h^4} + \frac{105^2 \cdot 81^2}{120 \cdot 8^5 \cdot h^5} + \dots$$

$$\sum_i A'_i h^{-i} = 1 - \frac{3}{8h} - \frac{15}{128h^2} - \frac{105}{16 \cdot 64h^3} - \frac{525}{8 \cdot 64^2 \cdot h^4} - \frac{105 \cdot 77}{64^3 \cdot h^5} + \dots, \quad (4.122b)$$

$$F(h) = \frac{\exp h}{\sqrt{2\pi h}}.$$

Используя указанные функции [72], непосредственно получаем для интеграла

$$V = \frac{\pi}{2} [I_0(h) - 1] \quad (4.123)$$

и для полной величины интегрального отражения:

$$R_i^{y_r} = \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h \right) \exp[-\sigma_m t] Q, \quad (4.124)$$

$$Q = \frac{\pi}{2} \left[2 \sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(2A) + I_0(h) - 1 \right].$$

Интегральное отражение от centrosимметричного кристалла

$$R_{ic}^{y_r} = \exp[-\sigma_m t] Q. \quad (4.125)$$

Более простое выражение, дающее во многих случаях хорошее согласие с экспериментом, может быть получено, если исходить из величины \bar{R} . При этом используется переход [см. (4.116)]

$$\pi \sum J_{2n+1}(2A) \rightarrow \pi/2.$$

Откуда

$$R_i^{y_r} \approx \frac{\pi}{2} \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h \right) \exp[-\sigma_m t] I_0(h). \quad (4.126)$$

Переходим к вычислению интегрального прохождения. Прежде всего заметим, что так как интегрирование выполняется в пределах от $-\infty$ до ∞ , то, очевидно, в (4.114) $\exp[-\sigma_0 t]$ представляет излучение, проходящее через кристалл за пределами области максимума.

Для облегчения расчета вычисляется интеграл от суммы $T_i + R_{ic}$. Используя (4.97) и (4.98), можно записать [см. (4.119)]

$$\begin{aligned} T_i + R_{ic} = \exp[-\sigma_m t] \int_{-\infty}^{\infty} & \left\{ \frac{2y_r^2 + 1}{2(y_r^2 + 1)} \operatorname{ch}[h \cos(\theta + \beta)] + \right. \\ & + \frac{y_r(y_r^2 + 1)^{1/2}}{2(y_r^2 + 1)} \operatorname{sh}[h \cos(\theta + \beta)] + \frac{\operatorname{ch}[h \cos(\theta + \beta)]}{2(y_r^2 + 1)} + \frac{1}{2(y_r^2 + 1)} \times \\ & \left. \times [\cos(2\alpha - 2v_i) - \cos 2\alpha] - \exp\left[-\frac{\mu t}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h}\right)\right] \right\} dy_r. \quad (4.127) \end{aligned}$$

Используя (4.85) и учитывая приближение (4.83), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2(y_r^2 + 1)} [\cos(2\alpha - 2v_i) - \cos 2\alpha] & \approx \frac{2v_i \sin 2\alpha}{2(y_r^2 + 1)}; \\ \int \frac{v_i \sin 2\alpha}{1 + y_r^2} dy_r & = \int \frac{\beta_i \sin 2\alpha dy_r}{2C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h\right)^{1/2} (y_r^2 + 1)^{3/2}}, \text{ т. к. } \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y_r \Psi_h \sin 2\alpha}{2\Phi_h (y_r^2 + 1)^{1/2}} dy_r = 0 \end{aligned}$$

(y_r делает подынтегральную функцию нечетной относительно нулевой точки). В результате очевидных преобразований

выражение (4.127) принимает следующий вид:

$$T_i + R_{ic} = \exp[-\sigma_m t] \{Y_1 + Y_2\},$$

$$Y_2 = \frac{|\chi_{oi}| \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right)}{2C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h\right)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin 2\alpha}{(y_r^2 + 1)^{3/2}} dy_r, \quad (4.128)$$

$$Y_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \operatorname{ch}[h \cos(\theta + \beta)] + \frac{y_r (y_r^2 + 1)^{1/2}}{y_r^2 + 1} \operatorname{sh}[h \cos(\theta + \beta)] - \exp[h \cos \beta] \right\} dy_r.$$

Обращаясь к интегралу Y_1 , замечаем, что он является несобственным. Действительно, при возрастании y_r коэффициент при sh стремится к единице. Далее, сумма ($\operatorname{ch} + \operatorname{sh}$) принимает значение $\exp[h \cos(\theta + \beta)]$. Рассматривая выражения (4.118) и (4.119), замечаем, что при дальнейшем возрастании y_r $\exp[h \cos(\theta + \beta)] \rightarrow \exp\left[h \cos \beta + \frac{h \sin \beta}{y_r}\right]$. В результате подынтегральная функция принимает следующее асимптотическое значение:

$$\exp[h \cos \beta] \left\{ \frac{h \sin \beta}{y_r} + \frac{1}{2!} \left(\frac{h \sin \beta}{y_r}\right)^2 + \dots \right\}. \quad (4.129)$$

Таким образом, этот интеграл является расходящимся, и в последующем будет определяться его главное значение.

Разобьем Y_1 на две части

$$Y_1' = \int_0^{\pi} \{\operatorname{ch}[h \cos(\theta + \beta)] - \operatorname{ch}[h \cos \beta]\} \sin^{-2} \theta d\theta, \quad (4.130)$$

$$Y_1'' = \int_0^{\pi} \{\cos \theta \operatorname{sh}[h \cos(\theta + \beta)] - \operatorname{sh}[h \cos \beta]\} \sin^{-2} \theta d\theta. \quad (4.131)$$

При вычислении этих интегралов используется известное разложение в ряды по функциям Бесселя от мнимого аргумента [72]:

$$\operatorname{ch}[h \cos \varphi] = I_0(h) + 2I_2(h) \cos 2\varphi + 2I_4(h) \cos 4\varphi + \dots \\ \dots + 2I_{2n}(h) \cos 2n\varphi, \quad (4.132)$$

$$\operatorname{sh}[h \cos \varphi] = 2I_1(h) \cos \varphi + 2I_3(h) \cos 3\varphi + 2I_5(h) \cos 5\varphi + \dots \\ \dots + 2I_{2n+1}(h) \cos(2n+1)\varphi. \quad (4.133)$$

Интеграл Y_1' преобразуется с помощью разложения (4.132) следующим образом:

$$Y_1' = 2 \sum_{n=0}^{\infty} I_{2n}(h) \int_0^{\pi} \{\cos 2n(\theta + \beta) - \cos 2n\beta\} \sin^{-2} \theta d\theta, \quad (4.134)$$

и его главное значение соответствует предельному переходу

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\varepsilon}^{\pi-\varepsilon} \{\cos 2n(\theta + \beta) - \cos 2n\beta\} \sin^{-2} \theta d\theta. \quad (4.135)$$

Разбивая область интегрирования в (4.134) на две части, получаем искомое значение этого интеграла

$$\begin{aligned} & \int_0^{\pi/2} \{\cos 2n(\theta + \beta) + \cos 2n(\theta - \beta) - 2 \cos n\beta\} \sin^{-2} \theta d\theta = \\ & = -4 \cos 2n\beta \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 n\theta}{\sin^2 \theta} d\theta = -2\pi \cos 2n\beta. \end{aligned} \quad (4.136)$$

Этот последний интеграл является стандартным (вычисляется с помощью интегральных сумм [73]). Таким образом,

$$Y_1' = -2\pi \sum_{n=0}^{\infty} 2n \cos 2n\beta I_{2n}(h). \quad (4.137)$$

Аналогичным путем получаем для второго интеграла (4.131):

$$Y_1'' = -2\pi \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \cos [(2n+1)\beta] I_{2n+1}(h). \quad (4.138)$$

Полная величина интеграла Y_1 составляет

$$Y_1 = -2\pi \sum_{m=1}^{\infty} \{m \cos [m\beta] I_m(h)\}. \quad (4.139)$$

Другое выражение для интеграла Y_1 , которое используется в дальнейшем анализе полученных формул, применительно к отдельным частным случаям может быть получено использованием рекуррентных формул для функций $I_n(h)$ [75]:

$$mI_m(h) = \frac{h}{2} \{I_{m-1}(h) - I_{m+1}(h)\}, \quad (4.140)$$

откуда

$$Y_1' = -\pi h I_1(h) + 2\pi h \sin \beta \sum_{n=0}^{\infty} \sin [(2n+1)\beta] I_{2n}(h), \quad (4.141)$$

$$Y_1'' = -\pi h \cos \beta I_0(h) + 2\pi h \sin \beta \sum_{n=1}^{\infty} \sin [2n\beta] I_{2n}(h), \quad (4.142)$$

$$Y_1 = -\pi h \{I_1(h) + I_0(h) \cos \beta\} + 2\pi h \sin \beta P, \quad (4.143)$$

$$P = \sum_{m=0}^{\infty} I_m(h) \sin m\beta. \quad (4.144)$$

Для \dot{P} в рассматриваемом общем случае может быть также получено следующее выражение. Исходя из другой рекуррентной формулы для $I_n(h)$

$$\frac{d}{dh} I_n(h) = \frac{1}{2} [I_{n-1}(h) + I_{n+1}(h)], \quad (4.145)$$

получаем дифференциальное уравнение для P

$$\frac{\partial P}{\partial h} = \frac{1}{2} I_0 \sin \beta + P \cos \beta. \quad (4.146)$$

При начальных условиях $P = 0$ при $h = 0$ имеем

$$P = \frac{1}{2} \sin \beta \exp [h \cos \beta] \int_0^h I_0(x) \exp \{-x \cos \beta\} dx. \quad (4.147)$$

Переходим теперь к вычислению интеграла Y_2 , который перепишем в виде

$$Y_2 = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \operatorname{ctg} \beta Y'_2, \quad Y'_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin 2A (1 + y_r^2)^{1/2}}{(1 + y_r^2)^{3/2}} dy_r. \quad (4.148)$$

Переходя к угловой переменной v_r

$$Y'_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(2A \operatorname{ch} v_r)}{(\operatorname{ch} v_r)^2} dv_r \quad (4.149)$$

и применяя разложение в ряд по функциям $I_n(h)$

$$\sin(2A \operatorname{ch} v_r) = 2I_1(2A) \operatorname{ch} v_r + 2I_3(2A) \operatorname{ch} 3v_r + \dots, \quad (4.150)$$

преобразуем Y'_2 в серии интегралов

$$Y'_2 = 4I_1(2A) \int_0^{\infty} \frac{dv_r}{\operatorname{ch} v_r} + 4I_3(2A) \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(3v_r)}{\operatorname{ch}^2 v_r} dv_r + \\ + 4I_5(2A) \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(5v_r)}{\operatorname{ch}^2 v_r} dv_r + \dots \quad (4.151)$$

Эти интегралы являются стандартными. Их решения имеют вид [74]

$$\int_0^{\infty} \frac{dv_r}{\operatorname{ch} v_r} = \frac{\pi}{2}, \quad \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(lv_r)}{\operatorname{ch}^2 v_r} dv_r = B \left(1 + \frac{l}{2}, 1 - \frac{l}{2} \right). \quad (4.152)$$

Функции B вычисляются с помощью бесконечных произведений

$$B(x, y) = \prod_{k=0}^{\infty} \frac{k(x+y+k)}{(x+k)(y+k)}, \quad (4.153)$$

имеющих при разумных значениях параметров пренебрежимо малые значения.

Таким образом,

$$Y_2 = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \operatorname{ctg} \beta \left\{ 2\pi I_1(2A) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} I_n(2A) B \left(1 + \frac{l}{2}, 1 - \frac{l}{2} \right) \right\} \approx \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \operatorname{ctg} \beta 2\pi I_1(2A). \quad (4.154)$$

Изложенный расчет приводит к следующим двум выражениям для интегрального прохождение:

$$T_{i,1}^{y_r} = \exp[-\sigma_m t] \{Y_1 + Y_2\} - R_{ic} = \pi \exp[-\sigma_m t] \{M(h) + N(A)\}, \\ T_{i,2}^{y_r} = \pi \exp[-\sigma_m t] \left\{ M'(h) + N(A) + \frac{1}{2} \right\}. \quad (4.155)$$

Здесь функции M и M' от h представляют результат интегрирования монотонных слагающих R и T , в то время как функция N от A относится к интегрированию периодических слагающих. Ниже приводятся явные выражения для этих функций:

$$M(h) = \frac{1}{2} [1 - I_0(h)] - 2 \sum_{m=1}^{\infty} m \cos(m\beta) I_m(h), \quad (4.156)$$

$$M'(h) = 2Ph \sin \beta - hI_1(h) - \frac{1}{2} (1 + 2h \cos \beta) I_0(h),$$

$$N(A) = 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \operatorname{ctg} \beta I_1(2A) - \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n+1}(2A). \quad (4.157)$$

Введение двух различных выражений для T_i , так же как и различных выражений для функций P , диктуется необходимостью использования в различных частных случаях (тонкий и толстый кристаллы, симметричное и асимметричное отражения) таких функций, которые будут обладать наилучшей сходимостью при тех или иных предельных условиях.

4.7. Анализ выражений для интегральных величин R_i и T_i применительно к важнейшим частным случаям

Преобразуем общие выражения, полученные ранее, к виду, более удобному как для качественного анализа в отдельных случаях, так и для численных оценок сходимости используемых рядов.

1. *Рассеяние в тонком кристалле.* В этом случае удобно использовать точные выражения для функций $I_n(h)$ и $I_1(2A)$, подобные приведенным в (4.121), и исследовать их в области значений аргументов от $A, h \ll 1$ до $A, h \approx 1-5$. Применяя соответствующее условие в (4.116), а также выражения (4.114), (4.121) и (4.124),

получим для интегрального отражения

$$R_i^n \approx \frac{C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right)^{1/2}}{\sin 2\theta} \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h \right) \exp [-\sigma_m t] \times \\ \times \frac{\pi}{2} \left(2A + \frac{h^2}{4} + \frac{h^4}{64} + \frac{h^6}{2304} + \dots \right). \quad (4.158)$$

Для вычисления интегрального прохождения удобно использовать функцию $M(h)$ согласно (4.155) и (4.156). Применяя общее выражение (4.121) для вычисления функций $I_n(h)$, при $n > 1$ получим

$$T_i^n = \frac{C \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} \Phi_h \right)^{1/2}}{\sin 2\theta} 2\pi \exp [-\sigma_m t] \left\{ -\frac{h}{2} \cos \beta - \frac{h^2}{16} (4 \cos 2\beta + 1) - \right. \\ - \frac{h^3}{16} (\cos \beta + \cos 3\beta) - \frac{h^4}{256} (2,67 \cos 4\beta + 6 \cos 2\beta + 1) - \\ - \frac{h^5}{384} (1,5 \cos 3\beta + \cos \beta) - \frac{h^6}{64 \cdot 144} (4,8 \cos 4\beta + 6 \cos 2\beta + 1) + \\ \left. + \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \operatorname{ctg} \beta \left[A + \frac{A^3}{2} + \frac{A^5}{12} + \frac{A^7}{144} + \dots \right] - \frac{A}{2} \right\}. \quad (4.159)$$

Эти выражения существенно упрощаются при переходе к симметричному отражению, при этом

$$\gamma_0 = \gamma_h \cos \theta, \quad \sigma_m = \sigma_0, \quad \cos \beta = \operatorname{ctg} \beta = \cos (2n + 1)\beta = 0 \\ (n = 1, 3, 5 \dots), \\ \cos 2n\beta = -1, \quad \cos 4n\beta = 1, \quad h_s = \frac{\mu t C \epsilon \cos \nu_h}{\cos \theta}. \quad (4.160)$$

Выражения (4.158) и (4.159) принимают вид

$$R_{is}^n \approx \frac{C \Phi_h^{1/2}}{\sin 2\theta} \frac{\pi}{2} \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h \right) \exp [-\sigma_0 t] \times \\ \times \left[2A + \frac{h_s^2}{4} + \frac{h_s^4}{64} + \frac{h_s^6}{2304} + \dots \right], \quad (4.161)$$

$$T_{is}^n \approx \frac{C \Phi_h^{1/2}}{\sin 2\theta} 2\pi \exp [-\sigma_0 t] \left\{ -\frac{A}{2} + \frac{h_s^2}{5,33} + \frac{h_s^4}{110} + \frac{h_s^6}{4600} + \dots \right\}. \quad (4.162)$$

Сопоставляя выражения (4.158) и (4.159) для асимметричной съемки с выражениями (4.161) и (4.162) для симметричной, замечаем, что первые могут быть использованы в меньшем интервале величин μt . Это связано с тем, что $h \approx 2-2,5 \mu t$, в то время как $h_s \approx \mu t$. Хотя при малых значениях μt явления должны быть близкими к рассеянию в прозрачных кристаллах, для которых характерно,

например, отрицательное значение величин T_i в (4.159) и (4.162) при h и h_s , меньших единицы, все же можно отметить особенности, свойственные поглощающим кристаллам. Это прежде всего различие в значениях R_i для hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ отражений, вследствие того, что $\sin \nu_h \neq 0$. Величина интегрального прохождения T_i при асимметричной съемке различается для отражений с противоположными знаками индексов из-за изменения знаков у $\cos l\beta$ в (4.159), причем это имеет место как при отсутствии, так и при наличии центра симметрии в рассеивающем кристалле.

Чрезвычайно наглядно выражение (4.162) передает переход от отрицательных значений при $h_s < 1$ к положительным при $h_s > 1$, что соответствует переходу к промежуточной области между приближениями тонкого и толстого кристаллов. Хотя при возрастании значений h и A свыше ≈ 5 сходимость рядов, входящих в рассматриваемые выражения, ухудшается, приведенные формулы все же могут быть использованы для примерного подсчета интегральных величин в промежуточной области.

В пределе, при $h \approx 0$, полученные соотношения должны совпадать с формулами для прозрачного кристалла. Учитывая, что при этом должно быть $\mu = 0$, получим, например, из (4.161) и (4.162):

$$R_{is}^y \approx \pi A, \quad T_{is}^y = -R_{is}^y. \quad (4.163)$$

II. *Рассеяние в области, промежуточной между приближениями тонкого и толстого кристаллов* [66]. При значениях h до 10 интегральные отражения, согласно (4.124), можно определить, используя разложение (3.81) для вычисления $\int J_0(x) dx$ и таблицы [75] для значений $I_0(h) \equiv J_0(ih)$.

III. *Рассеяние толстым кристаллом. Симметричное отражение.* Для приближения толстого кристалла используются асимптотические выражения для функций $I_0(h)$ и $I_1(h)$. Рассмотрим сначала симметричное отражение, которому по преимуществу посвящены имеющиеся экспериментальные работы. Так как асимптотические выражения (4.122a) имеют общий множитель $\exp h/(2\pi h)^{1/2}$, то в формулах для R_i и T_i

$$\exp[-(\sigma_0 t - h_s)] = \exp\left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} (1 - C\varepsilon \cos \nu_h)\right]. \quad (4.164)$$

Для интегрального отражения получаем [см. (4.116)]

$$R_{is}^n \approx 0,627 \frac{C |\chi_{hr}| \exp\left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} (1 - C\varepsilon \cos \nu_h)\right]}{\sin 2\vartheta (\mu \varepsilon \cos \nu_h)^{1/2}} \sqrt{\cos \vartheta} \times \\ \times \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h\right) \left(1 + \frac{0,125}{h_s} + \frac{0,0703}{h_s^2} + \dots\right). \quad (4.165)$$

Отметим хорошую сходимость ряда в (4.165). Даже для $h_s = 15$, т. е. в области, промежуточной между приближениями тонкого и

толстого кристаллов, третий член, содержащий h_s^{-2} , составит лишь 0,03% от единицы. Для вычисления интегрального прохождения необходимо использовать T_{i2} из (4.155). При этом функция $M'(h)$ дана в (4.156) и функция $N(A)$ принимает асимптотическое значение для симметричного отражения, равное $-1/2$. Что касается величины P , то

$$P_s = \frac{1}{2} \int_0^h I_0(x) dx \approx \frac{\exp[h_s]}{\sqrt{2\pi h}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{(2h_s)^k} \sum_{m=0}^{m=k} \frac{(2m-1)!!}{m! 4^m}. \quad (4.166)$$

Используя далее асимптотические выражения для $I_0(h)$ и $I_1(h)$, получаем

$$T_{is}^n \approx 0,627 \frac{C |\chi_{hr}|}{\sin 2\vartheta} \frac{\exp\left[-\frac{\mu t}{\cos \vartheta} (1 - C \varepsilon \cos v_h)\right]}{(\mu t \varepsilon \cos v_h)^{1/2}} \sqrt{\cos \vartheta} \times \\ \times \left(1 + \frac{2,125}{h_s} + \frac{5,320}{h_s^2} + \frac{18,520}{h_s^3} + \frac{83,149}{h_s^4} + \dots\right). \quad (4.167)$$

Очевидно, применяя приведенные формулы для R_{is} и T_{is} к рассеянию в кристаллах с центром симметрии, необходимо положить $\cos v_h = 1$, $\sin v_h = 0$.

Наличие множителя $\cos v_h$ в показателе множителя поглощения при рассеянии в нецентросимметричных кристаллах существенно снижает эффект аномального прохождения, по сравнению с этим эффектом в кристаллах с центром симметрии. Снижение особенно велико для сильных отражений, т. е. для больших значений ε . Так, при $\varepsilon = 0,96$ и $\cos v_h = 0,95$

$$\exp[-\mu t (1 - \varepsilon)] = 0,3; \quad \exp[-\mu t (1 - \cos v_h \varepsilon)] = 0,07. \quad (4.168)$$

Важным параметром рассеяния является отношение величин интегрального прохождения и отражения. При экспериментальных исследованиях это отношение может служить приближенным критерием степени совершенства рассеивающего кристалла.

Сходимость ряда для T_i (4.167) хуже сходимости ряда (4.165) для интегрального отражения. Так при $h \approx \mu t = 30$ использование лишь первого члена в (4.165), т. е. единицы, приводит к ошибке $\sim 0,4\%$. Такая же величина ошибки требует использования в (4.167) четырех первых членов, включая член с h_s^{-3} . С указанной точностью отношение

$$Q_s = \frac{T_{is}}{R_{is}} \approx \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin v_h\right)^{-1} \left(1 + \frac{2,125}{h_s} + \frac{5,320}{h_s^2} + \frac{18,520}{h_s^3}\right) \quad (4.169)$$

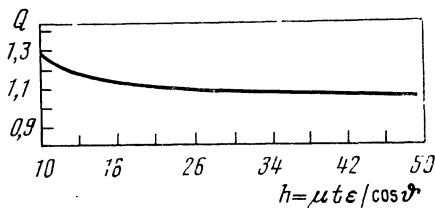
составляет для центросимметричного кристалла при $h_s \approx \mu t = 40$ не менее 1,057 и при $\mu t = 50$ порядка 1,042. В случае кристалла без центра симметрии, когда необходимо учитывать множитель

перед рядом в (4.167). указанное отношение для одного из отражений может оказаться гораздо ближе к единице, а для другого — величиной порядка 1,1 и больше при тех же значениях μt . Мы здесь не рассматриваем это отношение при специальных условиях, когда множитель $|\chi_h|/|\chi_{\bar{h}}|$ в формуле для R_i может достигать величины порядка 2.

На рис. 28 приведен график функции (4.169) в интервале значений h_s от 10 до 50 для центросимметричного кристалла.

IV. *Рассеяние толстым кристаллом. Асимметричное отражение.* Очевидно, что мы и в этом случае используем асимптотические

Рис. 28. График функции $Q_s = T_{is}/R_{is}$ для центросимметричного кристалла и симметричного отражения



выражения для функций $I_n(h)$. Для показателя множителя поглощения получаем

$$\sigma_m t - h = \frac{\mu t}{2\gamma_0 \gamma_h} [(\gamma_0 + \gamma_h) - S]. \quad (4.170)$$

Для интегрального отражения получаем формулу, мало отличающуюся от (4.165),

$$R_i^n \approx 0,627 \frac{C |\chi_{hr}|}{\sin 2\theta} \frac{\exp \left\{ -\frac{\mu t}{2\gamma_0 \gamma_h} [(\gamma_0 + \gamma_h) - S] \right\}}{(\mu t S)^{1/2}} \sqrt{2\gamma_0 \gamma_h} \times \\ \times \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h \right) \left(1 + \frac{0,125}{h} + \frac{0,703}{h^2} + \dots \right). \quad (4.171)$$

Чтобы получить выражение для T_i , необходимо вывести асимптотическую формулу для функции P в общем виде. Для этого введем новую переменную

$$g(h) = 2 \sin^{-1} \beta \sqrt{2\pi h} \exp(-h) P. \quad (4.172)$$

Дифференцируя (4.172) по h и используя (4.147), получаем следующее дифференциальное уравнение для $g(h)$:

$$\frac{\partial g}{\partial h} + g [1 - \cos \beta - (2h)^{-1}] = \sqrt{2\pi h} \exp(-h) I_0(h). \quad (4.173)$$

Переходим к большим h [см. (4.122)]:

$$\sqrt{2\pi h} I_0(h) \exp(-h) = A_0 + \frac{A_1}{h} + \frac{A_2}{h^2} + \dots \quad (4.174)$$

Допустим, что асимптотическое выражение для функции g имеет аналогичный вид:

$$g \approx B_0 + \frac{B_1}{h} + \frac{B_2}{h^2} + \dots \quad (4.175)$$

В таком случае, подставляя это значение g , а также правую часть (4.174) в (4.173) и приравнивая коэффициенты с равными h , получим

$$B_0 = \frac{A_0}{1 - \cos \beta}, \quad B_i = \frac{A_i + \left(i - \frac{1}{2}\right) B_{i-1}}{1 - \cos \beta} \quad (i \geq 1). \quad (4.176)$$

Таким образом, общее решение дифференциального уравнения (4.173) для g будет:

$$g \approx M \sqrt{2\pi h} \exp[-(1 - \cos \beta)h] + B_0 + B_1/h + B_2/h^2 + \dots \quad (4.177)$$

Постоянная интегрирования M должна быть равна нулю, так как P для больших h ($1 - \cos \beta$) имеет значение

$$P \approx \frac{\sin \beta}{2} \frac{\exp h}{\sqrt{2\pi h}} \frac{1}{1 - \cos \beta}, \quad (4.178)$$

и, следовательно, искомое асимптотическое выражение для P имеет вид

$$P \approx \frac{\sin \beta}{2} \frac{\exp h}{\sqrt{2\pi h}} \sum_{i=0} B_i h^{-i}. \quad (4.179)$$

Заметим, что в частном случае симметричного отражения $\cos \beta = 0$ и коэффициенты B_i принимают значения коэффициентов ряда (4.166).

Используя решение $T_{i,2}$ в (4.155) и $M'(h)$ в (4.156), пренебрегая малой величиной первого члена в выражении для $N(A)$ и учитывая, что при больших A $2 \sum_n J_{2n+1}(2A) - 1 = 0$, получаем

$$T_i^n = \frac{\pi}{2} \frac{C |\chi_{hr}|}{\sin 2\theta} \exp\left[-\frac{\mu t}{2\gamma_0 \gamma_h} (\gamma_0 + \gamma_h)\right] 2M'(h), \quad (4.180)$$

$$2M'(h) \approx \frac{2 \exp h}{(2\pi h)^{1/2}} \left\{ h(1 - \cos^2 \beta) \sum_{i=0}^i B_i h^{-i} - 2h \sum_i A_i' h^{-i} - \frac{1}{2} (1 + 2h \cos \beta) \sum_i A_i h^{-i} \right\}. \quad (4.181)$$

Подставляя значения коэффициентов B_i из (4.176), A_i и A_i' из (4.122), мы получим для интегрального отражения

$$T_i^n = 0,627 \frac{C |\chi_{hr}|}{\sin 2\theta} \frac{\exp\left\{-\frac{\mu t}{2\gamma_0 \gamma_h} [(\gamma_0 + \gamma_h) - S]\right\}}{(\mu t S)^{1/2}} \sqrt{2\gamma_0 \gamma_h} \sum_i L_i h^{-i}. \quad (4.182)$$

Приводим выражения для пяти коэффициентов \dot{L}_i в явном виде:

$$\begin{aligned}
 L_0 &= \frac{1 + \cos \beta}{1 - \cos \beta}, & L_1 &= 1,5 \frac{1 + \cos \beta}{(1 - \cos \beta)^2} [1 + 0,25(1 - \cos \beta)] + 0,25, \\
 L_2 &= 4,25 \frac{1 + \cos \beta}{(1 - \cos \beta)^3} [1 + 0,25(1 - \cos \beta) + 0,0938(1 - \cos \beta)^2] + \\
 &+ 0,281, & & (4.183) \\
 L_3 &= 13,125 \frac{1 + \cos \beta}{(1 - \cos \beta)^4} [1 + 0,25(1 - \cos \beta) + 0,0938(1 - \cos \beta)^2 + \\
 &+ 0,0391(1 - \cos \beta)^3] + 0,4395, \\
 L_4 &= 59,064 \frac{1 + \cos \beta}{(1 - \cos \beta)^5} [1 + 0,25(1 - \cos \beta) + 0,0938(1 - \cos \beta)^2 + \\
 &+ 0,0391(1 - \cos \beta)^3 + 0,017(1 - \cos \beta)^4] + 1,452.
 \end{aligned}$$

Рассматривая полученные соотношения для асимметричного отражения, замечаем, что интегральное отражение R_i так же, как и при симметричном отражении, имеет различную величину для отражений с противоположными знаками индексов при рассеянии в кристаллах без центра симметрии. Необходимо отметить, что ряд $\sum_i A_i h^{-i}$ (4.171) тождествен ряду (4.165) для интегрального от-

ражения при симметричной съемке. Это указывает на то, что хотя при переходе к асимметричной съемке максимумы отражения деформируются и становятся асимметричными относительно средней точки, вклад «хвостов» в величину R_i остается незначительным.

Вместе с тем необходимо отметить значительное возрастание поглощения при той же величине μt при асимметричной съемке сравнительно с симметричной. Так, при асимметричном отражении 333 и $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$ излучения Cu $K\alpha$ от Ge при ограничении $\{100\}$ для значения $\mu t = 20$ множитель поглощения в формулах для R_i и T_i составляет $6,3 \cdot 10^{-6}$, а при симметричном отражении величину $4 \cdot 10^{-4}$, что соответствует $\mu t \approx 31$.

Переходим к замечаниям, относящимся к интегральному прохождению T_i . Прежде всего отметим различие в значениях T_i для двух отражений с противоположными знаками индексов [$L_i = L_i(\cos \beta)$] и нечувствительность их к наличию или отсутствию центра симметрии в рассеивающем кристалле. Видно ухудшение сходимости рядов в формуле (4.182) для T_i по сравнению с аналогичным выражением при симметричной съемке. Это является следствием сильной деформации максимумов T и образованием медленно спадающего в сторону больших y_r хвостов (см. рис. 27, б)

Переходим к численным оценкам. Применяя формулу (4.182) для указанного примера, получим следующие ряды:

$$\begin{aligned}
 (\Sigma L_i h^{-i})_{333} &= 12,33 + \frac{128,6}{h} + \frac{2420}{h^2} + \frac{50\,575}{h^3} + \frac{2\,045\,000}{h^4} + \\
 &+ \frac{28 \cdot 10^6}{h^5} + \frac{208,7 \cdot 10^6}{h^6} + \dots, & & (4.184)
 \end{aligned}$$

при $h = 41,8$ ($\mu t = 20$) этот ряд имеет вид

$$\begin{aligned} (\Sigma L_i 41,8^{-i})_{333} &= 12,33 + 3,08 + 1,38 + 0,688 + 0,495 + 0,202 + \\ &+ 0,037 + \dots = 18,21 + \dots, \\ (\Sigma L_i h^{-i})_{333} &= 0,0811 + \frac{0,346}{h} + \frac{0,41}{h^2} + \dots, \\ (\Sigma L_i 41,8^i)_{333} &= 0,0811 + 0,00198 + 0,000235\dots \end{aligned} \quad (4.185)$$

Отношение сумм этих рядов

$$\frac{\left(\sum_{i=0}^{i=6} L_i h^{-i}\right)_{333}}{\left(\sum_{i=0}^{i=2} L_i h^{-i}\right)_{333}} \approx 202. \quad (4.186)$$

Заметим, что седьмой член разложения для 333 составляет $\sim 0,3\%$ от нулевого, так же как третий член ряда для отражения $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$. Следует иметь в виду, что в данном примере отражению 333 соответствует большой угол падения ψ_0 или малый скользящий угол.

Отношение интегрального прохождения T_i к интегральному отражению R_i в общем случае толстого нецентросимметричного кристалла и асимметричного отражения на основании (4.171) и (4.182) имеет вид

$$Q = \frac{T_i}{R_i} \approx \left(1 \pm 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h \right)^{-1} \sum_i L_i h^{-i}. \quad (4.187)$$

Это отношение будет различаться для отражений hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ также при наличии центра симметрии в рассеивающем кристалле, так как все выводы, полученные из рассмотрения формул для R_i и T_i , очевидно, находятся в согласии с анализом выражений для коэффициентов отражения и прохождения.

При рассеянии в прозрачном кристалле переход к π -колебаниям в плоскости отражения приводит к уменьшению коэффициента отражения и интегрального отражения, однако эти параметры имеют тот же порядок величины, что и для σ -колебаний. Это непосредственно следует, например, из формул (3.82) для интегрального отражения. Для отражений 220 и 333 излучения $\text{CuK}\alpha$ от тонкой пластинки Si:

$$R_{i\parallel}^{220} = 0,7R_{i\parallel}^{220}, \quad R_{i\parallel}^{333} = 0,99R_{i\perp}^{333}.$$

Переходя к рассеянию в поглощающем кристалле, замечаем, что в случае тонкого кристалла при любой схеме съемки интегральное отражение $R_{i\parallel} \sim |\cos 2\theta| R_{i\perp}$ [(4.158), (4.161)]. Примерно такая же зависимость имеет место для T_i .

В толстом кристалле распространение волн с π -колебаниями подчиняется другим закономерностям, и практически такие волны почти не обладают аномальным прохождением. Это является след-

ствием того, что функция \dot{h} (4.117) входит в показатель при множителях поглощения $\sigma_m t - h$ и $\sigma_0 t - h_s$ [см. (4.165), (4.167), (4.171), (4.182)].

В случае симметричного отражения влияния поляризационного множителя прослеживается более просто. В случае сильных отражений, когда $(1 - \epsilon) \ll 1$, множители поглощения для σ - и π -поляризаций сильно различаются. Типичным является отражение 220 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge. В этом случае $\epsilon = 0,96$, и, например, при $\mu t = 20$ множитель поглощения для σ -поляризации равен 0,42 и для π -поляризации $87 \cdot 10^{-8}$, т. е. излучение, прошедшее через кристалл, является почти полностью плоскополяризованным.

Для более слабых отражений, так же как и при асимметричном отражении, различие множителей поглощения не столь сильно. Излучение с π -поляризацией составляет величину от $\sim 1\%$ до немногих десятых процента от излучения с σ -поляризацией.

Другое замечание относится к так называемому закону Фриделя, играющему важную роль в рентгеноструктурном анализе, который основан на кинематической теории рассеяния. Закон Фриделя сводится к нечувствительности интенсивности отражений к наличию или отсутствию центра симметрии в структуре. При этом особенно важно указать, что речь идет об отражениях от таких плоскостей, которые непараллельны имеющимся в нецентросимметричном кристалле полярным направлениям.

Как следует из содержания гл. 3 и 4, можно говорить о выполнении или нарушении закона Фриделя при динамическом рассеянии со следующими оговорками. Во-первых, вместо интенсивности при динамическом рассеянии следует сравнивать кривые отражения и интегральные отражения R_i .

Во-вторых, как было показано рядом авторов, главным образом применительно к дифракции электронов при многоволновом рассеянии закон Фриделя для интегральных отражений не выполняется при рассеянии как в прозрачном, так и в поглощающем кристалле.

Однако в двухволновом приближении, как ясно из изложенного выше, рассеяние в прозрачном кристалле подчиняется закону Фриделя, в то время как при рассеянии в поглощающем кристалле этот закон нарушается, что связано непосредственно с наличием множителя $\left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| = \left(1 \pm 2 \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \sin v_h \right)$ в формулах для интегрального отражения R_i . Следует подчеркнуть, что этот множитель принимает значения, заметно отличающиеся от единицы лишь при рассеянии на кристаллах, содержащих тяжелые атомы, излучения с длиной волны, близкой к краю поглощения. Так, например, при рассеянии на кристаллах CdS со структурой сфалерита излучения с длиной волны, близкой к краю поглощения металлического атома, величины указанного множителя согласно (4.58) будут сильно

различаться. Действительно, величина

$$\Delta = (\Sigma f_r \sin \varphi) (\Sigma \mu_a^{(h)} \cos \varphi) - (\Sigma \mu_a^{(h)} \sin \varphi) (\Sigma f_r \cos \varphi) \quad (4.188)$$

будет определяться суммами, связанными с синусами, если выбрать такое описание структуры, в котором атомы Cd помещаются в центры октантов. В таком случае, используя излучение с указанной длиной волны, мы получим значительное уменьшение f_r Cd за счет большой величины и отрицательного знака поправок $\Delta f'$. С другой стороны, при этом возрастет поглощение $(\Sigma \mu_a \sin \varphi)$. Отношение [см. (4.58)]

$$\frac{1 + \alpha}{1 - \alpha} = \frac{\lambda \frac{e^2}{mc^2} + \Delta / |F_{hr}|^2}{\lambda \frac{e^2}{mc^2} - \Delta / |F_{hr}|^2}, \quad (4.189)$$

$$\alpha = 2 \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \sin \nu_h = \Delta |F_{hr}|^{-2} \left(\lambda \frac{e^2}{mc^2} \right)^{-1}$$

может достигнуть величины 2.

ВЕКТОРЫ ПОЙНТИНГА И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН

5.1. Усредненный вектор Пойнтинга в общем случае

Изложенная теория, описывающая возникновение и распространение волновых полей в кристалле, не может быть полной без рассмотрения векторов Пойнтинга, по которым распространяется энергия волновых полей. Так же как и в случае видимого света, направления векторов Пойнтинга рентгеновских полей в кристалле не совпадают с волновыми векторами $k_0^{(i)}$ или $k_h^{(i)}$.

Учет соотношений, определяющих векторы Пойнтинга и их траектории, может быть использован при рассмотрении случая малости волнового фронта падающей волны сравнительно с толщиной кристалла, а также рассеяния рентгеновских лучей в деформированных кристаллах.

Вектор плотности потока энергии S , представленный выражением

$$S = \frac{c}{4\pi} [EH], \quad (5.1)$$

используется в настоящей теории в несколько измененном виде. В общем случае поглощающих кристаллов электрический и магнитный векторы являются комплексными величинами типа (2.50).

Прежде всего обратим внимание на то, что направление вектора S , так же как и его модуль, меняется во времени с частотой, отвечающей частотам рентгеновских колебаний и, кроме того, меняется в пределах элементарной ячейки кристалла, притом одинаковым образом во всех ячейках. Поэтому в дальнейшем для сопоставления с экспериментом необходимо усреднить величину S по периоду колебания ν^{-1} и периоду решетки, нормальному к входной грани.

Отнесем нашу электромагнитную волну к прямоугольной системе координат. При распространении волны вдоль положительного направления оси x среднее значение векторного произведения за период колебания составит

$$[\overline{EH}]_x = \overline{E_y H_z} = \nu \int_0^{1/\nu} E_y H_z dt. \quad (5.2)$$

Результат этого первого усреднения может быть записан в форме

$$\mathbf{S}^t = \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} [\mathbf{E} \mathbf{H}^*], \quad (5.3)$$

где дополнительный множитель $1/2$ является средним значением квадрата косинуса. Далее, удобно перейти от вектора электрической напряженности \mathbf{E} к вектору индукции \mathbf{D} , который образует в кристалле правовинтовую тройку векторов совместно с \mathbf{H} и \mathbf{S} ввиду близости диэлектрической постоянной волн возмущения к единице. Таким образом, для среднего по времени значения вектора Пойнтинга можно написать

$$\mathbf{S}^t \approx \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} [\mathbf{D} \mathbf{H}^*]. \quad (5.4)$$

Для того чтобы получить выражение для вектора \mathbf{S} , отвечающего нашей задаче, необходимо подставить в (5.4) блоховские решения (2.36) и (2.50) для векторов индукции и магнитной напряженности. При этом выясняется, что вектор \mathbf{S}^t в кристалле является суммой слагающих, относящихся к отдельным полям. Как отмечалось выше, поля, принадлежащие одному состоянию поляризации и связанные общими условиями на границе вакуум — кристалл, являются взаимно когерентными, так же как и поля, относящиеся к различным состояниям, поляризации в том случае, когда падающая волна плоскополяризована.

Выпишем выражения для \mathbf{D} и \mathbf{H} :

$$\mathbf{D} = \sum_i \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0^{(i)} \mathbf{r})] \sum_m \mathbf{D}_m \exp [-2\pi i (\mathbf{h}_m \mathbf{r})], \quad (5.5)$$

$$\mathbf{H} = \sum_j \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0^{(j)} \mathbf{r})] \sum_n \mathbf{H}_n \exp [-2\pi i (\mathbf{h}_n \mathbf{r})]. \quad (5.6)$$

Формулы (5.5) и (5.6) написаны для общего случая многоволнового рассеяния. Первая (внешняя) сумма берется по точкам возбуждения на всех полостях многополостной дисперсионной поверхности и вторая сумма — по всем точкам обратной решетки, или по всевозможным индексам отражений. В соответствии с этим векторное произведение в (5.4) будет иметь вид

$$\begin{aligned} [\mathbf{D} \mathbf{H}^*] &= \sum_i \sum_j \exp [2\pi i (\mathbf{k}_0^{(j)} - \mathbf{k}_0^{(i)}, \mathbf{r}) \times \\ &\times \sum_m \sum_n [\mathbf{D}_m^{(i)} \mathbf{H}_n^{(j)*}] \exp [2\pi i (\mathbf{h}_n - \mathbf{h}_m, \mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Рассматривая распространение энергии в поглощающем кристалле, используем для вычисления вектора разности $\mathbf{k}_0^{(j)} - \mathbf{k}_0^{(i)}$ формулы (2.58) и (4.37). Итак, имеем

$$(\mathbf{k}_0^{(j)} - \mathbf{k}_0^{(i)}, \mathbf{r}) = (\Delta \mathbf{k}^{(ij)}, n\mathbf{z}) + (i/4\pi)(\sigma^{(i)} + \sigma^{(j)})z, \quad (5.8)$$

где $\Delta \mathbf{k}^{(ij)}$ обозначает вектор, отнесенный к разности волновых векторов любой пары точек возбуждения на двух различных полостях общей дисперсионной поверхности; σ_i и σ_j обозначают полные величины показателей поглощения для волн, связанных с указанными точками.

Рассматривая теперь величину векторного произведения (5.7) и учитывая (5.8), можно заметить, что значения σz медленно меняются с глубиной z и практически постоянны на отрезках порядка периода решетки. Разброс значений $|\Delta \mathbf{k}^{(ij)}|$ весьма незначителен. В отличие от этого

$$\exp [2\pi i (\mathbf{h}_n - \mathbf{h}_m, \mathbf{r})] = \exp 2\pi i (\mathbf{h}_q \mathbf{r})$$

является быстро меняющейся внутри ячейки функцией. Среднее значение этой величины в пределах элементарной ячейки обращается в нуль при всех значениях q , за исключением $q = 0$, когда этот множитель обращается в единицу. При этом двойная сумма по n и по m обращается в одинарную ($n = m$). Таким образом, наше векторное произведение, усредненное по элементарной ячейке, приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} [\overline{DH^*}]^{nc} &= \sum_i \sum_j \exp [2\pi i \Delta k_z^{(ij)} z] \times \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2} (\sigma^{(i)} + \sigma^{(j)}) z \right] \sum_n [D_n^{(i)} H_n^{(j)}]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Теперь преобразуем векторные произведения в правой части (5.9) в скалярные. С этой целью используем формулу (2.59) для вектора магнитной напряженности. При этом учтем, что модули векторов $\mathbf{k}_m \equiv \mathbf{k}_n$ отличаются величинами порядка 10^{-5} от \mathbf{K} . Поэтому если ввести единичный вектор вдоль \mathbf{k}_n

$$\mathbf{s}_n = \frac{\mathbf{k}_n}{|\mathbf{k}_n|},$$

формулу (2.59) можно переписать следующим образом:

$$\mathbf{H}_n \approx |\mathbf{s}_n D_n|, \quad (5.10)$$

и далее, согласно (2.47а),

$$[D_n^{(i)} H_n^{(j)}]^* = [D_n^{(i)} [s_n^{(j)} D_n^{(j)*}]] = (D_n^{(i)}, D_n^{(j)*}) s_n^{(j)} - (s_n^{(j)}, D_n^{(i)}) D_n^{(j)*}. \quad (5.11)$$

Нетрудно видеть, что второй член в правой части (5.11), обращается в нуль, так как векторы, параллельные волновым векторам, будут во всех случаях перпендикулярны соответствующим векторам индукции. Таким образом, уравнение (5.9) переписывается в виде

$$\begin{aligned} [\overline{DH^*}]^{nc} &= \sum_i \sum_j \exp [2\pi i \Delta k_z^{(ij)} z] \times \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2} (\sigma^{(i)} + \sigma^{(j)}) z \right] \sum_n (D_n^{(i)} D_n^{(j)*}) s_n \end{aligned} \quad (5.12)$$

и величина дважды усредненного вектора плотности потока энергии (с использованием действительной части (5.12))

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\mathbf{S}}} \equiv \bar{\mathbf{S}} = & \frac{c}{8\pi} \sum_n \left\{ \sum_i |D_n^{(i)}|^2 \exp(-\sigma^{(i)}z) + \right. \\ & \left. + \sum_i \sum_j \exp\left[-\frac{1}{2}(\sigma^{(i)} + \sigma^{(j)})z\right] \cos[2\pi\Delta k_z^{(ij)}z] (D_n^{(i)} D_n^{(j)}) \right\} \mathbf{s}_n. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Таким образом, вектор $\bar{\bar{\mathbf{S}}}$ является суммой векторов, направленных от соответствующих точек дисперсионной поверхности к отдельным узлам обратной решетки. Значение каждого такого вектора определяется выражением в фигурных скобках. Члены типа $|D_n^{(i)}|^2$ представляют собой независимый вклад отдельных волн от различных полостей дисперсионной поверхности, а двойная сумма — соответствующие интерференционные члены от каждой пары таких волн.

Косинусный член в формуле (5.13) имеет аргумент с периодом, соответствующим экстинкционной глубине

$$z = \tau = [\Delta k^{(ij)}]^{-1}. \quad (5.14)$$

Представляет интерес дальнейшее третье усреднение вектора $\bar{\bar{\mathbf{S}}}$ по периоду τ . Использование такой величины удобно при любом соотношении ширины фронта падающей вакуумной волны и толщины кристалла, если учесть, что обеспечить постоянство толщины кристалла с точностью порядка микрона на сколько-нибудь заметной площади составляет трудную задачу.

Введем вектор

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{c}{8\pi} \sum_j \left\{ \sum_i |D_n^{(i)}|^2 \exp[-\sigma^{(i)}z] \mathbf{s}_n \right\} \quad (5.15)$$

усредненный дополнительно по экстинкционной глубине для данного излучения. Переходя от многоволнового приближения к двухволновому, следует переписать (5.13) и (5.15), принимая $n = 0, h$ и $i = 1, 2$ в виде

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} = & \frac{c}{8\pi} \left\{ (|D_0^{(1)}|^2 \mathbf{s}_0 + |D_h^{(1)}|^2 \mathbf{s}_h) \exp(-\sigma^{(1)}z) + \right. \\ & + (|D_0^{(2)}|^2 \mathbf{s}_0 + |D_h^{(2)}|^2 \mathbf{s}_h) \exp(-\sigma^{(2)}z) + \\ & + [(D_0^{(1)} D_0^{(2)*} + D_0^{(1)*} D_0^{(2)}) \mathbf{s}_0 + \\ & \left. + (D_h^{(1)} D_h^{(2)*} + D_h^{(1)*} D_h^{(2)}) \mathbf{s}_h] \exp(-\sigma_0 z) \cos(2\pi\Delta k_z z), \right. \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\mathbf{S}}} = & \frac{c}{8\pi} \left\{ (|D_0^{(1)}|^2 \mathbf{s}_0 + |D_h^{(1)}|^2 \mathbf{s}_h) \exp(-\sigma^{(1)}z) + \right. \\ & \left. + (|D_0^{(2)}|^2 \mathbf{s}_0 + |D_h^{(2)}|^2 \mathbf{s}_h) \exp(-\sigma^{(2)}z) \right\}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

где $\Delta k = |\Delta \mathbf{k}|$ определяется из (3.35) и (3.37).

Заметим, что выражения (5.16) и (5.17) удобно относить к одному состоянию поляризации. Действительно, следует учесть, что произведения $(D_h^{(i)} D_0^{(j)*})$ слагающих индукции, относящихся к двум различным состояниям поляризации, обращаются в нуль. Кроме того, глубина экстинкции τ содержит множитель C и, следовательно, будет больше для σ -поляризации.

5.2. Трижды усредненный вектор Пойнтинга в прозрачном кристалле.

Слагающие вектора по полям. Теорема Эвальда — Като

Введем в наши выражения среднее значение вектора плотности тока падающей вакуумной волны:

$$|\bar{\mathbf{S}}_0| = \frac{c}{8\pi} |D_0^{(a)}|^2. \quad (5.18)$$

Заменяя в (5.17) $c/8\pi$ его значением из (5.18), используя соотношения (3.30) и (3.31) и введя обозначение $l = \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \left| \frac{\chi_h}{\chi_h} \right|$, получим ($\sigma^{(1)} = \sigma^{(2)} = 0$)

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} = & \frac{|\bar{\mathbf{S}}_0|}{4(1+y^2)} \{ [(y - \sqrt{1+y^2})^2 \mathbf{s}_0 + l\mathbf{s}_h] + \\ & + [(y + \sqrt{1+y^2})^2 \mathbf{s}_0 + l\mathbf{s}_h] \}, \end{aligned} \quad (5.19a)$$

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{|\bar{\mathbf{S}}_0|}{4 \operatorname{ch}^2 v} \{ \exp(-2v) \mathbf{s}_0 + l\mathbf{s}_h \} + \{ \exp(2v) \mathbf{s}_0 + l\mathbf{s}_h \} \quad (5.19b)$$

или

$$\bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{S}}^{(1)} + \bar{\mathbf{S}}^{(2)}, \quad (5.20a)$$

$$\bar{\mathbf{S}}^{(i)} = \frac{c}{8\pi} \{ |D_0^{(i)}|^2 \mathbf{s}_0 + |D_h^{(i)}|^2 \mathbf{s}_h \}, \quad (5.20b)$$

Очевидно, в (5.19) и (5.20) полная величина вектора плотности потока энергии представлена в виде суммы соответствующих векторов, отвечающих плотности потока энергии каждого из двух полей в кристалле.

Другое представление вектора $\bar{\mathbf{S}}$ следует из иной группировки членов в правой части (5.19), а также из (3.78), (5.18) и (5.20)

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} = & |\bar{\mathbf{S}}_0| \left\{ \sum_{i=1,2} \left| \frac{D_0^{(i)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 \mathbf{s}_0 + \sum_{i=1,2} \left| \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 \mathbf{s}_h \right\}, \\ \bar{\mathbf{S}} = & |\bar{\mathbf{S}}_0| \left\{ \bar{T} \mathbf{s}_0 + \bar{R} \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \mathbf{s}_h \right\}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Здесь вектор $\bar{\mathbf{S}}$ представлен в виде суммы векторов плотности потока энергии преломленной и дифрагированной волн в кристалле.

Выражения, аналогичные (5.21), получаются из (5.20б), если заменить $c/8\pi$ его значением из (5.18) и ввести переменные p_i и q_i :

$$\bar{\mathbf{S}}^{(i)} = |\bar{\mathbf{S}}_0| \left\{ \left| \frac{D_0^{(i)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 \mathbf{s}_0 + \left| \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 \mathbf{s}_h \right\}, \quad (5.22)$$

$$\bar{\mathbf{S}}^{(i)} = |\bar{\mathbf{S}}_0| \{p_i \mathbf{s}_0 + q_i \mathbf{s}_h\}.$$

Существенной характеристикой векторов $\bar{\mathbf{S}}$ и $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ является их ориентация в данной точке кристалла, например, относительно векторов \mathbf{s}_0 и \mathbf{s}_h . На рис. 29 j представляет биссектрису угла 2ϑ между \mathbf{s}_0 и \mathbf{s}_h . Направления векторов $\bar{\mathbf{S}}$ и $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ определяются углами ε и ε_i этих векторов с направлением j , причем положительные значения ε и ε_i отсчитываются в сторону \mathbf{s}_0 . Из рисунка непосредственно следует, что

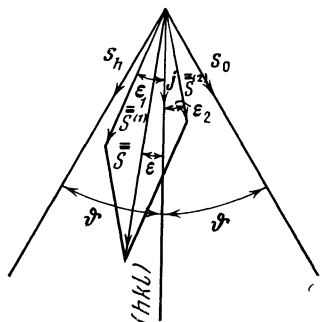


Рис. 29. К выводу формулы (5.23)

$$\frac{\sin(\vartheta + \varepsilon)}{\sin(\vartheta - \varepsilon)} = \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \frac{\bar{T}}{\bar{R}} = \frac{\sum_i |D_0^{(i)}|^2}{\sum_i |D_h^{(i)}|^2}, \quad (5.23)$$

$$\frac{\sin(\vartheta + \varepsilon_i)}{\sin(\vartheta - \varepsilon_i)} = \frac{|D_0^{(i)}|^2}{|D_h^{(i)}|^2}, \quad (5.24)$$

откуда определяются углы ε и ε_i :

$$\operatorname{tg} \varepsilon = \frac{\bar{T} - \bar{R}}{\bar{T} + \bar{R}} \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \operatorname{tg} \vartheta, \quad (5.25a)$$

$$\operatorname{tg} \varepsilon_i = \frac{|D_0^{(i)}|^2 - |D_h^{(i)}|^2}{|D_0^{(i)}|^2 + |D_h^{(i)}|^2} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.25b)$$

Используя далее соотношения (3.17) и (3.18), можно получить следующие формулы:

$$\operatorname{tg} \varepsilon = \frac{2 \operatorname{ch}^2 v - (1+l)}{2 \operatorname{ch}^2 v - (1-l)} \operatorname{tg} \vartheta = \frac{2y^2 + (1-l)}{2y^2 + (1+l)} \operatorname{tg} \vartheta, \quad (5.26a)$$

при $l = 1$, т. е. при симметричном отражении

$$\operatorname{tg} \varepsilon = \operatorname{th}^2 v \operatorname{tg} \vartheta = \frac{y^2}{1+y^2} \operatorname{tg} \vartheta,$$

$$\sin \varepsilon = \frac{1}{f} y^2 \sin \vartheta, \quad \cos \varepsilon = \frac{1}{f} (1+y^2) \cos \vartheta,$$

$$f = \sqrt{y^4 + (1 + 2y^2) \cos^2 \vartheta}, \quad (5.26б)$$

$$\operatorname{tg} \varepsilon_1(v) = \operatorname{tg} \varepsilon_2(-v) = \frac{\exp(-v) - l \exp v}{\exp(-v) + l \exp v} \operatorname{tg} \vartheta \quad (5.27а)$$

и при $l = 1$

$$\operatorname{tg} \varepsilon_i = \mp \operatorname{th} v \operatorname{tg} \vartheta = \mp \frac{y}{(1 + y^2)^{1/2}} \operatorname{tg} \vartheta, \quad (5.27б)$$

$$\sin \varepsilon_i = \mp \frac{y \sin \vartheta}{(x^2 + \cos^2 \vartheta)^{1/2}}.$$

Заметим, что при асимметричном отражении для каждого данного значения y или v углы $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$. Для равенства этих углов необходимо, чтобы

$$v_2 - v_1 = \ln l^2, \quad \frac{(y_2 + \sqrt{1 + y_2^2})}{(y_1 + \sqrt{1 + y_1^2})} = l^2. \quad (5.27в)$$

Очевидно, при $l = 1$ $y_1 = y_2$ или $v_1 = v_2$. Используя соотношения (5.23) и (5.24), легко получить формулы для модулей $|\bar{S}|$ и $|\bar{S}^{(i)}|$ при каждом данном значении углов ε и ε_i .

Так как в фигурных скобках справа в уравнениях (5.21) и (5.22) даются суммы слагающих соответствующих векторов по осям s_0 и s_h , то, очевидно, модули этих векторов равны суммам проекций слагающих на направления векторов. Эти проекции получаются умножением слагающих на косинусы углов, образуемых вектором с соответствующей осью. Преобразуя (5.21) и используя (5.23), получим

$$|\bar{S}| = |\bar{S}_0| \frac{l}{2(1 + y^2)} \left\{ \frac{\sin(\vartheta + \varepsilon)}{\sin(\vartheta - \varepsilon)} \cos(\vartheta - \varepsilon) + \cos(\vartheta + \varepsilon) \right\} =$$

$$= |\bar{S}_0| \frac{|l| \sin 2\vartheta}{2(1 + y^2) \sin(\vartheta - \varepsilon)} \quad (5.28)$$

и аналогичным путем из (5.22) и (5.24)

$$|\bar{S}^{(i)}| = |\bar{S}_0| \frac{|l| \sin 2\vartheta}{4(1 + y^2) \sin(\vartheta - \varepsilon_i)}. \quad (5.29)$$

Наконец, используя выражения (5.26а) и (5.27а), можно вычислить значения $\sin(\vartheta - \varepsilon)$ и $\sin(\vartheta - \varepsilon_i)$, входящие в знаменатели формул (5.28) и (5.29), и вывести нижеследующие выражения для модулей векторов \bar{S} и $\bar{S}^{(i)}$ в функции только от переменной y . В общем случае асимметричного отражения

$$|\bar{S}| = |\bar{S}_0| \times \quad (5.30а)$$

$$\times \frac{[4y^4 + (1 + l) \cos^2 \vartheta (4y^2 + 1 + l) + (1 - l) \sin^2 \vartheta (4y^2 + 1 - l)]^{1/2}}{2(1 + y^2)},$$

$$|\bar{S}^{(i)}| = \quad (5.30б)$$

$$= |\bar{S}_0| \frac{[(1 + l)^2 (y^2 + \cos^2 \vartheta) + (1 - l)^2 (y^2 + \sin^2 \vartheta) \pm (1 - l^2) 2y \sqrt{1 + y^2}]^{1/2}}{4(1 + y^2) (y \mp \sqrt{1 + y^2})},$$

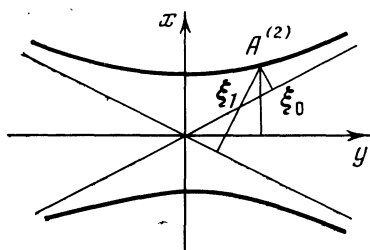


Рис. 30. Доказательство теоремы Эвальда -- Каго, $\xi_1 = \xi_n$

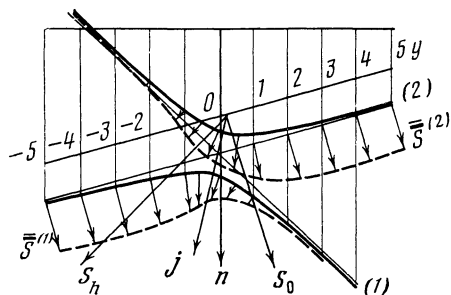


Рис. 31. Направления векторов $\bar{S}^{(i)}$ в области максимума

В случае симметричного отражения

$$|\bar{S}_s| = |\bar{S}_0| \frac{[y^4 + (2y^2 + 1) \cos^2 \vartheta]^{1/2}}{1 + y^2}, \quad (5.31a)$$

$$|\bar{S}_s^{(i)}| = |\bar{S}_0| \frac{(V\sqrt{1 + y^2} + y)[y^2 + \cos^2 \vartheta]^{1/2}}{2(1 + y^2)}. \quad (5.31b)$$

Обращаясь опять к уравнениям (5.20), заметим, что разложение вектора \bar{S} на слагающие по отдельным полям в кристалле имеет физическое обоснование, поскольку эти слагающие «возникают» на точках возбуждения дисперсионной кривой в результате пересечения их нормалью к входной грани. При этом, как было показано Эвальдом [67] и Каго [76], векторы $\bar{S}^{(i)}$ направлены по нормальям к ветвям дисперсионной кривой в соответствующих точках.

Элементарное доказательство упомянутой теоремы заключается в следующем. На рис. 30 показаны прямоугольные координаты x и y , в которых описывается дисперсионная кривая согласно (2.81),

$$x^2 \cos^2 \vartheta - y^2 \sin^2 \vartheta = \xi_0^{(i)} \xi_h^{(i)}, \quad (5.32)$$

где $\xi_0^{(i)} = x \cos \vartheta - y \sin \vartheta$, $\xi_h^{(i)} = x \cos \vartheta + y \sin \vartheta$ или

$$x = \frac{\xi_0^{(i)} + \xi_h^{(i)}}{2 \cos \vartheta}, \quad y = -\frac{\xi_0^{(i)} - \xi_h^{(i)}}{2 \sin \vartheta}. \quad (5.33)$$

Угол, образованный нормалью к дисперсионной кривой (5.32) в точке (x, y) с осью x , определяется условием

$$-\frac{dx}{dy} = \frac{y}{x} \operatorname{tg}^2 \vartheta = \frac{\xi_0^{(i)} - \xi_h^{(i)}}{\xi_0^{(i)} + \xi_h^{(i)}} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.34)$$

Используя соотношения (2.82), эти уравнения можно переписать следующим образом:

$$\frac{dx}{dy} = -\frac{|D_0^{(i)}|^2 - |D_h^{(i)}|^2}{|D_0^{(i)}|^2 + |D_h^{(i)}|^2} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.35)$$

Это уравнение в точности соответствует (5.256) для углов ε_i между векторами $\bar{S}^{(i)}$ и биссектрисой j , направление которой обратно (положительному) направлению оси x . На рис. 31 показаны направления векторов $\bar{S}^{(1)}$ и $\bar{S}^{(2)}$ в различных точках всей области максимума.

Чтобы пояснить применимость полученного результата к общему случаю многоволнового рассеяния, можно использовать ход рассуждений, основанный на понятии групповой скорости.

Рассмотрим общее решение волнового уравнения в виде группы блоховских волн [см. (2.38) и (2.36)]:

$$D = \sum_j D_j = \sum_j a_j \exp\{2\pi i [v_j t - (\mathbf{k}_{0j} \mathbf{r})]\} \sum_m D_m \exp[-2\pi i (\mathbf{h}_m \mathbf{r})]. \quad (5.36)$$

Разброс частот v_j и волновых векторов \mathbf{k}_{0j} отдельных компонентов группы характеризуется условиями

$$|\mathbf{k}_{0j} - \mathbf{k}_0| \ll |\mathbf{k}_0|, \quad v_j - v \ll v, \quad (5.37)$$

где \mathbf{k}_0 и v — некоторые средние значения для группы. Выражение (5.36) можно переписать в следующем виде:

$$D = \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})] \sum_j \left\{ \sum_m a_j D_m \exp[-2\pi i (\mathbf{h}_m \mathbf{r})] \right\} \times \\ \times \exp\{2\pi i [(v_j - v)t - (\mathbf{k}_{0j} - \mathbf{k}_0, \mathbf{r})]\}. \quad (5.38)$$

В соответствии с условиями (5.37) скорость перемещения амплитуды, точнее, энергии, связанной с группой, выражается через

$$\mathbf{u} = -\text{grad}_{\mathbf{k}_0} v. \quad (5.39)$$

Наглядное представление величины вектора групповой скорости \mathbf{u} может быть получено следующим образом. При построении дисперсионной поверхности мы использовали векторы $\mathbf{k}_0^{(i)}$, сходящиеся в начале координат обратной решетки O . При покачивании такого вектора в пределах максимума, при постоянном значении частоты v , его начальная точка описывает некоторый определенный лист дисперсионной поверхности. Если же частота меняется в некотором интервале dv , то каждый вектор в данном волновом поле i будет представлен пучком волновых векторов. Качания этих векторов приводит к заполнению их начальными точками определенного объема, внутри которого частоты v будут функциями координат обратного пространства.

Введенная величина групповой скорости $\mathbf{u} = \text{grad}_{\mathbf{k}} v$ будет направлена по нормали к поверхности $v = \text{const}$, т. е. к дисперсионной поверхности. Можно показать, что величина вектора Пойнтинга равна произведению групповой скорости распространения на плотность энергии.

Рассмотрим теперь качественную картину изменений векторов $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ в области максимума и их вклада в полную величину $\bar{\mathbf{S}}$. При этом можно сопоставить рис. 31 и рис. 11, если рассматривать изменения квадратов соответствующих величин (рис. 11). При больших положительных значениях y или v вблизи правой границы области максимума значение $\text{tg } \varepsilon_2$ согласно (5.27а) приближается к $\text{tg } \vartheta$, т. е. вектор $\bar{\mathbf{S}}^{(2)}$ по направлению близок к вектору $\bar{\mathbf{S}}_0$. При этом модуль $|\bar{\mathbf{S}}^{(2)}|$ согласно (5.30) принимает асимптотическое значение

$$|\bar{\mathbf{S}}^{(2)}|_{y \rightarrow \infty} \approx |\bar{\mathbf{S}}_0| \frac{[(1+l)^2 + (1-l)^2]y^2 + (1-l^2)2y^{1/2}}{2y} \approx |\bar{\mathbf{S}}_0|, \quad (5.40)$$

а следовательно, почти полностью определяет величину вектора $|\bar{\mathbf{S}}|$. Это находится в соответствии с рис. 11 и выражением (5.22), в правой части которого основной вклад в величину $|\bar{\mathbf{S}}^{(2)}|$ будет составлять $|D_0^{(2)}|^2 / |D_0^{(a)}|^2$, а вклад вектора $|\bar{\mathbf{S}}^{(1)}|$ в правой части области максимума ничтожен. Описанные соотношения становятся обратными в крайнем левом углу максимума, где главный вклад определяется вектором $|\bar{\mathbf{S}}^{(1)}|$.

Обращаясь снова к вектору $\bar{\mathbf{S}}^{(2)}$, замечаем, что с уменьшением y направление $\bar{\mathbf{S}}^{(2)}$ постепенно меняется, так как при этом уменьшается угол ε_2 . Вместе с тем уменьшается и модуль этого вектора, причем меняется соотношение между двумя его компонентами в (5.22), так как вклад дифрагированной волны возрастает. При некотором определенном значении y оба компонента в уравнениях (5.22) становятся равными. Согласно (3.30) и (3.31) при этом

$$\sqrt{1+y'^2} + y' = |\sqrt{l}|, \quad y' = \frac{l-1}{2|\sqrt{l}|} \begin{cases} > 0, & l > 1, \\ < 0, & l < 1. \end{cases} \quad (5.41)$$

При $y = y'$ значение вектора

$$\bar{\mathbf{S}}^{(2)} = |\bar{\mathbf{S}}_0| \frac{2l^2 \cos \vartheta}{(1+l)^2} \mathbf{j}, \quad (5.42)$$

так как равенство компонентов означает, что согласно (5.25) $\varepsilon_2 = 0$ и, следовательно, вектор $\bar{\mathbf{S}}^{(2)}$ направлен вдоль \mathbf{j} . Вектор $\bar{\mathbf{S}}^{(1)}$ принимает то же значение и имеет равные компоненты при

$$\sqrt{1+y'^2} - y' = |\sqrt{l}|, \quad y' = \frac{1-l}{2|\sqrt{l}|} \begin{cases} > 0, & l < 1, \\ < 0, & l > 1. \end{cases} \quad (5.43)$$

Дальнейшее уменьшение y до нуля приводит к совпадению направлений всех трех векторов $\bar{\mathbf{S}}$ и $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$. Это непосредственно следует из уравнений (5.26а) и (5.27а), которые дают при $y = 0$ следующее общее значение тангенса угла относительно вектора \mathbf{j} :

$$\text{tg } \varepsilon^{y=0} = \text{tg } \varepsilon_i^{y=0} = \frac{1-l}{1+l} \text{tg } \vartheta. \quad (5.44)$$

В соответствии с этим уравнения (5.30) для модулей векторов плотности потока энергии при $y = 0$ принимают вид

$$\begin{aligned} |\bar{\mathbf{S}}| &= |\bar{\mathbf{S}}_0| \frac{1}{2} [(1+l)^2 \cos^2 \vartheta + (1-l)^2 \sin^2 \vartheta]^{1/2} = \\ &= 2 |\bar{\mathbf{S}}^{(1)}| = 2 |\bar{\mathbf{S}}^{(2)}|. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Указанное в (5.44) общее направление всех трех векторов, не совпадающее с \mathbf{j} , все больше отклоняется от этого последнего с возрастанием множителей асимметрии, введенных в гл. 4 [см. (4.112) и (4.118)] (принимаяем $|\chi_h| \approx |\chi_{\bar{h}}|$):

$$q = \frac{\gamma_0 - \gamma_h}{2 \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} \approx \frac{l-1}{2 \sqrt{l}}, \quad \text{tg } \varepsilon = \text{tg } \varepsilon_1 = - \frac{q \sqrt{l}}{q \sqrt{l} + 1} \text{tg } \vartheta. \quad (5.46)$$

Весьма существенно установить направление этого поворота. Очевидно, что если

$$\text{для } (hkl) \gamma_0 > \gamma_h \text{ и } |\psi_0| < |\psi_h|, \text{ то } \text{tg } \varepsilon = \text{tg } \varepsilon_1 < 0, \quad (5.47a)$$

$$\text{для } (h\bar{k}l) \gamma_0 < \gamma_h \text{ и } |\psi_0| < |\psi_h|, \text{ то } \text{tg } \varepsilon = \text{tg } \varepsilon_1 > 0. \quad (5.47b)$$

Соотношения (5.47) означают, что при $y = 0$ общая энергия волнового поля, представляемая вектором $\bar{\mathbf{S}}$, распространяется при $\gamma_0 > \gamma_h$ в направлении, лежащем между отражающей плоскостью и вектором \mathbf{s}_h , а при $\gamma_0 < \gamma_h$ — между той же плоскостью и вектором \mathbf{s}_0 .

Очевидно, также, что в рассмотренном интервале уменьшающихся положительных значений y векторы $\bar{\mathbf{S}}^{(1)}$ и $\bar{\mathbf{S}}$ также совершили поворот: первый от \mathbf{s}_h , где модуль $\bar{\mathbf{S}}^{(1)} \approx 0$, и второй от \mathbf{s}_0 — до значений $\varepsilon_1^{y=0} = -\varepsilon_2^{y=0} = -\varepsilon^{y=0}$.

При дальнейшем изменении y в сторону возрастающих отрицательных значений в угловом интервале $(\vartheta + \varepsilon)$ векторы $\bar{\mathbf{S}}^{(1)}$ и $\bar{\mathbf{S}}$ будут поворачиваться до направления \mathbf{s}_0 , а вектор $\bar{\mathbf{S}}^{(2)}$ в меньшем угловом интервале $(\vartheta - \varepsilon)$ до направления \mathbf{s}_h , где $|\bar{\mathbf{S}}^{(2)}| \approx 0$.

При симметричном отражении значение y , при котором оба компонента y каждого из векторов $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ будут равны, обращается в нуль согласно (5.41) и (5.43) и, таким образом, совпадает со значением y , при котором все три вектора плотности потока энергии имеют одинаковое направление. Выражение (5.45) принимает более простой вид

$$|\bar{\mathbf{S}}_s| = |\bar{\mathbf{S}}_0| \cos \vartheta = 2 |\bar{\mathbf{S}}^{(1)}| = 2 |\bar{\mathbf{S}}^{(2)}|. \quad (5.48)$$

Здесь, очевидно, общее направление совпадает с \mathbf{j} , а значит и с отражающей плоскостью.

Наконец, важно отметить, что полная величина поворотов векторов $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ в интервале изменений y , т. е. в пределах немногих

угловых секунд, составляет 2θ , что выражается в зависимости от индексов отражающей плоскости и используемого излучения величинами $\sim 20^\circ \div 90^\circ$ и более. Можно показать, что величина производной $d\varepsilon/d\eta$ содержит в качестве множителя величину $|\chi_h|^{-1} \approx 10^5 \div 10^6$, что и определяет этот эффект. Интервал поворотов \bar{S} при симметричном отражении — от s_0 до j и обратно; при асимметричном — от s_0 до $(\theta \pm \varepsilon_0)$ и обратно. Впрочем модуль величины ε_0 при использовании мало поглощаемого излучения, например $MoK\alpha$, составляет несколько градусов.

Преобразуем некоторые из полученных выше соотношений, используя систему координат, естественным образом связанную с формой исследуемого кристалла в виде плоскопараллельной пластинки. В этой системе ось x (рис. 32) с единичным вектором a лежит в плоскости входной грани, и ось z с единичным вектором n — по направлению внутренней нормали.

В соответствии с выбором знаков для ψ_0 и ψ_h , сделанным в гл. 3, а именно, считая их положительными при отсчете от n по часовой стрелке, принимаем и для α тот же знак. В таком случае положительное направление оси x и вектора a принимаем налево от начала координат, как показано на рис. 32 для асимметричного отражения. Связи между векторами s_0 и s_h , с одной стороны, и n и a — с другой, имеют следующий вид:

$$\frac{s_0}{\gamma_0} = n + a \operatorname{tg} \psi_0, \quad \frac{s_h}{\gamma_h} = n + a \operatorname{tg} \psi_h. \quad (5.49)$$

Преобразуем (5.24), вынося за скобку $\bar{R}\gamma_0$ и используя (5.49)

$$\begin{aligned} \bar{S} = |\bar{S}_0| \frac{\gamma_0}{2(1+y^2)} \{2(1+y^2)n + 2y^2a \operatorname{tg} \psi_0 + \\ + (\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h)a\}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Из этого выражения можно определить уравнение траектории распространения энергии в прозрачном кристалле, отнесенное к указанным осям,

$$x = z \operatorname{tg} \alpha; \quad \operatorname{tg} \alpha = \frac{y^2}{1+y^2} \operatorname{tg} \psi_0 + \frac{\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h}{2(1+y^2)}. \quad (5.51)$$

Это уравнение показывает, что энергия волнового поля в прозрачном кристалле распространяется по прямым, выходящим из «точки» падения на входную грань падающей плоской волны с ограниченным волновым фронтом. Наклон этих прямых, во всем интервале значений y ясен из предшествующего анализа, причем соотношение между углами α и ε соответствует той или иной схеме отражения. Примеры таких схем и этих соотношений приведены на рис. 32 и 33. В случае рис. 33

$$-\operatorname{tg} \psi_0 = \operatorname{tg} \psi_h = \pm |\operatorname{tg} \theta|. \quad (5.52)$$

В результате значение $\operatorname{tg} \alpha$ определяется из более простого

Соотношения

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{y^2}{1+y^2} \operatorname{tg} \psi_0 = \pm \frac{y^2}{1+y^2} |\operatorname{tg} \psi|, \quad (5.53)$$

где знаки плюс или минус выбираются соответственно знаку $\operatorname{tg} \alpha$ или $\operatorname{tg} \psi_0$. Выражения (5.51) сами по себе не вносят нового в физическую картину или геометрию распространения энергии волнового поля в прозрачных кристаллах. Вместе с тем эти выражения непосредственно дают ориентацию вектора \bar{S} , тогда как формулы

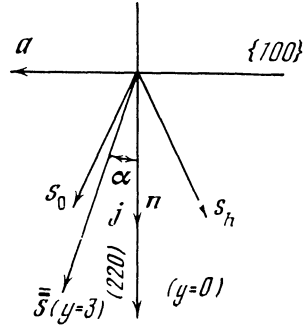
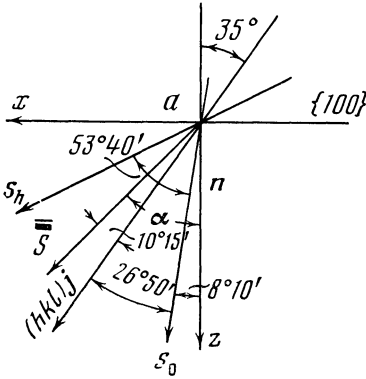


Рис. 32. К выводу формул (5.50) и (5.51)

Si, ограничение $\sim\{100\}$, отражение 444, излучение $\text{MoK}\alpha$, $\varphi = 55^\circ$

Рис. 33. Схема симметричного отражения (Si, $\text{MoK}\alpha$, 220)

5.26) позволяют вычислить лишь положение этого вектора относительно следа отражающей плоскости или вектора j .

Кроме того, использование приведенной системы координат является весьма существенным при переходе к поглощающему кристаллу, в котором, в отличие от прозрачного кристалла, $\operatorname{tg} \varphi$ является функцией вертикальной координаты или глубины z . В результате траектория распространения энергии становится криволинейной, и определение ее уравнения в явном виде требует интегрирования более сложной функции, чем (5.51).

Изложенный анализ, относящийся к распространению энергии в прозрачном кристалле, одинаково применим как к центросимметричному кристаллу, так и к кристаллу без центра симметрии.

5.3. Трижды усредненный вектор Пойнтинга в поглощающем центросимметричном кристалле

Запишем следующее выражение для вектора \bar{S} в поглощающем кристалле ($\sigma_h + \sigma'_h = \kappa$, $|\chi_h| / |\chi'_h| = 1$):

$$\bar{S} = |\bar{S}_0| \frac{\exp[-\sigma_m z]}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} \left\{ [\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z)] \mathbf{s}_0 + \frac{\gamma_0}{\gamma_h} [\operatorname{ch} \kappa z] \mathbf{s}_h \right\}. \quad (5.54)$$

Используя систему координат, введенную выше с единичными векторами \mathbf{a} и \mathbf{n} , перепишем (5.54)

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} = |\bar{\mathbf{S}}_0| \frac{\exp(-\sigma_m z) \gamma_0}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} \{ \operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) (\mathbf{n} + \mathbf{a} \operatorname{tg} \psi_0) + \\ + \operatorname{ch} \kappa z (\mathbf{n} + \mathbf{a} \operatorname{tg} \psi_h) \}. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Используя тождества

$$\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) + \operatorname{ch} \kappa z = 2 \operatorname{ch}(v_r + \kappa z) \operatorname{ch} v_r,$$

$$\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) - \operatorname{ch} \kappa z = 2 \operatorname{sh}(v_r + \kappa z) \operatorname{sh} v_r,$$

легко получить следующее выражение для $\bar{\mathbf{S}}$:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} = |\bar{\mathbf{S}}_0| \frac{\exp(-\sigma_m z) \gamma_0}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} \{ 2 \operatorname{ch}(v_r + \kappa z) \operatorname{ch} v_r \mathbf{n} + \\ + 2 \operatorname{sh}(v_r + \kappa z) \operatorname{sh} v_r \operatorname{tg} \psi_0 \mathbf{a} + \operatorname{ch} \kappa z (\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0) \mathbf{a} \}. \end{aligned} \quad (5.56)$$

Отсюда тангенс угла наклона касательной к траектории в точке с координатами (x, z) относительно оси z

$$\frac{dx}{dz} = \operatorname{tg} \alpha = \operatorname{tg} \psi_0 \operatorname{th}(v_r + \kappa z) \operatorname{th} v_r + \frac{\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0}{2 \operatorname{ch} v_r} \frac{\operatorname{ch} \kappa z}{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)} \quad (5.57)$$

и уравнение траектории в выбранных осях

$$\begin{aligned} x = \int_0^z \operatorname{th}(v_r + \kappa z) \operatorname{th} v_r \operatorname{tg} \psi_0 dz + \\ + \frac{\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0}{2 \operatorname{ch} v_r} \int_0^z \frac{\operatorname{ch} \kappa z}{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)} dz = X_1 + X_2. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Первый интеграл является стандартным

$$X_1 = \frac{\operatorname{th} v_r}{\kappa} \operatorname{tg} \psi_0 \ln \frac{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)}{\operatorname{ch} v_r}, \quad (5.59)$$

а второй легко решается с помощью подстановки $\exp(v_r + \kappa z) = t$

$$\begin{aligned} X_2 = \frac{\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0}{2 \operatorname{ch} v_r} \left\{ \frac{\operatorname{ch} v_r}{\kappa} (v_r + \kappa z) - \frac{\operatorname{sh} v_r}{\kappa} \ln 2 \operatorname{ch}(v_r + \kappa z) \right\}_0^z = \\ = \frac{1}{2} (\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0) z - \frac{1}{2} (\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0) \frac{\operatorname{th} v_r}{\kappa} \ln \frac{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)}{\operatorname{ch} v_r}. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Окончательно

$$x = \frac{y_r}{\kappa \sqrt{1 + y_r^2}} \operatorname{tg} \psi_0 \ln \frac{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)}{\operatorname{ch} v_r} + \frac{z}{2} (\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h) - \\ - \frac{y_r}{2\kappa \sqrt{1 + y_r^2}} (\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h) \ln \frac{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)}{\operatorname{ch} v_r},$$

или

$$x = - \frac{y_r \operatorname{tg} \psi_h}{\kappa \sqrt{1 + y_r^2}} \ln \frac{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)}{\operatorname{ch} v_r} - \\ - \frac{\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h}{2} \left[\frac{y_r}{\kappa \sqrt{1 + y_r^2}} \ln \frac{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)}{\operatorname{ch} v_r} - z \right]. \quad (5.61)$$

В последнем выражении первый член соответствует траектории распространения энергии в случае симметричного отражения и второй член возникает при переходе к общему случаю асимметричного отражения.

Полученные выражения для траектории распространения энергии волнового поля (5.61) и для угла α (5.57) в функции от координатного параметра v_r и глубины z являются достаточно сложными.

Качественный анализ формы и расположения траекторий, а также некоторые основные численные оценки могут быть выполнены, если использовать асимптотические формы уравнения (5.57) для участка кристалла вблизи поверхности ($z \approx 0$) и при большой толщине ($z \approx \infty$). В первом случае используем условия

$$\operatorname{th}(v_r + \kappa z)|_{z=0} \approx \operatorname{th} v_r, \quad \operatorname{ch} \kappa z|_{z \approx 0} \approx 1, \\ \operatorname{ch}(v_r + \kappa z)|_{z \approx 0} \approx \operatorname{ch} v_r, \quad (5.62)$$

откуда

$$\operatorname{tg} \alpha|_{z=0} \approx \operatorname{th}^2 v_r \operatorname{tg} \psi_0 + \frac{\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} = \frac{y_r^2 \operatorname{tg} \psi_0}{1 + y_r^2} + \frac{\operatorname{tg} \psi_h + \operatorname{tg} \psi_0}{2(1 + y_r^2)}. \quad (5.63)$$

Во втором случае имеем

$$\operatorname{th}(v_r + \kappa z)|_{z \approx \infty} \approx 1, \quad \left. \frac{\operatorname{ch} \kappa z}{\operatorname{ch}(v_r + \kappa z)} \right|_{z \approx \infty} \approx \exp(-v_r), \quad (5.64)$$

$$\operatorname{tg} \alpha|_{z \approx \infty} \approx \operatorname{th} v_r \operatorname{tg} \psi_0 + \frac{\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h}{2 \operatorname{ch} v_r \exp v_r} = \\ = \frac{y_r \operatorname{tg} \psi_0}{\sqrt{1 + y_r^2}} + \frac{\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h}{2 \sqrt{1 + y_r^2} (y_r + \sqrt{1 + y_r^2})}. \quad (5.65)$$

Заметим, что уравнения (5.63) и (5.65) фактически описывают распространение энергии в прозрачном кристалле: в поверхностном слое при наличии двух полей, так как (5.63) совпадает с (5.51) и в глубине кристалла при наличии одного поля (5.65). Действительно, рассматривая распространение второго поля

в поглощающем кристалле, используем выражения (5.22), (5.49) и получаем

$$\bar{S}^{(2)} = \frac{\exp[-(\sigma_m - \kappa)z]}{2(1 + y_r^2)} \{(\exp(2\nu_r) + 1)n + \exp(2\nu_r) \operatorname{tg} \psi_0 a + \operatorname{tg} \psi_h a\}. \quad (5.66)$$

Из этого выражения непосредственно определяется значение $\operatorname{tg} \alpha$, совпадающее с (5.57).

Дальнейший анализ применяется к определенным схемам асимметричной (и симметричной) съемки. На рис. 32—34 представлены

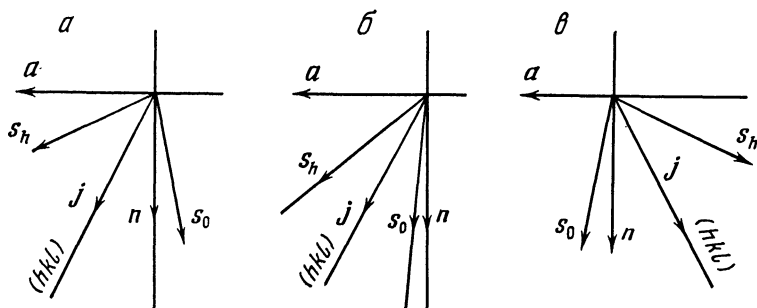


Рис. 34. Схема асимметричного отражения

$\alpha - \psi_0 = -11^\circ$, $\psi_h = +65^\circ$; $\beta - \psi_0 = +6^\circ 30'$, $\psi_h = 50^\circ$; $\epsilon - \psi_0 = -65^\circ$, $\psi_h = 11^\circ$

соответствующие схемы. На рис. 32, 34, б углы $\widehat{s_0 s_h}$ полностью уместятся в одном из квадрантов прямоугольной системы координат. Следовательно, при любом значении угловых параметров ν_r или y_r , а также на любой глубине знаки $\operatorname{tg} \alpha$ и угла α будут постоянны: для схем рис. 32 и 34, б знаки будут положительными. В противоположность этому схемы рис. 34, а, в так же как и частный случай подобных схем рис. 33, соответствуют более сложным закономерностям в изменении формы траекторий вектора Пойнтинга при изменении упомянутых параметров (табл. 8).

Обратимся сначала к схемам, представленным на рис. 32 и 34, б, в которых $\operatorname{tg} \psi_0$ и $\operatorname{tg} \psi_h$ положительны. Выражение (5.63) приводит одинаково при положительных и отрицательных возрастающих значениях y_r к уменьшению величин $\operatorname{tg} \alpha$ и α . От наибольшего значения, отвечающего $y_r = 0$, угол α , уменьшаясь, приближается к значению ψ_0 . Что касается значений угла α для $z \approx \infty$, определяемых из уравнения (5.65), то здесь возрастание положительных и отрицательных значений y_r приводит к различным результатам. В первом случае значения угла α приближаются к величине ψ_0 , во втором случае — к ψ_h . При этом интервал изменений при распространении энергии от поверхностного слоя к более глубокому (от $z \approx 0$ до $z \approx \infty$) с возрастанием положитель-

Таблица 8. Значения углов α между направлением вектора \vec{S} и вертикальной осью n в поглощающем кристалле (рис. 34)

Схема отражения	Глубина	Угловой параметр y_r						
		-5	-3	-1	0	1	3	5
$\psi_0 = 6^\circ 30'$	$z \approx 0$	7°	$9^\circ 30'$	$20^\circ 30'$	33°	$20^\circ 40'$	$9^\circ 30'$	7°
$\psi_h = 50^\circ$	$z \approx \infty$	50°	$49^\circ 30'$	46°	33°	$18^\circ 40'$	8°	$6^\circ 30'$
$\psi_0 = -11^\circ$	$z \approx 0$	-10°	$-4^\circ 30'$	21°	44°	21°	$-4^\circ 30'$	-10°
$\psi_h = 65^\circ$	$z \approx \infty$	65°	$64^\circ 40'$	$61^\circ 20'$	44°	$8^\circ 20'$	$-7^\circ 35'$	$-10^\circ 40'$
$\psi_0 = -65^\circ$	$z \approx 0$	$-64^\circ 35'$	$-63^\circ 35'$	$-57^\circ 25'$	$-44^\circ 20'$	$-57^\circ 25'$	$-63^\circ 35'$	$-64^\circ 35'$
$\psi_h = 11^\circ$	$z \approx \infty$	$10^\circ 45'$	$-6^\circ 30'$	$-9^\circ 35'$	$-44^\circ 20'$	$-60^\circ 10'$	$-64^\circ 30'$	$-64^\circ 50'$

ных значений y_r уменьшается почти до нуля. С возрастанием отрицательных значений y_r этот интервал возрастает до полной величины 2θ .

Другими словами, возрастание $|y_r|$ приводит к совпадению направлений векторов \vec{S} и s_0 в поверхностном слое, в то время как возрастание положительных значений y_r приводит к совпадению тех же векторов в глубине кристалла, а возрастание отрицательных значений y_r — к совпадению \vec{S} и s_h . Следовательно, кривизна соответствующих траекторий в первом случае ($y_r > 0$) уменьшается и во втором ($y_r < 0$) возрастает.

В соответствии с этим траектория вектора \vec{S} вблизи правого (положительного) края максимума (так же как и в центре при $y_r = 0$) близка к прямолинейной, в то время как в левой стороне максимума интервал изменений $\Delta\alpha$ приближается к 2θ . Сказанным определяются и знаки углов α , которые зависят от знаков ψ_0 и ψ_h .

Все это относится и к схемам, представляющим зеркальное отражение рис. 34, б.

Существенной чертой траекторий вектора Пойнтинга при использовании схем с углом $\widehat{s_0 s_h}$, захватывающим части обоих нижних квадрантов координатного поля, является их искривление с пересечением вертикальной оси n . Это следует из изменения знаков углов α в глубине кристалла по сравнению со знаками в поверхностном слое, которое наблюдается (табл. 8) в левой стороне максимума. Использование для численных оценок, приведенных в табл. 8, асимптотических выражений (5.63) и (5.65) не позволяет проследить за формой таких траекторий, в частности, определить (в этом полуколичественном анализе) значения координаты x , при которых траектории пересекают вертикальную ось. Это возможно только в случае симметричного отражения, схема которого представлена на рис. 33.

При симметричном отражении [см. (4.39) и (4.101)] $C = 1$,

$$\psi_0 = -\psi_h = \vartheta, \quad (5.67)$$

$$\kappa = \sigma_h = \frac{\mu \varepsilon \cos \nu_h}{\cos \vartheta \sqrt{1 + y_r^2}}. \quad (5.68)$$

Уравнение траектории распространения энергии (5.61) приобретает следующую форму:

$$x_s = \frac{y_r \sin \vartheta}{\mu \varepsilon \cos \nu_h} \ln \frac{\operatorname{ch} \left[\nu_r + \frac{z \mu \varepsilon \cos \nu_h}{\cos \vartheta \sqrt{1 + y_r^2}} \right]}{\operatorname{ch} \nu_r}. \quad (5.69)$$

Очевидно, что знак x_s будет обратным знаку y_r , так как $\sin \vartheta$ в данном случае [$\psi_0 < 0$] будет отрицательной величиной. Наконец, существенно упрощается также и (5.57):

$$\operatorname{tg} \alpha_s = \operatorname{th} \nu_r \operatorname{th} (\nu_r + z \sigma_h) \operatorname{tg} \vartheta \equiv \frac{y_r}{\sqrt{1 + y_r^2}} \operatorname{th} (\nu_r + z \sigma_h) \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.70)$$

Знаки функции $\operatorname{tg} \alpha_s$ подчиняются тому же правилу, что и знаки x_s . Асимптотические формы уравнений (5.70) имеют следующий вид:

$$\operatorname{tg} \alpha_s |_{z \approx 0} \approx \frac{y_r^2}{1 + y_r^2} \operatorname{tg} \psi_0 = - \frac{y_r^2}{1 + y_r^2} |\operatorname{tg} \vartheta|, \quad (5.71)$$

$$\operatorname{tg} \alpha_s |_{z \approx \infty} \approx \frac{y_r}{\sqrt{1 + y_r^2}} \operatorname{tg} \psi_0, \quad (5.72a)$$

$$\operatorname{tg} \alpha_s |_{z \approx \infty} \approx - \frac{y_r}{\sqrt{1 + y_r^2}} |\operatorname{tg} \vartheta|. \quad (5.72b)$$

Выражение (5.72a) совпадает с (5.53) при симметричном отражении от прозрачного кристалла, а (5.72b) соответствует случаю распространения энергии одного лишь второго поля и непосредственно получается из (5.65) наложением условий для симметричного отражения. Рассматривая зависимость знаков углов α и $\operatorname{tg} \alpha$ от знаков y_r , замечаем следующее.

Положительные значения y_r при обоих предельных значениях z дают отрицательные значения $\operatorname{tg} \alpha$, т. е. траектории распространения энергии при $y_r < 0$ полностью укладываются на правой стороне координатного поля при $x < 0$. При этом чем больше значение y_r , тем меньше увеличение $|\operatorname{tg} \alpha|$ во всем интервале изменений z . При значениях y_r , соответствующих положительной границе максимума, значения $\operatorname{tg} \alpha_{z \approx 0} \approx \operatorname{tg} \alpha_{z \approx \infty}$, т. е. траектория вектора \vec{S} идет почти параллельно направлению \mathbf{s}_0 .

При отрицательных значениях y_r вблизи верхней границы кристалла $\operatorname{tg} \alpha$ также имеет отрицательные значения, однако при

больших $z \operatorname{tg} \alpha$ меняет знак на обратный, т. е. траектория вектора \bar{S} пересекает ось z . Чем больше $|y_r|$, тем больше изменение $|\operatorname{tg} \alpha|$. При больших отрицательных значениях y_r изменение $|\alpha|$ составляет почти 2θ .

Из условия $x_s = 0$, согласно (5.70), помимо решения $y_r = 0$, следует также, что при $y_r < 0$ и $v_r < 0$

$$z = 2|v_r|/\sigma_h. \quad (5.73)$$

Другими словами, с уменьшением y_r или v_r точка пересечения «поднимается» к началу координат, т. е. к входной грани кристалла. При $y_r = 0$ траектория распространения энергии совпадает с осью z , которая лежит в отражающей плоскости.

Указанные особенности геометрии распространения энергии в поглощающем кристалле иллюстрируются некоторыми кривыми, представляющими траектории в схеме отражения на рис. 35.

Изложенный анализ геометрии распространения энергии в поглощающем кристалле относится к сравнительно небольшим значениям произведений $\sigma_m t$ для асимметричного отражения или μt для симметричного отражения. Вступая в область толстого кристалла, мы должны учесть зависимость поглощения от параметра y_r или ввести в наши формулы вместо коэффициента поглощения специальную функцию линейного коэффициента поглощения по направлению вектора \bar{S} — μ^S , который может быть представлен либо в виде функции от y_r (или v_r), либо угла ϵ отклонения \bar{S} от отражающей плоскости.

Наиболее простой путь для учета поглощения при рассмотрении распространения энергии в толстом поглощающем кристалле заключается в замене выражения для \bar{S} выражением для $\bar{S}^{(2)}$ (5.66).

Таким образом, значение вектора плотности потока энергии в толстом поглощающем кристалле мы получаем, используя (5.306) для $\bar{S}^{(2)}$ и вводя множитель поглощения:

$$|\bar{S}| = |\bar{S}_0| \frac{\exp[-(\sigma_m - \kappa)z]}{4(1 + y_r^2)} N(y_r + \sqrt{1 + y_r^2}), \quad (5.74)$$

где N — числитель дроби (5.306). В частном случае симметричного отражения используется (5.316):

$$|\bar{S}| = |\bar{S}_0| \frac{\exp[-(\sigma_m - \kappa)z]}{2(1 + y_r^2)} (y_r + \sqrt{1 + y_r^2}) \sqrt{y_r^2 + \cos^2 \vartheta}. \quad (5.75)$$

На рис. 36 представлена полярная диаграмма величины $|\bar{S}|/|\bar{S}_0|$ в функции от y_r , согласно (5.75), для симметричного 220 отражения излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge при значениях $\mu t = 17,65$ и $35,3$. Наиболее существенной чертой диаграммы является сужение фронта волнового поля, распространяющегося в достаточно толстом поглощающем кристалле. Отметим, что схема, представленная на рис. 36, соответствует падению вакуумной волны с весьма

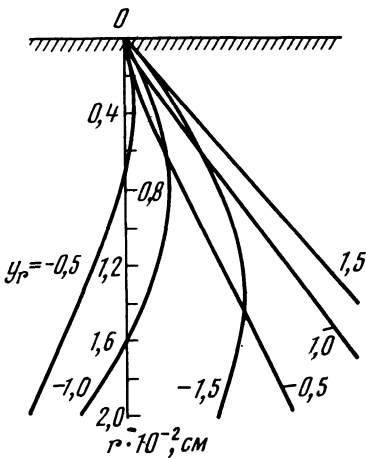
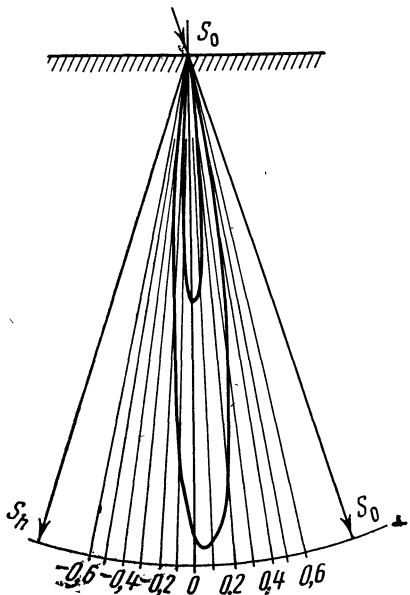


Рис. 35. Криволинейная траектория вектора Пойнтинга в поглощающем кристалле

Рис. 36. Сужение волнового фронта в толстом кристалле



узким волновым фронтом и при наличии полного набора векторов \bar{S} эквивалентна падению сферической вакуумной волны.

Эффект сужения волнового фронта обязан зависимости показателя при множителе поглощения в (5.75) от угловых переменных y_r или v_r . На основании (4.78), (4.94) и (4.113а) можно получить следующее выражение для этого показателя:

$$\begin{aligned} \sigma^{(i)} &= \sigma_m \pm \sigma_h \pm \sigma'_h = \\ &= \frac{\mu}{2 \operatorname{ch} v_r} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} \exp(\mp v_r) + \frac{1}{\gamma_h} \exp(\pm v_r) \mp \frac{2C\varepsilon}{V\gamma_0\gamma_h} \right\}. \end{aligned} \quad (5.76)$$

Нетрудно видеть, что, например, в случае симметричного отражения $\sigma^{(2)}$ уменьшается от границ области максимума к средней точке в зависимости от величины $\varepsilon = |\chi_{hi}| / |\chi_{0i}|$ на $\sim 4,5 \div \div 30\%$, что приводит к весьма существенному возрастанию $|\bar{S}|$.

Более общее значение имеет величина линейного показателя поглощения, в виде функции ε_i , дающая величину поглощения вдоль направления $\bar{S}^{(i)}$ для любой точки дисперсионной кривой. Такое выражение может быть использовано в тех случаях, когда условия эксперимента не позволяют связать каждый данный вектор плотности потока энергии с определенным значением угла η внутри максимума при падении на кристалл расходящегося пучка или сферической волны.

Вводим вектор $L^{(i)}$ (рис. 37), определяемый согласно (5.206) следующим образом:

$$L^{(i)} = \frac{8\pi}{c} \bar{S}^{(i)} = |D_0^{(i)}|^2 s_0 + |D_h^{(i)}|^2 s_h, \quad (5.77)$$

откуда

$$(L^{(i)} \cdot n) = |L^{(i)}| \cos \alpha_i = |D_0^{(i)}|^2 \gamma_0 + |D_h^{(i)}|^2 \gamma_h. \quad (5.78)$$

С другой стороны, из заштрихованного треугольника на рис. 37 следует, что

$$|L^{(i)}| \sin(\vartheta \pm \varepsilon_i) = |D_{0,h}^{(i)}|^2 \sin 2\vartheta, \quad (5.79)$$

$$\begin{aligned} \frac{|D_0^{(i)}| |D_h^{(i)}|}{|L^{(i)}|} &= (\sin 2\vartheta)^{-1} \sqrt{\sin(\vartheta + \varepsilon_i) \sin(\vartheta - \varepsilon_i)} = \\ &= (2 \cos \vartheta)^{-1} \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \varepsilon_i}{\sin^2 \vartheta}}. \end{aligned} \quad (5.80)$$

Проектируя тот же треугольник на направление j , получаем

$$|L^{(i)}| \cos \varepsilon_i = \{|D_0^{(i)}|^2 + |D_h^{(i)}|^2\} \cos \vartheta. \quad (5.81)$$

Далее, из (3.18) следует, что

$$\frac{\exp(\pm v_r)}{\gamma_0} = \frac{1}{\sqrt{\gamma_h}} \left| \frac{D_0^{(i)}}{D_h^{(i)}} \right|,$$

$$\frac{\exp(\pm v_r)}{\gamma_h} = \frac{1}{\gamma_0} \left| \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(i)}} \right|,$$

$$2 \operatorname{ch} v_r = \frac{|D_0^{(i)}|^2 \gamma_0 + |D_h^{(i)}|^2 \gamma_h}{|D_0| |D_h| \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}. \quad (5.82)$$

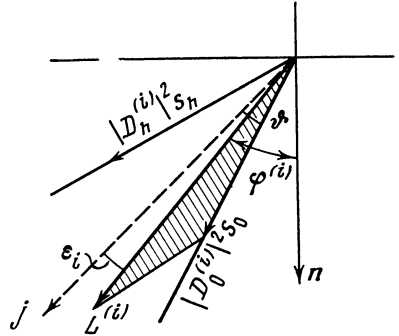


Рис. 37. К выводу формулы (5.84)

Используя выведенные соотношения, а также выражение (5.76) для σ , получаем

$$\mu^{S(i)} = \sigma \cos \alpha_i = (\mu/|L|) \{|D_0^{(i)}|^2 + |D_h^{(i)}|^2 \pm 2C\varepsilon \cos v_h |D_0^{(i)}| |D_h^{(i)}|\} \quad (5.83a)$$

или, исключая $|L|$ с помощью (5.80) и (5.81), приходим к выражению, совпадающему с формулой Лауэ для μ в направлении вектора \bar{S} [14],

$$\mu^{S(i)} = \frac{\mu}{\cos \vartheta} \left\{ \cos \varepsilon_i \pm C\varepsilon \cos v_h \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \varepsilon_i}{\sin^2 \vartheta}} \right\}, \quad \varepsilon = \frac{|x_{hi}|}{|x_{0i}|}. \quad (5.83б)$$

Наконец, используя тождество

$$\frac{1}{\cos \vartheta} \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \varepsilon_i}{\sin^2 \vartheta}} = \frac{\cos \varepsilon_i}{\cos \vartheta} \sqrt{1 - \frac{\operatorname{tg}^2 \varepsilon_i}{\operatorname{tg}^2 \vartheta}},$$

получаем

$$\mu^{S^{(i)}} = \left\{ 2\pi K |\chi_{0i}| \pm 2\pi KC |\chi_{hi}| \cos \nu_h \sqrt{1 - \frac{\operatorname{tg}^2 \varepsilon_i}{\operatorname{tg}^2 \vartheta}} \right\} \frac{\cos \varepsilon_i}{\cos \vartheta}. \quad (5.84)$$

Если энергия волнового поля распространилась вдоль некоторого направления L на отрезок l , то потеря этой энергии на поглощение составит, очевидно, $\mu^{S^{(i)}} l$. Проектируя путь l на направление j и разлагая полученную проекцию на слагающие $l_0 s_0$ и $l_h s_h$, получим

$$\begin{aligned} \mu^{S^{(i)}} l \cos \varepsilon_i &= \mu^{S^{(i)}} (l_0 + l_h) \cos \vartheta = \\ &= \left\{ 2\pi K |\chi_{0i}| \pm 2\pi KC \cos \nu_h |\chi_{hi}| \sqrt{1 - \frac{\operatorname{tg}^2 \varepsilon_i}{\operatorname{tg}^2 \vartheta}} \right\} (l_0 + l_h). \end{aligned} \quad (5.85)$$

Из этого соотношения следует, что выражение в фигурных скобках является линейным коэффициентом поглощения вдоль некоторого оптического пути в кристалле, состоящего из бесконечно малых отрезков вдоль s_0 и s_h . Полученное выражение для линейного показателя поглощения, как показал Като [24], обладает замечательным свойством: оно может быть получено без выполнения условий (4.80), которые лежат в основе теории динамического рассеяния в поглощающем кристалле.

Отметим два предельных значения правой части (5.85) при $\varepsilon_i = 0$ и $\varepsilon_i = \vartheta$. При $\varepsilon_i = 0$ второй член в фигурных скобках приобретает максимально возможное значение, а следовательно, линейный коэффициент поглощения (для второго поля) — минимальную величину. Другими словами, минимум поглощения энергии имеет место при ее распространении вдоль отражающей плоскости. Наоборот, максимум поглощения, отвечающий величине нормального линейного поглощения $2\pi K |\chi_{0i}| = \mu$, соответствует значению $\varepsilon_i = \vartheta$, т. е. значению $\varepsilon_i = \pm \vartheta$, соответствуют определенные резкие границы динамического волнового поля внутри кристалла. Таким образом, выражение (5.85) описывает волновое поле, строго локализованное в (треугольном) участке поглощающего кристалла.

Вместе с тем выражение (5.85), имеющее общий характер и относящееся как к симметричному, так и к асимметричному отражениям, показывает две составные части линейного коэффициента поглощения кристалла в области максимума: нормальный коэффициент μ и аномальный — интерференционный или бормановский

$$\mu_h = \pm 2\pi KC \cos \nu_h \left[\chi_{hi} \chi_{\bar{h}i} \left(1 - \frac{\operatorname{tg}^2 \varepsilon_i}{\operatorname{tg}^2 \vartheta} \right) \right]^{1/2}. \quad (5.86)$$

При этом интерференционный коэффициент поглощения зависит только от параметра χ_{hi} и не зависит от χ_{oi} , который определяет величину μ .

Сопоставляя выражение для линейного коэффициента поглощения внутри области максимума (5.85) с формулой типа (4.99)

$$\sigma = \frac{\mu}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) \pm \frac{\mu}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \text{th } v_r \pm \frac{C_{\mu\varepsilon} \cos v_h}{V \gamma_0 \gamma_h 2 \text{ch } v_r}, \quad (5.87)$$

замечаем прежде всего, что если (5.85) не связано с определенным значением угла падения ψ_0 , а следовательно, и с положением отражающей плоскости относительно входной грани, то (5.87) не связано с определенной точкой падения вакуумной волны на кристалл. Таким образом, переходя от (5.87) к (5.85), мы переходим от приближения падающей плоской волны к падающей сферической волне при достаточно узком волновом фронте (узкой щели). Очевидно, в общем случае оба выражения неэквивалентны, так как (5.85) дает коэффициент поглощения вдоль любого направления в кристалле, в то время как (5.87) — вдоль нормали к входной грани. Напоминаем, что (5.85) имеет общее значение, так как применимо при любом соотношении параметров $|\chi_{hi}|$ и $|\chi_{hr}|$, а (5.87) лишь при $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$. По-видимому, волновое поле в кристалле, порожденное падающей волной с узким волновым фронтом, имеет в некотором отношении более простую структуру, и задача определения линейного коэффициента поглощения в любом направлении имеет сравнительно простое решение без упомянутого приближения. В важном частном случае симметричного отражения при $v_r = y_r = \varepsilon_i = 0$ оба выражения совпадают, точнее

$$t\sigma_s^{v_r=0} = \{2\pi K |\chi_{oi}| \pm 2\pi KC \cos v_h |\chi_{hi}|\} (l_0 + l_h) t. \quad (5.88)$$

5.4. Распространение энергии

в поглощающем кристалле без центра симметрии.

Учет периодической составляющей вектора Пойнтинга.

Дополнительные замечания

Как уже упоминалось, изложенная для прозрачного кристалла теория полностью применима к кристаллам без центра симметрии, так как значение $|\chi_h|/|\chi_{\bar{h}}|$ обращается в единицу. В случае поглощающего кристалла без центра симметрии выражение, соответствующее (5.54), не позволяет провести столь детальный качественный анализ, как это сделано выше.

Выражение для вектора распространения потока энергии в поглощающем кристалле без центра симметрии имеет вид

$$|\bar{S}| = |\bar{S}_0| \frac{\exp[-\sigma_m z]}{2 \text{ch}^2 v_r} \left\{ \left[\text{ch}(2v_r + \kappa z) \right] \mathbf{s}_0 + \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \text{ch}(\kappa z) \mathbf{s}_h \right\}. \quad (5.89)$$

Переходя к системе координат xz , получаем

$$|\bar{\mathbf{S}}| = |\bar{\mathbf{S}}_0| \frac{\gamma_0 \exp[-\sigma_m z]}{2 \operatorname{ch}^2 v_r} \left\{ \left[\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{ch}(\kappa z) \right] \mathbf{n} + \left[\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) \operatorname{tg} \psi_0 + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{ch}(\kappa z) \operatorname{tg} \psi_h \right] \mathbf{a} \right\}. \quad (5.90)$$

Откуда

$$\frac{dx}{dz} = \operatorname{tg} \alpha = \frac{\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) \operatorname{th} \psi_0 + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{ch}(\kappa z) \operatorname{tg} \psi_h}{\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{ch}(\kappa z)}, \quad (5.91a)$$

$$x = \int_0^z \frac{dx}{dz} dz. \quad (5.91b)$$

Асимптотические уравнения для $\operatorname{tg} \alpha$ при $z \approx 0$ и $z \approx \infty$ имеют вид

$$\left. \frac{dx}{dz} \right|_{z \approx 0} \approx \frac{\operatorname{ch}(2v_r) \operatorname{tg} \psi_0 + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{tg} \psi_h}{\operatorname{ch}(2v_r) + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|},$$

$$\left. \frac{dx}{dz} \right|_{z \approx \infty} \approx \frac{\exp(2v_r) \operatorname{tg} \psi_0 + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{tg} \psi_h}{\exp(v_r) + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|}. \quad (5.92)$$

В случае симметричного отражения

$$\operatorname{tg} \psi_0 = -\operatorname{tg} \psi_h = \operatorname{tg} \vartheta, \quad (5.93)$$

$$-\operatorname{tg} \alpha = \frac{\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) - \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{ch} \kappa z}{\operatorname{ch}(2v_r + \kappa z) + \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \operatorname{ch} \kappa z} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.94)$$

Заметим, что здесь в отличие от центросимметричного кристалла даже при $y_r = v_r = 0$ $\operatorname{tg} \alpha \neq \operatorname{tg} \vartheta$. Вместо этого получаем из (5.84)

$$\operatorname{tg} \alpha_s^{y_r=0} = \frac{1 - |\chi_h/\chi_{\bar{h}}|}{1 + |\chi_h/\chi_{\bar{h}}|} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.95)$$

Сравнивая величину $\text{tg } \alpha$ из (5.95) для двух отражений hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ и используя (4.56), получаем

$$\text{tg } \alpha_{s, hkl}^{v_r=0} = \frac{-|\chi_{hi}/\chi_{hr}| \sin v_h}{1 + |\chi_{hi}/\chi_{hr}| \sin v_h} \quad |[\text{tg } \vartheta]|, \quad (5.96a)$$

$$\text{tg } \alpha_{s, \bar{h}\bar{k}\bar{l}}^{v_r=0} = \frac{|\chi_{hi}/\chi_{hr}| \sin v_h}{1 - |\chi_{hi}/\chi_{hr}| \sin v_h} |\text{tg } \vartheta|. \quad (5.96б)$$

Таким образом, фиксируя точку выхода энергии волнового поля на выходной грани кристаллической пластинки, можно установить различие между отражениями hkl и $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ *только из геометрии дифракционного эффекта*, в то время как при использовании коэффициента отражения (см. гл. 4) различие устанавливается по *интенсивностям*.

В заключение этой главы следует рассмотреть соотношения, относящиеся к траекториям дважды усредненного вектора Пойнтинга $\bar{\mathbf{S}}$, а следовательно, содержащие периодические составляющие. Необходимость учета этих осцилляций особенно наглядна в случае поглощающего кристалла, так как использование вектора $\bar{\mathbf{S}}$, усредненного по экстинкционной глубине τ , ограничено надлежащей величиной отношения $\tau/\sigma_m^{-1} = \tau\mu/\gamma_0$. Так, в случае отражений 220 и 333 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge это отношение составляет $\sim 0,2$ и $\sim 0,5$ соответственно.

К сожалению, вычисление траекторий вектора Пойнтинга с учетом периодических составляющих и поглощения представляет сравнительно сложную задачу и качественно анализируется лишь в простейшем случае симметричного отражения от centrosymmetric структур.

Основные особенности задачи могут быть показаны на примере рассеяния от прозрачного кристалла.

При учете периодических составляющих в значениях коэффициентов прохождения и отражения [см. (3.62) — (3.66)] для $\bar{\mathbf{S}}$ вместо (5.21) получаем

$$\bar{\mathbf{S}} = |\bar{\mathbf{S}}_0| (1 + y^2)^{-1} \{ [y^2 + \cos^2 \rho] \mathbf{s}_0 + \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \sin^2 \rho \mathbf{s}_h \}, \quad (5.97)$$

где $\rho = \pi z/\tau$. Переходя к системе координат xz , перепишем (5.97)

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{|\bar{\mathbf{S}}_0| \gamma_0}{1 + y^2} \{ [y^2 + \cos^2 \rho] (\mathbf{n} + \mathbf{a} \text{tg } \psi_0) + \sin^2 \rho (\mathbf{n} + \mathbf{a} \text{tg } \psi_h) \} \quad (5.98)$$

или

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{|\bar{\mathbf{S}}_0| \gamma_0}{1 + y^2} \{ (1 + y^2) \mathbf{n} + [(y^2 + \cos^2 \rho) \text{tg } \psi_0 + \sin^2 \rho \text{tg } \psi_h] \mathbf{a} \}. \quad (5.99)$$

Отсюда

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{y^2}{1+y^2} \operatorname{tg} \psi_0 + \frac{\cos^2 \frac{\pi z}{\tau}}{1+y^2} \operatorname{tg} \psi_0 + \frac{\sin^2 \frac{\pi z}{\tau}}{1+y^2} \operatorname{tg} \psi_h. \quad (5.100)$$

Заменяя $\sin^2 \rho$ и $\cos^2 \rho$ на их средние значения, получаем (5.51).

Рассмотрим подробнее симметричное отражение. В этом случае вместо (5.100) получаем

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{y^2}{1+y^2} \operatorname{tg} \vartheta + \frac{\cos^2 \frac{\pi z}{\tau}}{1+y^2} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.101)$$

Первый член справа относится к непериодической составляющей, которая совпадает с (5.53) для трижды усредненного вектора, а здесь может быть отнесена к средней линии распространения энергии. Второй член описывает периодические увеличения и уменьшения угла α по сравнению с углом для средней линии. В соответствии с (5.101) уравнение траектории имеет вид

$$x = \frac{y^2}{1+y^2} z \operatorname{tg} \vartheta + \frac{\operatorname{tg} \vartheta}{1+y^2} \frac{\sin 2\rho}{2\rho/z}. \quad (5.102)$$

Анализ выражений (5.101) и (5.102) непосредственно связан с описанием маятникового решения для прозрачного кристалла, приведенным в гл. 3 [см. (3.44) — (3.47)]. Действительно, средняя линия пересечется с осциллирующей на глубинах

$$z = \frac{m}{\Delta k} \quad \text{либо} \quad z = \frac{2m+1}{2\Delta k}, \quad \Delta k = \tau^{-1}, \quad (5.103)$$

которые соответствуют глубинам экстинкции. При этих глубинах расстояния x от оси z для обеих составляющих x в (5.102) будут равны. При таких значениях z углы наклона осциллирующей кривой согласно (5.101), вследствие $\cos 2\rho = \pm 1$, будут равны

$$\operatorname{tg} \alpha = \operatorname{tg} \vartheta, \quad \operatorname{tg} \alpha = \frac{y^2 - 1}{y^2 + 1} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (5.104)$$

Между двумя точками пересечения кривая отстоит от средней прямой

$$x_0 = \frac{y^2}{1+y^2} z \operatorname{tg} \vartheta \quad (5.105)$$

на величину

$$x - x_0 = \frac{\operatorname{tg} \vartheta}{2\pi\Delta k (1+y^2)}. \quad (5.106)$$

При этом $z = (m \pm 1/4)/\Delta k$. В этих точках, как следует из (5.102), вектор потока плотности энергии \vec{S} оказывается параллельным оси z .

Существенно отметить, что характерные параметры траектории потока энергии, определяемые приведенными уравнениями,

являются функциями y . В частности, при $y = 0$ средней линией (5.105) становится ось z . На оси z отстояния между двумя ближайшими точками пересечения $z = m\tau$ и $z = (m + 1/2)\tau$ будут наибольшими из расстояний, отвечающих различным возможным значениям y . В точках пересечения вектор \bar{S} будет направлен вдоль s_0 . При том же значении $y = 0$ в точках $z = (m + 1/2)\tau$ вектор \bar{S} будет направлен вдоль s_n . На средних линиях (прямых), отвечающих $y \neq 0$, в точках $z = m\tau$ или $z = (m + 1/2)\tau$ вектор \bar{S} будет также направлен вдоль s_0 , однако в промежуточных точках пересечения отклоняется к s_0 . Это отклонение возрастает с увеличением y . Обще представление о характере осцилляций направления потока энергии в случае симметричного отражения дает рис. 38, отличающийся от соответствующего рисунка для \bar{S} (рис. 29) наложением осциллирующих кривых.

В случае поглощающего кристалла в формулах для $\text{tg } \alpha$ и x [(5.69), (5.70)] появятся дополнительные слагаемые, аналогичные вторым членам в правой части выражений (5.101) и (5.102). Эти дополнительные члены имеют вид

$$\text{tg}_p \alpha_s = \cos \frac{2\pi z}{\tau} \text{tg } \vartheta / \text{ch}(v_r + \kappa z) \text{ch } v_r, \quad (5.107)$$

$$x_{ps} = \frac{\text{tg } \vartheta}{\text{ch } v_r} \int_0^z \cos \frac{2\pi z}{\tau} [\text{ch}(v_r + \kappa z)]^{-1} dz. \quad (5.108)$$

Подынтегральная функция в (5.108) осциллирует с глубиной z . Эти осцилляции при положительных значениях $y_r = \text{sh } v_r$ монотонно спадают с глубиной и при отрицательных значениях y_r проходят через (пологий) максимум и затем тоже спадают. Функция x_{ps} , согласно (5.108), пропорциональная площади под осциллирующими кривыми, ведет себя аналогично. Очевидно, период осцилляции равен отношению z/τ . Некоторые дополнительные данные, относящиеся к поведению функции x_{ps} , можно получить из обзора Джеймса [17].

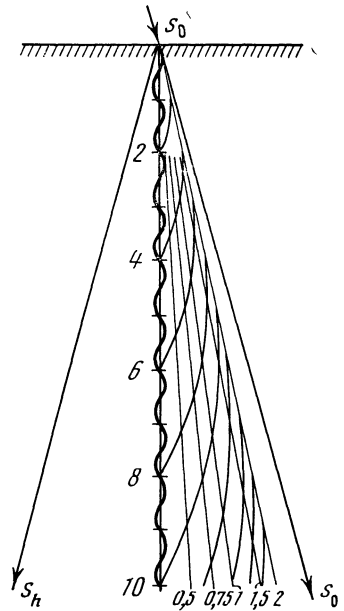


Рис. 38. Осцилляции направления распространения вектора Пойнтинга

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ ПАДАЮЩЕЙ СФЕРИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ

Динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей в идеальных кристаллах, изложенная в гл. 2—4, имеет одним из исходных условий — падение на кристалл *плоской монохроматической волны*. В конце гл. 3 мы отметили возможность других экспериментов, в частности использование пучка с ограниченным волновым фронтом и набором направлений падения, перекрывающим угловую ширину максимума отражения. В гл. 5 рассматривался случай волнового фронта падающей волны, малого по сравнению с толщиной кристаллической пластинки.

Эксперименты, в которых использовалась подобная схема (система диафрагм между трубкой и кристаллом), были поставлены в 1959 г. Като и Лангом [23] для исследования полос маятникового решения при прохождении рентгеновского пучка через кристаллический клин. Эти авторы получали рентгенограммы двух типов: «секционные» — снимки при фиксированном положении кристалла и пленки относительно источника рентгеновских лучей и снимки при сканировании кристалла и пленки относительно источника. На секционных снимках было получено изображение маятниковых полос, имеющих форму шпильки (буквы V). При сканировании были получены прямолинейные полосы.

В связи с качественным и в особенности количественным анализом этих экспериментов Като развил динамическую теорию, описывающую рассеяние рентгеновских лучей кристаллом при падении на него сферической волны [24]. Очевидно, что этот подход к явлениям рассеяния ближе к условиям эксперимента, чем приближение плоской падающей волны.

Действительно, излучателями характеристического рентгеновского излучения антикатада рентгеновской трубки являются отдельные атомы, и это излучение, прошедшее через систему диафрагм, следует рассматривать как наложение элементарных сферических волн без постоянных фазовых соотношений между ними. Нетрудно видеть, что наиболее существенным является соотношение между угловой шириной максимума отражения (или прохождения), с одной стороны, и угловым раствором пучка рентгеновских лучей, выходящего из антикатада и эквивалент-

ного (в некоторых отношениях) сферической волне. Этот угловой раствор составляет $\sim 1,5'$, т. е. по меньшей мере на порядок больше полуширины максимума. Интересно сопоставить указанное соотношение с тем, что имеет место в современном электронном микроскопе при просвечивании монокристаллической пластинки. Расходимость пучка электронов в подобных приборах не более 10^{-3} рад, в то время как полуширина первых максимумов динамического рассеяния на порядок больше.

Анализ этой фундаментальной проблемы «динамического» рентгеновского эксперимента проводится также в гл. 9 в связи с методами «приготовления» плоской монохроматической волны с помощью монохроматоров.

Динамическая теория в приближении падающей сферической волны, развитая Като, позволила с большой точностью описать упомянутые полосы маятникового решения на секционных снимках, которые были фактически первой экспериментальной реализацией эффекта, предсказанного Эвальдом в его работах 1916—1917 гг.

Существенным результатом теории Като и усовершенствования экспериментов с получением секционных снимков является новый метод измерения абсолютных значений $|\chi_{hr}|$, а следовательно, и структурных амплитуд $|F_{hr}|$. Здесь абсолютные значения противопоставляются относительным значениям, обычно определяемым из измерений интенсивности рентгеновской дифракции. Особенностью метода Като следует считать исключение ошибки, обязанной влиянию экстинкции на интенсивность сильных отражений, так как на секционных снимках измеряются только геометрические параметры дифракционной картины.

6.1. Динамическая теория в двухволновом приближении при условии падающей на кристалл сферической волны.

Применение к рассеянию в прозрачной плоскопараллельной кристаллической пластинке

Скалярная волна в вакууме, распространяющаяся в положительном направлении вдоль оси z , описывается в общем случае следующей интегральной формулой:

$$\Psi_a = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(\hat{K}) \exp i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) dK_x dK_y, \quad (6.1)$$

где $F(\hat{K})$ — весовая функция, относящаяся к угловому спектру волны Ψ_a . В случае плоской волны весовая функция обращается в δ -функцию:

$$F_p(\hat{K}) = \delta(\hat{K} - \hat{K}_e). \quad (6.2)$$

В случае сферической волны можно использовать обычное Фурье-представление (при единичной амплитуде):

$$\Psi_s = \frac{\exp i(\mathbf{K}r)}{4\pi r} = \frac{1}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp i(\mathbf{K}r)}{K_z} dK_x dK_y. \quad (6.3)$$

Сравнивая (6.3) и (6.1), замечаем, что весовая функция для сферической волны

$$F_s(\hat{\mathbf{K}}) = \frac{i}{8\pi^3} \frac{1}{K \cos(\mathbf{K}z)}. \quad (6.4)$$

Здесь $K \cos(\mathbf{K}z) = K_z = (K^2 - K_x^2 - K_y^2)^{1/2}$ принимает положительные значения либо на действительной, либо на мнимой осях комплексной плоскости.

В случае рентгеновских лучей мы должны использовать выражение, аналогичное (6.1) для векторных волн. Для получения такого выражения рассмотрим спонтанное электромагнитное излучение атомных источников. В вакууме вдали от источника электромагнитное поле полностью характеризуется заданием любого из векторов \mathbf{E} или \mathbf{H} , связанных соотношением

$$\mathbf{E} = iK^{-1} \text{rot } \mathbf{H}. \quad (6.5)$$

Если ввести операторы

$$\tilde{M} = [I\nabla], \quad \tilde{N} = \frac{1}{iK} [[I\nabla] \nabla] \quad (6.6)$$

(I — постоянный вектор, пропорциональный матричному элементу оператора плотности тока спонтанного атомного перехода, в результате которого излучается гамма-квант) и оставить только главный член (порядка r^{-1}) в асимптотическом разложении напряженности поля, можно получить следующие выражения для электромагнитного поля в волновой зоне излучения:

$$H_s \approx \tilde{M}\Phi_s, \quad E_s \approx \tilde{N}\Phi_s. \quad (6.7)$$

Отметим, что в асимптотической области векторы \mathbf{E} и \mathbf{H} перпендикулярны направлению распространения поля. Подставляя (6.1) в (6.7), получаем

$$H_s \approx iK \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dK_x dK_y F_s(\hat{\mathbf{K}}) [I\mathbf{K}] \exp i(\mathbf{K}r), \quad (6.8)$$

$$E_s \approx iK \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dK_x dK_y F_s(\hat{\mathbf{K}}) [[I\mathbf{K}] \mathbf{K}] \exp i(\mathbf{K}r).$$

В дальнейшем нас будут интересовать вполне определенные состояния поляризации электромагнитного поля в кристалле

с колебаниями вектора индукции либо в плоскости отражения, либо перпендикулярно этой плоскости. Поэтому мы можем ограничиться рассмотрением скалярного волнового поля, включая соответствующие поляризационные множители $[IK]$ и $[[IK]K]$ в весовую функцию $F(\mathbf{K})$.

Обращаясь к выражению для сферической волны в виде суперпозиции плоских волн, каждая из которых описывается изложенной в предыдущих главах динамической теорией, внесем в формулу (6.3) соответствующие амплитудные коэффициенты:

$$D_{0,h} = \frac{i}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_z^{-1} d_{0,h} dK_x dK_y. \quad (6.9)$$

Множитель $d_{0,h}$ может рассматриваться как амплитудная модуляция преломленной и дифрагированной волн в кристалле. Напомним, что такая же интерпретация приводилась нами применительно к выражению (2.36) для блоховской волны, а также при анализе волнового поля в кристалле (3.49).

Множители $d_{0,h}$ для прозрачного кристалла (в двухволновом приближении) детально рассмотрены в гл. 3. Они могут быть также записаны в форме

$$d_0 = \sum_{i=1,2} D_0^{(i)} \exp i \{ (\mathbf{k}_0^{(i)} - \mathbf{K})(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) \}, \quad (6.10)$$

$$d_h = \sum_{i=1,2} D_h^{(i)} \exp i \{ (\mathbf{k}_h^{(i)} - \mathbf{K})(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) \}. \quad (6.11)$$

В выражениях (6.10) и (6.11) \mathbf{r} обозначает расстояние точки наблюдения от источника, \mathbf{r}_e — расстояние произвольной точки на входной грани от того же источника. Для дальнейшего содержания данной главы существенное значение имеет точное определение величин, обозначаемых \mathbf{r} и \mathbf{r}_e . Так как формулы (6.10) и (6.11) относятся к плоским волнам, то \mathbf{r}_e можно рассматривать как вектор, проведенный от источника к любой точке входной грани. При этом согласно (3.1)

$$\mathbf{k}_0^{(i)} - \mathbf{K} = -K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0 \quad (6.12)$$

направлено в любой точке нормально к входной грани. Таким образом, в (6.10) и (6.11) величина фазы в фазовых множителях дана относительно произвольной точки входной грани.

Переходим к детальному рассмотрению случая падающей сферической волны. Для выполнения интегрирования в общем выражении типа (6.9) оси выбираются следующим образом.

В обратном пространстве, как показано на рис. 39 (см. рис. 6), ось x направлена в сторону отсчета отрицательных значений углов η и ось z совпадает с вектором \mathbf{K}_0^B , образующим с отра-

жающей плоскостью угол ϑ . Начало координат выбирается в точке M .

Анализ процесса распространения в плоскопараллельном кристалле поясняется рис. 40. Сферическая волна, выходящая из точечного источника на антикатоде рентгеновской трубки, проходит систему щелевых диафрагм и падает на кристалл в точке O . Ось x перпендикулярна вектору \mathbf{K}_0^B , имеющему тот же смысл, что и на рис. 39, и представляющему ось z . Ось y перпендикулярна к плоскости чертежа, которая совпадает с плоскостью отражения. Вектор \mathbf{K}_h^B имеет направление вектора отраженной волны при падении вакуумной волны под углом ϑ . \overline{OF} — перпендикуляр, опущенный на выходную грань, \overline{OL} — след отражающей плоскости и \overline{OP} — переменный вектор, соответствующий вектору плотности потока энергии, который далее будет рассмотрен подробнее. Для описания волнового поля, так же как и его интенсивности, в любой точке внутри кристалла используется направление \overline{OP} . Любая точка на этой прямой внутри кристалла и точка P на выходной грани определяются косоугольными координатами l_0 и l_h , а также длинами перпендикуляров, опущенных на векторы \mathbf{K}_0^B и \mathbf{K}_h^B (x и x'). Расстояние каждой данной точки наблюдения от источника мы определяем следующим образом:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e + (\mathbf{r} - \mathbf{r}_e), \quad (6.13)$$

где второй член справа представляет собой радиус-вектор от точки O входной грани к любой точке волнового поля в кристалле. В соответствии с рис. 40 $\mathbf{r} - \mathbf{r}_e$ можно отнести к переменному вектору \overline{OP} .

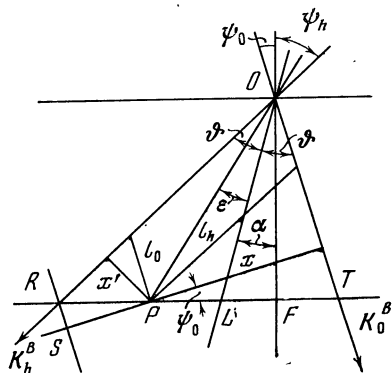
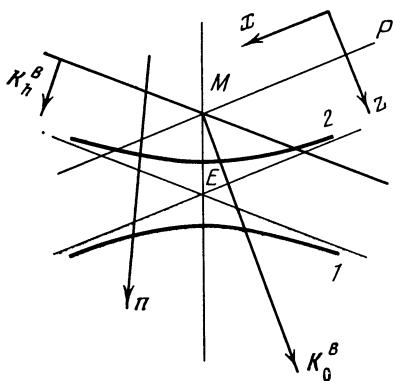


Рис. 39. Выбор осей координат x и z в обратном пространстве

Рис. 40. К анализу процесса распространения волн в плоскопараллельном кристалле

Расчеты, относящиеся к излагаемой теории, производятся с помощью следующих переменных:

$$s = -K_x - \frac{K\chi_0 \left(\frac{\gamma_h}{\gamma_0} - 1 \right)}{2 \sin 2\theta}, \quad f = \frac{KC}{\sin 2\theta} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}},$$

$$t = [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e) \mathbf{n}], \quad \alpha = \frac{1}{2\gamma_h} \sin 2\theta. \quad (6.14)$$

Связь новых переменных со старыми с учетом направления оси x устанавливается непосредственно (в этой главе $K_0 = 1/\lambda$ и $K = 2\pi/\lambda$)

$$\sqrt{1 + y^2} \pm y = f^{-1} (\sqrt{s^2 + f^2} \pm s),$$

$$K_x = -2\pi K_0 \eta, \quad s = \frac{K\beta}{2 \sin 2\theta}, \quad y = \frac{s}{f}. \quad (6.15)$$

Полное аналитическое выражение волновой функции проходящей волны в прозрачном кристалле в приближении падающей плоской волны в старых переменных

$$d_0^{(i)}(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{1 + y^2} \pm y}{2 \sqrt{1 + y^2}} \exp - 2\pi i \left\{ (\mathbf{K}_0 \mathbf{r}) + t \left[\frac{K_0 \chi_0}{2\gamma_0} + \frac{K_0 C \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{2 \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} (\sqrt{1 + y^2} \pm y) \right] \right\} \quad (6.16)$$

и в новых переменных

$$d_0^{(i)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \frac{\mp s + \sqrt{s^2 + f^2}}{\sqrt{s^2 + f^2}} \exp i \left\{ (\mathbf{K} \mathbf{r}) + \frac{K\chi_0 t}{2\gamma_0} + \alpha t [s \pm \sqrt{s^2 + f^2}] \right\}. \quad (6.17)$$

Заметим также, что далее в этой главе для обозначения плоской волны используется выражение

$$\Psi = \Psi_0 \exp [-i\omega t + i(\mathbf{K} \mathbf{r})]. \quad (6.18)$$

Аналогичные преобразования приводят к выражению для волновой функции дифрагированной волны в прозрачном кристалле [см. (3.32)]:

$$d_h^{(i)}(\mathbf{r}) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \frac{f \exp i\eta_h}{\sqrt{s^2 + f^2}} \exp i \left\{ [(\mathbf{K} + 2\pi\mathbf{h}) \mathbf{r}] + \frac{K\chi_0 z}{2\gamma_0} + \alpha t [s \pm \sqrt{s^2 + f^2}] \right\}. \quad (6.19)$$

Переходим к вычислению интеграла (6.9). При этом мы заменяем в амплитуде величину K_z^{-1} на K^{-1} , что соответствует двухволно-

вому приближению или аппроксимации участка сферы радиуса K на рис. 39 плоскостью (ее след — прямая MP). Фазовый множитель $\exp i(\mathbf{K} \mathbf{r})$ в (6.17) и (6.19) преобразуется, согласно (6.13),

$$\exp i(\mathbf{K} \mathbf{r}) = \exp i(K_z L) \exp i(K_z z + K_x x), \quad (6.20a)$$

$$L = r_e, \quad [\mathbf{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e)] \equiv K_z z + K_x x. \quad (6.20b)$$

Что касается интегрирования в (6.9) по K_y , то необходимо учесть, что переменная K_y встречается только в выражении (6.20a), так как $K_z = (K^2 - K_x^2 - K_y^2)^{1/2}$. Выполняя интегрирование по K_y методом перевала [77], получаем

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp i(z + L) \sqrt{K^2 - K_x^2 - K_y^2} dK_y &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[iK(z + L) - \right. \\ &\quad \left. - i(z + L) \frac{K_y^2}{2K} \right] dK_y = \exp iK(z + L) \times \\ &\quad \times \int \exp \left[-i(z + L) \frac{K_y^2}{2K} \right] dK_y. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Переходя от показательной подынтегральной функции к тригонометрическим, используем для вычисления полученных интегралов таблицу интегральных трансформант в книге Снеддона [78]. После обратного перехода к показательной функции получаем

$$\exp(iKz) D_y = \exp(iKz) \sqrt{\frac{2\pi K}{z + L}} \exp\left(-i \frac{\pi}{4}\right). \quad (6.22)$$

Вместо выполнения интегрирования по K_x вводим новую переменную s , связанную с K_x соотношением (6.14). Вынося за знак интегралов выражения, не содержащие s , получим следующие формулы:

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{i}{2} (2\pi)^{-3/2} [K(z + L)]^{-1/2} \exp(iKL) \exp\left(-i \frac{\pi}{4}\right) \times \\ &\quad \times \exp[i(K_z + P)] U_0, \end{aligned} \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned} D_h &= \frac{i}{2} (2\pi)^{-3/2} [K(z + L)]^{-1/2} \exp(iKL) \exp\left(-i \frac{\pi}{4}\right) \times \\ &\quad \times \exp[i(Kz + 2\pi(\mathbf{h} \mathbf{r}) + \eta_h + P)] U_h, \end{aligned} \quad (6.24)$$

$$P = \frac{K\chi_0}{2} \left\{ \frac{t}{\gamma_0} - \frac{x\gamma_h}{\gamma_0 \sin 2\theta} + \frac{x}{\sin 2\theta} \right\} = \frac{K\chi_0}{2} (l_0 + l_h), \quad (6.25)$$

и интегралы U_0 и U_h имеют вид

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \{(-s + \sqrt{s^2 + f^2}) \exp[iat \sqrt{s^2 + f^2}] + (s + \sqrt{s^2 + f^2}) \times \\ &\quad \times \exp[-iat \sqrt{s^2 + f^2}]\} [\sqrt{s^2 + f^2}]^{-1} \exp[-iqst] ds, \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$U_h = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \{ \exp [i\alpha t \sqrt{s^2 + f^2}] - \exp [-i\alpha t \sqrt{s^2 + f^2}] \} \times \\ \times \frac{KC \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta \sqrt{s^2 + f^2}} \exp [-iqst] ds, \quad (6.27a)$$

$$U_h = \frac{iKC \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin [\alpha t \sqrt{s^2 + f^2}]}{\sqrt{s^2 + f^2}} \exp (-iqst) ds. \quad (6.27b)$$

Здесь

$$q = \frac{x}{t} - \alpha, \quad x = (\alpha + q)t. \quad (6.28)$$

Более простой интеграл U_h непосредственно раскрывается с помощью уже упомянутой таблицы интегральных трансформант [78]. Результат записывается следующим образом:

$$U_h = F(q) = \begin{cases} 0, & |q| > \alpha, \\ \pi i \frac{KC \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} J_0 [ft \sqrt{\alpha^2 - q^2}], & |q| < \alpha. \end{cases} \quad (6.29)$$

Вычисление интеграла U_0 облегчается следующим очевидным соотношением с U_h [см. (6.27a)]:

$$U_0 = \left[\frac{KC \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \right]^{-1} \left\{ \frac{\partial U_h}{\partial (iqt)} + \frac{\partial U_h}{\partial (i\alpha t)} \right\}, \quad (6.30)$$

а также рекуррентным соотношением

$$J_1(\xi) = -\partial [J_0(\xi)] / \partial \xi. \quad (6.31)$$

В результате получаем

$$U_0 = \begin{cases} 0, & |q| > \alpha, \\ -\pi f \sqrt{\frac{\alpha - q}{\alpha + q}} J_1 [ft \sqrt{\alpha^2 - q^2}], & |q| < \alpha. \end{cases} \quad (6.32)$$

Анализ полученных выражений для волнового поля в кристалле может быть произведен с помощью рис. 40 и 41. Прежде всего, как следует из условий (6.29) и (6.32), волновое поле в кристалле резко ограничено треугольной областью ROT . В приближении плоской падающей волны, как подробно показано в гл. 5, каждому частному значению угла падения $\psi_0 \pm \eta$ отвечает определенное направление распространения энергии, или вектор плотности потока энергии $\bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{S}}^{(1)} + \bar{\mathbf{S}}^{(2)}$, причем векторы $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ представляют нормали к соответствующим ветвям дисперсионной поверхности в точках возбуждения. В случае сферической падающей волны, когда возбуждаются все точки дисперсионной гиперболы, векторы $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ по-прежнему являются нормальными в соответствующих точках той или иной ветви. Однако они уже не связаны с

каким-либо частным значением угла падения и однозначно определяются, например, углом ε относительно отражающей плоскости. При этом, очевидно, данному значению ε будут отвечать два вектора $\bar{S}^{(i)}$ в точках A и \bar{A} (см. рис. 41). Можно принять, что для каждого значения ε существует определенный вектор $\bar{S} = 2\bar{S}_A^{(2)} = 2\bar{S}_A^{(1)}$. Такой переменный вектор \bar{S} представлен на рис. 40 прямой OP . Основание P этого переменного вектора фиксируется косоугольными координатами x' и x , направления которых перпендикулярны K_h^B и K_0^B . В свою очередь x и x' зависят от общего углового параметра q , являющегося функцией ε . Значение x представлено формулой (6.28), в то время как значение x' определяется из соотношений, следующих из рис. 40:

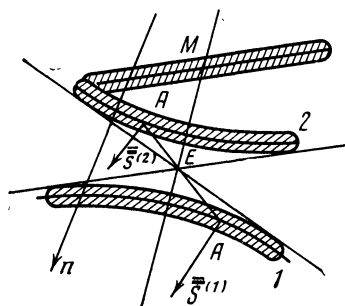


Рис. 41. Возбуждение всех точек дисперсионной гиперболы при падении сферической вакуумной волны (верхнее $A \equiv \bar{A}$)

$$\begin{aligned} x' &= \overline{SP} \frac{\gamma_h}{\gamma_0} = \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \left(t \frac{\sin 2\vartheta}{\gamma_h} - x \right) = \\ &= \frac{\gamma_h}{\gamma_0} (\alpha - q) t. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Используя далее очевидные связи

$$\begin{aligned} l &= \overline{OP} = t / \cos(\vartheta - \psi_0 + \varepsilon), \\ x &= l \sin(\vartheta + \varepsilon), \end{aligned} \quad (6.34)$$

получаем для q

$$q \approx \frac{\sin(\vartheta + \varepsilon)}{\cos(\psi_h - \vartheta + \varepsilon)} - \frac{\sin 2\vartheta}{2 \cos \psi_h}. \quad (6.35)$$

Учитывая приведенные значения аргументов x и x' (6.28), (6.33) и решения интегралов (6.29) и (6.32), выпишем полные значения волновых функций D_0 и D_h в кристалле в следующей форме:

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{-i}{4} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{Kz}} \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \exp iLz \exp i\{Kz + P\} \bar{f} \sqrt{\frac{x'}{x}} \times \\ &\times J_1(\bar{f} \sqrt{xx'}), \end{aligned} \quad (6.36)$$

$$\begin{aligned} D_h &= \frac{-1}{4} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{Kz}} \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \exp iLz \exp i\{Kz + 2\pi(hr) + \\ &+ \eta_h + P\} \bar{f} J_0(\bar{f} \sqrt{xx'}), \end{aligned} \quad (6.37)$$

$$\bar{f} = f \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}}. \quad (6.38)$$

Полученные выражения показывают, что геометрические места точек, отвечающие постоянным значениям произведения

$$xx' = \frac{\gamma_0}{\gamma_h} (\alpha^2 - q^2) t^2, \quad (6.39)$$

образуют гиперболы, асимптотами которых являются векторы K_0^B и K_h^B .

Исходя из формул (6.36) и (6.37), можно перейти к полю интенсивности внутри кристалла. Напишем соответствующее выражение для дифрагированной волны

$$\mathcal{J}_h = T (\bar{f})^2 (J_0 [\bar{f} \sqrt{xx'}])^2 = T (f)^2 \{J_0 [t\varphi(\varepsilon)]\}^2. \quad (6.40)$$

Как уже отмечалось во введении к настоящей главе, излагаемая теория была использована для истолкования и расчета интерференционных эффектов маятникового решения, которые наблюдались на секционных снимках.

Естественно связать такие осцилляции указанных функций с интерференцией полей, обязанных возбуждению точек на обеих ветвях дисперсионной кривой. Для описания волнового поля внутри кристалла используется переменный вектор OP , который при каждом частном значении угла ε , с одной стороны, соответствует интерференции определенной пары волн, для точек A и \bar{A} (рис. 41), а с другой стороны, служит разрезом через интерференционную картину маятникового решения.

Для интерференции волн, соответствующих сопряженным точкам A и \bar{A} дисперсионной гиперболы, необходимо выполнение двух условий: наряду с совпадением направлений распространения потока энергии $\bar{S}_A^{(i)} \parallel \bar{S}_A^{(i)}$ указанные волны должны быть когерентными.

Рассматривая не только точку A , но и малый участок гиперболы вблизи A , на котором еще можно пренебречь ее кривизной, мы можем ввести следующие характеристики, определяющие способность к интерференции вдоль направления $\bar{S}_A^{(i)}$ соответствующих волн: 1) дифракционную ширину

$$g \approx (\delta K_A)^{-1} \approx \delta \lambda; \quad (6.41)$$

2) геометрическую ширину $g' = lW$, где l — путь, проходимый в кристалле вдоль $\bar{S}^{(i)}$ от точки O , и W — угловая расходимость векторов $\bar{S}^{(i)}$ внутри участка δK_A . При этом минимальный размер g_m определяется равенством геометрического размера и дифракционной ширины

$$g_m = lW_m = lW(\omega_m) = (K\omega_m)^{-1}, \quad \omega_m = \frac{\delta K_A}{K_A}. \quad (6.42)$$

Условие (6.42) означает, что волны внутри интервала относительного углового разброса пучка волн не могут интерферировать с волнами за пределами этого интервала. Другими словами, g_m дает порядок величины когерентного участка вдоль волнового фронта, который распространяется в направлении $\bar{S}^{(i)}$.

Обратимся теперь к точке \bar{A} дисперсионной гиперболы. Точка \bar{A} является сопряженной точке A , что означает параллель-

ность соответствующих векторов $\vec{S}^{(i)}$, а также определенное условие, касающееся интервала когерентности. Сопоставим минимальный размер g_m , согласно (6.24), с разностью расстояний от источника

$$|(\bar{l} + \bar{r}_e) - (l + r_e)| \approx L2\eta_m, \quad (6.43)$$

где величины с чертой относятся к участкам волнового поля в кристалле, соответствующим точке возбуждения \bar{A} . Строго говоря, это соотношение не соответствует исходной модели, показанной на рис. 40 и положенной в основу

излагаемой теории. Для выяснения условия (6.43) необходимо допустить конечную ширину волнового фронта падающей волны вместо точки O на рис. 40. При этом не выполняется первое условие (6.20). Величина L отвечает расстоянию от источника до точки падения при угле ψ_0 , в то время как \bar{r}_e и r_e — расстояниям до точек при углах падения $\psi_0 \mp \eta$. На первый взгляд, условие (6.43) невыполнимо, так как левая часть, согласно (6.42), имеет величину

Рис. 42. К вычислению увеличения M в кристалле

порядка LW_m , т. е. примерно $10^{-4}L2\eta_m$, если принять, что $\eta_m \approx W_m$. Однако условие (6.43) оказывается справедливым, так как волновое поле в кристалле обладает свойством увеличения, в результате чего $W_m \gg 2\eta_m$.

Действительно (см. [79] и рис. 42), при наличии некоторого интервала углов падения $d\eta$ на малом участке SS' дисперсионной гиперболы возникает интервал $\alpha \varepsilon_i$ углов векторов $\vec{S}^{(i)}$ с плоскостью отражения. Увеличение M , пропорциональное кривизне гиперболы на данном участке $1/R$, где R — радиус кривизны, составляет

$$M = \frac{d\varepsilon_{is}}{d\eta} = \frac{d\varepsilon_i}{dy_s} \frac{dy_s}{d\eta} = \frac{2 \sin^2 \theta \cos^2 \varepsilon_{is} K}{\cos \theta [1 + s_s^2/j_s^2]^{3/2}} \tau_0 = \frac{K \cos \theta}{R \cos \varepsilon_i}. \quad (6.44)$$

Величина радиуса кривизны на рассматриваемом участке гиперболы

$$R = \frac{[1 + (s_s^2/j_s^2)]^{3/2}}{2 \operatorname{tg}^2 \theta \cos^3 \varepsilon_i + \tau_0} = \frac{[(s_s^2/j_s^2) + \cos^2 \theta]^{3/2}}{KC |\chi_h| 2 \sin^2 \theta}. \quad (6.45)$$

Рассмотрим два предельных случая.

1. На границе максимума $R \rightarrow K$, так как граница максимума соответствует переходу от дисперсионной гиперболы к окружности. При этом $\varepsilon_i \rightarrow \theta$ и

$$M \approx 1, \quad (6.46)$$

т. е. увеличения нет.

2. При точном значении угла Вульфа — Брэгга $\varepsilon_i = y = s_s/f_s = 0$ и

$$R = \frac{1}{2\tau_0 \operatorname{tg}^2 \vartheta}, \quad (6.47)$$

$$M = \frac{2K\tau_0 \sin^2 \vartheta}{\cos \vartheta}. \quad (6.48)$$

Из отношения τ_0/λ M будет порядка 10^4 .

Из этой оценки мы получаем, во-первых, нужное нам соотношение

$$g_m \gg L2\eta_m \quad (6.49)$$

и, следовательно, возможность интерференции волн, отвечающих точке (участку) A дисперсионной гиперболы, с волнами, соответствующими возбуждению сопряженной точки (участка) \bar{A} , и только с этими волнами. Сопоставляя условия образования интерференционных картин маятникового решения в случаях падения сферической и плоской волн, отметим их существенные отличия. Действительно, во втором случае интерферируют волны с примерно параллельными волновыми векторами, в то время как в первом случае интерферируют волны с параллельными векторами Пойнтинга, или лучами.

Другой вывод, который следует сделать из приведенной оценки увеличения M кристалла в области максимума, имеет более общее значение: фраунгоферова дифракция, при которой геометрические размеры изображения источника значительно меньше дифракционной картины, в кристалле реализуется при расстояниях источник — дифракционная картина примерно в 10^4 меньших, чем в вакууме.

Уравнение (6.40), дающее распределение интенсивности в плоскости отражения, показывает, что величина \mathcal{J}_h фактически зависит от двух независимых переменных: глубины (толщины) t и угла ε , образованного переменным вектором OP и следом отражающей плоскости. Величина $\varphi(\varepsilon)$ в (6.40) выражается следующим образом:

$$\varphi(\varepsilon) = \frac{KC|\chi_h|}{\sin 2\vartheta} \sqrt{\sin(\vartheta + \varepsilon) \sin(\vartheta - \varepsilon)} \cos^{-1}(\psi_h - \vartheta + \varepsilon). \quad (6.50)$$

Экспериментальные исследования этих эффектов и в особенности применение их для определения абсолютных значений структурных амплитуд основаны на вариациях интенсивности вдоль линии \overline{OL} (следа) отражающей плоскости (рис. 40). Обозначая отстояние произвольной точки на этой линии от точки O на входной грани через ρ и учитывая, что вдоль \overline{OL} значение ε обращается в нуль и $\cos(\psi_h - \vartheta + \varepsilon) = t/\rho$, получим

$$t\varphi(\varepsilon) \rightarrow \rho \sin \vartheta \frac{KC|\chi_h|}{\sin 2\vartheta} = \frac{KC|\chi_h|}{2 \cos \vartheta} \rho. \quad (6.51)$$

Выражение (6.40) переписывается в виде

$$\mathcal{J}_h^c = T \frac{4\pi^2 a^2}{\sin^2 \vartheta} \{J_0(2\pi a \rho)\}^2, \quad (6.52)$$

где $a = K_0 C |\chi_h| / 2 \cos \vartheta$ составляет действительную полуось дисперсионной гиперболы.

Как было показано экспериментальными исследованиями этих интерференционных эффектов, для описания изменения интенсивности вдоль линии ρ можно ограничиться формулой (6.52) лишь на участке дифракционной картины, примыкающей к точке O . Более глубокие участки соответствуют асимптотическому разложению функции Бесселя, которое для функции нулевого порядка имеет вид [72]

$$J_0(\xi) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \cos \left[\xi - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (6.53)$$

В таком случае, для более глубоких участков интерференционной картины закон изменения интенсивности выражается следующим образом:

$$\mathcal{J}_h(\rho) \approx A \frac{2a}{\pi \rho \sin^2 \vartheta} \cos^2 \left(2\pi a \rho - \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.54)$$

Расстояние между двумя соседними гиперболами вдоль линии ρ , вблизи точки O в соответствии с (6.52)

$$\Lambda_{mh} = \frac{\xi_{m+1} - \xi_m}{2\pi a}, \quad (6.55)$$

где ξ_{m+1} и ξ_m — значения аргумента J_0 , отвечающие двум соседним максимумам. Для остальной части дифракционной картины при больших значениях ρ интервал между соседними максимумами (6.54)

$$\Lambda_{mh} \approx \frac{\pi}{2\pi a} = \frac{\lambda \cos \vartheta}{C |\chi_h|} = \Lambda_{cl}. \quad (6.56)$$

Несмотря на совпадение формулы (6.56) с (3.45) и (3.47) для экстинкционной глубины в случае падающей плоской волны различия между двумя интерференционными картинками бросаются в глаза при исследовании абсолютных положений максимумов, т. е. их расположения относительно входной грани кристалла (см. рис. 43) [80].

Прежде всего при $\rho^* \approx 0$ ($2\pi a \rho < 0,01$), т. е. непосредственно вблизи входной грани, согласно (6.52), функция J_0 , а с ней и величина интенсивности $\mathcal{J}_h(\rho)$ имеют максимум, в то время как из (3.43) интенсивность дифрагированной волны в кристалле, при падающей плоской волне

$$\mathcal{J}_h \sim |D_0^{(a)}|^2 \sin^2(\pi \Delta k z), \quad (6.57)$$

при $z \approx 0$, $\mathcal{Y}_h \approx 0$. Отстояния между максимумами в случае падающей плоской волны $\Lambda_{\rho l}$ точно определяются из (6.56) и примерно соответствуют отстояниям Λ_{mh} при больших ρ . Однако отстояния первых максимумов превосходят $\Lambda_{\rho l}$. Так, расстояние между первым и вторым максимумами превосходит $\Lambda_{\rho l}$ на 22%. Далее эти расстояния постепенно уменьшаются, приближаясь к $\Lambda_{\rho l}$. При этом максимумы смещены к входной грани по сравнению с максимумами для случая плоской волны на $1/4 \Lambda_{mh}$, что непосредственно следует из выражения (6.54).

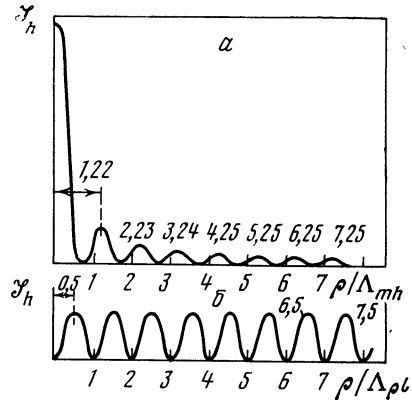


Рис. 43. Сопоставление интервалов интерференционных картин маятникового решения
 α — сферическая падающая волна;
 $\bar{\alpha}$ — плоская падающая волна.

Рассмотрим детальнее физические причины, приводящие к указанным различиям, в особенности смещение фазы на $\pi/4$ в (6.57) сравнительно с (6.54) [81]. Полное аналитическое выражение для фазы каждой из двух слагающих волн, проходящих и дифрагированных, после проведения интегрирования по K_y^* имеет вид [см. (6.23) — (6.26)]

$$T_{0,h}^{(i)} = KL + Kz + P + (at - x)s \pm at \sqrt{s^2 + f^2}. \quad (6.58a)$$

С другой стороны, фаза для каждого из полей заменяется вдоль траектории вектора $\bar{S}^{(i)}$ по закону

$$T^{(i)} = KL + (\mathbf{k}^{(i)}(\mathbf{v}), \mathbf{v}), \quad (6.58b)$$

где \mathbf{v} — единичный вектор вдоль $\bar{S}^{(i)}$. Легко показать, что значение (6.56) для Λ_{mh} может быть получено из величины разности векторов

$$(\Delta \mathbf{k}(\mathbf{v}), \mathbf{v}) = (|\mathbf{k}^{(1)}(\mathbf{v}) - \mathbf{k}^{(2)}(\mathbf{v})|, \mathbf{v}), \quad \Lambda_{mh} = 2\pi / (\Delta \mathbf{k}(\mathbf{v}), \mathbf{v}), \quad (6.59)$$

в то время как величина

$$\Lambda_{\rho l} = 2\pi / (\Delta \mathbf{k}(\mathbf{n}), \mathbf{n}). \quad (6.60)$$

Более полное выражение для фазы колебаний вдоль траектории вектора $\bar{S}^{(i)}$ может быть получено приближенным методом

перевала. В отдельности для проходящей и дифрагированной волн можно получить

$$T_0^{(i)} = KL + \left(\frac{\pi}{2}\right)_1 + \left(-\frac{\pi}{4}\right)_2 + \left(\pm\frac{\pi}{4}\right)_3 + (k_0^{(i)}\mathbf{v})l, \quad (6.61)$$

$$T_h^{(i)} = KL + \left(\pm\frac{\pi}{2} + 2\pi(\mathbf{h}\mathbf{r}) + \delta\right)_1 + \left(-\frac{\pi}{4}\right)_2 + \left(\pm\frac{\pi}{4}\right)_3 + (k_h^{(i)}\mathbf{v})l. \quad (6.62)$$

Здесь фаза, обозначенная индексом 1, содержит величину $\pi/2$, соответствующую множителю i в выражениях (6.23) и (6.24). Фаза с индексом 2 появилась в результате интегрирования по K_y [см. (6.22)]. Соответственно фаза с индексом 3 возникает при интегрировании по K_x . Наконец, член, зависящий от l , определяет форму гипербол и их отстояния.

В связи со сдвигом фазы в (6.54) представляет интерес наличие двух знаков в $(\pm\pi/4)_3$. Если исходить из того, что при падении на кристалл сферической вакуумной волны возбуждаются все точки обеих ветвей дисперсионной гиперболы (поверхности), причем из каждой точки по нормали распространяются векторы $\bar{S}^{(i)}$, то, очевидно, что для первого поля следует ожидать образование фокуса (фокальной линии) этих лучей вблизи входной грани. Что касается второго поля, то соответствующая ветвь имеет тот же знак кривизны, что и падающая волна, и дает лишь расходящийся веер векторов Пойнтинга. Это можно показать, если проинтегрировать выражение для цилиндрической волны

$$\Psi^*(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp i \{k_x x + f(k_x) z\} dk_x \quad (6.63)$$

приближенным методом перевала. Результат имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi^*(\mathbf{r}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i/2) [f''(x)]_0 z (k_x - [k_x]_0)^2 dk_x = \\ &= \left(\frac{2\pi}{|[f'']_0| z_0}\right)^{1/2} \exp \left[a \left(i \frac{\pi}{4} \right) \right] [\Psi^*(\mathbf{r})]_0, \end{aligned} \quad (6.64)$$

где индекс 0 означает величину, отвечающую точке стационарной фазы, $a = \pm 1$, в зависимости от знака $[f'']_0$. Полученное выражение показывает, что знак фазы $[i(\pi/4)]$ зависит от знака второй производной $f(k_x)$, т. е. от кривизны наших гипербол.

Между тем из оптики известно, что при переходе через фокус фаза меняется скачком на $\pi/2$. Таким образом, фаза второго поля остается неизменной и составляет $[-i(\pi/4)]_3$, в то время как фаза первого поля меняется и становится $[i(\pi/4)]_3$. Детальное рассмотрение этого эффекта, следующего из теории Дебая, дано в монографии Зиммерфельда [82].

Существенной чертой рассматриваемой интерференционной картины можно считать модуляцию интенсивности максимумов с интервалами, более или менее значительно превышающими интервалы (6.55) и (6.56). Эта модуляция, как показали Като [83] и Харт и Ланг [84], обязана эффекту биения при суммировании интенсивностей излучений со взаимно перпендикулярными плоскостями колебаний электрической индукции. Учитывая, что излучение, выходящее из рентгеновской трубки, является (практически) полностью неполяризованным, и рассматривая для простоты Λ_{mh} из (6.56), следует различать Λ_{\perp} и Λ_{\parallel} :

$$\begin{aligned}(\Lambda_{\perp})^{-1} &= |\chi_h|/\lambda \cos \vartheta, & (\Lambda_{\parallel})^{-1} &= \chi_h \cos 2\vartheta/\lambda \cos \vartheta, \\(\Lambda_{\perp})^{-1} + (\Lambda_{\parallel})^{-1} &= (\Lambda_{\perp})^{-1}(1 + \cos 2\vartheta).\end{aligned}\tag{6.65}$$

Формула (6.54) для интенсивности вдоль отражающей плоскости $\mathcal{Y}_h(\rho)$ переписывается и далее преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_h(\rho) &= N_{\perp}\rho^{-1} \left[\cos^2 \left(\frac{\pi\rho}{\Lambda_{\perp}} - \frac{\pi}{4} \right) + \cos 2\vartheta \cos^2 \left(\frac{\pi\rho}{\Lambda_{\parallel}} - \frac{\pi}{4} \right) \right] = \\&= \frac{N_{\perp}}{2\rho} (1 + \cos 2\vartheta) + \frac{N_{\perp}}{2\rho} (1 + \cos 2\vartheta) \cos \{ \pi [(\Lambda_{\perp})^{-1} + (\Lambda_{\parallel})^{-1}] \rho - \\&- \pi/2 \} \cos \{ \pi [(\Lambda_{\perp})^{-1} - (\Lambda_{\parallel})^{-1}] \rho \} - \frac{N_{\perp}}{2\rho} (1 - \cos 2\vartheta) \times \\&\times \sin \{ \pi [(\Lambda_{\perp})^{-1} + (\Lambda_{\parallel})^{-1}] \rho - \frac{\pi}{2} \} \sin \{ \pi [(\Lambda_{\perp})^{-1} - (\Lambda_{\parallel})^{-1}] \rho \}, \\N_{\perp} &= \left[2 \frac{A\alpha}{\pi \sin^2 \vartheta} \right]_{\perp}.\end{aligned}\tag{6.66}$$

Не рассматривая здесь убывания амплитуды с возрастанием ρ , представленного множителем $N_{\perp}/2\rho$, рассмотрим три слагаемых в правой стороне уравнения (6.66).

Первое слагаемое дает лишь общий фон. Третье слагаемое дает незначительные модуляции, так как $\cos 2\vartheta$ имеет величину, близкую к единице. Поэтому основная интерференционная картина определяется вторым слагаемым, точнее, величиной $\cos \{ \pi [(\Lambda_{\perp})^{-1} + (\Lambda_{\parallel})^{-1}] \rho - (\pi/2) \}$. Интервал Λ , слегка отличный от Λ_{mh} из (6.56), соответствует соотношению

$$\Lambda^{-1} = (2\Lambda_{\perp})^{-1} (1 + \cos 2\vartheta).\tag{6.67}$$

Амплитуды полос N/ρ модулируются эффектом биений двух осцилляций интенсивности, выраженным множителем

$$\cos [\pi\rho (\Lambda_{\perp})^{-1} (1 - \cos 2\vartheta)]\tag{6.68}$$

во втором слагаемом. Полосы интерференции ослабляются вплоть до полного исчезновения, если соблюдается условие

$$(1 - \cos 2\vartheta) \rho/\Lambda \approx (2n + 1)/2.\tag{6.69}$$

Число полос между двумя участками ослабления определяется соотношением

$$N = (1 + \cos 2\vartheta)/2 (1 - \cos 2\vartheta) \quad (6.70)$$

за исключением участка между началом и первым ослаблением. Здесь число полос составляет $N/2$. Условия образования полос в участках между двумя ослаблениями зависят от знака множителя $\cos [\pi r \Lambda_{\perp}^{-1} (1 - \cos 2\vartheta)]$. В случае положительного знака максимумы и минимумы интенсивности полос определяются условиями

$$\begin{aligned} \pi r \Lambda_{\perp}^{-1} (1 + \cos 2\vartheta) - \frac{\pi}{2} &= 2n\pi - \max, \\ \pi r \Lambda_{\perp}^{-1} (1 + \cos 2\vartheta) - \frac{\pi}{2} &= (2n + 1)\pi - \min. \end{aligned} \quad (6.71)$$

В случае отрицательного знака указанного множителя условия (6.71) меняются на обратные, и, следовательно, положения максимумов и минимумов меняются после каждого участка ослабления. Приведенные характеристики находятся в хорошем количественном согласии с экспериментальными данными [83, 84] (рис. 44).

Хотя изложенное рассмотрение влияния поляризации на интерференционную картину является естественным и, возможно, элементарным проявлением поперечной природы электромагнитных волн рентгеновского диапазона, наглядный характер эффекта, а также возможность внесения поправки в наблюдаемые значения Λ делает этот эффект существенным. Речь идет о небольших смещениях в положениях максимумов, вызванных как плавным фоном, так и слабыми осцилляциями [третий член справа в (6.66)]. Принципиальный интерес представляет измерение формы максимумов интерференционной картины. Действительно, форма максимумов находится в закономерной связи с формой ветвей дисперсионной гиперболы и согласно (6.40) должна быть гиперболической. Метод экспериментального изучения формы дисперсионной поверхности с помощью описываемых здесь секционных снимков является более прямым, чем использование кривых отражения. Между тем обнаружение каких-либо отклонений от гиперболы в форме дисперсионных кривых имело бы важное значение, так как указывало бы непосредственно на неприменимость (во всяком случае частичную) двухволнового приближения.

В соответствии с (6.61) или (6.62) полная величина разности фаз между волнами, связанными с двумя различными ветвями дисперсионной гиперболы, составляет

$$\Phi = (\Phi^{(1)} - \Phi^{(2)}) + ([\mathbf{k}^{(1)}(\mathbf{v}) - \mathbf{k}^{(2)}(\mathbf{v})], \mathbf{v}) l \quad (6.72)$$

или, учитывая (6.50) и (6.59),

$$\Phi = (\Phi^{(1)} - \Phi^{(2)}) + \frac{2\pi C |\chi_h|}{\lambda \cos \vartheta} \sqrt{xx'}, \quad (6.73)$$

откуда получаем

$$\sqrt{xx'} = \{\Phi - (\Phi^{(1)} - \Phi^{(2)})\} / \frac{2\pi C |\chi_h|}{\lambda \cos \theta}. \quad (6.74)$$

Таким образом, условием точной гиперболической формы интерференционных полос является постоянство разности фаз ($\Phi^{(1)} - \Phi^{(2)}$). Очевидно, это условие относится и к форме дисперсионной поверхности или ее сечения плоскостью отражения. Выполненные до сих пор экспериментальные проверки формы интерференционных полос [85] не обнаружили отклонения от гиперболы.

В связи с использованием секционных снимков для определения абсолютных величин структурных амплитуд в ряде работ Като с сотрудниками [86] разрабатывалась методика регистрации и точных измерений периодов Λ_h , данных формулами (6.55) и (6.56). Если обратиться к основной части дифракционной картины, за исключением участков, прилегающих к входной грани, то в формулу (6.56) следует ввести поляризационный множитель

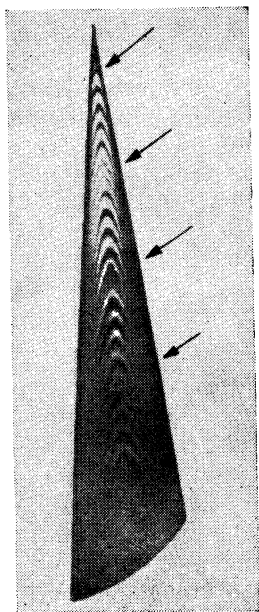


Рис. 44. Модуляция интенсивности гипербол

Стрелки показывают области ослабления

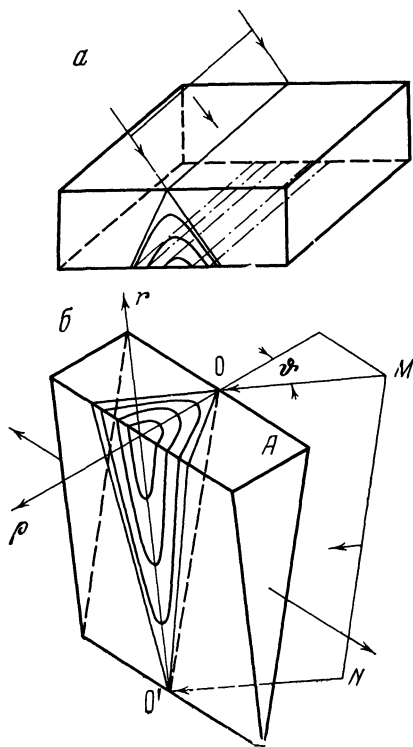


Рис. 45. Схема образования изображения гипербол маятникового решения при распространении сферической волны в кристалле

a — интерференционная картина в случае плоскопараллельной пластинки; *b* — интерференционная картина в случае клина; пересечение прямых r и ρ — точка *C*

согласно (6.67). В таком случае период Λ_h^C между соседними вершинами гипербол в *отражающей плоскости* внутри кристалла имеет величину

$$\Lambda_h^C = \frac{\lambda}{\cos \vartheta \chi_h}. \quad (6.75)$$

На рис. 45, *а* показана соответствующая дифракционная картина на боковой стороне плоскопараллельной пластинки. Период Λ_h^C измеряется вдоль оси ρ . На выходной грани плоскопараллельной пластинки будут наблюдаться полосы, отвечающие основаниям гипербол.

Для объективной регистрации гипербол можно использовать клин, показанный на рис. 45, *б*. Здесь дифракционная картина наблюдается на выходной грани и соответствует косо́й проекции изображения на грани *A*.

Как отмечалось в самом начале этой главы, при исследовании динамического рассеяния, наряду с секционными снимками, используются также снимки со сканированием.

На рис. 45 показано направление перемещений кристалла (и пленки) относительно источника. Нетрудно видеть, что при этом на пленке регистрируются линии, которые являются геометрическими местами вершин гипербол, образующих секционный снимок. Вместе с тем эти линии являются линиями постоянной, или равной, толщины в клинообразном кристалле.

На рис. 45, *б* представлен частный случай съемки при симметричном отражении: отражающая плоскость *OCO'* перпендикулярна входной и выходной граням пластинки. Период Λ_h на выходной грани вдоль оси r будет увеличен по сравнению с периодом Λ_h^C вдоль ρ согласно формуле

$$\Lambda_h = \Lambda_h^C \Phi_h, \quad \Phi_h = \frac{\Delta r}{\Delta \rho} \approx \text{ctg } \mu, \quad (6.76)$$

где μ — угол клина *CO'O*. Величина Λ_h с учетом (6.75)

$$\Lambda_h \approx \frac{1}{\cos \vartheta} \frac{\lambda}{C |\chi_h|} \frac{1}{\text{tg } \mu} \quad (6.77)$$

отличается от соответствующей величины периода в приближении падающей плоской волны лишь множителем поляризации.

Однако детальное рассмотрение изображений, получаемых при регистрации дифракционной картины на выходной грани клина, привело к необходимости введения ряда поправок, приведенных в гл. 9.

Величина интегрального отражения в случае прозрачного кристалла не должна отличаться от значения, получаемого в теории при падающей плоской волне. Согласно (3.816)

$$R_i = \frac{\pi}{2} \int_0^{2A} J_0(x) dx. \quad (6.78)$$

Заметим, что здесь и далее в формулах R_i опущен множитель $|\chi_h| / |\chi_{\bar{h}}|$. Выражение (6.78) представляет осциллирующую функцию на фоне постоянной интенсивности $\pi/2$. Интеграл, очевидно, является функцией верхнего предела

$$2A = \frac{2\pi t C |\chi_h|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}, \quad (6.79)$$

имеет период осцилляций 2π и дает интервал между соседними полосами равной толщины t :

$$\Lambda = \frac{\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}{C |\chi_h|}. \quad (6.80)$$

Таким образом, использование снимков со сканированием, которые были получены впервые в работе Като и Ланга ([23] гл. 1), не требует пересмотра теории в приближении падающей плоской волны. Однако, как это следует из нашего изложения, только на основе теории в приближении падающей сферической волны можно установить механизм образования и количественные характеристики интерференционных полос на снимках со сканированием.

Здесь будет уместно дополнить сопоставление двух типов маятникового решения: полос равной толщины и побочных максимумов, которое было рассмотрено в разделе 3.3. Очевидно, гиперболические полосы на секционных снимках не могут быть отнесены к указанным двум типам. Действительно, согласно (6.33)—(6.35) аргумент функции Бесселя J_0 , входящей в выражение (6.40), для поля интенсивности интерференционной картины будет

$$\xi = \xi(t, \epsilon). \quad (6.81)$$

Отсюда следует, что полосы на секционных снимках представляют геометрические места точек, отвечающих максимумам интенсивности, для определенной пары значений угла ϵ и толщины (или глубины) t . При этом точки всех гипербол на прямой ρ , лежащей в отражающей плоскости, соответствуют значению $\epsilon = 0$, т. е. направлению векторов $\vec{S}^{(i)}$ или $\vec{S} = 2\vec{S}^{(i)}$, параллельному той же плоскости. Естественно, сканирование кристалла по направлению, указанному на рис. 45, приводит к образованию линий равной толщины на фотоплёнке. (На выходной грани кристалла образуются лишь интерференционные гиперболы: при сканировании меняется объем кристалла, в котором происходит рассеяние падающей сферической волны.)

С другой стороны, полосы на секционных снимках, так же как и побочные максимумы, обязаны интерференции *при равном наклоне*. Однако в то время как при образовании побочных максимумов интерферируют волны, имеющие одинаково направленные волновые векторы как внутри кристалла, так и в вакууме,

при падении на кристалл сферической волны интерферируют волны, имеющие в кристалле одинаково направленные векторы \vec{S} , т. е. лучи, но в вакууме имеющие различные направления лучей, или волновых векторов.

Если учесть соотношения (6.59) и (6.60) и обратиться к дисперсионной гиперболе в обратном пространстве, то станет очевидным следующее. Так как интервалы осцилляций и разность фаз интерферирующих волн в случае секционных снимков, согласно (6.59), определяются проекцией соответствующего диаметра дисперсионной гиперболы на нормаль (\mathbf{v} , но не \mathbf{n} !) или вектор \vec{S} , то очевидно, что разность фаз уменьшается к краю снимка до нуля, так как вблизи границы максимума нормаль к кривой становится перпендикулярной диаметру гиперболы. Таким образом, в этом отношении гиперболы на секционных снимках сходны скорее с линиями равной толщины, чем с линиями равного наклона.

6.2. Применение изложенной теории к рассеянию в поглощающем кристалле.

Для перехода к поглощающему кристаллу мы должны рассматривать в выражениях (6.23)—(6.27) параметры χ_0 и χ_h , $\chi_{\bar{h}}$ как комплексные величины. Следует обратить внимание на то, что χ_0 входит только в величину фазы P (6.25), в то время как χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ — в подынтегральные функции в (6.26) и (6.27). Выражение (6.25) можно переписать в виде

$$P = P_r + iP_i = \frac{K}{2} (\chi_{0r} + i\chi_{0i}) (l_0 + l_h), \quad (6.82)$$

а следовательно, множитель поглощения, относящийся к предынтегральным частям в (6.23) и (6.24), соответствует нормальному коэффициенту поглощения.

Переходя к интегралам U_0 и U_h , замечаем, что при вычислении интерференционной части показателя в множителе поглощения, как показано в гл. 4, согласно теории Захариасена и Лауэ, используется весьма существенное приближение: $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$, в то время как при вычислении амплитудных множителей принимается $\chi_0 \approx \chi_{0r}$ и $\chi_h \chi_{\bar{h}} \approx (\chi_h \chi_{\bar{h}})_r = \Phi_h$. Однако при интегрировании выражений (6.26) и (6.27), как было показано Като, удастся избежать указанных ограничений и вычислить эти интегралы для общего случая любого соотношения между модулями действительной и мнимой частями параметров χ . Для этого используется интегрирование по комплексной плоскости. Как и ранее, начинаем с интеграла U_h . Сначала этот интеграл вычисляется при условии

$$a > |(x - \alpha \cdot t_0)|/t_0 = q. \quad (6.83)$$

Вводится следующая функция комплексной переменной z :

$$I(\pm) = [\pm^{1/2} (z^2 + f^2)^{1/2}] \exp it [-qz \pm \alpha (z^2 + f^2)^{1/2}], \quad (6.84)$$

причем значение $(z^2 + f^2)^{1/2}$ будет равно $(s^2 + f^2)^{1/2}$ на линии $z = s_r + is_i$ для $s_r \geq 0$. Контур интегрирования показаны на рис. 46. Интегрирование вдоль линий L_i ($i = 1, 2, 3, 4$) сводится к четырем интегралам:

$$\begin{aligned} \int_{L_1=-\infty}^0 I(+)\, dZ; & \quad \int_{L_2=0}^{\infty} I(+)\, dz; \\ \int_{L_3=-\infty}^0 I(-)\, dz; & \quad \int_{L_4=0}^{\infty} I(-)\, dz. \end{aligned} \quad (6.85)$$

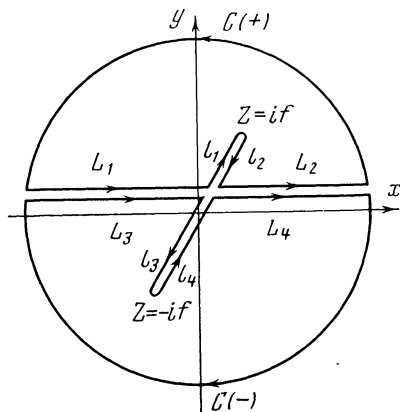


Рис. 46. К выводу формулы (6.89)

Далее берутся интегралы по контурам $C(+)$ и $C(-)$. Однако, так как внутри этих последних контуров нет полюсов, линейные интегралы по бесконечно удаленным полуокружностям при выполнении условий (6.83) стремятся к нулю и интегралы по бесконечно малым окружностям вокруг точек (полюсов) $z = \pm if$ равны нулю. Поэтому

$$\begin{aligned} U_h &= \bar{f} \exp j\eta_h \left[\int_{L_1+L_2} I(+)\, dz + \int_{L_3+L_4} I(-)\, dz \right] = \\ &= \bar{f} \exp i\eta_h \left[\int_{l_1+l_2} I(+)\, dz + \int_{l_3+l_4} I(-)\, dz \right]. \end{aligned} \quad (6.86)$$

На этих последних линиях выполняются условия

$$z = if \sin \varphi (l_1, l_2); \quad z = -if \sin \varphi (l_3, l_4). \quad (6.87)$$

В таком случае линейные интегралы по контурам l_i ($i=1, \dots, 4$) имеют вид

$$\begin{aligned} \int_{l_1} I(+)\, dz &= -i/2 \int_{\varphi_0}^{\pi/2} \exp ft (q \sin \varphi - i\alpha \cos \varphi) \, d\varphi, \\ \int_{l_2} I(+)\, dz &= i/2 \int_{\pi/2}^{\varphi_0} \exp ft (q \sin \varphi + i\alpha \cos \varphi) \, d\varphi, \\ \int_{l_3} I(-)\, dz &= -\frac{i}{2} \int_{-\varphi_0}^{\pi/2} \exp ft (-q \sin \varphi + i\alpha \cos \varphi) \, d\varphi, \\ \int_{l_4} I(-)\, dz &= \frac{i}{2} \int_{\pi/2}^{-\varphi_0} \exp ft (-q \sin \varphi - i\alpha \cos \varphi) \, d\varphi, \end{aligned} \quad (6.88)$$

где φ_0 определяется из соотношения $f_r \sin \varphi_0 = s_i$. Изменяя переменную φ таким образом, чтобы все интегралы приняли форму первого, например, во втором интеграле, заменяя φ на $\pi - \varphi$, получим для суммы интегралов

$$\begin{aligned} U_h &= \frac{i}{2} \bar{f} \exp i\eta_h \int_{\varphi_0}^{2\pi+\varphi_0} \exp ft (q \sin \varphi - i\alpha \cos \varphi) d\varphi = \\ &= \frac{i}{2} \bar{f} \exp i\eta_h \int_0^{2\pi} \exp [ift (\alpha^2 - q^2)^{1/2} \sin \vartheta] d\vartheta = \\ &= \pi i \bar{f} \exp i\eta_h J_0 [ft (\alpha^2 - q^2)^{1/2}]. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Нетрудно показать, что, заменяя условие (6.83) условием $\alpha < |q|$, мы получаем $U_h = 0$, а при $\alpha = |q|$ интеграл становится несобственным, хотя и имеет главное значение.

Аналогичным путем решается и интеграл U_0 .

Таким образом, мы приходим к неожиданному и весьма важному результату. Формулы (6.36) и (6.37) для волновых функций в кристалле одинаково применимы как к прозрачному, так и к поглощающему кристаллам, если во втором случае считать χ_0 и χ_h комплексными величинами. При этом никаких ограничений, касающихся соотношения модулей $|\chi_{0r}|$ и $|\chi_{0i}|$, а также $|\chi_{hr}|$ и $|\chi_{hi}|$, не накладывается.

Так как при больших значениях аргумента ξ , в частности $\xi(\rho)$, функции Бесселя J_0 принимают асимптотические значения

$$J_0(\xi) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \cos\left(\xi - \frac{\pi}{4}\right), & -\frac{\pi}{2} < \xi < +\frac{\pi}{2}, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \cos\left(\xi + \frac{\pi}{4}\right), & \frac{\pi}{2} < \xi < \frac{3\pi}{2} \end{cases} \quad (6.90)$$

(см. также (6.53)), то мы можем рассматривать эти выражения как описывающие две плоские волны в кристалле. Каждая волна связана с определенной ветвью дисперсионной гиперболы. Эти волны в поглощающем кристалле имеют линейный коэффициент поглощения в направлении нормали в данной точке гиперболы согласно (5.85) на некотором пути l :

$$\begin{aligned} \mu l &= K\chi_{0i}(l_0 + l_h) \pm 2f_i (xx')^{1/2} = \\ &= \left\{ \mu l \pm 2\pi K_0 C \cos \nu_h \sqrt{\chi_{hi}\chi_{\bar{h}\bar{i}}} \sqrt{1 - \frac{\text{tg}^2 \varepsilon_i}{\text{tg}^2 \vartheta}} \right\} (l_0 + l_h). \end{aligned} \quad (6.91)$$

В связи с этим выражением в разделе 5.3 рассматривается соотношение между этой величиной и полным значением σ в теории рассеяния в поглощающем кристалле при падении плоской волны.

Переходя от выражений для волновых полей к выражениям для интенсивностей и прослеживая изменение интенсивностей вдоль отражающей плоскости (направление отсчета длин ρ),

мы можем использовать выражения (6.36) и (6.37). Таким образом, интенсивности вдоль указанного направления для проходящей и дифрагированной волн в кристалле имеют вид

$$\mathcal{J}_0 = \frac{1}{32\pi} \frac{1}{Kz} \exp\left[-\frac{\mu\rho}{\cos\vartheta}\right] |\bar{f}|^2 \left| J_1\left[2a_{r\rho} + i(l_0 + l_h) \frac{KC\mu\varepsilon}{2} \exp i\omega_h\right] \right|^2, \quad (6.92)$$

$$\mathcal{J}_h = \frac{1}{32\pi} \frac{1}{Kz} \exp\left[-\frac{\mu\rho}{\cos\vartheta}\right] |\bar{f}|^2 \left| J_0\left[2a_{r\rho} + i(l_0 + l_h) \frac{KC\mu\varepsilon}{2} \exp i\omega_h\right] \right|^2, \quad (6.93)$$

$$\rho = (l_0 + l_h) \cos\vartheta; \quad \varepsilon \exp i\omega_h = \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}}. \quad (6.94)$$

Рассмотрим два важнейших частных случая (применительно к \mathcal{J}_h).

Тонкий кристалл

$$\left| (l_0 + l_h) \frac{KC\mu\varepsilon}{2} \right| \ll 1. \quad (6.95)$$

При этом можно использовать приближенное выражение

$$J_0(u + iv) = \mathcal{J}_0(u) - ivJ_1(u), \quad v \ll 1, \quad (6.96)$$

или

$$|J_0(2\mu a\rho)|^2 = |J_0(2a_{r\rho})|^2 + \left| (l_0 + l_h) \frac{KC\mu\varepsilon}{2} \right| [J_1(2a\rho)]^2. \quad (6.97)$$

Подставляя это выражение в (6.93), мы получим необходимое частное значение \mathcal{J}_h . Определим теперь относительное смещение максимумов функции (6.97) и полной величины \mathcal{J}_h сравнительно с положением максимумов в случае прозрачного кристалла согласно (6.55). Указанное смещение имеет величину

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_m = -\kappa_0/\Lambda_{mh}; \quad \kappa_0 = [C\chi_{hr}/\chi_{oi}]^{-1}, \quad (6.98)$$

причем эта величина смещения справедлива, если только $\kappa\Lambda_{mh} \ll 1$. Отметим, что максимумы смещаются по направлению к входной грани. Численная оценка для величины κ_0 для отражения 220 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge составит $\sim 5\%$.

Толстый кристалл

$$\left| (l_0 + l_h) \frac{KC\mu\varepsilon}{2} \right| \gg 1. \quad (6.99)$$

В соответствии с асимптотическим разложением функции Бесселя нулевого порядка J_0 величина интенсивности в направлении

ρ выражается следующим образом:

$$\mathcal{Y}_h = \frac{1}{32\pi^2} \frac{1}{Kz} \frac{|f|}{l \sin \vartheta} \exp \left[-\frac{\mu l}{\cos \vartheta} \right] \left\{ \cos \left(4a_{r0} - \frac{\pi}{2} \right) + \right. \\ \left. + \operatorname{ch} [(l_0 + l_h) KC \mu \varepsilon \exp i\omega_h] \right\}. \quad (6.100)$$

Оценка относительного смещения максимумов в этом случае показывает, что учет этого смещения при прецизионных измерениях необходим лишь при значениях χ_{oi}/χ_{hr} и χ_{hi}/χ_{hr} порядка 0,1.

Следующей задачей в разработке теории в приближении сферической падающей волны является вычисление интегральных интенсивностей, которые здесь определяются интегрированием поля интенсивности на выходной грани. Задача решается для кристалла, имеющего форму клина, в частности, в связи с интерпретацией снимков со сканированием и их использованием для определения структурных амплитуд.

Значения интегрального отражения и прохождения в излагаемой теории формулируются следующим образом:

$$T_i^n = \frac{C |\chi_h|}{\sin 2\vartheta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} T_i^y; \quad T_i^y = \frac{\pi}{2} \exp[-\mu t'] \times \\ \times \frac{KC |\chi_h| t}{2 \sqrt{\gamma_0' \gamma_h'}} \int_{-1}^1 \exp \left[\frac{\mu t \sigma}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0'} - \frac{1}{\gamma_h'} \right) \right] \frac{1 - \sigma}{1 + \sigma} \times \\ \times \left| J_1 \left[\frac{KC |\chi_h| t \sqrt{1 - \sigma^2}}{2 \sqrt{\gamma_0' \gamma_h'}} \right] \right|^2 d\sigma; \quad (6.101)$$

$$R_i^n = \frac{C |\chi_h|}{\sin 2\vartheta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} R_i^y; \\ R_i^y = \frac{\pi}{2} \exp[-\mu t'] \frac{KC |\chi_h| t}{2 \sqrt{\gamma_0' \gamma_h'}} \int_{-1}^1 \exp \left[\frac{\mu t \sigma}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0'} - \frac{1}{\gamma_h'} \right) \right] \times \\ \times \left| J_0 \left[\frac{KC |\chi_h| t \sqrt{1 - \sigma^2}}{2 \sqrt{\gamma_0' \gamma_h'}} \right] \right|^2 d\sigma. \quad (6.102)$$

Переменная интегрирования σ является нормированной переменной координатой на прямой \overline{RT} , представляющей след выходной грани, и определяется выражением (см. рис. 47)

$$\sigma = \left[\tau - \frac{1}{2}(a + b) \right] / {}^{1/2}(b - a), \quad (6.103)$$

где $a = \overline{TF}$, $b = \overline{RF}$ и τ — переменное отстояние от основания F перпендикуляра EF , опущенного на выходную грань. Далее $t' = (t/2) [(1/\gamma_0) + (1/\gamma_h)]$, γ_0 и γ_h — косинусы углов с нормалью к выходной грани.

В работе Като [24] вычисляется интеграл в выражении (6.102) и подробно анализируются полученные выражения для интегрального отражения R_i . Для R_i^y получено выражение

$$R_i^y = \frac{\pi}{2} \exp[-\mu t'] \sqrt{\frac{1+\kappa^2}{1-g^2}} \left\{ \int_0^{2\bar{A}} J_0(\rho) d\rho + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r! r!} \left(\frac{h}{2}\right)^{2r} g_{2r+1} [2A \sqrt{1-g^2}] \right\},$$

$$2\bar{A} = 2A \sqrt{1-g^2}. \quad (6.104)$$

В этом выражении

$$\kappa = |\chi_{hi}| / |\chi_{hr}|; \quad g = \frac{\mu t}{2} \left(\frac{1}{\gamma'_0} - \frac{1}{\gamma'_h} \right) (2A)^{-1}, \quad (6.105)$$

A соответствует формуле (3.61) с учетом комплексного значения величин $|\chi_h|$ и $|\chi_{\bar{h}}|$. Следовательно, $A = |A| \exp i\alpha$, $\cos \alpha = 1$, $\sin \alpha = \kappa$. Наконец, h дается формулой (4.117).

Сравнивая (6.104) с величиной интегрального отражения в приближении падающей плоской волны (4.115), (4.121) и (3.81), замечаем, что интеграл в (6.104) отличается от интеграла W в (4.115) верхним пределом интегрирования, а сумма в (6.104) отличается от интеграла V в (4.115) множителем $g_{2r+1} [2A \sqrt{1-g^2}]$.

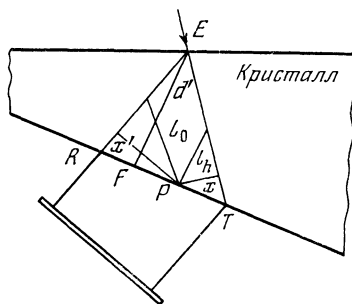


Рис. 47. К вычислению интегральных интенсивностей в случае клина

Указанное сходство используется для проведения качественного анализа результатов интегрирования. При этом необходимо заменить косинусы углов с нормалью к выходной грани γ'_0 и γ'_h на соответствующие величины, относящиеся к входной грани.

I. *Прозрачный кристалл*: $\mu = \kappa = g = 0$. Интегральное отражение, описывающее распределение интенсивности на снимках со сканированием, уже в функции от угловой переменной y или угла η , одинаково как при падении плоской, так и сферической волн.

II. *Тонкий поглощающий кристалл*: $h (\approx \mu t') \ll 1$. Полагая, что величина Σ в (6.104) пренебрежимо мала, приходим к выводу, что интегральное отражение при падающей сферической волне слегка отличается множителем $[(1 + \kappa^2)/(1 - g^2)]^{1/2}$ и верхним пределом интегрирования от выражения для прозрачного кристалла.

III. *Промежуточная область толщин*: $h (\approx \mu t') \approx 1$. В этом случае необходимо учитывать величину

$$V^* = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!r!} \left(\frac{h}{2}\right)^{2r} g_{2r+1} [2A \sqrt{1 - g^2}]. \quad (6.106)$$

Численные значения функции $g_m(2\bar{A})$ в широком интервале значений $2\bar{A}$, т. е. в широком интервале произведений μt , оказались близкими к единице для значений $2\bar{A} < 3$ и при условии, что κ и g порядка 0,1. Таким образом, и в этом случае можно использовать теорию в приближении падающей плоской волны.

IV. *Толстый поглощающий кристалл*: $h \gg 1$. Используя асимптотическое разложение бесселевых функций, можно получить следующее выражение для интегрального отражения:

$$R_h^y = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \exp[-\mu t' + h] \left\{ 1 + \left[\frac{1}{8} + \frac{\kappa^2 + g^2}{(1 + \kappa^2)^2} \right] \frac{1}{h} \right\}, \quad (6.107)$$

т. е. результат (при достаточно больших h), практически совпадающий с (4.174) для интегрального отражения в случае падающей плоской волны, разумеется, если в (6.102) отнести $\cos \psi_0$ и $\cos \psi_h$ к входной грани.

В заключение приведем линейный коэффициент поглощения в направлении нормали к выходной грани для интегрального отражения:

$$\mu = \frac{1}{2} K \chi_{0i} \left(\frac{1}{\gamma_0'^2} + \frac{1}{\gamma_h'^2} \right) + r K C \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} [(\kappa^2 + g^2) / \gamma_0' \gamma_h']^{1/2}, \quad (6.108)$$

где параметры χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ рассматриваются как комплексные величины.

**ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ПО БРЭГГУ. I.
ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ.
КОЭФИЦИЕНТЫ ПОГЛОЩЕНИЯ.
ДИФРАКЦИЯ В КОНЕЧНОМ КРИСТАЛЛЕ**

Изложенная выше теория относится к прохождению рентгеновских лучей через кристалл с выходом отраженной волны через выходную или обратную поверхность кристаллической пластинки. Такая схема эксперимента носит название метода или случая Лауэ. Другая схема (рис. 48) относится к случаю Брэгга, в котором отраженная волна выходит в вакуум через входную поверхность. Существенное отличие физических явлений, протекающих при этом в кристалле, от того, что имеет место в случае Лауэ, определяется различием условий для амплитуд на границах раздела кристалл—вакуум. В случае Лауэ комплексный характер поляризуемости, угловых функций и волновых векторов внутри кристалла выражает истинное поглощение рентгеновских лучей. В случае Брэгга наряду с поглощением мы встречаемся с экстинкцией —

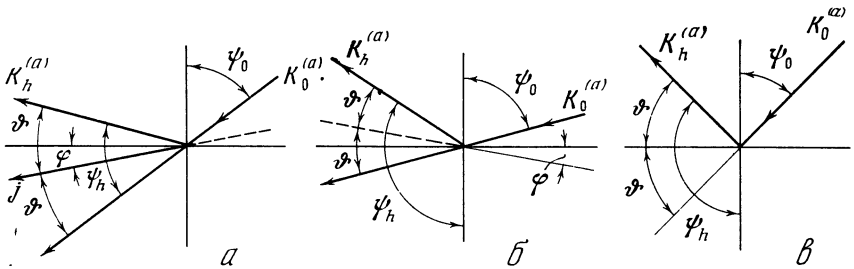


Рис. 48. Схема отражения по Брэггу
 $a - \gamma_0 > |\gamma_h|$; $б - \gamma_0 < |\gamma_h|$; $в - \gamma_0 = |\gamma_h|$

интерференционным эффектом, действие которого для некоторых случаев в определенной части области максимума значительно превосходит действие поглощения. Характерной чертой отражения по Брэггу является различие физического механизма рассеяния в разных частях области максимума.

Теория рассеяния рентгеновских лучей идеальными кристаллами при отражении по Брэггу исторически начала разрабатываться раньше теории Эвальда. Она была впервые дана в трудах Дарвина и Принса [87], который включил в рассмотрение эффект

поглощения. В настоящей главе используется тот же подход, что и в предыдущих главах, предложенный Лауэ—Захариасеном. Следует отметить работу Вагнера [88], который рассмотрел отражение по Брэггу в тонкой плоскопараллельной поглощающей пластинке, а также работы Бонзе [89, 90]. В самые последние годы были опубликованы важные теоретические и экспериментальные исследования, посвященные этой проблеме [91—97].

Поскольку различие между рассеянием по Лауэ и по Брэггу возникает при изменении пограничных условий, содержание гл. 2, относящееся к неограниченному кристаллу, может быть использовано в обоих случаях. Иное расположение дисперсионной поверхности относительно нормали к выходной поверхности кристалла будет специально рассмотрено.

Переходя к полукристаллу (см. гл. 3), замечаем прежде всего что при выбранных нами направлениях отсчета углов ψ_0 и ψ_h величина $\cos \psi_h = \gamma_h$ в случае Брэгга становится отрицательной

$$\psi_h > \pi/2, \quad \gamma_h = -|\gamma_h|. \quad (7.1)$$

В соответствии с этим получаем

$$\beta = 2\alpha - \chi_0 \left(1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right), \quad (7.2)$$

$$c^{(i)} = \frac{+\beta \pm (\beta^2 - 4\chi_h \chi_{\bar{h}} C^2 |\gamma_h|/\gamma_0)^{1/2}}{2\chi_{\bar{h}} \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} C}. \quad (7.3)$$

Как можно видеть, существенное отличие этого выражения от (3.11) заключается в том, что корень в правой части для определенной области величин β может принимать мнимые значения. Эта область ограничена условиями

$$-2C|\chi_h| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} < \beta < +2C|\chi_h| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}. \quad (7.4)$$

В результате в указанной области величин β волновые векторы волн в решетке принимают комплексные значения. По аналогии с волновыми векторами в поглощающих кристаллах это означает экспоненциальное ослабление интенсивностей таких волн по мере их проникновения внутрь кристаллов. Соответствующая область максимума носит название области полного отражения.

В этой главе мы также будем пользоваться угловыми функциями β , u и v от величины η — отклонения от угла ψ_0 . Однако связи между указанными функциями будут иметь несколько отличные значения в различных областях максимума, а также в прозрачных и поглощающих кристаллах.

7.1. Отражение от прозрачного кристалла

Для того чтобы исследовать различные области максимума при отражении по Брэггу, рассмотрим прежде всего схему эксперимента, при котором падающая вакуумная волна имеет достаточно широкий по сравнению с толщиной кристалла волновой фронт и при этом ничтожную расходимость, меньшую углового размера максимума.

По-видимому, вся область максимума может быть разделена по меньшей мере на три части: область полного отражения и две соседние — в сторону меньших и больших углов $\psi_0 \pm \eta$.

Область I находится в стороне меньших значений углов $\psi_0 - \eta$ сравнительно с границей области полного отражения. Здесь $y_I < -1$, но $|y_I| > 1$. Величина $(y_I^2 - 1)^{1/2}$, а вместе с ней и значения $c^{(i)}$, $\xi_0^{(i)}$, $k_0^{(i)}$ и $k_h^{(i)}$ являются действительными величинами. Переменная v определяется условиями

$$y_I = \frac{\beta}{2C|\chi_h|\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0}} = -\operatorname{ch} v, \quad v > 0. \quad (7.5)$$

Используя приведенные соотношения, а также (3.15), получаем

$$\begin{aligned} \sqrt{y_I^2 - 1} = \operatorname{sh} v, \quad \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h^{(1)}}{D_0^{(1)}} = \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y_I + \\ + \sqrt{y_I^2 - 1}) = -\sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp(-v), \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h^{(2)}}{D_0^{(2)}} = \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y_I - \sqrt{y_I^2 - 1}) = -\sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp(+v). \quad (7.7)$$

Область III находится в стороне больших значений углов $\psi_0 + \eta$. Здесь $y_{III} > 1$, $(y_{III}^2 - 1)^{1/2}$ и связанные с ним функции действительны, так же как и в области I. Переменная v определяется условиями

$$y_{III} = \frac{\beta}{2C|\chi_h|\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0}} = \operatorname{ch} v, \quad v > 0, \quad (7.8)$$

откуда

$$(y_{III}^2 - 1)^{1/2} = \operatorname{sh} v, \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h^{(1)}}{D_0^{(1)}} = \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y_{III} + \sqrt{y_{III}^2 - 1}) = \\ = \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp(+v), \end{aligned} \quad (7.10)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h^{(2)}}{D_0^{(2)}} &= \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y_{II} - \sqrt{y_{II}^2 - 1}) = \\ &= \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp(-v). \end{aligned} \quad (7.11)$$

Наконец, в области полного отражения—области II для переменной v принимаем

$$y_{II} = \cos v, \quad v > 0. \quad (7.12)$$

Границами области являются значения $y_{\min} = -1$, $y_{\max} = +1$. Так как в этой области $|y| < 1$, то

$$\sqrt{y_{II}^2 - 1} \equiv i\sqrt{1 - y_{II}^2} = i \sin v, \quad (7.13)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h^{(1)}}{D_0^{(1)}} &= \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y_{II} + i\sqrt{1 - y_{II}^2}) = \\ &= \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp(iv), \end{aligned} \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h^{(2)}}{D_0^{(2)}} &= \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y_{II} - i\sqrt{1 - y_{II}^2}) = \\ &= \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \exp(-iv). \end{aligned} \quad (7.15)$$

Очевидно, при наличии поглощения переменные y и v становятся комплексными величинами. Заметим также, что угловая ширина области полного отражения, которая далее будет определяться, соответствует полуширине максимума при отражении по Лауэ и составляет для прозрачного кристалла от ~ 10 — $13''$ для сильных отражений до ~ 2 — $3''$ для слабых отражений.

Для дальнейшего анализа необходимо привести три возможные схемы съемки по Брэггу, различающиеся соотношением между γ_0 и модулем $|\gamma_h|$. На рис. 48, а представлен случай $\gamma_0 > |\gamma_h|$, $(\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/2} > 1$, $\psi_h - (\pi/2) < (\pi/2) - \psi_0$, $(\pi/2) - \psi_0 > \vartheta$. На рис. 48, б показана схема съемки при $\gamma_0 < |\gamma_h|$, $(\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/2} < 1$, $\psi_h - (\pi/2) > (\pi/2) - \psi_0$, $(\pi/2) - \psi_0 < \vartheta$. На рис. 48, в дана схема симметричного отражения по Брэггу, при котором отражающая плоскость параллельна входной поверхности кристаллической пластинки и $\gamma_0 = |\gamma_h|$, $\psi_0 = \pi - \psi_h$.

Сопоставим теперь формулы для амплитудных коэффициентов отражения в трех областях максимума с анализом взаимного расположения дисперсионной поверхности и нормалей \mathbf{n} к входной поверхности кристалла в случае Брэгга (см. рис. 49). Отражающая плоскость представлена здесь прямой, проходящей через точки E и M , и является действительной осью дисперсион-

значение $c^{(2)}$ в (7.16) является единственным решением дисперсионного уравнения в области III.

В области I точки $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$ как бы меняются местами сравнительно с точками $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$. С увеличением η в сторону отрицательных значений, т. е. с приближением к левой границе максимума, отрезок $\overline{A^{(1)}B'}$, а с ним и коэффициент $c^{(1)}$ уменьшаются и стремятся к нулю, в то время как отрезок $A^{(2)}B'$ и $c^{(2)}$ возрастают беспредельно. Единственным физически приемлемым решением дисперсионного уравнения в области I является значение $c^{(1)}$, и, следовательно, необходимо признать, что в области I внутри кристалла существует лишь первое поле.

Сопоставляя эти выводы с формулами (7.6), (7.7) и (7.10), (7.11), мы видим соответствие в поведении обоих полей в областях I и III.

Наконец, тот же результат можно сформулировать с помощью пограничных условий для амплитуд на входной поверхности, которые для случая Брэгга принимают следующую характерную форму:

$$D_0^{(1)} + D_0^{(2)} = D_0^{(a)} \quad \text{и} \quad D_h^{(1)} + D_h^{(2)} = D_h^{(a)}. \quad (7.17)$$

Учитывая сделанные выводы о наличии только одного из полей внутри кристалла в двух боковых областях максимума, перепишем эти условия для областей I и III соответственно:

$$D_0^{(2)} = D_0^{(a)}, \quad c^{(2)}D_0^{(2)} = D_h^{(a)}, \quad (7.18)$$

$$D_0^{(1)} = D_0^{(a)}, \quad c^{(1)}D_0^{(1)} = D_h^{(a)}.$$

Таким образом, в каждой из этих областей значения соответствующей амплитуды $D_0^{(i)}$ постоянны и не зависят от угла η , в то время как амплитуды отраженных волн $D_h^{(i)}$ возрастают с уменьшением модуля $|\eta|$ или $|y|$, достигая максимума при $y = \pm 1$, т. е. на границах области II полного отражения. Для $\chi_h = \chi_h^-$ эти максимальные значения, согласно (7.6) и (7.11), при $c^{(i)} = 1$ приводят к условиям в областях I и III:

$$\begin{aligned} \exp(-v) &= -\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}, \\ \exp(-v) &= \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Однако эти условия выполнимы только в том случае, когда $|\gamma_h| < \gamma_0$, так как v всегда положительно, другими словами, когда схема эксперимента соответствует рис. 48,а. В случае схемы, представленной рис. 48,б, дисперсионная поверхность в обратном пространстве будет иметь расположение относительно нормалей,

несколько отличное от рис. 49. При уменьшении $|\eta|$ на аналогичной схеме точки $A^{(2)}$ в области III и $A'^{(1)}$ в области I, перемещаясь вдоль гиперболы, достигнут точек касания соответственно R и R' раньше, чем придут в вершину гиперболы F (или F'), в которой только и может обратиться в единицу коэффициент $c^{(i)}$. В результате условия (7.19) не будут выполнены.

Переходя к коэффициенту отражения, получаем одинаковую величину для областей I и III:

$$R_{I,III} = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \left| \frac{D_h^{(a)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 = \exp(-2\nu) \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (7.20)$$

Что касается области II, то из (7.14) и (7.15) следует, что для обоих полей

$$R_{II} = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| |y \pm i\sqrt{1-y^2}|^2 = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (7.21)$$

Таким образом, для прозрачного кристалла коэффициент отражения равен 1 во всей области полного отражения от $y = -1$ до $y = +1$ и быстро падает в областях I и III от единицы до нуля по закону (7.20). Соответствующая кривая отражения (см. рис. 50) была впервые вычислена Дарвином [5], который использовал известный первый вариант динамической теории.

Очевидно, эффект полного отражения падающей волны в области II связан с экспоненциальным убыванием волнового поля в кристалле с глубиной. Это убывание, подобно явлению поглощения, также можно описать введением комплексного волнового вектора.

Так как в области II мы не можем построить тангенциальную проекцию волнового вектора в кристалле, воспользуемся формально уравнением (3.1), причем вместо величины $\xi_0^{(2)}$ используем коэффициент $c^{(2)}$ согласно (2.82). Таким образом, мы получаем условие на границе для волновых векторов в форме

$$\mathbf{k}_0^{(2)} = \mathbf{K}_0^{(a)} - K\delta^{(2)}\mathbf{n}_0, \quad (7.22)$$

$$\begin{aligned} |K\delta^{(2)}\mathbf{n}_0| &= \frac{1}{\gamma_0} \left\{ -\xi_0^{(2)} - \frac{1}{2} K\chi_0 \right\} = \\ &= \frac{1}{\gamma_0} \left\{ -\frac{1}{2} K\chi_{\bar{h}} c^{(2)} - \frac{1}{2} K\chi_0 \right\}, \end{aligned} \quad (7.23)$$

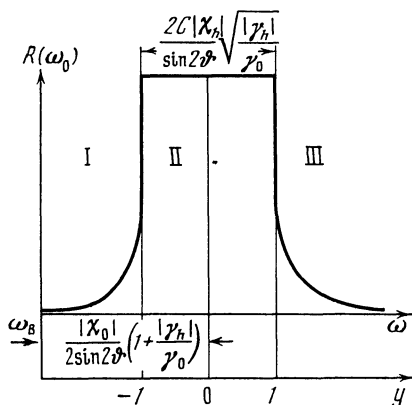


Рис. 50. Профиль максимума отражения по Брэггу при асимметричной съемке от прозрачного кристалла

или, подставляя значение $c^{(2)}$ из уравнения (7.15), получаем для мнимой части волнового вектора, обязанной полному отражению от прозрачного кристалла,

$$|K\delta_i^{(2)}n_o| = -\frac{K\chi_h C}{2\gamma_0} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_h}} \sqrt{1-y^2}. \quad (7.24)$$

По аналогии с коэффициентом поглощения (4.36) вводится коэффициент экстинкции

$$\sigma_e = 4\pi k_{oi}^{(2)} = 2\pi KC |\chi_h| \sqrt{1-y^2} / \sqrt{\gamma_0|\gamma_h|}. \quad (7.25)$$

Как можно видеть из уравнения (7.25), экстинкция имеет максимум при $y = 0$ и падает до нуля на краях области полного отражения при $y = \pm 1$. Подставляя в (7.25) значение $|\chi_h|$, получаем [см. (2,34)]

$$\sigma_{e \max} = 2\lambda C e^2 F(h) / \sqrt{\gamma_0|\gamma_h|} mc^2 \Omega. \quad (7.26)$$

При подстановке в (7.23) вместо $c^{(2)}$ величины $c^{(1)}$ мы получим согласно (7.14) для коэффициента экстинкции

$$\sigma'_e = -2\pi KC |\chi_h| \sqrt{1-y^2} / \sqrt{\gamma_0|\gamma_h|}. \quad (7.27)$$

Если положительное значение σ_e по (7.25) означает экспоненциальное ослабление волнового поля, проникающего в глубь кристалла, то отрицательное значение σ'_e соответствует экспоненциальному усилению этого поля с глубиной и, таким образом, является физически неприемлемым, так как в области II вся энергия падающей волны отражается обратно в вакуум. Этот результат еще раз подтверждает правильность вывода о наличии в области II лишь второго поля.

В дальнейшем мы будем часто пользоваться помимо углов ψ_0 и ψ_h относительно нормали углами ω_0 и ω_h относительно входной поверхности или углами скольжения. При этом увеличение угла ψ_0 , или величина η , откладываемая от нормали по часовой стрелке, означает уменьшение угла скольжения ω_0 . Используя угол ϑ между входной поверхностью и отражающей плоскостью, запишем для схемы рис. 48, а

$$\gamma_0 = \cos \psi_0 = \sin(\vartheta + \varphi) = \sin \omega_0, \quad (7.28)$$

$$|\gamma_h| = |\cos \psi_h| = \sin(\vartheta - \varphi) = \sin \omega_h.$$

При симметричном отражении (рис. 48, в) максимальное значение экстинкции составляет величину

$$\sigma_{e, s, \max} = 2 \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda C}{\sin \vartheta} \frac{F(h)}{\Omega} \quad (7.29)$$

и, следовательно определяется только структурой кристалла, природой рассеивающих атомов и индексами отражения.

Сопоставим величины экстинкции и обычного поглощения. Наибольшее превышение σ_e над величиной μ имеет место для самых первых отражений и в тех случаях, когда обычное поглощение минимально, т. е. для жесткого излучения и атомов легких элементов. Этим требованиям удовлетворяет, например, отражение излучения $\text{MoK}\alpha$ от плоскости (200) Si. В этом случае, принимая $C = 1$, получим

$$\sigma_{e, s, \max} = 14\,700 \text{ см}^{-1}, \quad \mu \approx 15 \text{ см}^{-1}, \quad \sigma_e/\mu \approx 1000. \quad (7.30)$$

Более правильно сравнивать величину σ_e с величиной μ , отнесенной к нормали к входной поверхности, тогда отношение экстинкции к поглощению составит лишь ~ 128 .

Для полной характеристики максимума интенсивности при отражении по Брэггу, приведем выражения для углового размера и средней точки области полного отражения. Согласно (7.4) угловая величина этой области составляет

$$\Delta\beta = 4C |\chi_h| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \quad (7.31)$$

или, переходя к угловому аргументу η ,

$$\Delta\eta_0 = (\sin 2\vartheta)^{-1} 2C \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} |\chi_h|. \quad (7.32)$$

Наличие множителя C существенно снижает угловую ширину $\Delta\eta_0$ для π -колебаний вектора \mathbf{D} . Индекс 0 обозначает принадлежность данного углового интервала к падающей волне. Средняя точка максимума η_0 отвечает значению $\beta = 0$, т. е. смещена относительно величины ψ_0 ,

$$\begin{aligned} \beta &= 2\eta_0 \sin 2\vartheta - \chi_0 \left(1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right) = 0, \\ \eta_0 &= \chi_0 \left(1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right) (2 \sin 2\vartheta)^{-1}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Значение η_0 по (7.33) совпадает с величиной углового смещения максимума отражения в случае Лауэ, согласно (3.83), с заменой $-\gamma_h$ на γ_h . Замечания, сделанные в связи с выражением (3.83), частично применимы и к случаю Брэгга. Это относится к указанию о зависимости эффекта смещения только от величины χ_0 , но не от χ_h . Заметим, что в виду $\chi_0 = -|\chi_0|$ выражение (7.33) обозначает уменьшение угла ψ_0 , т. е. увеличение угла ω_0 . Наконец, (7.33) можно преобразовать так же, как это сделано в случае Лауэ, и получить выражение, аналогичное (3.85),

$$\eta_0 = - \frac{\delta_D}{\sin 2\vartheta} \left(1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right) \quad (7.34)$$

и в случае симметричного отражения

$$\eta_{0,s} = -\frac{2\delta_D}{\sin 2\vartheta} = \frac{\chi_0}{\sin 2\vartheta}, \quad (7.35)$$

выражение, полученное Дарвином.

Очевидно, что смещение угла падения (7.33), отвечающее средней точке максимума, приводит к смещению отражения, отвечающего той же точке. Из основного условия, связывающего переменные векторы $\mathbf{K}_h^{(i)}$ и $\mathbf{K}_0^{(i)}$, $\mathbf{K}_0^{(i)} - \mathbf{K}_h^{(i)} = \mathbf{h}$, следует, что

$$K(\sin \psi'_0 - \sin \psi'_h) = |\mathbf{h}|, \quad (7.36)$$

где ψ'_0 и ψ'_h — переменные углы,

$$\psi'_0 = \psi_0 + \eta_0, \quad \psi'_h = \psi_h + \eta_h. \quad (7.37)$$

Таким образом,

$$K(\cos \psi_0 \eta_0 - \cos \psi_h \eta_h) = 0, \quad (7.38)$$

так как мы принимаем $\cos \psi'_0 \approx \cos \psi_0$ и $\cos \psi'_h \approx \cos \psi_h$. Из (7.38) получаем

$$\eta_h = \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \eta_0 = -\frac{\delta_D}{\sin 2\vartheta} \left(1 + \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}\right). \quad (7.39)$$

Изменение величины отклонения падающего луча при отражении по Брэггу составляет, если перейти от углов ψ_0 и ψ_h к углам скольжения,

$$\begin{aligned} \Sigma\eta &= \eta_0 + \eta_h = \frac{\delta \cos \varphi}{\cos \vartheta} \left\{ \frac{1}{\sin \omega_0} + \frac{1}{\sin \omega_h} \right\} = \\ &= -\frac{\chi_0 \cos \varphi}{2 \cos \vartheta} \left\{ \frac{1}{\sin \omega_0} + \frac{1}{\sin \omega_h} \right\}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Это выражение показывает, что величина $\Sigma\eta$ может принять особенно большие значения, а следовательно, может быть измерена с большей точностью в том случае, когда или падающий, или отраженный луч почти параллелен входной поверхности. Для достижения таких условий поверхность кристалла шлифуется под надлежащим углом к отражающей плоскости. На рис. 50 приведен профиль максимума по Брэггу согласно формулам (7.19) и (7.21). Ширина области полного отражения и положение максимума относительно угла ϑ в соответствии с формулами (7.32) и (7.33) приведены в функции от углов скольжения. Эта форма максимума, полученная впервые Дарвином, называется иногда в литературе его именем. Ее характерными признаками являются: плоская вершина, отвечающая коэффициенту отражения $R = 1$, и симметрия относительно средней ординаты. Эти признаки характерны для отражения от прозрачного кристалла и нарушаются при переходе к поглощающим кристаллам.

Замечательное свойство прозрачного кристалла полностью отражать в области II максимума падающие на него рентгеновские лучи, очевидно, является весьма ценным при решении фундаментальной экспериментальной задачи — получения достаточно интенсивного излучения, возможно, близкого по своим характеристикам к идеальной модели плоской монохроматической волны. При этом существенным является уменьшение угловой расходимости отраженного пучка, которая для сильных отражений, как было отмечено, может немного превышать $10''$. В случае симметричного отражения угловые расходимости падающего и отраженного (в области II максимума) пучков одинаковы. Величина угловой расходимости в этом случае определяется выражением, которое можно получить из (7.32) и условия $\gamma_0 = |\gamma_h|$

$$\Delta\eta_s = \frac{2C|\chi_h|}{\sin 2\Phi}. \quad (7.41)$$

Отсюда, переходя обратно к асимметричному отражению и углам скольжения, получим опять для расходимости падающего пучка, который отражается в пределах области II максимума

$$\Delta\eta_0 = \Delta\eta_s \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} = \Delta\eta_s \sqrt{\frac{\sin \omega_h}{\sin \omega_0}}. \quad (7.42)$$

Очевидно, что расходимость отраженного в той же области максимума пучка будет связана с величиной $\Delta\eta_s$ выражением, в котором синусы углов ω_h и ω_0 меняются местами. Используя формулы (7.28), можно написать (для схемы 48, б)

$$\Delta\eta_h = \Delta\eta_s \sqrt{\frac{\sin \omega_0}{\sin \omega_h}} = b\Delta\eta_0, \quad b = \frac{\sin(\Phi - \varphi)}{\sin(\Phi + \varphi)}. \quad (7.43)$$

Так как углы φ между входной поверхностью кристалла и отражающей плоскостью можно менять шлифовкой и, кроме того, использовать повторное отражение от разных кристаллов, то величину расходимости $\Delta\eta_h$ отраженного пучка можно весьма существенно уменьшить. Этот метод асимметричной съемки действительно оказался одним из наиболее эффективных методов получения пучка лучей с нужными свойствами (см. гл. 9).

Эффект изменения угловой расходимости пучков при изменении углов падения и отражения наглядно поясняется использованием схемы дисперсионной поверхности в обратном пространстве (рис. 51). На рис. 51, а показано, что при симметричном отражении угловые расходимости в области полного отражения для падающей волны TT' и отраженной RR' одинаковы, на рис. 51, б при асимметричной съемке $TT' > RR'$, т. е. $\Delta\eta_h < \Delta\eta_0$.

Сделаем несколько замечаний, касающихся суммарного волнового поля в кристалле (для σ -поляризации) при указанных

условиях отражения, т. е. падении плоской монохроматической волны с широким волновым фронтом. Это поле описывается уравнением (3.49)

$$D^{(i)} = \{D_0^{(i)} + D_h^{(i)} \exp(-2\pi i(\mathbf{h} \cdot \mathbf{r}))\} \exp 2\pi i [vt - (\mathbf{k}_0^{(i)} \cdot \mathbf{r})], \quad (7.44)$$

и его полная величина определяется соотношением фаз проходящей и дифрагированной волн в кристалле. В отличие от случая Лауэ, при котором во всей области максимума присутствуют оба поля двухволнового приближения, в рассматриваемом слу-

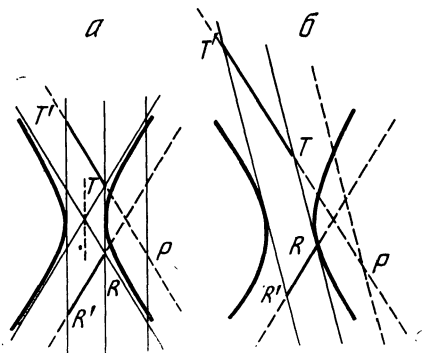


Рис. 51. К рассмотрению эффекта изменения угловой расходимости пучков при изменении углов падения

a — симметричное отражение;
б — асимметричное отражение

чае в каждой из областей эффективным является лишь одно из полей: в области I лишь первое, в то время как в областях II и III — второе поле. Для определения фазовых соотношений необходимо в выражениях (7.6), (7.11) и (7.15) уточнить фазу η_h отношения $(\chi_h/\chi_{\bar{h}})^{1/2} = \exp i\eta_h$. Принятые нами в (3.16) значения $\eta_h = \pi$ соответствуют простейшему случаю примитивной трансляционной решетки с одним атомом в элементарной ячейке, причем исключаются условия аномальной дисперсии. Таким образом, величина отношения D_0/D_h принимает следующие значения (с точностью до множителя $(\gamma_0/|\gamma_h|)^{1/2}$):

$$\begin{aligned} \text{I} & - \exp(-v), \\ \text{II} & - \exp[i(\pi - v)], \\ \text{III} & - \exp(i\pi - v). \end{aligned} \quad (7.45)$$

Другими словами, в области I обе волны находятся в фазе, в области III — в противофазе и в области II сдвиг фазы монотонно растет от 0 при $y = -1$ до π при $y = +1$.

Как это следует далее из (7.44), максимумы и минимумы полного волнового поля в кристалле располагаются на плоскостях, параллельных атомным плоскостям. Значения экстремумов интенсивности поля выражаются величинами $[1 \pm (\gamma_0/|\gamma_h|) \exp(-v)]^2$ для областей I и III и величинами $[1 \pm (\gamma_0/|\gamma_h|)]^2$ для области II. Очевидно также, что если при принятых условиях в области I на атомных плоскостях лежат максимумы, то в об-

ласти III на тех же плоскостях лежат минимумы. В области II положения максимумов и минимумов монотонно меняются от одного до другого крайних положений. Эти данные непосредственно указывают на направление распространения энергии в каждой из областей. В то время как на боковых областях максимума суммарный вектор \vec{S} направлен вдоль \mathbf{K} , в области II полного отражения энергия волнового поля распространяется параллельно входной поверхности кристалла. Соответственно значениям сдвига фаз D_0 и D_h колебаний по трем областям можно построить

Рис. 52. Изменение интенсивности волнового поля в кристалле в функции от угловой переменной y в трех областях максимума

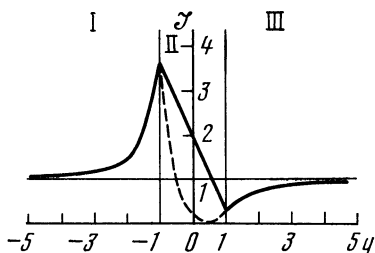


график полного значения интенсивности волнового поля в кристалле, представленный на рис. 52. Пунктирная линия в области II показывает значения интенсивности с учетом некоторой принятой величины экстинкции.

Обращает на себя внимание резкая асимметрия максимума относительно средней точки этого распределения интенсивности внутри кристалла, в то время как кривая отражения (Дарвина), изображенная на рис. 50, является симметричной.

Некоторые отличия в описанной картине возникают при переходе от σ - к π -поляризации, в частности возрастают значения интенсивности поля в области III.

Сделаем некоторое общее замечание, имеющее существенное значение. Несмотря на оговорки, согласно которым рассматривалось отражение от прозрачного кристалла при широком фронте падающей плоской волны, в действительности в приведенной трактовке неявно предполагалось, что отражающий кристалл является достаточно толстым. В таком случае, даже при сколь угодно малом поглощении, волновые поля в областях I и III, распространяясь в глубь кристалла, полностью затухают.

Иное имеет место при отражении от тонкой кристаллической пластинки без поглощения или с исчезающе малым поглощением. Волновые поля, возникающие в кристалле при углах падения, отвечающих областям I или III, достигают противоположной выходной поверхности, где вступают в силу другие пограничные условия.

Так, поскольку отраженная волна не выходит в вакуум на выходной поверхности, пограничное условие для дифрагированных

волн может быть записано следующим образом:

$$D_h^{(d)} \exp[-2\pi i(\mathbf{K}_h \mathbf{r})] = \exp[-2\pi i(\mathbf{K} + \mathbf{h}), \mathbf{r}] \times \\ \times \sum_{i=1,2} D_h^{(i)} \exp[2\pi K \delta^{(i)} t] = 0. \quad (7.46)$$

Таким образом, здесь возникает дополнительно второе поле в области I и первое поле в области III. Чтобы установить направление распространения энергии вновь возникающих полей, напишем выражение для скалярного произведения векторов $\bar{\mathbf{S}}^{(i)}$ на нормаль \mathbf{n} . Используя выражения (5.206), (7.10) и (7.11), легко получить следующее соотношение:

$$(\bar{\mathbf{S}}^{(i)} \mathbf{n}_0) = \frac{c}{8\pi} |D_0^{(i)}|^2 \gamma_0 \left\{ 1 - \left| \frac{\chi_h}{\chi_h} \right| \exp(\pm 2v) \right\}. \quad (7.47)$$

Применяя это соотношение, например к области III, и учитывая, что $v > 0$, получим положительную величину скалярного произведения для второго поля (при $-2v$) и отрицательную величину при $2v$, т. е. для первого поля. Так как внутренняя нормаль \mathbf{n}_0 направлена от входной поверхности к выходной, то из (7.47) следует, что второе поле распространяется в том же направлении, в то время как первое — в обратном направлении, т. е. к входной поверхности кристалла.

Очевидно далее, что при достаточно широком фронте падающей плоской волны (под углом падения, отвечающим одной из боковых областей максимума) внутри кристалла, так же как и на входной поверхности, возникнут интерференционные эффекты. Постоянная величина относительного сдвига фаз интерферирующих волн обоих полей, определяющая расстояние между максимумами или минимумами интерференционной картины

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}_h^{(2)} - \mathbf{k}_h^{(1)}, \quad (7.48)$$

соответствует *хорде*, которая соединяет две точки $A^{(i)}$ или $A'^{(i)}$ на общей ветви дисперсионной гиперболы. Эти интерференционные эффекты являются побочными максимумами маятникового решения в случае Брэгга. Они соответствуют тонкой структуре боковых областей максимума. Эта тонкая структура постепенно пропадает при возрастании толщины отражающей кристаллической пластинки и переходит в монотонный спад коэффициента отражения от $R = 1$ до $R = 0$ на кривой Дарвина (рис. 50).

7.2. Истинное поглощение при отражении по Брэггу. Исследование величины σ

В отличие от случая Лауэ величина коэффициента поглощения здесь существенно различна в трех областях максимума. Начнем рассмотрение с коэффициента поглощения, отнесенного к нормали

n_0 к входной поверхности кристаллической пластинки

$$\sigma = \mu/\gamma_0, \quad (7.49)$$

где μ — линейный коэффициент поглощения в произвольном направлении при падении вакуумной волны под углом $\psi_0 \pm \eta$ в области максимума. Как точные, так и приближенные выражения для σ вычисляются аналогично гл. 4 с необходимыми коррективками, вызванными особенностями случая Брэгга.

Так как величина σ непосредственно связана с мнимой частью волнового вектора, возникающей в связи с δ_i , то согласно (2.58), (3.1), (4.67) и (4.68) получаем

$$\sigma = -4\pi |k_{0i}| = 4\pi k \delta_i = 4\pi \left\{ -\frac{K\chi_{0i}}{2\gamma_0} - \frac{K}{4|\gamma_h|} (\beta_i \pm W_i) \right\}, \quad (7.50)$$

где учтено условие (7.1), согласно которому

$$\beta_i = |\chi_{0i}| \left(1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right), \quad W = \sqrt{\beta^2 - 4C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}. \quad (7.51)$$

Далее приводятся точные и приближенные значения действительной и мнимой частей корня W аналогично формулам (4.65), (4.66), (4.86), (4.87). Точные значения W_r и W_i при любом соотношении $|\chi_{hi}|$, $|\chi_{0i}|$, $|\chi_{hr}|$, $|\chi_{0r}|$ определяются согласно выражениям (4.65), однако при слегка отличных значениях величин a и b . В случае Брэгга, очевидно,

$$a = \beta_r^2 - \beta_i^2 - 4C^2 \Phi_h \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}, \quad b = 2\beta_r \beta_i - 4C^2 \Psi_h \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \quad (7.52)$$

или в функции от y

$$W_r = l W_r(y), \quad W_i = l W_i(y), \quad l = 2C \sqrt{\Phi_h} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} = \frac{\beta_r}{y_r}. \quad (7.53)$$

В этом случае

$$a(y) = y_r^2 - g^2 - 1, \quad b(y) = -2y_r g - \frac{\Psi_h}{\Phi_h}, \quad g = -\frac{\beta_i}{l}. \quad (7.54)$$

При вычислении приближенных значений W_r и W_i используется аналогия с выражениями (4.86) и (4.87)

$$\begin{aligned} W_r &\approx l \sqrt{y_r^2 - 1}, \\ W_i &\approx \frac{\beta_r \beta_i - 2C^2 (|\gamma_h|/\gamma_0) \Psi_h}{(\beta_r^2 - 4C^2 (|\gamma_h|/\gamma_0) \Phi_h)^{1/2}} = \frac{\mu |\gamma_h|}{2\pi K \sqrt{y_r^2 - 1}} \times \\ &\times \left\{ y_r \left(\frac{1}{|\gamma_h|} + \frac{1}{\gamma_0} \right) - \frac{2C\varepsilon \cos \psi_h}{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \right\}. \end{aligned} \quad (7.55)$$

Таким образом, для приближенного значения σ получаем

$$\sigma = \frac{\mu}{2} \left\{ \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_h|} \right) \mp \frac{1}{\sqrt{y_r^2 - 1}} \left[y_r \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{|\gamma_h|} \right) - \frac{2C\varepsilon \cos v_h}{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \right] \right\}, \quad (7.56a)$$

или

$$\sigma = \frac{\mu}{2} \frac{1}{\sqrt{y_r^2 - 1}} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} (\sqrt{y_r^2 - 1} \mp y_r) - \frac{1}{|\gamma_h|} (\sqrt{y_r^2 - 1} \pm \pm y_r) \pm \frac{2C\varepsilon \cos v_h}{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \right\}. \quad (7.56b)$$

Имея в виду, что в области I $y_r = -|y_r|$ и в области III $y_r = |y_r|$, и вводя обозначения

$$\alpha = \frac{\mu}{2\sqrt{y_r^2 - 1}}, \quad \beta = |y_r| + \sqrt{y_r^2 - 1},$$

$$\Delta = |y_r| - \sqrt{y_r^2 - 1}, \quad \delta = \frac{2C\varepsilon \cos v_h}{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}}, \quad (7.57)$$

выпишем отдельно значения σ для обоих полей. Область I — первое поле

$$\sigma^I = \alpha \left\{ \frac{\beta}{\gamma_0} + \frac{\Delta}{|\gamma_h|} + \delta \right\}, \quad (7.58a)$$

второе поле

$$\sigma^I = -\alpha \left\{ \frac{\Delta}{\gamma_0} + \frac{\beta}{|\gamma_h|} + \delta \right\}. \quad (7.58b)$$

Область III — первое поле

$$\sigma^{III} = -\alpha \left\{ \frac{\Delta}{\gamma_0} + \frac{\beta}{|\gamma_h|} - \delta \right\}, \quad (7.58b)$$

второе поле

$$\sigma^{III} = \alpha \left\{ \frac{\beta}{\gamma_0} + \frac{\Delta}{|\gamma_h|} - \delta \right\}, \quad (7.58g)$$

Сравнивая последние соотношения с аналогичным выражением (5.76) для случая Лауэ, замечаем принципиальное различие в эффектах поглощения.

В случае Лауэ величина σ всегда положительна, хотя и может различаться для обоих полей весьма существенно. В случае Брэгга величина σ может принимать как положительные, так и отрицательные значения, при этом величины в фигурных скобках (7.58) всегда положительны. Абсолютная величина $|\sigma^{(i)}|$ ($i =$

= I, III) для обеих полей мало различается, а в случае симметричного отражения одинакова.

Обратимся пока только к положительным значениям σ в областях I и III. Как и следовало ожидать из анализа, проведенного в разделе 7.1, положительные знаки относятся к первому полю в области I и ко второму полю в области III. При этом если принять $2C\varepsilon \cos \nu_h > 0$, то $\sigma^I > \sigma^{III}$. Таким образом, возникает асимметрия профиля максимума при отражении от поглощающего кристалла. Вблизи границы области полного отражения при значениях угловой функции $y_r > 1$ величина коэффициента поглощения σ^{III} меньше значения σ^I , отвечающего другой боковой стороне максимума. С увеличением угла отклонения, т. е. с возрастанием $|y_r|$ в выражениях (7.58), относительный вес первого слагаемого в фигурных скобках возрастает и все выражение асимптотически приближается к величине μ/γ_0 . Если $2C\varepsilon \times \cos \nu_h < 0$, то области I и III имеют обратные отношения коэффициентов σ . Для более детального исследования области III с меньшим поглощением определим дифференцированием по y_r выражения (7.58) минимум функции σ^{III} и соответствующие аргументы:

$$\sigma_{\min}^{III} = \frac{\mu}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} \frac{1}{|\gamma_h|} \mp \sqrt{\left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{|\gamma_h|} \right)^2 - \frac{4C^2\varepsilon^2 \cos^2 \nu_h}{\gamma_0 |\gamma_h|}} \right\},$$

$$y_{r, \min} = \frac{1}{2C\varepsilon \cos \nu_h} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \left(1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right) \quad (7.59)$$

и в случае симметричного отражения

$$\sigma_{\min, s}^{III} = \frac{\mu}{\gamma_0} \sqrt{1 - C^2\varepsilon^2 \cos^2 \nu_h}, \quad y_{i, \min, s} = (C\varepsilon \cos \nu_h)^{-1}. \quad (7.60)$$

Из (7.60) следует, что при σ -колебаниях вектора индукции величина коэффициента поглощения будет несколько меньше, чем при π -колебаниях. Для численной оценки величины $\sigma_{\min, s}^{III}$ приведем значение этой величины при симметричном отражении 220 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge и $C = 1$. При этих условиях $C^2\varepsilon^2 \cos^2 \nu_h \approx \approx 0,925$ (при комнатной температуре) и σ составит $\sim 0,25 \mu/\gamma_0$.

Определим величину σ в области полного отражения. Так как в этой области максимума

$$W = i \sqrt{4C^2 \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \chi_{hr} \chi_{\bar{h}r} - \beta^2} = iW_r - W_i, \quad (7.61)$$

то на основании (7.53) можно написать

$$\sigma_{II} = 4\pi \left\{ -\frac{K\chi_{0i}}{2\gamma_0} - \frac{K\beta_i}{4|\gamma_h|} \pm \frac{K}{4\gamma_h} W_r \right\} = \frac{\mu}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_h|} \right\} \pm$$

$$\pm \frac{Kl}{4\gamma_h} \left[\frac{1}{2} (\sqrt{a^2(y) + b^2(y)} + a(y)) \right]^{1/2}$$

или

$$\sigma_{II} = \frac{\mu}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_h|} \pm \frac{2C |\chi_{hr}|}{|\chi_{oi}| \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \left[\frac{1}{2} (\sqrt{a^2(y) + b^2(y)} + a'(y)) \right]^{1/2} \right\}. \quad (7.62)$$

В тех случаях, когда можно принять малость $|\chi_{hi}|$ по сравнению с $|\chi_{hr}|$ и пренебречь величиной β_i^2 , подкоренное выражение в (7.62) можно аппроксимировать более простым и получить для коэффициента поглощения

$$\sigma_{II} \approx \frac{\mu}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_h|} \pm \frac{2C |\chi_{hr}|}{|\chi_{oi}| \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \sqrt{y_r^2 - 1} \times \left(1 + \frac{b_1^2}{8(y_r^2 - 1)} \right) \right\}. \quad (7.63)$$

Наконец, непосредственно на границах области полного отражения при $y_r = \pm 1$ для вычисления величины σ используем точные формулы (4.65) и (7.53) для W_i . Формула (4.65) упрощается, если в (7.54) принять малость величины $g^2 \sim \beta_i^2$ и, следовательно, a для рассматриваемых значений y обращается в нуль. Для W_i получаем

$$\pm W_i \approx l \sqrt{\pm i |b(y)|} = \pm l \sqrt{\frac{1}{2} |b(y)|}. \quad (7.64)$$

Отсюда для $y_r = \pm 1$

$$\sigma_{-1} = \frac{\mu}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_h|} \pm \frac{2C |\chi_{hr}|}{|\chi_{oi}| \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \sqrt{\frac{1}{2} |b(y)|} \right\}, \quad (7.65)$$

$$\sigma_{+1} = \frac{\mu}{2} \left\{ \frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_h|} \mp \frac{2C |\chi_{hr}|}{|\chi_{oi}| \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \sqrt{\frac{1}{2} |b(y)|} \right\}. \quad (7.66)$$

Здесь

$$|b(y)| = \frac{1}{C} \left| \frac{\chi_{oi}}{\chi_{hr}} \right| \left(\sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} + \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \right) \pm 2\kappa \cos \nu_h, \\ \kappa = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right|. \quad (7.67)$$

Общая картина изменения величины σ во всех областях максимума передается с помощью двух графиков рис. 53, а, описывающего изменение σ/σ_m в боковых областях максимума и рис. 53, б, где σ/σ_m дана также внутри области полного отражения. Нетрудно видеть, что в приведенных формулах для σ (7.56а), (7.62), (7.63) и (7.65), (7.66) $(\gamma_0^{-1} - |\gamma_h|^{-1})$ обращается в нуль при симметричном отражении. Что касается асимметричного отражения, то эта разность является существенной, если

падающая, или отраженная, волна образует малые скользющие углы. Однако во всех случаях эта разность меньше второго члена в фигурных скобках, и, следовательно, знаки коэффициента поглощения σ для первого и второго полей, вычисленные из всех указанных формул, будут противоположными друг другу как при симметричном, так и асимметричном отражении.

Рис. 53, *a* относится к отражению 333 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge, причем отражающая плоскость (111) наклонена к входной поверхности кристалла под углом 35° . При этом $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma^{-1} =$

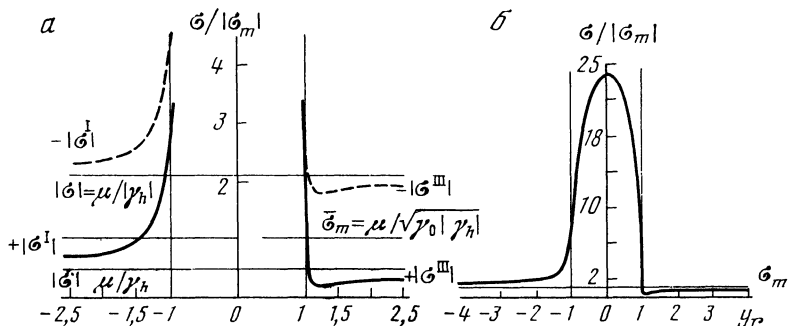


Рис. 53. Изменение относительного коэффициента поглощения σ/σ_m

a — при асимметричном отражении для обоих полей;

б — при симметричном отражении, включая экстинкцию в средней области максимум^a

$= 1,015$, $|\gamma_h|^{-1} = 5,75$. Для вычисления хода величины σ с угловой переменной y_r в областях I и III удобно использовать формулу (7.56а), дающую достаточно точный результат от больших $|y_r|$ до значений y_r около ± 1 . Принимаем $C = 1$. Кривая на рис. 53, *a* дает относительные значения σ/σ_m , где

$$\sigma_m = \mu / \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|} \quad (7.68)$$

соответствует среднему геометрическому величинам, относящихся к распространению излучения в кристалле в направлениях \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}_h : μ/γ_0 и $\mu/|\gamma_h|$. Рассматривая рис. 53, *a*, замечаем, что сплошные кривые, вычисленные с помощью уравнения (7.56а), со знаком минус перед вторым членом в фигурных скобках для области I и знаком плюс для области III, относятся к поглощению при отражении от толстого кристалла. Действительно, как мы показали ранее, в толстом кристалле в области I возникает лишь первое поле и в области III — второе поле. Как видно из рисунка, в области I имеет место интерференционное поглощение, превышающее нормальное поглощение μ/γ_0 за пределами максимума. Величина поглощения первого поля в области I резко возрастает с приближением к границе области полного отражения. В области II, которая будет еще рассмотрена в связи с рис. 53, *б* имеет место наложение двух эффектов: фотоэлектрического (истинного) по-

глощения и экстинкции. При переходе в область III поглощение резко падает и далее возникает интерференционное прохождение, максимальная величина которого, отвечающая минимуму σ , может быть вычислена с помощью формулы (7.59). Естественно, с увеличением $|y_r|$ на обеих границах максимума значения σ асимптотически приближаются к величине μ/γ_0 ; в области I от значений, больших этой величины, и в области III от значений, меньших этой предельной величины.

Сплошные кривые на рис. 53, а отвечают положительным значениям σ для первого поля в области I (7.58а) и второго поля в области III (7.58г). Коэффициенты поглощения для дополнительных полей, представленные на рис. 53, а штриховыми кривыми, являются отрицательными и относятся соответственно ко второму полю в области I (7.58б) и первому полю в области III (7.58в). На шкале относительных величин рис. 53, а они окажутся значительно выше рассмотренных ранее значений σ^I и σ^{III} .

Кривая изменения относительной величины поглощения σ/σ_m при симметричном отражении (рис. 53, б) вычислена следующим образом. Для областей I и III применяются формулы

$$\frac{\sigma^{I,III}}{\sigma_{m,s}} = C \left| \frac{\chi_{hr}}{\chi_{oi}} \right| \sqrt{\frac{1}{2} (\sqrt{a^2(y) + b^2(y)} - a^2(y))}, \quad (7.69)$$

$$a(y) \approx y_r^2 - 1, \quad (7.70)$$

$$b(y) = 2 \left| \frac{\chi_{oi}}{\chi_{hr}} \right| (y_r - C\varepsilon \cos \nu_h). \quad (7.71)$$

Приближенная формула получена из (7.56а); за пределами участков, непосредственно примыкающих к границам области II,

$$\left(\frac{\sigma^{I,III}}{\sigma_{m,s}} \right)_s = \frac{|y_r - C\varepsilon \cos \nu_h|}{\sqrt{y_r^2 - 1}}. \quad (7.72)$$

Для значений $y_r = \pm 1$ формулы (7.65)–(7.67) приводят в случае симметричного отражения к виду

$$\frac{\sigma^{\pm 1}}{\sigma_m} \sqrt{C} \sqrt{\left| \frac{\chi_{hr}}{\chi_{oi}} \right| (1 \mp C\varepsilon \cos \nu_h)}, \quad (7.73)$$

где, как обычно, при положительном значении величины $\varepsilon \cos \nu_n$ верхний знак относится к $y_r = 1$, т. е. к первому полю.

Наконец, в области полного отражения можно использовать формулу (7.62) и (7.63) с учетом условий симметричного отражения и для $\sigma_m = \mu/\sin \vartheta$. Более точную формулу (7.62), как и в случае областей I и III, следует применить к участкам, близким к границам области.

Остановимся на характерных чертах кривой изменения поглощения в пределах максимума, представленной на рис. 53, б. Что касается областей I и III, то здесь можно отметить сходство с кривой на рис. 53, а. Существенно также, что как в этих областях, так и в целом, несмотря на наличие симметричного отражения, максимум сохраняет свою асимметричную форму. Аномальное поглощение в области I и аномальное проникновение волнового поля в области III можно связать с анализом фазовых соотношений между проходящей и дифрагированной волнами в кристалле (см. рис. 52). Там было указано, что в области I благодаря совпадению фаз максимумы полного волнового поля лежат на атомных плоскостях, а в области III, ввиду сдвига фаз на π , максимумы лежат между атомными плоскостями.

Возвращаясь к анализу кривой поглощения на рис. 53, б, отмечаем резкое различие значений поглощения на границах области полного отражения. Рассматривая эту область, следует иметь в виду, что в центре области и всего максимума в целом при максимальном значении первичной экстинкции проникновение волнового поля внутрь кристалла пренебрежимо мало и соответственно вклад истинного поглощения в эффект затухания волнового поля в кристалле незначителен. При переходе к боковым частям области II экстинкция резко падает и поглощение вступает в свои права.

Можно заметить, что в случае асимметричного отражения в области II должны иметь место две кривые поглощения, отвечающие сплошным и штриховым кривым в областях I и III, показанным на рис. 52.

7.3. Дифракция в конечном кристалле в приближении сферической падающей волны или падающего волнового пакета

Как уже отмечалось, выше рассматривалось отражение по Брэггу от кристалла, ограниченного либо лишь входной гранью (бесконечно толстый кристалл), либо двумя параллельными гранями (тонкая плоскопараллельная пластинка). Существенным исходным условием вышеизложенного анализа было приближение падающей плоской волны с шириной фронта, превышающей толщину пластинки. Напомним, что теория отражения по Лауэ, изложенная в гл. 2, 3 и 4, также относится к плоскопараллельному или клиновидному кристаллу с той или иной толщиной.

То обстоятельство, что в динамической теории Эвальда — Лауэ — Захариасена ограничиваются рассмотрением плоских кристаллов, причем не учитываются пограничные условия на боковых гранях, некоторые авторы полагали отличительной чертой этой теории. Такому подходу противопоставлялась кинематическая или геометрическая теория, которая описывает рассеяние рентгеновских лучей на конечных кристаллах.

Между тем методы динамической теории, в особенности в ее современных формах (гл. 6 и 12), могут быть успешно использованы для решения соответствующих задач, причем условием полноты рассмотрения является в данном случае отход от классической схемы — приближения падающей плоской волны.

Характерное для рассеяния в конечном кристалле многократное отражение от границ было рассмотрено Вагнером [88] на примере тонкой неограниченной с боков плоскопараллельной пластинки с учетом поглощения. Схема такого отражения показана на

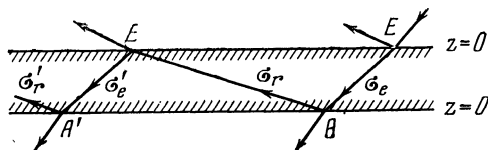


Рис. 54. Многократные отражения в тонкой плоскопараллельной пластинке

рис. 54. Хотя в основе этой схемы лежит модель падающей в точке E волны с узким волновым фронтом, Вагнер применил для рассмотрения волнового поля внутри кристалла и выходящих из кристалла волн (например, в точках A и E') теорию в приближении падающей плоской волны. Применяя последовательно стандартные пограничные условия для отражения по Брэггу типа (7.17), этот автор получил выражения для векторов Пойнтинга и интенсивностей отраженных и проходящих волн в точках E , A , E' , ... Очевидно, эти выражения в более полной теории в приближении падающей сферической волны интегрируются по углам [91, 92].

Следует заметить, что в работе Вагнера [88] приводятся формулы для коэффициента поглощения в функции от углов ε_i ($i = 1, 2$), образуемых векторами Пойнтинга с отражающей плоскостью. Подобные формулы (5.83)—(5.85) применительно к случаю Лауэ рассматривались в гл. 5 и представляют интерес, так как вполне применимы к теории для сферической волны.

Для случая Брэгга могут быть получены следующие выражения для коэффициента поглощения вдоль направлений векторов Пойнтинга:

$$\mu^{-S^{(i)}} = \frac{\mu}{\cos \vartheta} \left\{ \cos \varepsilon_i - C\varepsilon \cos \nu_h \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \varepsilon_i}{\sin^2 \vartheta}} \right\}. \quad (7.74)$$

Сопоставляя (7.74) с (5.83), заметим, что знак плюс в скобках перед вторым членом в (5.83), примененный к (7.74), означал бы переход от области III в область I максимума. Необходимо также учесть знаки ε_i . Они считаются положительными, если векторные произведения $[k_0 k_h]$ и $[j \bar{S}^{(i)}]$ параллельны. Минимум функции μ^S определяется в зависимости от соотношения между величинами $C\varepsilon \cos \nu_h$ и $\sin^2 \vartheta$.

I. $C\varepsilon |\cos v_h| > \sin^2 \vartheta$, минимум при $\varepsilon_i = 0$,

$$\mu_{\min}^S = \frac{\mu}{\cos \vartheta} (1 - C\varepsilon \cos v_h). \quad (7.75)$$

II. $C\varepsilon |\cos v_h| < \sin^2 \vartheta$, минимумы при двух значениях ε_i , определяемых из уравнения

$$\sin^2 \varepsilon_i = \frac{\sin^4 \vartheta - C^2 \varepsilon^2 \cos^2 v_h}{\sin^2 \vartheta - C^2 \varepsilon^2 \cos^2 v_h},$$

$$\mu_{\min}^S = \mu \sqrt{1 - \frac{C^2 \varepsilon^2 \cos^2 v_h}{\sin^2 \vartheta}}. \quad (7.76)$$

Используя выражения (7.75) и (7.76), можно построить полярную диаграмму наименьшего поглощения или наибольшего проникновения $(\mu^{S(2)})^{-1}$ лучей, проникающих в кристалл при падении в случае Брэгга и отраженных обратно в точке A (на рис. 54). Такая диаграмма представлена на рис. 55. Минимальное ослабление соответствует лучу ET , где T — точка касания прямой, параллельной нижней грани. Луч AN отвечает величине $(\mu^{S(1)})^{-1}$, т. е. пучку, отраженному от A обратно в кристалл.

В работе Вагнера [88], так же как и в работах Урагами [93, 94], рассматриваются условия перехода от случая Брэгга к случаю Лауэ и обратно.

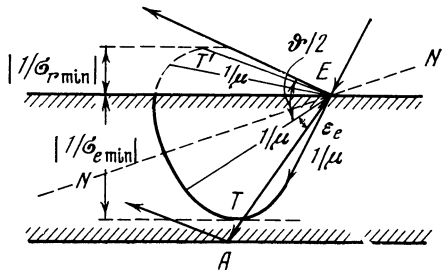


Рис. 55. Полярная диаграмма наибольшего проникновения лучей, проникающих в кристалл и отраженных обратно от входной поверхности

При использовании падающего пучка с достаточной расходимостью и отражении от системы плоскостей с углом $\varphi \simeq \vartheta$ могут одновременно реализоваться отражения по Брэггу ($\varphi < \vartheta$) и по Лауэ ($\varphi > \vartheta$). В таком эксперименте плоскости отражения обоих типов не совпадают.

Другая схема подобного перехода, которая обсуждается в [93], основана на использовании сферической падающей волны с угловой расходимостью порядка ширины динамического максимума. При этом отражения обоих типов, Лауэ и Брэгга, возникают либо ввиду отклонения входной поверхности от плоской формы, либо в результате последующего отражения от других границ кристалла.

В работах [94, 95] Урагами рассматривает в приближении падающей плоской волны переход от отражения по Брэггу к отражению по Лауэ для схемы Вагнера.

Рассеяние рентгеновских лучей в ограниченном кристалле изучали Борман и Лееман [96, 97]. Падающий пучок рентгеновских лучей с узким волновым фронтом направлялся на меньшую грань кристалла, имеющего прямоугольное сечение. Образующееся при этом волновое поле внутри кристалла в угловом интервале 2θ между направлениями s_0 и s_h частично распространялось без отражения до противоположной выходной грани и в боковых участках отражалось на границах кристалла. Таким образом, в этом эксперименте, во-первых, одновременно реализовались условия отражения как по Лауэ, так и по Брэггу (бóльшие грани отвечали плоскостям с малыми индексами) и, во-вторых, возникла интерференция между различными частями волнового поля. В описываемом случае (излучение $CuK\alpha$, кристалл Si) рассеяние соответствовало толстому поглощающему кристаллу и эффекты маятникового решения были в значительной степени подавлены. Более общие случаи рассеяния были рассмотрены теоретически в последующих работах Урагами [93—95] и Като с сотрудниками [91, 92] и, частично, экспериментально в указанных работах Урагами. В схемах, исследованных этими авторами, «точки» падения вакуумной волны лежали как между краями меньшей грани, так и на вершинах этого сечения. Кроме того, рассматривалось трапециевидное сечение кристалла. В отличие от Леемана и Бормана [97], которые анализировали волновое поле в кристалле в приближении падающей плоской волны, авторы работ [91—95] использовали уже упомянутые выше современные формы динамической теории.

В гл. 6 было показано, что волновые поля, порожденные в кристалле падающим пучком рентгеновских лучей (без использования монохроматора), могут рассматриваться в приближении падающей сферической волны. В изложенной теории Като окончательные выражения для волновых функций получаются интегрированием по функциям углов или Фурье-преобразованием выражений для плоских волн. Этот метод был использован Като применительно к отражению по Лауэ.

При рассмотрении волновых полей в ограниченном кристалле Като с сотрудниками [91, 92] успешно применили тот же метод разложения по плоским волнам к случаю Брэгга.

Схема, рассмотренная в этих последних работах, представлена на рис. 56. На входной грани в точке E имеет место отражение по Лауэ. Соответственно выражения для плоских волн в кристалле совпадают с формулами (6.16) и (6.19). Дифрагированная волна падает на выходную грань в точке A_1 и здесь претерпевает отражение и прохождение по Брэггу (далее в точках A_{2n+1} и B_{2n} многократные отражения и прохождения).

Из пограничных условий на этой поверхности

$$E_{h,t} \exp [i(\mathbf{K}_{n,t} \mathbf{r}_a)] = d_n \exp [i(\mathbf{k}_h \mathbf{r}_a)] + d_{h,r} \exp [i(\mathbf{k}_{h,r} \mathbf{r}_a)], \quad (7.77)$$

$$0 = d_0 \exp [i(\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_a)] + d_{0,r} \exp [i(\mathbf{k}_{0,r} \mathbf{r}_a)] \quad (7.78)$$

(индексы t и r означают прошедшие и отраженные волны) и соответствующих условий для волновых векторов, из которых определяются величины accommodations $\delta^{(i)}$, можно вычислить окончательные значения волновых функций внутри кристалла после отражения от выходной грани. Значения $\Phi_{0,r}$ и $\Phi_{h,r}$ уже в приближении падающей сферической волны получают интегрированием в комплексной плоскости величин $d_{0,r}$ и $d_{h,r}$. Выражения для $\Phi_{0,r}$ и $\Phi_{h,r}$ очень близки к выражениям (6.36) и (6.37) для однократного отражения по Лауэ. В обозначениях, принятых в гл. 6, значения волновых функций для случая Лауэ — Брэгга составляют (первая строка в формулах (7.79) и (7.80) относится к условию $x_{0,r} x_{h,r} > 0$, вторая — к условию $x_{0,r} x_{h,r} < 0$)

$$\Phi_{0,r} = \begin{cases} \pi f \frac{\gamma'_h}{|\gamma'_0|} \sqrt{\frac{x_0}{x_{h,r}}} J_1(\bar{f} \sqrt{x_{0,r} x_{h,r}}) B_0 E_e, \\ 0, \end{cases} \quad (7.79)$$

$$\Phi_{h,r} = \begin{cases} i\pi f \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \frac{\gamma'_h}{|\gamma'_0|} b \frac{x_{0,r}}{x_{h,r}} J_2(\bar{f} \sqrt{x_{0,r} x_{h,r}}) B_h E_e, \\ 0, \end{cases} \quad (7.80)$$

$b = \pm 1$ в зависимости от знака $x_{0,r}$,

$$B_0 = \frac{i}{8\pi^2} \sqrt{\frac{2\pi}{Kz}} \exp \left[i \left(-\frac{\pi}{4} + P + Kz \right) \right],$$

$$B_h = B_0 \exp [2\pi i(\mathbf{h} \mathbf{r})]. \quad (7.81)$$

Величины γ'_0 и γ'_h являются косинусами углов, образованных волновыми векторами \mathbf{K}_0 и $\mathbf{K}_{h,t}$ выходящих вакуумных волн с нормалью \mathbf{n}_a выходной грани; $x_{0,r}$ и $x_{h,r}$ — длины перпендикуляров, опущенных из точки наблюдения на направления \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}_h в кристалле, подобно отрезкам x и x' в (6.36) и (6.37):

Для волны $\Phi_{h,t}$, вышедшей в вакуум, получается выражение

$$\Phi_{h,t} = \begin{cases} i\pi f \sqrt{\chi_h/\chi_{\bar{h}}} c \left\{ \frac{x_h}{x_{h,r}} J_2(\bar{f} \sqrt{(|\gamma'_0|/|\gamma'_h|) x_h x_{h,r}}) + \right. \\ \left. + J_0(\bar{f} \sqrt{(|\gamma'_0|/|\gamma'_h|) x_h x_{h,r}}) \right\} B_{h,t} E_e, & x_h x_{h,r} > 0, \\ 0, & x_h x_{h,r} < 0, \end{cases} \quad (7.82)$$

$c = \pm 1$ в зависимости от знака x_h , E_e — амплитуда падающей волны.

Не останавливаясь на подробном анализе полученных результатов, ограничимся двумя замечаниями.

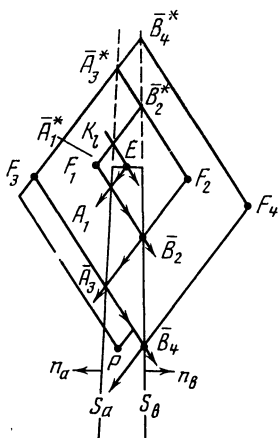


Рис. 56. Образование волновых полей в ограниченном кристалле (случай Лауэ—Брэгга)

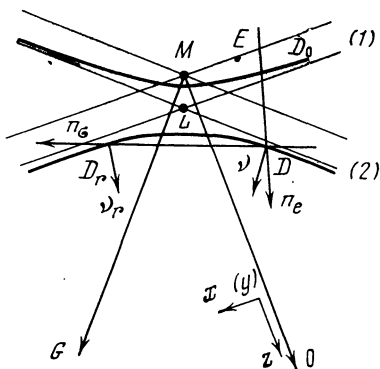


Рис. 57. Схема образования волновых полей в ограниченном кристалле (обратное пространство для случая Лауэ — Брэгга)

Как и в применении к случаю Лауэ (гл. 6), волновые функции внутри кристалла (7.79) и (7.80) отличны от нуля в определенной области, ограниченной направлениями векторов \mathbf{K}_0 и $\mathbf{K}_{h,t}$. То же относится к волновой функции выходящей волны $\Phi_{h,t}$ согласно (7.82). При этом в случае Лауэ (рис. 40) указанная область включает действительную часть, находящуюся внутри кристалла и выходящую из точки E (точки E на рис. 56), и мнимую часть, находящуюся в вакууме, с волнами, сходящимися в той же точке.

Аналогично этому, в случае Лауэ — Брэгга формулы (7.80) — (7.82) действительны в области ограниченной двумя прямыми, пересекающимися в некоторой точке «фокуса». Эта область включает участок кристалла, ограниченный выходной гранью и направлением отраженного в точке A вектора $\mathbf{K}_{h,r}$. На рис. 57 показана схема рассмотренных отражений Лауэ — Брэгга в обратном пространстве. Отметим, что в отличие от чистого случая Брэгга, связывающего точки D и D_r , лежащие на общей ветви дисперсионной кривой, в данном случае для каждой точки D_r существует соответственная точка D_0 с тем же направлением вектора Пойнтинга. Как известно из гл. 6, наличие таких пар точек характерно для случая Лауэ в применении сферической падающей волны.

В работе [92] рассматривались более сложные случаи рассеяния в подобных кристаллах при наличии однократного отражения по Лауэ на входной грани и многократных отражений по Брэггу на боковых выходных гранях. Применялся тот же метод исследования.

Отметим замечания, приведенные в этой работе, по поводу эксперимента Леемана и Бормана и наблюдаемых ими интерференционных полос. Полагая необходимым рассмотрение схемы Леемана—Бормана в приближении сферической падающей волны, авторы приводят соответствующие выражения для волн, прошедших через кристалл без отражения на внутренней стороне боковых граней (Лауэ—Лауэ), и для волн, претерпевших такое отражение (Лауэ—Брэгг—Лауэ). В приближении сферической падающей волны асимптотические формы функций Бесселя, входящих в указанные выражения, имеют вид в случае Лауэ—Лауэ для прошедшей волны

$$J_1(\rho_1) \simeq \sqrt{1/2\pi\rho_1} \sqrt{\frac{x_h}{x_0}} \left\{ \exp \left[i \left(\rho_1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] + \exp \left[- i \left(\rho_1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \right\}, \quad (7.83)$$

для дифрагированной волны

$$iJ_0(\rho_1) \simeq \sqrt{1/2\pi\rho_1} \left\{ \exp \left[i \left(\rho_1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] + \exp \left[- i \left(\rho_1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \right\}. \quad (7.84)$$

В случае Лауэ—Брэгг—Лауэ для прошедшей волны

$$J_1(\rho_2) \simeq \sqrt{1/2\pi\rho_2} \sqrt{\frac{x_{0,r}}{x_{h,r}}} \left\{ \exp \left[i \left(\rho_2 - \frac{3\pi}{4} \right) \right] + \exp \left[- i \left(\rho_2 - \frac{3\pi}{4} \right) \right] \right\}, \quad (7.85)$$

для дифрагированной волны

$$iJ_2(\rho_2) \simeq \sqrt{\frac{1}{2\pi\rho_2}} \frac{x_{0,r}}{x_{h,r}} \left\{ \exp \left[i \left(\rho_2 - \frac{3\pi}{4} \right) \right] + \exp \left[- i \left(\rho_2 - \frac{3\pi}{4} \right) \right] \right\}, \quad (7.86)$$

$$\rho_1 = \bar{f} \sqrt{x_0 x_h}, \quad \rho_2 = \bar{f} \sqrt{x_{0,r} x_{h,r}}. \quad (7.87)$$

Сопоставляя приведенные выражения (7.83)—(7.86), легко получить выводы, совпадающие с экспериментальными наблюдениями Леемана и Бормана.

При взаимной интерференции прошедших, так же как и дифрагированных, волн разность фаз выражается одинаковой величиной ($\rho_1 - \rho_2 + \pi$), так как вторые члены в фигурных скобках пренебрежимо малы в случае толстых поглощающих кристаллов. Отсюда следует, что те и другие волны имеют минимумы и максимумы в тех же точках и, в частности, на общей выходной грани, где $\rho_1 = \rho_2$ имеют общий минимум. При этом минимум соответствует нулевой амплитуде лишь для прошедших волн.

Приведенное рассмотрение интерференционного эффекта в работе [92] имеет характер иллюстрации возможностей развитой этими авторами теории. Как уже отмечалось, в опытах Леемана — Бормана практически отсутствуют эффекты маятникового решения, что существенно упрощает задачу расчета. Авторы работ [91, 92] подчеркивают, что общий случай интерференционных эффектов при многократном отражении является весьма сложным и поэтому не рассматривается.

В отличие от этого Урагами посвятил свои работы [93—95] рассмотрению интерференционных эффектов в условиях многократного отражения произвольного

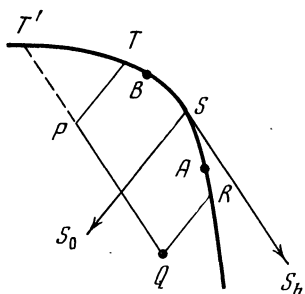


Рис. 58. Случай Лауэ — Брэгга при криволинейной поверхности кристалла

типа падающей волны и наличия отражения на входной (узкой) грани как по Лауэ, так и по Брэггу.

Мы уже отмечали в историческом обзоре (гл. 1), что Урагами, наряду с нашими авторами Афанасьевым и Коном [45], применил для решения задачи отражение по Брэггу обобщенную динамическую теорию, основанную на уравнениях типа Такаги. В гл. 11 кратко излагается решение этой задачи методами обобщенной теории, причем интегральное уравнение для отраженной по Брэггу волны решается с помощью Фурье-преобразования этой функции (D_h).

В первой работе [95] Урагами рассматривает более сложный случай: падающий волновой пакет одновременно претерпевает отражения как по Брэггу, так и по Лауэ. При этом поверхность раздела может быть не плоской, что представляется важным обобщением по сравнению с классической динамической теорией. Действительно, Лауэ [14] подчеркивает, что стандартные условия на границе для величин D и H относятся именно к плоской поверхности раздела.

Следует отметить, что теория Като приближения сферической падающей волны является недостаточно общей, так как исключает из рассмотрения такой важный параметр, как ширина фронта падающей волны. Метод плоских волн, использованный Като, не позволяет провести исследование волнового поля в зависимости от ширины волнового фронта или ширины щели на входной грани кристалла.

В обобщенной динамической теории, как показано в гл. 11, для определения волнового поля в любой точке кристалла необходимо вычислить интеграл по некоторому контуру C от функции Грина (функции влияния) G [уравнение (11.43)]. При этом необходимым условием решения является задание величин D_0 , D_h и их нормальных производных на контуре.

Урагами рассчитывает соответствующий интеграл для контура $TPQRS$ (рис. 58) на поверхности кристалла RT ; участок \overline{AB} представляет ограниченный фронт падающего волнового пакета, т. е. группы волн с разбросом направлений распространения. Участок \overline{AB} делится точкой S на две части: на AS условия падения отвечают случаю Брэгга, а на \overline{SB} — случаю Лауэ. Как показывает исследование, проведенное в этой работе, при падении узкого пучка на ребро клиновидного кристалла в кристалле возникает волновое поле, представляющее рассеяние по Лауэ и Брэггу и сопровождающееся образованием маятниковых полос. Используя соотношения обобщенной теории, Урагами получил выражения для проходящей и дифрагированной волн в кристалле, которые включают все указанные эффекты.

Для волны, отраженной от входной грани, получено выражение, отвечающее затухающей осцилляции, что находится в полном согласии с результатом расчета случая Брэгга в работе [45].

Принципиальным является результат, полученный в обеих работах [45] и [95] и относящийся к так называемому краевому эффекту. Как было установлено экспериментально при использовании широких (по углам) пучков, интенсивность пучка, отраженного по Брэггу, достигает максимума на стороне, обращенной к падающему пучку. Этот эффект не мог получить правильное теоретическое истолкование в работах [24, 88], в которых для соответствующих углов значения интенсивностей обращались в бесконечность. В противоположность этому в работах [45] и [95] для амплитуды отраженной волны в точке падения получаются хотя и большие, но конечные значения.

В своей работе [95] Урагами привел полученную им рентгенограмму, которая качественно соответствует теории.

В другой работе [94] было рассмотрено многократное отражение, аналогичное схеме Вагнера, однако в общем случае клиновидной пластинки. Здесь более строгим путем получены результаты, аналогичные результатам, полученным Вагнером.

Наконец, в третьей работе [93] рассматривается схема многократных отражений, подобная той, которая была исследована несколько позже в работах Като с сотрудниками [91, 92]. В этой работе Урагами, главным образом, применительно к рассеянию в прозрачном кристалле вычисляет как маятниковое решение при многократных отражениях, так и распределение интенсивности волн, отраженных по Брэггу на одной из боковых стенок.

Наиболее типичной является рассчитанная теоретически и наблюдаемая экспериментально (в той же работе) картина маятниковых полос V -образной формы, образованных интерференцией волн, однократно отраженных от обеих боковых границ пластинки.

ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ПО БРЭГГУ. II. КОЭФФИЦИЕНТЫ И ИНТЕГРАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОТРАЖЕНИЯ И ПРОХОЖДЕНИЯ

В этой главе выводятся выражения для вычисления коэффициентов и интегральных значений отражения и прохождения в общем виде: как в смысле применимости к любой из трех областей максимума, так и с учетом обоих полей в кристалле. Полученные общие выражения далее применяются к частным задачам.

При выводе основных соотношений сопоставляются формулы, выведенные различными авторами, в частности, те, которые приводятся в монографии Захариасена [15, гл. 1] и широко используются в литературе.

Приведенные здесь выражения применимы к случаю падения плоской вакуумной волны.

8.1. Вывод общих выражений для коэффициентов отражения и прохождения

Выведем выражения для коэффициентов R и T при отражении по Брэггу с учетом обоих полей в кристалле, не предпреляя вопроса о вещественности или комплексности параметров динамической задачи. Рассмотрим отражение и прохождение в случае плоскопараллельной кристаллической пластинки, в которой различаются входная и выходная поверхности. Приведенный вывод близок к данному в работе Рамачандрана и Карта [98].

Пограничные условия на входной поверхности

$$D_0^{(1)} + D_0^{(2)} = D_0^{(a)}, \quad D_h^{(1)} + D_h^{(2)} = D_h^{(a)}. \quad (8.1)$$

Условия на выходной поверхности

$$D_0^{(1)} \exp[-2\pi i k_{0z}^{(1)} t] + D_0^{(2)} \exp[-2\pi i k_{0z}^{(2)} t] = D_0^{(d)} \exp[-2\pi i k_{0z}^{(d)} t], \quad (8.2)$$

$$D_h^{(1)} \exp[-2\pi i k_{hz}^{(1)} t] + D_h^{(2)} \exp[-2\pi i k_{hz}^{(2)} t] = 0. \quad (8.3)$$

Напомним, что $D_h^{(a)}$ — амплитуда волны, отраженной в вакуум на входной поверхности, и $D_0^{(d)}$ — амплитуда волны, вышедшей в вакуум через выходную поверхность.

Согласно (3.1) волновые векторы волн в кристалле и волновой вектор вакуумной волны \mathbf{K} связаны следующими условиями:

$$\mathbf{k}_0^{(i)} = \mathbf{K}_0^{(a)} - K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0, \quad \mathbf{k}_h^{(i)} = \mathbf{K}(1 + \alpha) - K\delta^{(i)}\mathbf{n}_0, \quad (8.4)$$

где

$$\delta^{(i)} = -\frac{\chi_0}{2\gamma_0} + \frac{\beta}{4|\gamma_h|} \pm \sqrt{\frac{\beta^2}{16|\gamma_h|^2} - \frac{\chi_h\chi_{\bar{h}}C^2}{4\gamma_0|\gamma_h|}}, \quad (8.5)$$

$$\delta^{(1)} - \delta^{(2)} = -2|\gamma_h|^{-1} \sqrt{\beta^2 - 4C^2\chi_h\chi_{\bar{h}}\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}. \quad (8.6)$$

Введем для всех трех областей максимума общее обозначение $y = \text{ch } v$,

$$(8.7)$$

а также величину

$$f = \sqrt{\chi_h/\chi_{\bar{h}}} \sqrt{\gamma_0/|\gamma_h|}. \quad (8.8)$$

Для амплитуд $D_h^{(i)}$ записываем соотношения [см. (7.6) и (7.11)]

$$D_h^{(1)} = fD_0^{(1)} \exp(v), \quad D_h^{(2)} = fD_0^{(2)} \exp(-v). \quad (8.9)$$

Исключая из (8.1) $D_0^{(2)}$ и подставляя (8.9) и (8.4) в (8.3), получим

$$D_0^{(1)} = -\frac{\exp(-v + 2\pi i Kt\delta^{(2)}) D_0^{(a)}}{\exp(v + 2\pi i Kt\delta^{(1)}) - \exp(-v + 2\pi i Kt\delta^{(2)})}. \quad (8.10)$$

Введем переменную

$$x = i\pi Kt(\delta^{(1)} - \delta^{(2)}). \quad (8.11)$$

Сокращаем в (8.10) дробь справа на величину

$$\exp\left\{2\pi i Kt\left[\delta^{(1)} - \frac{(\delta^{(1)} - \delta^{(2)})^2}{2}\right]\right\};$$

выражение для $D_0^{(1)}$ принимает вид

$$D_0^{(1)} = -\frac{\exp[-(v+x)] D_0^{(a)}}{\exp(v+x) - \exp[-(v+x)]} = -\frac{\exp[-(v+x)] D_0^{(a)}}{2 \text{sh}(v+x)}. \quad (8.12)$$

Далее, используя (8.1), получаем

$$D_0^{(2)} = \frac{\exp(v+x) D_0^{(a)}}{2 \text{sh}(v+x)}. \quad (8.13)$$

Подставляя в (8.9) значения $D_0^{(i)}$ и вводя с помощью (8.1) величину $D_h^{(a)}$, получим следующее выражение для коэффициента отражения

$$R = \left| f \frac{D_h^{(a)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 = |f|^2 \left| \frac{D_h^{(1)} + D_h^{(2)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 = |f|^2 \frac{|\text{sh } x|^2}{|\text{sh}(v+x)|^2}. \quad (8.14)$$

Для получения коэффициента прохождения T подставляем в (8.2) значения $D_0^{(i)}$ из (8.12) и (8.13) и значения $k_{0z}^{(i)}$ из (8.4):

$$T = \left| \frac{D_0^{(d)}}{D_0^{(a)}} \right|^2 = \left| \frac{\exp(v+x)}{2 \operatorname{sh}(v+x)} \exp(-2\pi i K_{0z}^{(a)} t + 2\pi i K t \delta^{(2)}) - \frac{\exp[-(v+x)]}{2 \operatorname{sh}(v+x)} \exp(-2\pi i K_{0z}^{(a)} t + 2\pi i K t \delta^{(1)}) \right|. \quad (8.15)$$

Это выражение с точностью до множителя

$$\exp \left[-2\pi i t \left(K_{0z}^{(a)} - K \frac{\delta^{(1)} + \delta^{(2)}}{2} \right) \right],$$

который дает единицу при умножении на комплексно-сопряженную величину, принимает следующий простой вид:

$$T = \frac{|\operatorname{sh} v|^2}{|\operatorname{sh}(v+x)|^2}. \quad (8.16)$$

Прежде чем перейти к анализу формул (8.14) и (8.16) применительно к более частным задачам, приведем аналогичный вывод выражений для R и T , используя обозначения Захариасена [15].

Введем переменные q , z , W , $c^{(i)}$ и $n^{(i)}$:

$$q = C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \frac{\gamma_0}{\gamma_h}, \quad z = -\frac{\beta}{2} \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}, \quad \sqrt{z^2 + q} = \frac{W}{2} \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}, \quad (8.17)$$

$$c^{(i)} = \frac{-z \pm \sqrt{z^2 + q}}{\chi_{\bar{h}}},$$

$$n^{(i)} = \exp \left[-i2\pi \frac{K}{\gamma_0} \frac{t}{2} (\chi_0 - z \pm \sqrt{q + z^2}) \right] = \exp [2\pi i K t \delta^{(i)}]. \quad (8.18)$$

Пограничные условия на выходной поверхности (8.2) с точностью до фазового множителя $\exp[-2\pi i (K_{0z}^{(a)} t)]$ могут быть переписаны следующим образом:

$$n^{(1)} D_0^{(1)} + n^{(2)} D_0^{(2)} = D_0^{(d)} \quad (8.19)$$

и (8.3) с точностью до множителя $\exp[-2\pi i (1 + \alpha) K_{0z}^{(a)} t]$

$$c^{(1)} n^{(1)} D_0^{(1)} + c^{(2)} n^{(2)} D_0^{(2)} = 0. \quad (8.20)$$

Решая совместно уравнения (8.1), (8.19) и (8.20), получаем

$$R = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \left| \frac{c^{(1)} c^{(2)} (n^{(1)} - n^{(2)})}{c^{(2)} n^{(2)} - c^{(1)} n^{(1)}} \right|^2,$$

$$T = \left| \frac{n^{(1)} n^{(2)} (c^{(2)} - c^{(1)})}{c^{(2)} n^{(2)} - c^{(1)} n^{(1)}} \right|^2. \quad (8.21)$$

Выражение R (8.21) было преобразовано Захариасеном для общего случая тонкого и толстого, а также прозрачного и поглощающего кристаллов.

Разбиение на действительные и мнимые части соответствующих параметров сводится к следующему:

$$\sqrt{q + z^2} = v + iw. \quad (8.22a)$$

Введем также обозначение

$$\pi K \cdot t / \gamma_0 = a. \quad (8.22b)$$

В таком случае величина $n^{(i)}$ из (8.18) записывается так:

$$n^{(i)} = \exp[-ia(\chi_0 - z \pm v)] \exp(\pm aw). \quad (8.23)$$

После введения в (8.21) значений $c^{(i)}$ из (8.18) и $n^{(i)}$ из (8.23) выражение для коэффициента отражения запишется так:

$$R = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \left| \frac{\chi_h^{-2}(-z+y)(-z-y) [\exp(2\pi i K t \delta^{(1)}) - \exp(2\pi i K t \delta^{(2)})]}{\chi_h^{-1} [(-z-y) \exp(2\pi i K t \delta^{(2)}) - (-z+y) \exp(2\pi i K t \delta^{(1)})]} \right|^2. \quad (8.24)$$

Здесь $y = \sqrt{q + z^2}$.

Числитель этого выражения преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} (-z + \sqrt{q + z^2}) - (z - \sqrt{q + z^2}) &= -q, & |q \chi_h^{-2}|^2 &= \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|^2}, \\ |n^{(1)} - n^{(2)}|^2 &= 4(\sin^2 av + \text{sh}^2 aw). \end{aligned} \quad (8.25)$$

В знаменателе (8.24) вычисляются квадраты модулей

$$|-z \pm \sqrt{q + z^2}|^2 \quad (8.26)$$

и используются тождества

$$z(\sqrt{q + z^2})^* \pm z^* \sqrt{q + z^2} = \sqrt{(|q + z^2| \pm |z|^2)^2 - |q|^2}. \quad (8.27)$$

В результате, путем очевидных преобразований, выводится следующая общая формула Захариасена для коэффициента отражения:

$$\begin{aligned} R &= \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} |\chi_h|^2 \times \\ &\times \frac{\sin^2 av + \text{sh}^2 aw}{D + (D + |z|^2) \text{sh}^2 aw - (D - |z|^2) \sin^2 av + \frac{1}{2} M^{1/2} \text{sh} 2aw + \frac{1}{2} N^{1/2} \sin 2av}, \\ D &= |q + z^2|, \quad M = |(D + |z|^2)^2 - |q|^2|^{1/2}, \\ N &= |(D - |z|^2)^2 - |q|^2|^{1/2}. \end{aligned} \quad (8.28)$$

Содержание последующих параграфов настоящей главы сводится к преобразованию, качественному анализу и, частично, численным расчетам полученных общих формул (8.21) и (8.28) применительно к важнейшим частным случаям.

8.2. Отражение по Брэггу от прозрачного кристалла

В этом случае переменная x в (8.11) может быть представлена как [см. (8.6)]

$$x = i\pi Kt(\delta^{(1)} - \delta^{(2)}) = -iA\sqrt{y^2 - 1}, \quad A = \frac{\pi CKt\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}}{\sqrt{\gamma_0|\gamma_h|}}. \quad (8.29)$$

Рассмотрим теперь последовательно разные области максимума
Область II

$$i\sqrt{y^2 - 1} = -\sqrt{1 - y^2}, \quad x = A\sqrt{1 - y^2}. \quad (8.30)$$

Из (8.14) следует для относительной интенсивности отраженной волны

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}} &= R \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} = \frac{|\operatorname{sh} x|^2}{|\operatorname{sh}(v+x)|^2} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| = \\ &= \frac{|\operatorname{sh}(A\sqrt{1-y^2})|^2}{|\operatorname{sh}(A\sqrt{1-y^2} + v)|^2} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \end{aligned} \quad (8.31)$$

Используя далее тождества

$$\begin{aligned} |\operatorname{sh}(A\sqrt{1-y^2} + v)|^2 &= \operatorname{sh}^2 A\sqrt{1-y^2} + \sin^2 v, \\ (\operatorname{sh} \alpha)^{-2} &= \operatorname{cth}^2 \alpha - 1 \end{aligned} \quad (8.32)$$

и учитывая формулы (7.12), (7.13), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}} &= \frac{\operatorname{sh}^2 [A\sqrt{1-y^2}]}{1 - y^2 + \operatorname{sh}^2 [A\sqrt{1-y^2}]} = \\ &= \frac{1}{y^2 - (1 - y^2)\operatorname{cth}^2 A\sqrt{1-y^2}} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \end{aligned} \quad (8.33)$$

Заметим, что в наших выражениях, помимо тех, которые совпадают с формулами Захариасена, переменная y задана формулой (7.5):

$$y = \frac{\beta}{2C|\chi_h|\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0}}, \quad (8.34)$$

т. е. фактически не отличается от функции y , которой мы пользовались в главах, посвященных отражению по Лауэ, так как $\gamma_{h,L} = |\gamma_h|_B$. Что касается формул Захариасена, то следует иметь

в виду, что

$$y_z = -y' \quad (8.35)$$

и в прозрачном кристалле $y^2 = z^2/q$.

Области I и III. В этом случае $x = -iA(y^2 - 1)^{1/2}$, $\text{sh } x = -\text{sh} [iA(y^2 - 1)^{1/2}]$, $|\text{sh } x|^2 = \sin^2 [A(y^2 + 1)^{1/2}]$.

Используя тождества (8.32), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}} &= \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \frac{\sin^2 [A(y^2 - 1)^{1/2}]}{y^2 - 1 + \sin^2 [A(y^2 - 1)^{1/2}]} = \\ &= \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \frac{1}{y^2 + (y^2 - 1) \text{ctg}^2 [A(y^2 - 1)^{1/2}]} . \end{aligned} \quad (8.36)$$

Выражения (8.33) и (8.36), данные в форме и с обозначениями Захариасена, легко получаются также из общей формулы (8.28). Действительно, область II соответствует условию $(q + z^2) < 0$ и области I и III — $(q + z^2) > 0$.

1. $(q + z^2) < 0$. Так как $v = 0$, то $\sin^2 av$ и $\sin 2av$ обращаются в нуль, так же как и $|(q + z^2| + |z|^2)^2 - |q|^2|^{1/2}$. Далее $|q + z^2| = q(1 - y^2)$ и, наконец,

$$aw = aq \sqrt{1 - y^2} = A \sqrt{1 - y^2}. \quad (8.37)$$

В результате из (8.28) получаем $R \gamma_0 / |\gamma_h|$ согласно (8.33).

2. $(q + z^2) > 0$, тогда $w = 0$, $av = A \sqrt{y^2 - 1}$, $\text{sh}^2 aw = \text{sh} 2aw = 0$, $(|q + z^2| - |z|^2)^2 - |q|^2 = 0$, $q + z^2 = q(y^2 - 1)$ и уравнение (8.28) переходит в $\frac{|\gamma_h}{\gamma_0} \frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}}$ согласно (8.36). Заметим,

что, учитывая тождества

$$\text{sh}^2 \alpha = -\sin^2 i\alpha, \quad \text{cth}^2 \alpha = -\text{ctg} i\alpha, \quad (8.38)$$

формулы (8.33) и (8.36) следует рассматривать как две формы одного общего выражения.

Рассматривая формулу (8.36), замечаем, что она описывает побочные максимумы маятникового решения для случая Брэгга, которые возникают в боковых областях общего максимума интенсивности. Мы уже упоминали ранее о возможности возникновения подобных максимумов, рассматривая явления в тонкой кристаллической пластинке. Причиной образования максимумов можно считать интерференцию между вторым волновым полем, проникающим внутрь кристалла, и первым полем, которое возникает при отражении от выходной поверхности и распространяется обратно в кристалл.

Преобразуем выражение (8.36), переходя частично в знаменателе от переменной y к v :

$$\frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}} = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \frac{1 - \cos 2A \sqrt{y^2 - 1}}{\text{ch } 2v - \cos 2A \sqrt{y^2 - 1}} . \quad (8.39)$$

На рис. 59 показан профиль максимума, соответственно формуле (8.39), при нескольких значениях параметра $A = \frac{C\pi|\chi_h|}{\lambda\sqrt{\gamma_0|\gamma_h|}} t$. Выражения (8.36) и (8.39) обращаются в нуль при условии

$$2A\sqrt{y^2 - 1} = 2\pi m. \quad (8.40)$$

Для больших m (практически уже при $m \geq 2$) угловой интервал между двумя минимумами отвечает величине

$$\Delta y \approx \frac{\pi}{A} = \frac{\lambda\sqrt{\gamma_0|\gamma_h|}}{Ct|\chi_h|}, \quad (8.41)$$

что формально совпадает с выражением (3.70), которое дает угловые интервалы побочных максимумов в случае Лауэ.

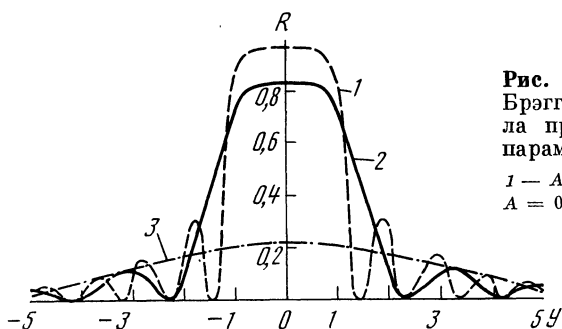


Рис. 59. Кривые отражения по Брэггу от прозрачного кристалла при различных значениях параметра $A = f(t)$

1 — $A = \pi$; 2 — $A = \pi/2$; 3 — $A = 0,5$

Как уже отмечалось, различие механизма образования побочных максимумов в обоих случаях отражения связано с тем, что точки возбуждения интерферирующих волн в случае Лауэ лежат на различных ветвях, в случае Брэгга — на общей ветви дисперсионной гиперболы.

Модуль вектора Δk , представляющий в обратном пространстве экстинкционную глубину τ , в случае Лауэ задан выражением (3.37):

$$\Delta k = \frac{C|\chi_h|}{\lambda\sqrt{\gamma_0\gamma_h}} \sqrt{1 + y^2} = \tau^{-1}. \quad (8.42)$$

При отражении по Брэггу нормаль к входной грани в областях максимума за пределами области полного отражения пересекает в двух точках какую-либо одну ветвь дисперсионной гиперболы.

Длина хорды $\overline{A^{(1)}A^{(2)}}$ на рис. 49 непосредственно определяется из выражения

$$\overline{A^{(1)}A^{(2)}} = |\Delta k|_B = |(\xi_0^{(1)} - \xi_0^{(2)})|\gamma_0^{-1}, \quad (8.43)$$

где значения $\xi_0^{(i)}$ слегка отличаются от (3.14), если учесть отрицательный знак γ_h :

$$\xi_0^{(i)} = \mp \frac{KC |\chi_h|}{\lambda} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} (V y^2 - 1 \pm y)}. \quad (8.44)$$

Таким образом, в случае Брэгга

$$|\Delta k|_B = \frac{C |\chi_h|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \sqrt{y^2 - 1} \approx \frac{\sqrt{y^2 - 1}}{\Delta y t}. \quad (8.45)$$

При симметричном отражении получим в случае Лауэ [см. (3.73)]:

$$\Delta y_s \approx \frac{\lambda \cos \vartheta}{C t |\chi_h|}, \quad \Delta \eta_s = \frac{d_{hkl}}{t}, \quad (8.46)$$

в случае Брэгга

$$\Delta y_s \approx \frac{\lambda \sin \vartheta}{C t |\chi_h|}, \quad \Delta \eta_s = \frac{d_{hkl}}{t} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (8.47)$$

Приведенное рассмотрение побочных максимумов маятникового решения в случае Брэгга показало их близкую аналогию с тем же явлением при отражении по Лауэ. Различие сводится к тому, что в случае Брэгга интерферируют волны встречные, в то время как в случае Лауэ — распространяющиеся в (почти) одном направлении.

Нетрудно видеть, что в боковых областях максимума при отражении по Брэггу должен иметь место и другой тип маятникового решения, именно полосы равной толщины. Действительно, модулю вектора Δk , согласно (8.45), должен отвечать определенный «экстинкционный» интервал τ . Распределение соответствующих максимумов, так же как и в случае Лауэ, принципиально можно наблюдать, используя вместо плоскопараллельной кристаллической пластинки клинообразную, при фиксированной величине угла падения, т. е. величины η .

Наконец, заметим, что численная оценка величин Δy и $\Delta k = \tau^{-1}$, данная в гл. 3 для случая Лауэ, по порядку величин применима и к случаю Брэгга. Это непосредственно следует из сопоставления выражений (8.46) и (8.47).

Представляет интерес рассмотреть случай толстого кристалла, обладающего столь малым поглощением, что его можно считать прозрачным.

Формулы (8.33) и (8.36), содержащие величину A , как это следует из (8.29), зависят от толщины кристалла t . В области II максимума согласно (8.33) величина относительной интенсивности с возрастанием A стремится вместе с $\operatorname{cth}^2 [A (1 - y^2)^{1/2}]$ к единице; если $|y| < 1$ и $A \gg 1$, то

$$\frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}} = 1. \quad (8.48)$$

Что касается областей максимума I и III, то задача вычисления относительных интенсивностей для предельных толщин является более трудной, так как наличие тригонометрических функций в (8.36) делает величину интенсивности осциллирующей функцией толщины. Для вычисления искомой величины необходимо усреднить $\text{ctg} [A(y^2 - 1)^{1/2}]$ по области изменений A , большей, чем $\pi/2$. Интегрирование по A приводит к выражению для $|y| > 1$ и $A \gg 1$:

$$R = \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \frac{\mathcal{J}_h^{(a)}}{\mathcal{J}_0^{(a)}} = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| (1 - \sqrt{1 - y^{-2}}). \quad (8.49)$$

Сопоставим теперь выражения для коэффициентов отражения от прозрачного кристалла, полученные в этой главе, (8.33), (8.36), (8.48) и (8.49) с выражениями (7.20) и (7.21).

Для области II максимума (8.33) отличается от (7.21), однако это расхождение устраняется при переходе к предельному значению для толстого кристалла, и формула (8.48) дает $R = 1$ в согласии с (7.21).

Для областей I и III переход от (8.36) к формуле (8.49), применимой для толстого кристалла, не устранил различия с формулой (7.20), которая может быть записана в следующем виде, если перейти от переменной v к y [см. (7.5) и (7.8)]:

$$R_{I, III} = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| (\mp |y| - \sqrt{y^2 - 1})^2, \quad (8.50)$$

где верхний знак относится к области I.

Нетрудно видеть причину этого различия. Формула (7.20) [и эквивалентная ей (8.50)] выведена в разделе 7.1 с учетом лишь одного первого поля в области I максимума и одного второго поля в области III. Как уже отмечалось, в основе этого вывода лежит представление о толстом слегка поглощающем кристалле. В таком кристалле волновое поле, возникающее на входной поверхности, распространяется в глубь кристалла и затухает, не достигая выходной поверхности, где может возникнуть дополнительное поле, идущее обратно.

В отличие от этого формула (8.49) получена на основе представления, согласно которому даже в достаточно толстом кристалле волновое поле, идущее в глубь кристалла, все же достигает выходной поверхности и порождает дополнительное поле. Действительно, исходные формулы (8.14) и (8.24) выведены для широкого фронта падающей волны и наложении двух полей во всей области максимума.

Захариасен назвал формулу (8.50) решением Дарвина, который вывел ее впервые, а формулу (8.49) — решением Эвальда. Очевидно, решение Эвальда применимо к менее толстым кристаллам, в которых эффект поглощения пренебрежимо мал, и предельным выражением для коэффициента отражения должна быть формула

Дарвина. Из этого следует, что строгое рассмотрение требует более точного учета комплексного характера параметров, входящих в выражения (8.14) и (8.24).

На основе изложенного, приведем выражения для интегрального отражения в приближении Дарвина и Эвальда. Очевидно, что в обоих случаях интегральное отражение по области II максимума

$$R_{i, II}^y = 2 \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.51)$$

Для решения Дарвина

$$\begin{aligned} R_{i, I}^y + R_{i, III}^y &= \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| 2 \int_0^{\infty} \exp(-2v) dy = \\ &= \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| 2 \int_0^{\infty} \exp(-2v) \operatorname{sh} v dv = \\ &= \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \int_0^{\infty} [\exp(-v) - \exp(-3v)] dv = \frac{2}{3} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \end{aligned} \quad (8.52)$$

Откуда полная величина интегрального отражения от толстого кристалла

$$R_i^y = \frac{8}{3} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, \quad R_i^n = \frac{8C |\chi_h|}{3 \sin 2\vartheta} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.53a)$$

Очевидно, как в выражении (8.53a), так и в следующем выражении для интегрального отражения (8.55) при падении на кристалл неполяризованного излучения C заменяется известной величиной поляризационного множителя:

$$R_i^n = \frac{8}{3} \frac{|\chi_h|}{\sin 2\vartheta} \frac{1 + |\cos 2\vartheta|}{2} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.53б)$$

В зависимости от условия $2\vartheta > \pi/2$ или $2\vartheta < \pi/2$ или $\cos^2 \vartheta \geq \sin^2 \vartheta$ величина интегрального отражения принимает одно из двух частных значений:

$$R_i^n = \begin{cases} \frac{4}{3} |\chi_h| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \operatorname{ctg} \vartheta \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, & 2\vartheta < \frac{\pi}{2}, \\ \frac{4}{3} |\chi_h| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \operatorname{tg} \vartheta \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, & 2\vartheta > \frac{\pi}{2}. \end{cases} \quad (8.53в)$$

Для решения Эвальда можно либо проинтегрировать выражение (8.49), полученное путем усреднения (8.63) по достаточно широкой области изменений толщины (и величины A), либо проинтегрировать формулы (8.33) и (8.36) с учетом условий (8.38),

а затем перейти к толстому кристаллу. Этот второй метод был использован Лауэ путем интегрирования по комплексной плоскости изменений величины y . Не останавливаясь на ходе интегрирования, который подробно изложен в монографии Лауэ [14], приведем окончательный результат

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y^2 + (1 - y^2) \operatorname{cth}(A \sqrt{1 - y^2})} = \pi \operatorname{th} A. \quad (8.54)$$

При больших значениях A , а следовательно и толщины отражающего кристалла t , $\operatorname{th} A \approx 1$. Для этого предельного значения достаточно, чтобы $A \geq 3$. В таком случае

$$R_i^y = \pi \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, \quad R_i^n = \frac{\pi C |\chi_h|}{\sin \theta} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.55)$$

Сравнивая это значение R_i с интегральным отражением в случае Лауэ согласно (3.82), замечаем, что в случае Брэгга интегральное отражение в два раза больше. Заметим, что (8.53) было получено Дарвином.

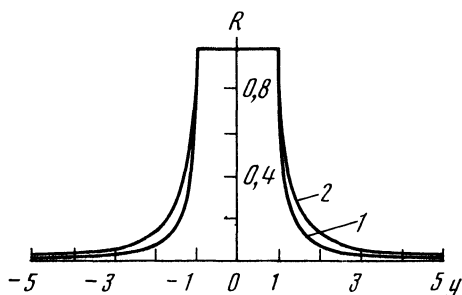


Рис. 60. Максимумы кривых отражения по формулам Дарвина (1) и Эвальда (2)

На рис. 60 показаны профили максимумов, отвечающие формулам Дарвина и Эвальда. Различие этих профилей находит свое выражение в различии значений полуширины. Из условия $R_{I, III} = 1/2$ находим из (8.50) и (8.49):

$$w_D = 2\eta_{1/2} = \frac{3\sqrt{2}}{2}, \quad (8.56a)$$

$$w_E = \frac{4\sqrt{3}}{3}. \quad (8.56b)$$

Заметим, что при асимметричном отражении по Брэггу от толстого кристалла с минимальным поглощением форма максимума остается симметричной. Однако при этом наблюдаются два существенных изменения по сравнению с симметричным отражением. На шкале углов падения с уменьшением скользящего угла ω_0 , или увеличением φ_0 , возрастает смещение средней точки максимума y_0 относительно угла θ и увеличивается полуширина максимума

$\Delta\eta_0$. Указанное смещение максимума определяется разницей величин η_0 согласно (7.34) и (7.35) при $|\gamma_h| > \gamma_0$ (см. рис. 48). Увеличение ширины области полного отражения $\Delta\eta_0$ следует из (7.32). Очевидно, величины η_0 и $\Delta\eta_0$ изменяются в обратных направлениях при увеличении ω_0 (рис. 48). При переходе от шкалы углов падения к шкале углов отражения указанные изменения имеют обратные знаки. Величина смещения максимума на шкале углов отражения подробно обсуждается в 9.4 в связи со схемой трехкристального спектрометра при асимметричной съемке. Что касается численных оценок, то отмеченные эффекты значительно превышают соответствующие величины в случае Лауэ. Так, при асимметричном отражении 220 излучения $\text{MoK}\alpha$ от Si с $\gamma_h = 0,335$ и $\gamma_0 = 0,027$ получаем $\eta_0 \approx -11,2''$ вместо $\eta_{0s} = -1,8''$ и $\Delta\eta_0 = 8,1''$ вместо $\Delta\eta_{0s} = 2,3''$.

8.3. Отражение по Брэггу от толстого поглощающего кристалла

Выражения для величин R и T в указанном случае могут быть получены как из общих формул (8.14) и (8.16), так и из формулы Захариасена (8.28).

Приведем сначала в развернутой форме выражения для комплексных переменных в (8.14) и (8.16) x и v .

Согласно (8.11) и (8.6)

$$x = -i\pi Kt \frac{W}{2|\gamma_h|}, \quad (8.57)$$

где точные и приближенные значения W_r и W_i для случая Брэгга даны в гл. 7 выражениями (7.52)–(7.55). Заметим, что из (8.57)

$$x_r = \frac{\pi Kt}{2|\gamma_h|} W_i, \quad x_i = -\frac{\pi Kt}{2|\gamma_h|} W_r. \quad (8.58)$$

Выпишем здесь приближенные значения x_r и x_i , используя формулу (7.55):

$$x_r = \frac{\mu t}{4\sqrt{y_r^2 - 1}} \left\{ y_r \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{|\gamma_h|} \right) - \frac{2C\epsilon \cos v_h}{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \right\}, \quad (8.59)$$

$$x_i = -A_r \sqrt{y_r^2 - 1}, \quad A_r = \frac{\pi K C t |\chi_{hr}|}{\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}}. \quad (8.60)$$

При выводе выражений для комплексной переменной v используются тождества

$$\text{ch } v = \text{ch } (v_r + iv_i) = \text{ch } v_r \cos v_i + i \text{sh } v_r \sin v_i, \quad (8.61)$$

а также аналогичное выражение для $\text{sh } (v_r + iv_i)$ (4.82). Приближенные значения основаны на допущениях (4.83) и (4.84).

Таким образом, в областях I и III максимума

$$y_r + iy_i = \mp \operatorname{ch}(v_r + iv_i). \quad (8.62)$$

Точные значения функций v_r и v_i определяются согласно (8.61) из условий

$$\operatorname{ch} v_r \cos v_i = \mp y_r, \quad \operatorname{sh} v_r \sin v_i = \mp y_i; \quad (8.63)$$

приближенные значения

$$\operatorname{ch} v_r \approx \mp y_r, \quad v_i \approx \sin v_i = \mp \frac{y_i}{\sqrt{y_r^2 - 1}}. \quad (8.64)$$

В области II [см. (7.12)]

$$y_r + iy_i = \cos(v_r + iv_i) = \operatorname{ch} v_i \cos v_r - i \operatorname{sh} v_i \sin v_r, \quad (8.65)$$

$$\cos iv_i = \operatorname{ch} v_i, \quad \sin iv_i = i \operatorname{sh} v_i. \quad (8.66)$$

Таким образом, точные значения v_r и v_i определяются из условий

$$y_r = \operatorname{ch} v_i \cos v_r, \quad y_i = -\sin v_r \operatorname{sh} v_i, \quad (8.67)$$

и приближенные

$$y_r \approx \cos v_r, \quad v_i \approx -\frac{y_i}{\sqrt{1 - y_r^2}}. \quad (8.68)$$

Преобразуем теперь общие формулы (8.14) и (8.16) к частному случаю отражения от толстого поглощающего кристалла, используя тождество

$$|\operatorname{sh} \alpha|^2 = \frac{1}{2} (\operatorname{ch} 2\alpha_r - \cos 2\alpha_i). \quad (8.69)$$

Выражения (8.14) и (8.16) принимают следующий вид:

$$R = |f|^2 \frac{\operatorname{ch} 2x_r - \cos 2x_i}{\operatorname{ch}(2x_r + 2v_r) - \cos(2x_i + 2v_i)}, \quad (8.70)$$

$$T = \frac{\operatorname{ch} 2v_r - \cos 2v_i}{\operatorname{ch}(2x_r + 2v_r) - \cos(2x_i + 2v_i)}, \quad (8.71)$$

где переменные x_r и x_i даны формулами (8.57) — (8.60).

Переходим к применению формул (8.70) и (8.71) к отдельным областям максимума. При этом учтем, что согласно (8.58) и (8.60) $x_i = -|x_i|$, а также используем соотношения (7.5) — (7.15). В областях I и II максимума

$$R_{I, II} = |f|^2 \frac{\operatorname{ch} 2x_r - \cos 2x_i}{\operatorname{ch}(2x_r \pm 2v_r) - \cos(2x_i \mp 2v_i)}, \quad (8.72)$$

$$T_{I, II} = \frac{\operatorname{ch} 2v_r - \cos 2v_i}{\operatorname{ch}(2x_r \pm 2v_r) - \cos(2x_i \mp 2v_i)}, \quad (8.73)$$

где верхние знаки в круглых скобках относятся к области I. В области II, заменяя v на iv , получим вместо $(v_r + iv_i)$, $(v_i - iv_r)$. Таким образом, в формулах (8.72) и (8.73) заменяем v_r на v_i и v_i на $-v_r$. В результате для области II получаем следующие выражения для R и T :

$$R_{II} = |f|^2 \frac{\operatorname{ch} 2x_r - \cos 2x_i}{\operatorname{ch}(2x_r + 2v_i) - \cos(2x_i + 2v_r)}, \quad (8.74)$$

$$T_{II} = \frac{\operatorname{ch} 2v_i - \cos 2v_r}{\operatorname{ch}(2x_r + 2v_i) - \cos(2x_i + 2v_r)}. \quad (8.75)$$

Представляет интерес сопоставление формул (8.39) и (8.72) в связи с влиянием поглощения на побочные максимумы маятникового решения. Обратим внимание на различие числителей обеих формул. Наличие в (8.72) члена $\operatorname{ch} 2x_r$ приводит к тому, что в минимумах, соответствующих условию (8.40), функция R не обращается в нуль. Другое существенное свойство функции (8.72) заключается в асимметрии относительно средней точки ($y = 0$). Это можно показать следующим образом.

Рассмотрим для простоты симметричное отражение. Преобразуем выражение (8.59), приняв $y_r \gg 1$:

$$x_r \approx \frac{\mu t}{2 \sin \vartheta} - \frac{C \mu t \varepsilon \cos v_h}{2 \sin \vartheta y_r}. \quad (8.76)$$

При выполнении условия (8.40)

$$2x_i = -2A \sqrt{y_r^2 - 1} = 2\pi m, \quad (8.77)$$

и мы получим в числителе (8.72) $\operatorname{ch}(\alpha - \beta) - 1$ при $y_r > 0$, $\operatorname{ch}(\alpha + \beta) - 1$ при $y_r < 0$,

$$\alpha = \frac{\mu t}{\sin \vartheta}, \quad \beta = \frac{C \mu t \varepsilon \cos v_h}{y_r \sin \vartheta}, \quad (8.78)$$

Эта асимметрия является следствием асимметрии коэффициента поглощения. Заметим, что из сравнения (8.59) и (7.56а) следует

$$x_r = -|\sigma_{I, III}|_s t/2, \quad (8.79)$$

$$|\sigma_{I, III}|_s = \frac{\mu}{2 \sqrt{y_r^2 - 1}} \left[y_r \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{|\gamma_h|} \right) - \frac{2C \varepsilon \cos v_h}{\sqrt{|\gamma_0| |\gamma_h|}} \right] \quad (8.80)$$

в соответствии со знаком y_r меняет свой знак при переходе от области I к области III.

В отличие от выражений (8.72) — (8.75), применимых к определенным областям максимума, выведем формулы, предложенные рядом авторов и пригодные для вычисления коэффициентов отражения и прохождения (поглощающий кристалл) в случае Брэгга по всему максимуму.

Бонзе [89] использует для вычисления коэффициента отражения величины амплитудного коэффициента отражения внутри кристалла [см. (3.11) и (3.15)] для случая Брэгга:

$$c^{(i)} = \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(i)}} = -(-1)^r \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} (y \pm \sqrt{y^2 - 1}). \quad (8.81)$$

В этой формуле, как обычно, верхний знак в круглых скобках справа относится к первому полю, нижний — ко второму. Использование величин $c^{(i)}$ для коэффициентов отражения вакуумных волн облегчается в случае Брэгга тем обстоятельством, что, как было показано в гл. 7, в областях, примыкающих к левой стороне максимума и к области полного отражения, остается лишь первое поле, в то время как в области, примыкающей к правой стороне максимума ($y > +1$), остается лишь второе поле.

Таким образом, в соответствии с пограничными условиями (7.18), вполне правомерными являются равенства

$$c^{(i)} = \frac{D_h^{(i)}}{D_0^{(i)}} = \frac{D_h^{(a)}}{D_0^{(a)}}, \quad i = 1, 2, \quad (8.82)$$

и коэффициент отражения в общем случае поглощающего кристалла вместо (7.20) и (7.21) выражается простой формулой

$$R = |c^{(i)}|^2 \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}, \quad (8.83)$$

где $c^{(i)}$ уже являются комплексными величинами.

Перейдем теперь к выводу выражения для R в виде явной функции от $c_r^{(i)}$ и $c_i^{(i)}$, а следовательно, и от y_r и y_i . Вывод соответствующих выражений будет более строгим, чем в гл. 4 для формул Лауэ (4.96) — (4.98). Значения y_r и y_i вычисляются следующим образом:

$$y = \frac{\beta}{2|C| \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}} = y_r + iy_i. \quad (8.84)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} &= \sqrt{\Phi_h + i\Psi_h} \approx \sqrt{\Phi_h} + i\Psi_h/2\sqrt{\Phi_h}, \\ \frac{1}{\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} &= \frac{1}{\sqrt{\Phi_h + i\Psi_h/2}\sqrt{\Phi_h}} = \frac{2\sqrt{\Phi_h}}{2\Phi_h + i\Psi_h} \approx \\ &\approx \frac{2\sqrt{\Phi_h}(2\Phi_h - i\Psi_h)}{4\Phi_h^2} = \frac{1}{\sqrt{\Phi_h}} \left(1 - \frac{i}{2} \frac{\Psi_h}{\Phi_h}\right). \end{aligned} \quad (8.85)$$

Отметим, что (8.85) выведено при условии

$$\Psi_h \ll \Phi_h. \quad (8.86)$$

Возвращаемся к выражению (8.84)

$$y = \frac{\beta_r + i\beta_i}{2|C|\sqrt{\Phi_h} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}} \left(1 - \frac{i}{2} \frac{\Psi_h}{\Phi_h}\right) = \frac{\beta_r + \frac{1}{2}\beta_i \frac{\Psi_h}{\Phi_h}}{2|C|\sqrt{\Phi_h} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}} +$$

$$+ i \left[\frac{\beta_i}{2|C|\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \sqrt{\Phi_h}} - \frac{\beta_r \frac{\Psi_h}{\Phi_h}}{4|C|\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \sqrt{\Phi_h}} \right]. \quad (8.87)$$

Отсюда

$$y_r = - \left(y_z + g \frac{\Psi_h}{2\Phi_h} \right), \quad y_i = \left(\frac{\Psi_h}{2\Phi_h} y_z - g \right), \quad (8.88)$$

$$y_z = - \frac{\beta_r}{2|C|\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \sqrt{\Phi_h}}, \quad g = - \frac{\beta_i}{2|C|\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \sqrt{\Phi_h}}. \quad (8.89)$$

Формула (8.81) принимает вид

$$c^{(i)} = - (-1)^r \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} [y_r + iy_i \pm \sqrt{(y_r + iy_i)^2 - 1}]. \quad (8.90)$$

Для выделения действительной и мнимой частей в корне, входящем в правую часть выражения (8.90), применяем правило извлечения корня из комплексной величины. Обозначая этот корень через W , запишем

$$W = W_r + iW_i, \quad |c^{(i)}|^2 = \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| [(y_r \pm W_r)^2 + (y_i \pm W_i)^2], \quad (8.91)$$

$$W_r = \sqrt{\frac{1}{2}[E' - 1 + (y_r^2 - y_i^2)]}, \quad W_i = \sqrt{\frac{1}{2}[E' + 1 - (y_r^2 - y_i^2)]},$$

$$E' = \sqrt{1 + (y_r^2 + y_i^2)^2 - 2(y_r^2 - y_i^2)}. \quad (8.92)$$

Умножая и деля W_r на $E + 1$ и W_i на $E - 1$, где

$$E = E' + y_r^2 + y_i^2, \quad (8.93)$$

получим

$$W_r = |y_r| \sqrt{\frac{E-1}{E+1}}, \quad W_i = |y_i| \sqrt{\frac{E+1}{E-1}},$$

$$|c^{(i)}|^2 = \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \left[|y_r|^2 \left(1 \pm \sqrt{\frac{E-1}{E+1}} \right)^2 + \right. \\ \left. + |y_i|^2 \left(1 \pm \sqrt{\frac{E+1}{E-1}} \right)^2 \right]. \quad (8.94)$$

Путем несложных преобразований выражение для $|c^{(i)}|^2$ принимает простейшую форму, и после подстановки в (8.83) получаем следующую формулу для коэффициента отражения от поглощающего кристалла:

$$R = (E - \sqrt{E^2 - 1}) \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, \quad (8.95)$$

причем из двух знаков перед корнями в (8.94) справа выбираем знак минус, который единственно обеспечивает в (8.95) условие $R < 1$.

Входящие в выражение (8.93) переменные y_r и y_i могут быть преобразованы из (8.88), если учесть, что

$$\frac{\Psi_h}{2\Phi_h} = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{hr}} \right| \cos v_h = \kappa \cos v_h \quad (8.96a)$$

(κ^2 отбрасывается). В таком случае

$$y_r = -(y_z + g\kappa \cos v_h), \quad y_i = (y\kappa \cos v_h - g). \quad (8.96b)$$

При симметричном отражении от centrosимметричного кристалла эти переменные принимают следующие частные значения:

$$y_{rs} = -\left(y_{zs} + \frac{\kappa^2}{C\varepsilon} \right), \quad y_{is} = y_{zs}\kappa - \frac{\kappa}{C\varepsilon},$$

$$\varepsilon = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} \right|; \quad (8.97a)$$

$$y_{rs}^2 + y_{is}^2 = \left(y_{zs}^2 + \frac{\kappa^2}{C^2\varepsilon^2} \right) (1 + \kappa^2),$$

$$y_{rs}^2 - y_{is}^2 = \left(y_{zs}^2 - \frac{\kappa^2}{C^2\varepsilon^2} \right) (1 + \kappa^2) + 4y_{zs} \frac{\kappa^2}{C^2\varepsilon^2}. \quad (8.97b)$$

Заметим, что выражение типа (8.95) можно получить также из формулы (8.70), если использовать тождество

$$\operatorname{ch}(2x_r + 2v_r) = \exp(2v_r)\operatorname{ch}(2x_r) - [\operatorname{ch}(2x_r) - \operatorname{sh}(2x_r)] \operatorname{sh} 2v_r,$$

разделить числитель и знаменатель в (8.70) на $\operatorname{ch}(2x_r)$ и далее перейти к асимптотической форме, отвечающей толстому кристаллу. При этом x_r [см. (8.59)] растет беспредельно, а с ним и

$\text{ch}(2x_r)$; $\text{th}(2x_r)$ стремится к единице. В результате получается

$$R_\infty = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| [\text{ch}(2v_r) - \sqrt{\text{ch}^2(2v_r) - 1}], \quad (8.98)$$

где $\text{ch}(2v_r)$, как можно показать, имеет значение, близкое к E .

Формула (8.71) для коэффициента прохождения легко преобразуется с помощью приведенных формул

$$T_B = \frac{E + 1 - [4y_r^2/(E + 1)]}{\frac{1}{2} R_{\infty B}^{-1} \exp(2x_r) + \frac{1}{2} R_{\infty B} \exp(2x_r) - \left[\frac{4y_r^2}{E-1} - 1 \right] \cos 2x_i - \frac{4y_r y_i}{\sqrt{E^2-1}} \sin 2x_i}. \quad (8.99)$$

Впрочем при вычислении T было показано, что двумя последними членами в знаменателе, дающими осцилляцию T с возрастанием толщины кристалла, можно пренебречь ввиду их малых значений.

Наконец, следует вывести используемые в литературе значения коэффициента отражения для толстого поглощающего кристалла в нескольких приближениях, исходя из формулы Захариасена (8.28). Эту формулу следует рассматривать как общее выражение, применимое к кристаллам любой толщины. В случае толстых кристаллов в этой формуле следует принять $aw \gg 1$ [см. (8.23)]. Следовательно, можно отбросить все члены, не содержащие aw , и заменить $\text{sh}^2 aw$ на $1/4 \exp(2aw)$ и $\text{sh}(2aw)$ на $1/2 \exp(2aw)$. После сокращения на $\exp(2aw)$ получаем

$$R_\infty = \frac{(\gamma_0/\gamma_h) C^2 |\chi_h|^2}{|q + z^2| + |z|^2 + [(|q + z^2| + |z|^2)^2 - |q|^2]^{1/2}} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.100)$$

Рассмотрим далее последовательно применение (8.100) к трем важнейшим частным случаям при асимметричном отражении.

I. *Центросимметричный кристалл, члены с κ^2 отбрасываются* [15]. Введенные ранее переменные получают следующие значения [κ определяется в (7.67)]:

$$q = -C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \chi_h^2 = -C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} (\chi_{hr} + i\chi_{hi})^2 = \alpha(1 + i2\kappa), \quad (8.101a)$$

$$|\chi_h| = \sqrt{|\chi_{hr}|^2 + |\chi_{hi}|^2} = |\chi_{hr}| \sqrt{1 + \kappa^2}, \quad (8.101b)$$

$$z = -\frac{1}{2} \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} (\beta_r + i\beta_i) = C \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} |\chi_{hr}| (yz + ig) = \sqrt{\alpha} (yz + ig),$$

$$\alpha = C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} |\chi_{hr}|^2, \quad (8.102a)$$

$$|z|^2 = \alpha(y_z^2 + g^2), \quad |q|^2 = \alpha(1 + 4\kappa^2),$$

$$\begin{aligned} |q + z^2| &= \alpha | - (1 + i2\kappa) + (yz + ig)^2 | = \\ &= \alpha \sqrt{(y_z^2 - g^2 - 1)^2 + 4(y_z g - \kappa)^2}, \end{aligned} \quad (8.102b)$$

yz и g заданы в (8.89).

Введем дополнительную переменную

$$L_Z = \{|q + z^2| + |z|^2\} = \alpha \{ |\sqrt{(y_Z^2 - g^2 - 1)^2 + 4(y_Z g - \kappa)^2} + (y_Z^2 + g^2) \}. \quad (8.103)$$

Подставляя полученные выражения в (8.100), умножая затем числитель и знаменатель в правой части (8.100) на $L_Z - (L_Z - 1)^{1/2}$ и отбрасывая в знаменателе член $4\kappa^2$, получаем

$$R_{\infty Z}^U = [L_Z - \sqrt{L_Z^2 - (1 + 4\kappa^2)}] \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.104)$$

Эта формула, за исключением последнего множителя, приведена Захариасеном в его монографии.

II. *Центросимметричный кристалл; члены с κ^2 не отбрасываются* [99]. Преобразуем сначала выражение (8.100) следующим образом:

$$R = \frac{|q + z^2| + |z|^2 - \sqrt{\{|q + z^2| + |z|^2\}^2 - |q|^2}}{|q|} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|. \quad (8.105)$$

Здесь удобно ввести переменную

$$L_H = \frac{(|q + z^2| + |z|^2)}{|q|}. \quad (8.106)$$

Формула для коэффициента отражения (8.105) принимает вид

$$R_{\infty H}^U = [L_H - \sqrt{L_H^2 - 1}] \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \quad (8.107)$$

и была дана в работе Хирша и Рамачандрана [99].

Используемые в (8.105) и (8.106) переменные несколько отличаются от (8.100)–(8.103):

$$|q| = C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} |(\chi_{hr} + i\chi_{hi})|^2 = \alpha(1 + \kappa^2), \quad (8.108)$$

$$\begin{aligned} |q + z^2| &= \left| -C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} (\chi_{hr} + i\chi_{hi})^2 + \alpha(y_Z^2 + 2iy_Z g - g^2) \right| = \\ &= \alpha \left| \sqrt{(y_r^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^2 + 4(y_Z g - \kappa)^2} \right|. \end{aligned} \quad (8.109)$$

Откуда

$$L_H = \frac{|\sqrt{(y_r^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^2 + 4(y_Z g - \kappa)^2} + (y^2 + g^2)|}{1 + \kappa^2}. \quad (8.110)$$

III. *Кристалл без центра симметрии; члены, содержащие κ^2 не отбрасываются* [100]. В отличие от (4.53) запишем комплексные значения $|\chi_{hr}|$ и $|\chi_{hi}|$ следующим образом:

$$\chi_{hr} = \chi'_{hr} + i\chi''_{hr}, \quad \chi_{hi} = \chi'_{hi} + i\chi''_{hi}, \quad (8.111a)$$

где согласно (4.48)

$$\begin{aligned}\chi'_{hi} &= -r \sum_j \mu_{aj}^{(h)} \cos \varphi_j, & \chi''_{hi} &= -r \sum_j \mu_{aj}^{(h)} \sin \varphi_j, \\ \chi'_{hr} &= -\Gamma \sum_j f_{rj} \cos \varphi_j, & \chi''_{hr} &= -\Gamma \sum_j f_{rj} \sin \varphi_j.\end{aligned}\quad (8.111б)$$

В таком случае

$$\begin{aligned}\chi_h &= \chi'_{hr} - \chi''_{hi} + i(\chi''_{hr} + \chi'_{hi}), & |\chi_h|^2 &= |\chi_{hr}|^2 (1 + \kappa^2 + 2s), \\ s &= \frac{\chi''_{hr} \chi'_{hi} - \chi'_{hr} \chi''_{hi}}{|\chi_{hr}|^2},\end{aligned}\quad (8.111в)$$

$$\begin{aligned}|\chi_{\bar{h}}|^2 &= |\chi_{hr}|^2 (1 + \kappa^2 - 2s), \\ \chi_h \chi_{\bar{h}} &= |\chi_{hr}|^2 - |\chi_{hi}|^2 + i2(\chi'_{hr} \chi'_{hi} + \chi''_{hr} \chi''_{hi}).\end{aligned}\quad (8.112а)$$

Если ввести переменную

$$p = |\chi_{hr}|^{-2} (\chi'_{hr} \chi'_{hi} + \chi''_{hr} \chi''_{hi}), \quad (8.112б)$$

то можно написать

$$|\chi_h \chi_{\bar{h}}| = |\chi_{hr}|^2 [(1 - \kappa^2)^2 + 4p^2]^{1/2}. \quad (8.112в)$$

Следует помнить, что мы принимаем $\kappa = |\chi_{hi}|/|\chi_{hr}|$, т. е. величиной существенно положительной. Что касается соотношения полных величин χ_{hi}/χ_{hr} , то оно определяет величину p согласно (8.112б).

Очевидно, для centrosимметричного кристалла $s = 0$ и $p = \kappa$. Для q берем более общее значение

$$q = -C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \chi_h \chi_{\bar{h}} = -\alpha [(1 - \kappa^2) + i2p], \quad (8.113а)$$

в то время как в числителе (8.100) сохраняется величина

$$C^2 \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} |\chi_h|^2 = \alpha [1 + \kappa^2 + 2s]. \quad (8.113б)$$

Вместе с тем в выражениях (8.106) и (8.109) мы сохраняем прежнее значение $|q|$ (8.108).

Итак, коэффициент отражения выражается следующим образом:

$$R_{\infty C}^y = \frac{1 + \kappa^2 + 2s}{\sqrt{(1 - \kappa^2)^2 + 4p^2}} [L_C - \sqrt{L_C^2 - 1}] \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|, \quad (8.114)$$

где

$$L_C = \frac{\sqrt{(y_z^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^2 + 4(y_z g - p)^2 + y_z^2 + g^2}}{[(1 - \kappa^2)^2 + 4p^2]^{1/2}}. \quad (8.115)$$

Выражения (8.114) и (8.115) выведены в работе Кола и Стемпла [100].

Максимумы симметричных отражений 220 и 333 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge, вычисленные по формулам (8.95) и (8.107), (8.110) (рис. 61), практически совпадают. Обращаем внимание читателей на интересное различие формул (8.70), (8.72), (8.74), с одной стороны, и формул (8.95), (8.104), (8.107), (8.114), с другой. В первых в явном виде присутствуют функции толщины (глубины) кристалла t , а именно, x_r и x_i [см. (8.59) и (8.60)]. Во второй группе формул мы имеем дело с R_∞ , т. е. с предельным переходом к бесконечно толстому поглощающему кристаллу.

Надо полагать, что тщательный анализ и сопоставление этих двух типов выражений может вскрыть различие (например, в области толщин) подобно тому, как это было сделано для решений Дарвина и Эвальда для прозрачного или почти прозрачного кристалла. Сделаем несколько замечаний, касающихся формы (и вы-

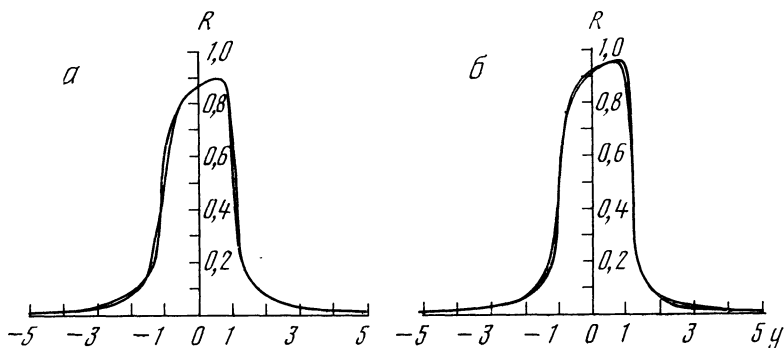


Рис. 61. Сопоставление кривых симметричного отражения $\text{CuK}\alpha$ -излучения для Ge, вычисленных по формулам (8.95а), (8.107) и (8.110)

а — отражение 333; б — отражение 220

соты) максимума отражения по Брэггу от поглощающего кристалла. В случае тонких поглощающих кристаллов, как мы уже отмечали в связи с анализом формулы (8.72), побочные максимумы маятникового решения должны наблюдаться, причем следует ожидать асимметрии относительно средней точки максимума высоты побочных пиков.

С возрастанием толщины кристалла, ввиду затухания волнового поля, проникающего в кристалл в областях I и III максимума, вследствие поглощения максимум приобретает характерную «дарвиновскую» форму с плоской вершиной и плавно спадающими боковыми частями (см. рис. 50).

Рассмотрение формы максимума по Брэггу в поглощающем кристалле сводится к анализу деформации дарвиновской кривой

в зависимости от параметров $\kappa = |\chi_{hi}| / |\chi_{hr}|$ и

$$g = - \frac{\chi_{oi} \left[1 + \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right]}{2C |\chi_{hr}| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}}$$

для centrosимметричного кристалла и в зависимости от κ , g , p , s [формула (8.107) и (8.110)] для кристалла без центра симметрии [89, 101, 102].

На рис. 62 приведены некоторые типичные формы максимумов при различных значениях κ и g , построенные в соответствии с расчетами по формулам (8.102) и (8.105). Заметим, что формы максимума при $\kappa_h > 0$ и $\kappa_h < 0$ для данного значения $\kappa_h = \chi_{hi}/\chi_{hr}$ являются зеркально симметричными относительно оси ординат. Как можно видеть из приведенных кривых, возрастание κ приводит к усилению асимметрии максимума, в то время как увеличение g — к уменьшению площади максимума или интегрального отражения. При значениях $\kappa = 0,1 \div 0,2$ и $g < -0,3$ один (левый) край асимметричного максимума сохраняется неизменным по отношению к дарвиновской кривой. Эта особенность

кривых отражения в случае поглощающего кристалла может быть объяснена на основе анализа волнового поля в кристалле. Ранее было показано, что относительное расположение плоскостей узлов и пучностей волнового поля, с одной стороны, и атомных плоскостей, с другой, различно в областях I и III, плавно меняется от одного до другого края в области полного отражения. Если допустить, что в области I при $u_r < -1$ атомные плоскости совпадают с узловыми плоскостями волнового поля, то в этой «левой» стороне максимум останется неизменным, и «левый» край области II будет отвечать $R = 1$. Соответственно с перемещением узловых плоскостей при возрастании u эффект поглощения усиливается и остальная часть максимума обнаруживает характерный спад коэффициентов отражения. Рис. 63 может служить иллюстра-

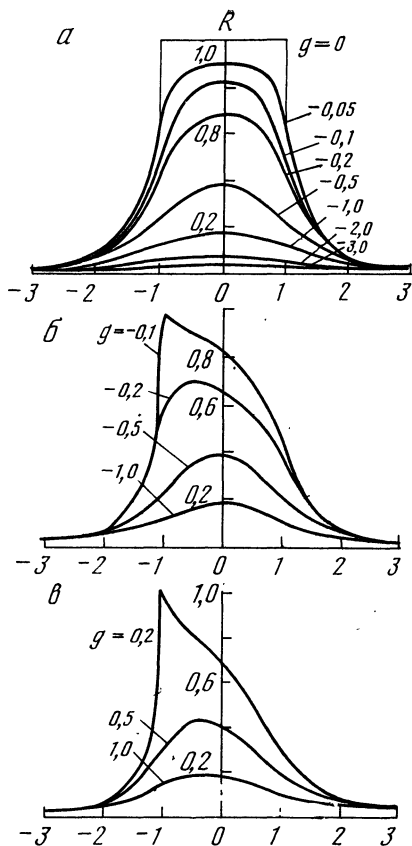


Рис. 62. Кривые отражения от поглощающего кристалла, отвечающие различным значениям параметров g и κ
 а — $\kappa = 0$; б — $\kappa = 0,1$; в — $\kappa = 0,2$,
 $g = -0,2$

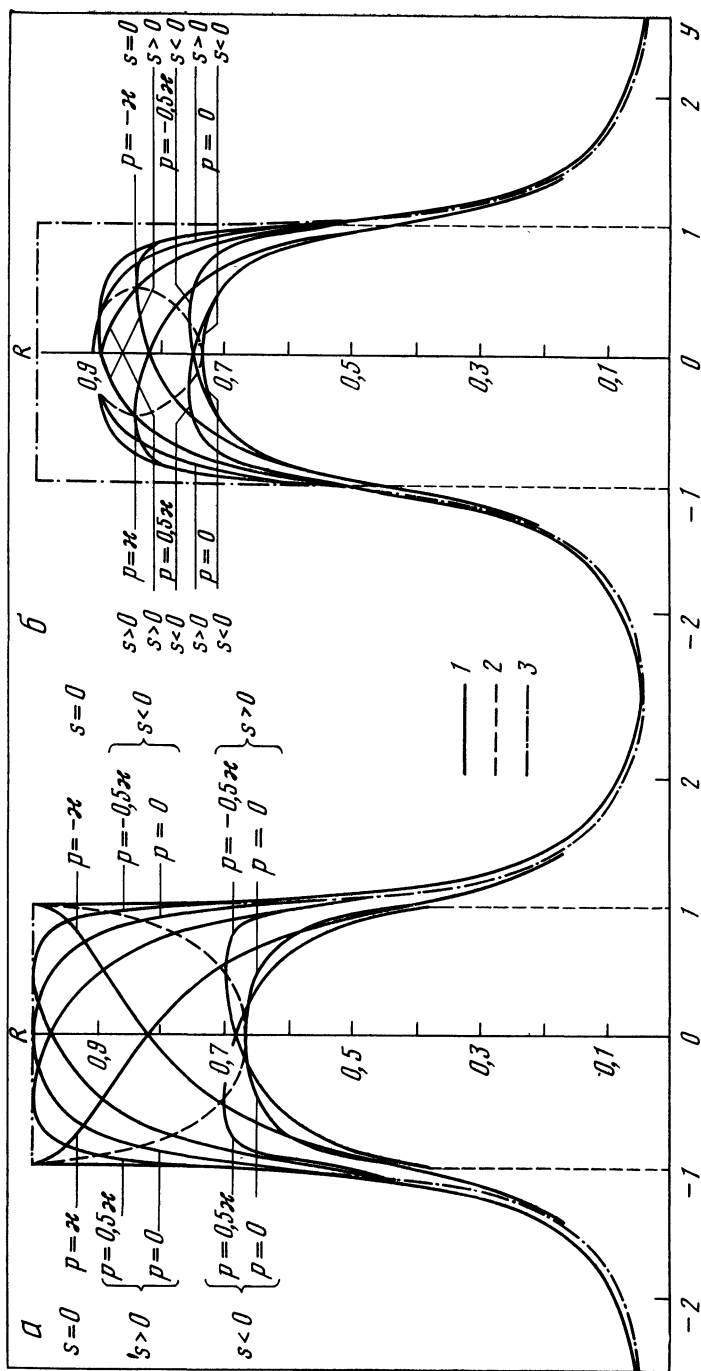


Рис. 63. Кривые отражения от поглощающего кристалла без центра симметрии

$a - x = -g = 0,1$; $b - x = -g/2 = 0,05$; 1 — кривые R ; 2 — предельные значения R_{\max} ; 3 — кривая Дарвина (для прозрачного кристалла)

цией изменений, которые претерпевает форма максимума при отражении от кристалла без центра симметрии [параметры p и z заданы уравнениями (8.112) и (8.111)].

Многие детали подобных изменений кривых отражения можно истолковать с помощью модели кристалла, в котором эффекты рассеяния и соответственно экстинкции, с одной стороны, и эффекты поглощения, с другой, связываются с двумя различными рассеивающими центрами, определенным образом распределенными в структуре [102].

8.4. Интегральное отражение от поглощающего кристалла в случае Брэгга

Несмотря на то, что динамическая теория в применении к отражению по Брэггу разрабатывается уже почти 60 лет, аналитическое выражение для интегрального отражения в наиболее сложном случае толстого поглощающего кристалла выведено совсем недавно в работе Афанасьева и Перстнева [103].

Будем исходить из формулы для коэффициента отражения Захариасена (8.104), которая с помощью новой переменной L_A [см. также (8.17)]

$$L_A = \frac{|q + z^2| + |z|^2}{|q|^2} = \frac{\left| \gamma_0 \alpha - \frac{1}{2} \chi_0 (\gamma_0 + |\gamma_h|) \right|^2 \left[\gamma_0 \alpha - \frac{1}{2} \chi_0 (\gamma_0 + |\gamma_h|) \right]^2 - C \gamma_0 |\gamma_h| \chi_h \chi_{\bar{h}}}{C^2 \gamma_0 |\gamma_h| |\chi_h \chi_{\bar{h}}|}, \quad (8.116)$$

приводится к виду

$$R_i^\eta = \frac{1}{\sin 2\theta} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \int_{-\infty}^{\infty} (L_A - \sqrt{L_A^2 - 1}) d\alpha, \quad (8.117)$$

$$\alpha = 2\eta \sin 2\theta.$$

Далее вводятся следующие вспомогательные переменные:

$$s = \frac{\gamma_0 + |\gamma_h|}{2\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}} \frac{|\chi_{0i}|}{|C| \sqrt{|\chi_h \chi_{\bar{h}}|}}, \quad q = \frac{2\sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|}}{\gamma_0 + |\gamma_h|} \frac{|C| \operatorname{Im} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{|\chi_{0i}|},$$

$$k = \frac{1}{1 + s^2(1 - q^2)}, \quad L_0 = 1 + 2s^2(1 - q^2). \quad (8.118)$$

Перейдем от переменной интегрирования α к L согласно соотношению

$$z^2 = 1 + \frac{2s^2(1 - q^2)}{(1 - L)}. \quad (8.119a)$$

Величина интегрального отражения выражается следующим

образом:

$$R_i = \frac{8}{3 \sin 2\Phi} C |\chi_{hr}| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \sqrt{\left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right|} P(s, q), \quad (8.119б)$$

где подлежащие вычислению интегралы имеют вид

$$P(s, q) = \frac{3 \sqrt{1-k^2}}{2k^3(1-q^2)} (I_1 + I_2);$$

$$I_1 = \int_0^1 [2 - k - k^2 z^2 - 2 \sqrt{(1-k^2)(1-k^2 z^2)}] \frac{q^2 dz}{(1-q^2 z^2) \sqrt{1-z^2}}, \quad (8.120)$$

$$I_2 = \int_0^1 [2 - k^2 - k^2 z^2 - 2 \sqrt{(1-k^2)(1-k^2 z^2)}] \left[\frac{1-q^2}{(1-z^2)^{3/2}} - \frac{1}{(1-z^2)^{3/2}} \right] dz. \quad (8.121)$$

I_1 может быть непосредственно выражен через полные эллиптические интегралы первого рода K и третьего рода Π [104]:

$$I_1 = \frac{\pi}{2} k^2 + \frac{\pi}{2 \sqrt{1-q^2}} [2q^2 - k^2(1+q^2)] + 2 \sqrt{1-k^2} \times \\ \times [(k^2 - q^2) \Pi(-q^2/k) - k^2 K(k)]. \quad (8.122)$$

I_2 приводится к стандартным эллиптическим интегралам после интегрирования по частям:

$$I_2 = \int_0^1 [2 - k^2 - k^2 z^2 + 2 \sqrt{(1-k^2)(1-k^2 z^2)}] \times \\ \times d \left\{ \frac{z}{3} \left[\frac{1-q^2}{(1-z^2)^{3/2}} - \frac{1+2q^2}{\sqrt{1-z^2}} \right] \right\} = \frac{2}{3} k^2 [(1-q^2) I_3 + I_4], \quad (8.123)$$

где интегралы I_3 и I_4 приводятся к эллиптическим интегралам

$$I_3 = \frac{E(k)}{\sqrt{1-k^2}} - \sqrt{1-k^2} K(k),$$

$$I_4 = (1-q^2) \left[\sqrt{1-k^2} K(k) - \frac{\pi}{2} \right] + \\ + (1+2q^2) + \left\{ \frac{\sqrt{1-k^2}}{k^2} [K(k) - E(k)] - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (8.124)$$

Окончательно функция $P(s, q)$ принимает следующее значение:

$$P(s, q) = (1-s^2-2q^2 s^2) \frac{E(k)}{k} - \frac{3\pi}{4} s(1-2q^2 s^2) + \\ + ks^2(1-q^2) [3(1-q^2 s^2) \Pi(-q^2, k) - \\ - (2-s^2-2q^2 s^2) K(k)]. \quad (8.125)$$

Существенной чертой расчета, выполненного в этой работе является общий характер комплексных параметров χ_0 и $\chi_h, \chi_{\bar{h}}$, которые входят в выражение для переменной интегрирования z (8.119) посредством величин q, s и L . Здесь не накладывается каких-либо ограничений, связанных с соотношением величин $|\chi_{hi}|$ и $|\chi_{hr}|$, как и величин $|\chi_{0i}|$ и $|\chi_{0r}|$, а также с наличием или отсутствием центра симметрии в рассеивающем кристалле. Для произведения $\chi_h \chi_{\bar{h}}$ можно использовать как общие выражения (8.114), так и более специальное, например, отвечающее центросимметричным кристаллам. В этом более простом случае основные параметры s и q принимают следующие значения:

$$s_s = - \frac{|\chi_{0i}| [1 + (|\gamma_h|/\gamma_0)]}{2C (|\gamma_h|/\gamma_0)^{1/2} |\chi_h|} = g \sqrt{1 + \kappa^2},$$

$$q_s \approx \frac{2C (|\gamma_h|/\gamma_0)^{1/2}}{[1 + (|\gamma_h|/\gamma_0)]} \varepsilon = \frac{\kappa}{g}, \quad \kappa \approx s_s q_s, \quad (8.126)$$

где g определяется из (8.89), $\kappa = |\chi_{hi}| / |\chi_{hr}|$ и $\varepsilon = |\chi_{hi}| / |\chi_{0i}|$.

Интегральное отражение в общем случае может быть протабулировано с помощью формул (8.119) и (8.125) и таблиц эллиптических интегралов. Однако так как в настоящее время наибольший интерес представляют случаи отражения при (относительно) малых $|\chi_{0i}|$ и $|\chi_{hi}|$, а следовательно, $s \approx g \ll 1, k \approx 1$, причем $q \leq 1$, то функция $P(s, q)$ может быть упрощена. Используя выражения для полных эллиптических интегралов первого и второго рода и разложение

$$(1 - q^2) \Pi(-q^2, k) \approx \frac{1}{2} \ln \left(\frac{8}{1+q} \frac{1-q}{1+k} \right) + \frac{1-q}{4} \ln \frac{1+q}{1-q},$$

$$(1 - k \ll 1), \quad (8.127)$$

можно получить

$$P(s, q) \approx 1 - \frac{3\pi}{4} s (1 - 2q^2 s^2) + 3s^2 \left[\frac{1+q^2}{2} \ln \frac{4}{s(1+q)} - \frac{1+3q^2}{4} + \frac{(1-q)^2}{4} \ln \frac{1+q}{1-q} \right]. \quad (8.128)$$

Это выражение дает для $s \leq 0,2$ результат, отличающийся от точного не более чем на $\sim 1\%$. Наконец, для $s \leq 0,05$ главный член в (8.128) составляет

$$P(s, q) \approx 1 - \frac{3\pi}{4} s \quad (8.129)$$

и интегральное отражение оказывается равным

$$R_i^n = \frac{8}{3} \frac{C |\chi_{hr}|}{\sin 2\theta} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| (1 - 2,355 |g|), \quad (8.130)$$

что почти точно совпадает с эмпирической формулой Хирша и Рамачандрана, предложенной ими для случая $g < 0,1$, а также близко к формуле Захариасена $R_i \approx \frac{8}{3} (1 - 2|g|)$. Наконец, если принять в выражении для s (8.118) $\chi_{0i} = 0$, то (8.130) дает формулу Дарвина (8.53).

Таблица 9. Функция $P(s, q)$ для различных s и q

q	s							
	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,60
1,0	0,716	0,672	0,633	0,599	0,568	0,541	0,516	0,473
0,9	0,708	0,661	0,620	0,584	0,552	0,523	0,496	0,451
0,7	0,696	0,646	0,602	0,564	0,529	0,499	0,471	0,423
0,5	0,687	0,636	0,591	0,551	0,515	0,484	0,455	0,406
0,3	0,682	0,630	0,583	0,543	0,507	0,475	0,446	0,397
0,1	0,680	0,627	0,580	0,539	0,503	0,470	0,442	0,392

q	s							
	0,70	0,80	0,90	1,00	1,50	2,00	3,00	5,00
1,0								
0,9	0,412							
0,7	0,383	0,349						
0,5	0,366	0,332	0,304	0,280				
0,3	0,356	0,323	0,295	0,271	0,190			
0,1	0,352	0,318	0,290	0,266	0,187	0,143	0,097	0,059

В излагаемой работе [103] протабулированы значения интегрального отражения при широких интервалах изменения параметров q от 0,1 до 1 и s от 0,2 до 5 (табл. 9). Де-Марко и Вейсс [53], вычислили значения R_i^y машинным интегрированием формулы (8.107) для широкого интервала значений параметров — g от 0 до 3 и κ от 0 и до 1. Большое число вычисленных значений (1291), при незначительных интервалах величин этих параметров, снижает ошибку при использовании интерполяции до $\sim 0,1\%$ (см. приложение 2).

Пользуясь этой таблицей, можно исходить из значений g и κ в любом из приближений, отвечающих данному конкретному примеру и требуемой точности расчета. Вместе с тем при рассмотрении отражений от кристалла без центра симметрии, в соответствии с отношениями (8.106) — (8.111), использование лишь двух указанных параметров, вообще говоря, недостаточно для определения величины R_i^y , хотя в отдельных случаях это можно сделать с

удовлетворительной точностью. Приложение 2 воспроизводит результат расчета Де-Марко и Вейсса. Малая таблица соответствует определенному интервалу значений $g = \kappa$.

В отличие от данных приложения 2 сравнительно простое выражение (8.128) позволяет подсчитать величину интегрального отражения для любого общего случая кристалла без центра симметрии в широком диапазоне изменений значений параметров $|\chi_{oi}|$, $|\chi_{hi}|$ и $|\chi_{hr}|$, а также провести качественный анализ ожидаемого поведения величины R_i .

Частная задача, связанная с вычислениями интегрального отражения и представляющая принципиальный интерес, была решена в работе Вейсса [105]. Речь идет о сопоставлении формул (8.50) (решение Дарвина) и (8.49) (решение Эвальда) для коэффициента отражения в случае толстого «непоглощающего» кристалла.

Будем исходить из наиболее общего выражения Захариасена (8.28). Приведем в явном виде значения аргументов av и aw . На основании (8.22) и (8.104) эти величины можно вычислить наиболее точно, используя правило извлечения корня из комплексного числа:

$$av = A(q + z^2)_r^{1/2}, \quad aw = A(q + z^2)_i^{1/2}, \quad (8.131)$$

$$(q + z^2)^{1/2} = [(y_r^2 - g^2 - 1 - \kappa^2) + i2(yzg - \kappa)]^{1/2}, \quad (8.132)$$

$$av = \frac{A}{\sqrt{2}} \{ [(y_r^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^2 + 4(yzg - \kappa)^2]^{1/2} + (y_r^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^{1/2} \}, \quad (8.133)$$

$$aw = \frac{A}{\sqrt{2}} \{ [(y_r^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^2 + 4(yzg - \kappa)^2]^{1/2} - (y_r^2 - g^2 - 1 + \kappa^2)^{1/2} \}. \quad (8.134)$$

Приближение Эвальда можно сформулировать условием: $g = 0$ и приближение Дарвина — $aw \gg 1$. На машине вычислялась величина

$R_i^y = \int_{-\infty}^{\infty} R dy$, причем R бралось по формуле (8.28). R_i^y вы-

числялось в функции от толщины $t = 2gA/\mu$ [см. (8.133) и (8.134)]. Для $g(x) = \kappa$ принималось значение 0,01 (рис. 64). Как показывает кривая R_i^y , при очень малых толщинах ($\mu t < 0,001$) мы имеем кинематическую область, при $\mu t \approx 0,03$ мы приближаемся к решению Эвальда. В максимуме $R_i^y = \pi$, что точно отвечает приближению Эвальда. С возрастанием толщины кристалла кривая асимптотически приближается к значению $R_i^y = 8/3$, т. е. к решению Дарвина. Эта величина интегрального отражения достигается при $\mu t > 8$, т. е. действительно соответствует толстому кристаллу при исчезающе малом поглощении.

Численная оценка полученного результата применительно к конкретному эксперименту может быть проиллюстрирована на примере симметричного отражения 220 излучения Ag $K\alpha$ от кристалла Si. В этом случае

$$\mu = 11,2 \text{ см}^{-1}, \quad |\chi_{hr}| = 1,266 \cdot 10^{-6},$$

$$|\chi_{oi}| = 1 \cdot 10^{-8}, \quad |\chi_{hi}| \approx 0,6 \cdot 10^{-8},$$

$$g \approx 0,008, \quad \kappa \approx 0,005.$$

Максимум на кривой рис. 64 будет близок к толщине пластинки кремния $t = 0,03 \text{ мм}$, и значение $\mu t = 8$ соответствует толщине $t = 7,5 \text{ мм}$.

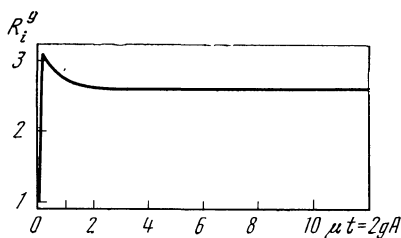


Рис. 64. Изменение величины интегрального отражения от кристалла с исчезающе малым поглощением с возрастанием толщины [решения Эвальда и Дарвина ($g = 0,01$)]

Сделаем несколько общих замечаний, касающихся интегрального отражения в случае Брэгга. Как следует из изложенного материала, величина интегрального отражения определяется прежде всего параметрами g и κ , а также отношением $|\gamma_h|/\gamma_0$.

Обращает на себя внимание слабая зависимость R_i от κ . Рассматривая табл. 9 значений функции $P(s, q)$, замечаем, что для данного значения $s \approx g$ изменение $\kappa \approx gs$ в 10 раз приводит к уменьшению функции P лишь на $\sim 5\%$ для малых s и до $\sim 15-16\%$ для $s = 0,60$. Из приложения 2 следует, что при $g = 0,30$ изменение κ от 0 до 0,3 приводит к увеличению $R_i^y \sim$ на 11,5%. Более существенное изменение наблюдается при больших значениях g . Так, при $g = 2$ изменение κ от 0 до 0,9 влечет за собой возрастание R_i^y на 87%. Возрастание величины R_i^y с увеличением κ аналогично возрастанию интегрального отражения в случае Лауэ с увеличением величины $\epsilon = |\chi_{hi}|/|\chi_{oi}|$. Заметим, что параметр g в формулах (8.119) и (8.125) пропорционален при рассеянии от centrosимметричного кристалла величине ϵ . Во всяком случае, увеличение κ и $|\chi_{hi}|$ означает возрастание интерференционного «вклада» в поглощение или возрастание экстинкции

$$\sigma_e = \frac{2nKC|\chi_h|}{(\gamma_0|\gamma_h|)^{1/2}} = \frac{2\pi KC|\chi_{hr}|(1+\kappa^2)^{1/2}}{(\gamma_0|\gamma_h|)^{1/2}}. \quad (8.135)$$

Вместе с тем следует отметить несравненно меньшую чувствительность интегрального отражения к изменению параметров κ или

е в случае Брэгга по сравнению со случаем Лауэ. В соответствующих формулах для случая Лауэ, например (4.165), величина ϵ входит в показатель множителя поглощения и для сильных отражений возрастание или уменьшение $|\chi_{hi}|$ меняет величину R_i на несколько порядков.

Несравненно большее влияние на R_i в случае Брэгга имеет параметр g . Можно показать, что величина g , согласно (8.89), соответствует отношению величин поглощения и экстинкции. Действительно, рассматривая путь, проходимый падающей и дифрагированной волнами в кристалле, получим для некоторой эффективной глубины t_a

$$\sigma t_a = \mu (\gamma_0^{-1} + |\gamma_h|^{-1}) t_a. \quad (8.136)$$

С другой стороны, экстинкционное «поглощение» при некоторой глубине проникновения t_e и $y_r = 0$ составит

$$\sigma_e t_e = \frac{\pi K C t_e |\chi_{hr}|}{(\gamma_0 |\gamma_h|)^{1/2}}, \quad (8.137)$$

откуда

$$\frac{\sigma}{\sigma_e} = \frac{t_e}{t_a} = \frac{2\pi K |\chi_{oi}| [1 + (|\gamma_h|/\gamma_0)]}{\pi K C |\chi_{hr}| (|\gamma_h|/\gamma_0)^{1/2}} = -4g > 0. \quad (8.138)$$

Таким образом, возрастание величины истинного поглощения или уменьшения глубины проникновения, обязанное поглощению, приводит к увеличению параметра g . Большая величина экстинкции, т. е. малость глубины проникновения волнового поля в кристалл, связанного с интерференционными эффектами, при малом поглощении соответствует малой величине g . В связи с этим можно заметить, что на рис. 62, а изменение профиля кривой при малых значениях $|g|$ затрагивает лишь область полного отражения, что иллюстрирует связь этого параметра с эффектом экстинкции. Заметим также, что указанная трактовка параметра g позволяет сформулировать физические условия перехода от динамического рассеяния к рассеянию на мозаичном кристалле.

Интересной чертой функции $R_i^n \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}$ (при $g \ll 0,2$) является заметное изменение ее величины при переходе от симметричного к асимметричному отражению. Действительно, сравнивая соответствующие значения g

$$g_s = \left| \frac{\chi_{oi}}{\chi_{hr}} \right|, \quad g_{as} = \left| \frac{\chi_{oi}}{\chi_{hr}} \right| \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \right)^{1/2} + \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right)^{1/2} \right], \quad (8.139)$$

замечаем, что с отклонением от значения $|\gamma_h|/\gamma_0 = 1$ до 4—5 или до 0,25—0,20 величина g (одинаково в обоих случаях) увеличивается примерно в 2—2,2 раза. Это влечет за собой некоторое умень-

шение величины R_i^y . Однако так как

$$R_i^n = \frac{C |\chi_{hr}|}{\sin 2\theta} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0} \right)^{1/2} R_i^y,$$

то благодаря действию множителя $(|\gamma_h|/\gamma_0)^{1/2}$ интегральное отражение R_i^n в конечном счете либо еще больше уменьшается (если $|\gamma_h| < \gamma_0$), либо увеличивается (если $|\gamma_h| > \gamma_0$). Увеличение может достигать 70—80%, уменьшение всегда более значительно.

Сопоставляя величины интегрального отражения по Лауэ и по Брэггу, можно сделать следующие замечания.

Интегральное отражение по Брэггу в аналогичных случаях более или менее значительно превышает отражение по Лауэ, иногда на несколько порядков, что является весьма существенным при создании кристаллических монохроматоров.

С другой стороны, сложный характер зависимости R_i^y от таких параметров, как $|\chi_{hr}|$ и $|\chi_{hi}|$, делает мало эффективным не только их экспериментальное определение измерением интегральных отражений, но также и точную и однозначную проверку теории.

РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРОМЕТРЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ. НЕКОТОРЫЕ ИТОГИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ПРОВЕРКИ ТЕОРИИ

Динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей в идеальном кристалле, изложенная в предыдущих главах, основана на двух возможных физических моделях падающей вакуумной волны, которая возбуждает волновое поле в кристалле: большая часть изложения исходит из приближения падающей плоской волны, а меньшая — из приближения падающей сферической волны или эквивалентного допущения — ограничения фронта падающей волны узкой щелью.

Обращаясь к экспериментальным исследованиям динамического рассеяния, посвященным количественной проверке теории, следует прежде всего рассмотреть трудности, возникающие при попытке реализации приближения падающей плоской волны. Эти трудности связаны главным образом с использованием характеристического излучения рентгеновской трубки. Действительно, как известно, спектральная ширина этого излучения, так же как и угловая расходимость, значительно превосходит соответствующие параметры динамических максимумов, а тем более их тонкой структуры.

Прежде чем перейти к систематическому рассмотрению этой проблемы, заметим, что на современном уровне экспериментальных исследований динамического рассеяния достигнуты большие успехи в создании пучка, монохроматичность и ничтожная угловая ширина которого позволяет реализовать указанное приближение с высокой точностью.

Однако именно в связи с достигнутым уровнем совершенства спектральной аппаратуры на пути прецизионной количественной проверки теории возникают новые препятствия, связанные, во-первых, с трудностью получения монокристаллических образцов, лишенных самых незначительных нарушений, и, во-вторых, с недостаточной точностью значений некоторых фундаментальных параметров, вводимых в теоретические расчеты. Это относится, например, к величинам χ_{hr} , χ_{hi} , χ_{oi} , величине M в дебаевском температурном факторе, к параметрам, связанным с неупругим рассеянием на фононах, к длинам волн, используемым в данном эксперименте, и, возможно, к некоторым другим величинам (см., например, 4.1).

Очевидно, в экспериментальных исследованиях получают кривую отражения при покачивании исследуемого кристалла вблизи среднего значения ($y = 0$) при падении на него рентгеновского пучка после отражения от монохроматора. Кривая отражения является, следовательно, наложением, точнее, сверткой функции $R(\vartheta)$ для двух (или трех) кристаллов. Она не может быть непосредственно сопоставлена с теоретически вычисленным динамическим максимумом для одного исследуемого кристалла. (Заметим, что в этой главе через ϑ обозначается переменный скользящий угол падения на данную отражающую плоскость в области максимума.)

Приведем теперь некоторые оценки мешающих эффектов, связанных с конечной спектральной шириной характеристической линии и ее угловой расходимости.

9.1. Оценка спектральной ширины и угловой расходимости излучения рентгеновской трубки

При использовании в качестве источника монохроматической волны той или иной линии характеристического излучения приходится учитывать естественную спектральную ширину этих линий $\Delta\lambda$. Внутри этого интервала имеет место некоторое распределение интенсивности, которое можно аппроксимировать, например, гауссовым распределением. Классическая теория дисперсии [6, 106] связывает конечную спектральную ширину линии с затуханием электронного осциллятора. Подробное рассмотрение этого вопроса приводит к следующей формуле для спектральной ширины линии на половине высоты:

$$w_\lambda \equiv \Delta\lambda = \frac{2\pi e^2}{3mc^2} = 0,059X \quad (X = 10^{-11} \text{ см}). \quad (9.1)$$

Этот результат означает, что спектральная ширина является универсальной константой, в частности, не зависящей от длины волны λ_0 середины интервала $\Delta\lambda$. Переходя от спектральной ширины к эффективному времени жизни осциллятора τ (в течение которого интенсивность линии уменьшается в e раз), получаем

$$\tau = \frac{\lambda_0^2}{2\pi c \Delta\lambda}, \quad (9.2)$$

что дает, например, для $\text{CuK}\alpha_1$, $\lambda_0 = 1537 X$, $\tau = 2,12 \cdot 10^{-15}$ сек, и для $\text{MoK}\alpha_1$, $\lambda_0 = 708 X$, $\tau = 4,70 \cdot 10^{-16}$ сек.

Однако, как известно, классическая теория дисперсии рентгеновских лучей в оценке естественной ширины спектральной линии существенно расходится с экспериментом, не подтверждается универсальный характер условия (9.1), и абсолютная величина $\Delta\lambda$, вообще говоря, занижена. Квантовомеханическое рассмотрение устанавливает связь между шириной спектральных линий и

шириной уровней, определяющих соответствующий переход:

$$(\Delta E)_{if} = h(\Delta\nu)_{if} = (\Delta E)_i + (\Delta E)_f. \quad (9.3)$$

Численная оценка величин $(\Delta E)_{if}$ фактически берется из экспериментальных данных. Значения, приведенные в монографиях (например, [106]), следует считать ориентировочными. Так как из измерений на двухкристальном спектрометре (см. ниже) непосредственно определяется полуширина спектральной линии, то лучше обратиться к этим данным. Итак, согласно [106], величины $\Delta\lambda$ для $K\alpha_1$ линии монотонно падают от 1,60 X для Ca до 0,153 X для W; $\Delta\lambda$ для $L\alpha_1$ — от 4,5 X для Ag до 0,88 X для U. Новые и более точные данные, хотя и для ограниченного числа линий, приведены в табл. 10 в связи с анализом результатов, полученных на двухкристальном спектрометре.

Возвращаясь к теоретическим оценкам, заметим, что ширина спектральной линии

$$(\Delta E)_{if} \equiv \Gamma \approx \frac{h}{2\pi\tau}, \quad (9.4)$$

где τ — время жизни состояния, представляет собой величину, обратную вероятности распада в единицу времени.

Для формы спектральной линии классическая теория дает следующее выражение:

$$y = y_0 \left\{ 1 + \left[\frac{4(\lambda - \lambda_0)^2}{w_R^2} \right] \right\}^{-1}, \quad (9.5)$$

квантовомеханический расчет дает, в первом приближении, ту же формулу. Впрочем, здесь не учитывается асимметрия влияния химической связи и другие более тонкие эффекты. Формула (9.5) представляет особый интерес в связи с тем, что она близка к формуле, описывающей кривую отражения, получаемую на двухкристальном спектрометре при так называемом антипараллельном положении кристаллов (см. ниже).

Очевидно далее, что каждой данной величине полуширины $\Delta\lambda$ характеристической линии излучения отвечает некоторая величина дисперсии при отражении от данного кристалла. Эта величина определяется дифференцированием уравнения Вульфа—Брэгга:

$$\Delta\vartheta = \frac{\Delta\lambda}{2d \cos \vartheta}. \quad (9.6)$$

Существенно отметить возрастание $\Delta\vartheta$ с порядком отражения, в то время как полуширина максимума

$$2\Delta\eta_{1/2} = 2\Delta y |\chi_{hr}| \sqrt{\gamma_h/\gamma_0} (\sin 2\vartheta)^{-1} \quad (9.7)$$

уменьшается

Таблица 10. Экспериментальные рентгеновские данные по естественной полуширине спектральных линий w_λ (в X ед.), полученные измерениями на двухкристальном спектрометре [107]

Линия	Отражающий кристалл	* w_+	** w_-	w_λ	Автор
CuK α_1	Кварц 11 $\bar{2}0$	0,475	0,038	0,44	Parratt
	Кварц 22 $\bar{4}0$	0,44	0,010	0,43	»
	Кальцит 211	0,56	0,142	0,42	»
	Кальцит 422	0,455	0,012	0,44	»
TiK α_1	Кварц 11 $\bar{2}0$	0,91	0,075	0,84	»
	Кальцит 211	1,09	0,22	0,87	»
FeK α_1	Кварц 11 $\bar{2}0$	0,82	0,04	0,78	Brogren
	Кальцит 211	1,00	0,19	0,81	Allison
MoK α_1	Кварц 11 $\bar{2}0$	0,27	0,029	0,24	Parratt
	Кварц 11 $\bar{2}0$	0,263	0,027	0,24	Brogren
	Кальцит 211	0,306	0,076	0,23	Parratt

* Полуширина по схеме (1,1).

** Полуширина по схеме (1, -1).

Сопоставим теперь численные оценки величин дисперсии полуширины максимумов при динамическом рассеянии. При отражении 220 кристаллом Ge излучения CuK α_1 значения $\Delta\theta_{1/2} = 24$, $w = 12,8$, при отражении 333 — $\Delta\theta_{1/2} = 57,5$, $w = 3,9$, а при отражении 220 кристаллом Si излучения MoK α_1 значения полуширины и дисперсии составили $w = 2,2$, $\Delta\theta_{1/2} = 13,1$.

Переходим к рассмотрению угловой расходимости излучения рентгеновской трубки (см. также [24]).

Сформулируем условия применимости приближения плоской падающей волны, полагая, что излучение трубки обладает достаточной монохроматичностью. Если обозначить (плоский) угол, внутри которого интенсивность излучения еще имеет заметную величину, через Ω , то первым условием будет

$$w = 2\eta_{1/2} \gg \Omega, \quad (9.8)$$

где слева стоит угловая полуширина максимума отражения.

Что касается ширины когерентного фронта падающей волны, то, вообще говоря, существенным является соотношение между этой шириной и толщиной кристаллической пластинки. Но, кроме этого, при использовании пограничных условий на входной грани для тангенциальных слагающих волновых векторов необходимо устранить возможность дифракционных явлений (дифракция Френеля) на краях когерентного участка волнового фронта или щели. Это условие формулируется следующим образом:

$$2\eta_{1/2} \gg \lambda S^{-1}, \quad (9.9)$$

где S — эффективный поперечный размер входной грани ($S = Z\Delta\phi$). Можно также записать в качестве желательного условия

$$f \gg S, \quad (9.10)$$

где f — линейная ширина когерентного фронта.

В условиях эксперимента, в котором на исследуемый кристалл падает пучок лучей от антикатада рентгеновской трубки, прошедшей через систему диафрагм, соотношения (9.8) и (9.10) невыполнимы. Величина Ω , обычно, на два порядка превышает угловую полуширину динамического максимума.

Наконец, помимо некогерентности и значительной угловой ширины рентгеновского излучения трубки существенным является качество рассеивающего кристалла. Как показали экспериментальные исследования [6], выполненные в начале тридцатых годов, наиболее совершенные образцы монокристаллов, пригодные для количественной проверки динамической теории, можно было найти в то время среди естественных кристаллов кальцита и, иногда, кварца. Кристаллы каменной соли или искусственные кристаллы хлористого натрия скорее могли быть использованы для изучения рассеяния в области промежуточной между динамическим и кинематическим. В настоящее время исследователи располагают также и таким превосходным материалом, как синтетические монокристаллы кварца, германия, кремния, арсенида галлия и некоторых металлов.

9.2. Двухкристальный спектрометр с использованием отражений по Брэггу в обоих кристаллах (схема Брэгг — Брэгг)

Как хорошо известно, еще с 1917 г. [6] в практику исследований начал входить двухкристальный спектрометр, в котором пучок лучей от рентгеновской трубки последовательно отражается от двух кристаллов, чем достигается существенное приближение к условиям динамического рассеяния. Хотя подобные приборы нашли широкое применение при решении ряда других физических и технических задач, мы здесь будем рассматривать двухкристальные спектрометры только с точки зрения экспериментальной проверки динамической теории в отношении параметров динамического максимума и интерференционных эффектов.

Дальнейшее усовершенствование спектральной аппаратуры было направлено к тому, чтобы получить форму кривой отражения, в наибольшей степени близкой к динамическому максимуму. В связи с этим необходимо отметить:

1) использование схемы Брэгг — Лауэ и Лауэ — Лауэ в работах Бюргена [108];

2) создание и использование трехкристального спектрометра, идея которого и первые эксперименты принадлежат Реннингеру

[101], а теория и весьма ценные результаты являются заслугой чешских авторов Бубаковой, Драгокоупила и Фингерланда [109];

3) асимметричную съемку в различных схемах, проведенную Реннингером [110, 111], Бубаковой [112], японскими авторами [113—115], Батгерманом и Хильдебрандтом [116];

4) двухкристальный спектрометр Лауэ — Лауэ, с использованием в первом кристалле эффекта Бормана, в работах Отье [16], Лефельд-Сосновской и Мальгранж [117].

Детальное изложение теории двухкристального спектрометра дано в книге Комптона и Алисона [6]; обсуждение некоторых важ-

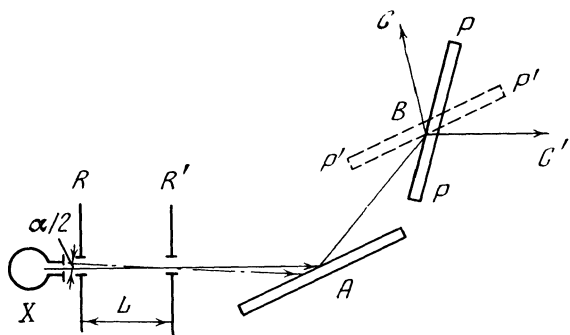


Рис. 65. Схема двухкристального спектрометра

ных выводов, этой теории приведено в монографиях Джеймса [8] и Лауэ [14]. Применение теории к схемам трехкристального спектрометра развито в работе [109].

Схемы двухкристального спектрометра, для которых была развита теория (рис. 65), основаны на комбинировании двух кристаллов с отражением по Брэггу в симметричном положении, т. е. от системы плоскостей, параллельных входной грани. Падающий на первый кристалл или кристалл-монокроматор *A* рентгеновский пучок после выхода из трубки проходит через две параллельные щели, в результате чего он характеризуется двумя значениями расходимости или плоскими углами: α — горизонтальная расходимость, соответствующая ширине щелей (в плоскости чертежа), и φ — вертикальная расходимость, соответствующая высоте щелей. Таким образом, максимальные значения этих углов

$$\alpha_m = c/z, \quad \varphi_m = h/z, \quad (9.11)$$

где c — ширина и h — высота щелей; z — расстояние между ними. Схема спектрометра, показанная на рис. 65, относится к двум различным установкам второго кристалла *B*. Нормали к отражающим плоскостям кристаллов: неподвижного *A* и вращающегося *B* в положениях *PP* или *P'P'* лежат в общей горизонтальной плоскости.

Неподвижный кристалл *A* устанавливается таким образом, чтобы некоторый средний луч в падающем пучке (т. е. луч, проходящий через геометрические центры обеих щелей), образовывал с

плоской гранью кристалла угол ϑ_0 , соответствующий середине области полного отражения. Действие кристалла A сводится к тому, что он в некоторой эффективной области углов α формирует параллельные пучки лучей для каждого значения длины волны λ .

Кристалл B устанавливается в исходное положение. Покачивая кристалл B вокруг вертикальной оси, лежащей в отражающей плоскости, мы регистрируем отраженные от этого кристалла пучки, и, таким образом, получаем некоторую экспериментальную форму максимума, называемую в литературе кривой качания (rocking curve) или кривой отражения. Существенной задачей теории является установление соотношения между этой кривой и истинной формой динамического максимума от одного кристалла B . Рассмотрим прежде всего величины углов, образуемых различными лучами в падающем пучке, при различных значениях λ с кристаллами A и B .

Если центральный луч, падающий на кристалл A , характеризуется параметрами $\vartheta_0, \lambda_0, \alpha = 0, \varphi = 0, n_A$, где n_A — индексы отражения от кристалла A , то угловое отклонение от центрального луча при отражении произвольного луча в пучке с параметрами $(\vartheta, \lambda, \alpha, \varphi, n_A)$ составит

$$\alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta (\lambda_0, n_A) - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0^1. \quad (9.12)$$

Второй член этого выражения отвечает отклонению, зависящему от вертикальной расходимости, третий — отклонению, связанному с немонахроматичностью. Вид последнего члена связан с естественным допущением, что в пределах спектральной ширины падающего пучка углы отражения меняются лишь незначительно. Индексы 1 и 0 означают, что значение этой производной берется вблизи среднего угла ϑ_0 (для первого кристалла) и средней длины волны λ_0 .

Обращаясь теперь к кристаллу B , замечаем, что если в нулевом положении угол падения на второй кристалл среднего луча будет также ϑ_0 , то в случае поворота кристалла на угол β в пределах области максимума, например, против часовой стрелки, угол отражения от B изменится на $\vartheta_0 + \beta$ (положение I — PP) или на $\vartheta_0 - \beta$ (положение II — $P'P'$) (рис. 65, 66). Соответственно угол отражения луча от второго кристалла $(\lambda, \alpha, \varphi)$ будет отличаться от угла отражения стандартного луча на величину

$$\pm \beta \pm \alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta (\lambda_0, n_B) - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0^2. \quad (9.13)$$

Здесь верхние знаки перед β и α относятся к положению I и нижние — к положению II, n_B означает индексы отражения от второго кристалла, индексы 2 и 0 относятся к значению производной вблизи угла отражения центрального луча от второго кристалла вблизи λ_0 .

Теперь нам необходимо учесть функции распределения энергии или интенсивности в исходном пучке в зависимости от расходимости пучков α и φ и длины волны λ . Зададимся пока некоторыми функциями

$$G(\alpha, \varphi), \quad J(\lambda - \lambda_0), \quad (9.14)$$

которые нормируются таким образом, что интенсивности внутри определенного интервала аргумента ($d\alpha$, $d\varphi$ и $d\lambda$ соответственно) определяются умножением на эти интервалы.

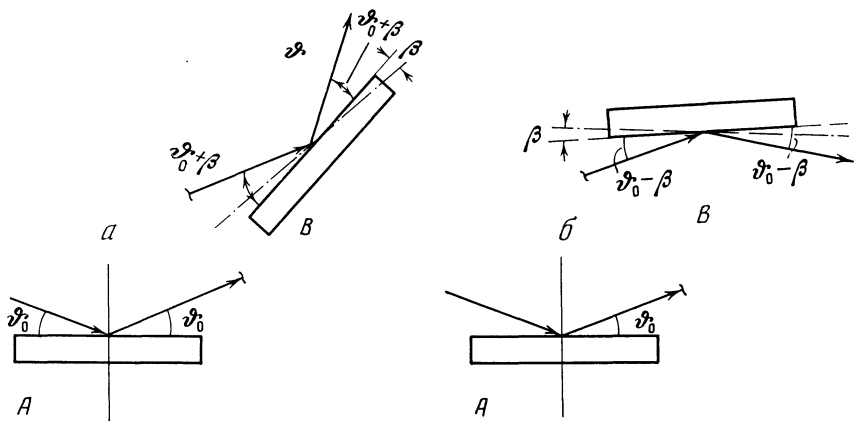


Рис. 66. Положение кристалла B в спектрометре
 a — антипараллельное (I); b — параллельное (II)

В результате изложенного мы можем написать следующее выражение для полной мощности излучения, отраженного от второго кристалла, в функции от угла поворота β кристалла B из начального положения, если горизонтальная расходимость падающего пучка заключена в пределах от $-\alpha_m$ до α_m :

$$\begin{aligned}
 P(\beta) = & \int_{-\varphi_m}^{\varphi_m} \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \int_{-\alpha_m}^{\alpha_m} G(\alpha, \varphi) J(\lambda - \lambda_0) C_A \left[\alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta_1 - \right. \\
 & - (\lambda - \lambda_0) \left. \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^1 \right] C_B \left[\pm \beta \pm \alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta_2 - \right. \\
 & \left. - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^2 \right] d\alpha d\varphi d\lambda. \quad (9.15)
 \end{aligned}$$

В этом выражении C_A и C_B — функции, отвечающие коэффициентам отражений n_A и n_B от кристаллов A и B .

Анализ и некоторое упрощение достаточно сложного выражения (9.15) можно начать с рассмотрения одной из важнейших характеристик спектрометра, а именно дисперсии, которую мож-

но ожидать вследствие конечного спектрального интервала в используемом излучении.

Переходя к предельному случаю бесконечно узких максимумов для функций C_A и C_B , которые, следовательно, будут отличаться от нуля лишь при обращении в нуль их аргументов, легко получить величину дисперсии:

$$\frac{d\beta}{d\lambda} \equiv D = \frac{n_A}{2d \cos \vartheta_1} \pm \frac{n_B}{2d \cos \vartheta_2}, \quad (9.16)$$

где, как и раньше, верхний знак относится к положению I и нижний — к положению II кристалла B . Это соотношение непосредственно приводит к следующим важным результатам. В положении I дисперсия в двойном спектрометре складывается из значений дисперсии, отвечающих обоим кристаллам в отдельности. Наоборот, в положении II полная дисперсия составляет разность тех же величин.

В важном частном случае, когда оба кристалла одинаковы и индексы отражения $n_A = n_B$, положение I дает удвоенную дисперсию, в то время как II — дает дисперсию, равную нулю. Такое свойство положения II определило его преимущественное использование во многих работах.

Дальнейшее рассмотрение характеристик двойного спектрометра ведется раздельно для обеих схем.

Положение II, или параллельное расположение кристаллов — схема $(n, -n)$ (рис. 66, б). Важным частным случаем является схема с двумя одинаковыми кристаллами, причем предполагается, что оба кристалла являются достаточно (и в одинаковой степени) совершенными и индексы отражения

$$n_A = n_B. \quad (9.17)$$

Кроме того, очевидно, что

$$C_A = C_B = C_1, \quad \vartheta_1 = \vartheta_2 = \vartheta. \quad (9.18)$$

В таком случае выражение (9.15) принимает вид

$$\begin{aligned} P(\beta) = & \int_{\varphi} \int_{\lambda} \int_{\alpha} G(\alpha, \varphi) J(\lambda - \lambda_0) C \left[\alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta - \right. \\ & \left. - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0 \right] C \left[\alpha - \beta - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta - \right. \\ & \left. - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0 \right] d\alpha d\lambda d\varphi. \end{aligned} \quad (9.19)$$

Качественный анализ этого выражения позволяет получить дополнительные характеристики параллельного расположения.

Исходным пунктом такого анализа служит весьма малая область значений аргумента, измеряемая немногими угловыми секундами или абсолютной величиной углов порядка 10^{-5} , при ко-

торых функция C под интегралом отлична от нуля. В таком случае можно показать следующее.

1. Функция $G(\alpha, \varphi)$ может быть представлена в виде произведения двух функций

$$G(\alpha, \varphi) = G_1(\alpha)G_2(\varphi). \quad (9.20)$$

При этом, хотя значения функций G_i отличны от нуля в областях углов порядка минуты ($\sim 10^{-3}$ в абсолютных единицах), в соответствии с величиной члена $1/2 \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta$, эффективная область изменений функции G_2 примерно того же порядка, что и функции C . Кроме того, как можно показать, при параллельном расположении кристаллов форма получаемой кривой отражения вообще не зависит от вертикальной расходимости падающего на первый кристалл пучка.

2. Для каждой из монохроматических составляющих падающего пучка эффективная область изменений аргумента весьма незначительна и составляет примерно

$$\alpha_e \approx (\lambda - \lambda_0)(\partial\vartheta/\partial\lambda)_0. \quad (9.21)$$

Эта оценка соответствует сделанному выше указанию, что кристалл A преобразует падающий пучок в совокупность параллельных пучков для монохроматических составляющих.

3. Функция $P(\beta)$ отлична от нуля в очень узкой области значений аргумента. Другими словами, в схеме $(n, -n)$ полуширина кривой отражения сравнима с полушириной динамического максимума от одного кристалла. Для некоторых типичных условий она превышает эту последнюю приблизительно в 1,3 раза.

4. Эффективная область длин волн, участвующих в образовании максимума внутри кривой отражения, относительно велика и оценивается величиной

$$\lambda_0 \pm (\partial\lambda/\partial\vartheta)_0 \alpha_m. \quad (9.22)$$

В типичных случаях это составляет $\sim \lambda_0 \pm (2 \div 3) X$, т.е. используется интервал длин волн, более или менее значительно превышающий полуширину многих спектральных линий (см. табл. 10). Оценка (9.22), как видно из этого выражения, не зависит от β .

5. Сопоставляя узкую область изменений функций C , фактически учитываемых при интегрировании, и сравнительно широкие области изменений аргументов φ, α, λ , причем функции G_1, G_2 и J медленно меняются в пределах угловых секунд, приходим к следующей форме выражения для кривой отражения:

$$P(\beta) = K \int_{-\infty}^{\infty} C(\alpha) C(\alpha - \beta) d\alpha, \quad (9.23)$$

где

$$K = \int_{n_1}^{n_2} \int_{-\varphi_m}^{\varphi_m} G_1 \left[\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda_0} (\lambda - \lambda_0) \right] G_2(\varphi) J(\lambda - \lambda_0) d\varphi d\lambda,$$

$$n_1 = \lambda_0 - \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \Phi} \right)^0 \alpha_m, \quad n_2 = \lambda_0 + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \Phi} \right)^0 \alpha_m. \quad (9.24)$$

Поставленный выше вопрос о соотношении между экспериментальной кривой отражения $P(\beta)$ и истинным профилем динамического максимума отражения от кристалла B был специально рассмотрен Лауэ [118]. Было показано, что прямой переход невозможен.

Мало того, если надлежащим подбором функции (или функций) C интеграл (9.23), вычисленный тем или иным методом, будет в удовлетворительном согласии с экспериментальной кривой отражения, то и этот результат не будет однозначным.

Следует далее отметить, что элементарное рассмотрение (9.23) непосредственно обнаруживает, что кривая отражения при использовании схемы $(n, -n)$ является симметричной относительно точки $\beta = 0$, даже если истинные кривые динамического отражения кристаллов A и B несимметричны, например, как в случае отражения по Брэггу от поглощающего кристалла. Необязательным условием указанной симметрии будет тождественность динамических максимумов от обоих кристаллов.

Очевидно далее, что формула (9.23) относится к случаю, когда падающее на кристалл A излучение поляризовано. При неполяризованном излучении функция P записывается следующим образом:

$$P(\beta) = K \int_{-\infty}^{\infty} [C_{\sigma}(\alpha) C_{\sigma}(\alpha - \beta) + C_{\pi}(\alpha) C_{\pi}(\alpha - \beta)] d\alpha. \quad (9.25)$$

Это выражение дает полную мощность, отраженную кристаллом B в положении β . Коэффициент отражения в этом случае выражается величиной

$$R(\beta) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} [C_{\sigma}(\alpha) C_{\sigma}(\alpha - \beta) + C_{\pi}(\alpha) C_{\pi}(\alpha - \beta)] d\alpha}{\int [C_{\sigma}(\alpha) + C_{\pi}(\alpha)] d\alpha}. \quad (9.26)$$

Впрочем, под коэффициентом отражения часто понимают величину $P(\beta)$ (9.25). Очевидно, что так как подынтегральная функция в (9.25) является для любого данного значения α произведением ординат обеих кривых $C(\alpha)$ и $C(\alpha - \beta)$, то максимальное значение этого произведения при $\beta = 0$ и параллельности обоих

кристаллов будет соответствовать величине (процентного отражения)

$$R(0) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} [C_{\sigma}(\alpha)]^2 d\alpha + \int_{-\infty}^{\infty} [C_{\pi}(\alpha)]^2 d\alpha}{\int_{-\infty}^{\infty} [C_{\sigma}(\alpha) + C_{\pi}(\alpha)] d\alpha}, \quad (9.27)$$

которая является максимальным (относительным) значением коэффициента отражения (в двухкристальном спектрометре).

Наконец, величина интегрального отражения при измерениях на двухкристальном спектрометре вычисляется из следующего выражения:

$$R_i = \int_{-\infty}^{\infty} R(\beta) d\beta = \frac{\left[\int_{-\infty}^{\infty} C_{\sigma}(\alpha) d\alpha \right]^2 + \left[\int_{-\infty}^{\infty} C_{\pi}(\alpha) d\alpha \right]^2}{\int_{-\infty}^{\infty} C_{\sigma}(\alpha) d\alpha + \int_{-\infty}^{\infty} C_{\pi}(\alpha) d\alpha}. \quad (9.28)$$

Положение I, или антипараллельное расположение кристаллов — схема (n, n) (рис. 66, а). В этом случае, аналогично (9.19), можно написать

$$\begin{aligned} P(\beta) = & \int_{\varphi}^{\infty} \int_{\lambda}^{\infty} \int_{\alpha}^{\infty} G(\alpha, \varphi) J(\lambda - \lambda_0) C \left\{ \alpha - \frac{\varphi^2}{2} \operatorname{tg} \vartheta - \right. \\ & - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0 \left. \right\} C \left\{ \beta - \alpha - \frac{\varphi^2}{2} \operatorname{tg} \vartheta - \right. \\ & \left. - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0 \right\} d\alpha d\lambda d\varphi. \end{aligned} \quad (9.29)$$

Качественный анализ этого уравнения, подобный тому, который относится к случаю параллельного расположения, приводит к следующим результатам.

1. И в этом случае эффективные значения α оцениваются как

$$\alpha \approx (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0. \quad (9.30)$$

2. Оценивая интервал значений β , для которых функция $P(\beta)$ имеет еще заметную величину, приходим к выводу, что в данном случае этот интервал существенно превышает угловую ширину динамического максимума для одного кристалла. Количественные оценки требуют установления связей между величиной β и спектральным интервалом, дающим вклад в образование максимума.

3. Аргумент второй функции C под знаком интеграла в (9.29) можно переписать следующим образом:

$$\left\{ \beta - 2 \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0 (\lambda - \lambda_0) \right\} - \left\{ \alpha - \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \lambda} \right)_0 (\lambda - \lambda_0) \right\} - \frac{\varphi^2}{2} \operatorname{tg} \vartheta. \quad (9.31)$$

Нетрудно видеть, что так как последний член в этом выражении, так же как и второй член в фигурных скобках [согласно (9.30)],

малы, то и первый член в фигурных скобках должен быть малым для того, чтобы величина C для второго кристалла заметно отличалась от нуля. Таким образом, в отличие от параллельного расположения кристаллов [см. (9.22)], если кристалл B отклоняется от среднего положения на угол β , оба кристалла отбирают из всего спектра волн в падающем пучке узкую спектральную полосу:

$$\Delta\lambda \approx \lambda_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\lambda}{\partial\theta} \right)^0 \beta. \quad (9.32)$$

Этот результат имеет принципиальное значение, так как он позволил Реннингеру использовать в качестве монохроматора в трехкристалльном спектрометре именно схему (n, n) . Действительно, как было уже указано, при образовании максимума $P(\beta)$ при параллельном расположении кристаллов в значение функции $P(\beta)$ при каждом данном положении β дают вклад монохроматические составляющие пучка в сравнительно широком интервале длин волн: в типичном случае, согласно (9.22), $2-3X$. В противоположность этому, в каждом данном положении β кристалла B в схеме (n, n) принимает участие спектральный интервал в β/α_m раз меньший, т. е. в указанном типичном случае шириной до $0,01-0,02X$.

Что касается дисперсии двойного спектрометра, то согласно (9.16) при расположении кристаллов (n, n) она составляет сумму дисперсий от обоих кристаллов и, в частном случае равенства $n_A = n_B$ и тождественности обоих кристаллов, указанное расположение дает дисперсию, удвоенную по сравнению с дисперсией от однокристалльного спектрометра.

4. Наконец, важным является результат проверки симметрии функции $P(\beta)$ в данной схеме.

Рассматривая выражение (9.29), мы замечаем, что его преобразование, подобное тому, которое было применено к (9.19), здесь не может быть проведено. Что касается переменной α , то, в соответствии с (9.30), эффективная область ее изменений мала сравнительно с α_m , и поэтому мы можем и здесь распространить пределы интегрирования по α до $\pm \infty$. Эффект вертикальной расходимости не может здесь быть исключен, так же как и функция $J(\lambda - \lambda_0)$. Однако рассматривая условно работу нашего спектрометра при падении на кристалл A монохроматического пучка лучей с указанной расходимостью (α, φ) и, приняв, что мы можем пренебречь зависимостью от φ , получим

$$P'(\beta) \approx \int_{-\infty}^{\infty} C(\alpha) C(\beta - \alpha) d\alpha, \quad (9.33)$$

где опущен множитель пропорциональности. Как показывает внимательное рассмотрение этой формулы, она отличается от (9.23) тем, что, заменяя в ней (β) на $(-\beta)$, мы не получим эквивалентного результата. Следовательно, кривая отражения, снятая при вращении кристалла B в схеме (n, n) , не обладает паразитной или ин-

струментальной симметрией относительно точки $\beta = 0$ (так же как и относительно любого другого значения β). Это свойство кривых отражения, снятых в схеме (n, n) , также имеет принципиальное значение для последующего, хотя и не может быть использовано в рассматриваемой схеме двухкристального спектрометра из-за сильного эффекта дисперсии.

9.3. Трехкристальный спектрометр

Впервые идея трех- и многокристальных спектрометров была выдвинута Дю-Мондом [119], который предложил наглядный графический метод анализа свойств подобных приборов. Реннингер [101] использовал этот метод для качественного рассмотрения возможных схем трехкристального спектрометра, построил его и получил с его помощью существенно новый результат: кривую отражения по Брэггу от кальцита с отчетливой асимметрией. Таким образом, была устранена паразитная симметрия кривых отражения, которые получаются при использовании классической схемы $(n, -n)$ двухкристального спектрометра. Полная теория и схема трехкристального прибора были развиты в работе [109] и успешно использованы для получения кривых отражения от Ge и Si.

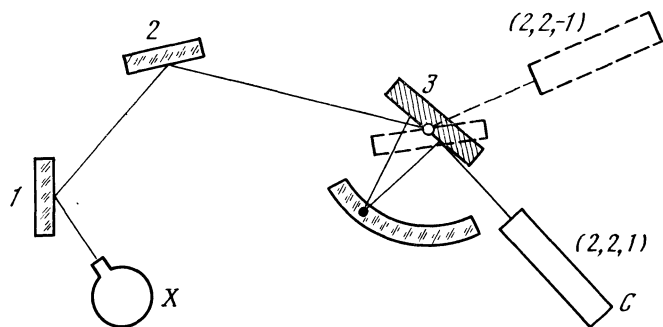


Рис. 67. Схема трехкристального спектрометра

Схема трехкристального спектрометра приведена на рис. 67. Неподвижные кристаллы 1 и 2 образуют двухкристальный монокроматор¹. Кристалл 3, для которого получают кривую отражения, устанавливается в положение параллельное или антипараллельное по отношению к кристаллу II.

Графический метод Дю-Монда заключается в следующем (рис. 68). Значения переменных ϑ и λ , связанных законом Вульфа —

¹ Мы используем термин «монокроматор» для одного, двух или более кристаллов, с помощью которых получается пучок, приближающийся к плоской монокроматической волне. Другими словами, монокроматор не только монокроматизирует падающее излучение, но и преобразует его, суживая угловую расходимость.

Брэгга, откладываются на двух осях прямоугольной системы координат. Значения λ в функции от ϑ лежат на прямой линии, наклонной к обоим осям. Фактически, однако, используется не линия, а полоска. Значения ширины этой полоски, взятые параллельно осям ϑ и λ , соответствуют некоторым интервалам углов падения и дисперсии. Двухкристальный спектрометр отвечает наложение двух подобных полосок. При качании кристалла 2 в параллельной установке отвечающий ему график смещается в положительном направлении оси ϑ , и в антипараллельной установке отвечающий второму кристаллу график смещается в противоположном направлении. Зачерненный ромб на пересечении двух полосок в случае схемы (n, n) , изображенный на рис. 68, соответствует угловому и спектральному интервалам пучка, который образуется в результате последовательного отражения от двух неподвижных кристаллов 1 и 2, составляющих двухкристальный монохроматор. Более широкая полоса 3 показывает область отражения кристалла 3, который поворачивается во время измерения кривой отражения.

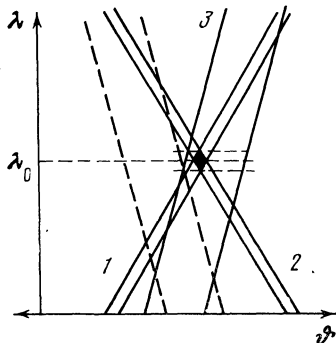


Рис. 68. К пояснению графического метода Дю-Монда

Этот метод позволил Реннингеру выбрать принципиальную схему для трехкристального прибора. Существенным моментом в схеме Реннингера является правильный выбор устройства двухкристального монохроматора. В изложенной выше теории двухкристального спектрометра было указано, что из-за отсутствия дисперсии полуширина максимума при $(n, -n)$ расположении несравненно меньше, чем при расположении (n, n) . Однако параллельное расположение характеризуется значительным вкладом в образование максимума сравнительно широкого интервала длин волн при каждом данном значении β или при каждом положении кристалла 2. Очевидно поэтому, что, используя подобный луч в качестве зонда для получения кривой отражения от кристалла 3, мы получим развертку по спектральному интервалу, заключенному в падающем луче.

Наоборот, согласно оценке (9.32), в каждом данном положении второго кристалла в схеме (n, n) в отражении принимают участие составляющие спектрального интервала примерно на два порядка меньше, чем в схеме $(n, -n)$,

Выяснение возможностей и количественных характеристик трехкристального спектрометра было достигнуто разработкой более строгой теории этого метода, изложенной в работе [109]. Построение теории близко к изложенной теории двухкристального спектрометра.

Условия, которые должны выполняться, следующие:

1) кристаллы устанавливаются так, чтобы нормали к их входным граням лежали в общей плоскости;

2) кристаллы имеют совершенную структуру, так что их функции отражения отвечают динамической теории;

3) рассматривается симметричное отражение от всех трех кристаллов. В таком случае, используя расположение (n, n) в монохроматоре (или для первых двух кристаллов (рис. 67)), на основе рассуждений, которые были приведены при выводе формулы (9.15), получим

$$\begin{aligned}
 P(\pm \gamma) = & \int_{\varphi} \int_{\lambda} \int_{\alpha} G(\alpha, \varphi) J(\lambda - \lambda_0) C_1 \left[\alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta_1 - \right. \\
 & - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^{\text{I}} C_2 \left[-\alpha - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta_2 - \right. \\
 & - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^{\text{II}} C_0 \left[\pm (\gamma - \alpha) - \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta_3 - \right. \\
 & \left. \left. - (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^{\text{III}} \right] d\alpha d\lambda d\varphi. \right. \quad (9.34)
 \end{aligned}$$

Здесь угол γ представляет отклонение исследуемого кристалла 3 от начального положения, и знаки « \pm » отвечают положениям антипараллельному и параллельному кристалла 3 относительно 2 соответственно. Символы этих схем по предложению Реннингера имеют вид (n_1, n_2, n_3) и $(n_1, n_2, -n_3)$.

Для упрощения общего выражения (9.34) введем допущения

$$C_1 = C_2 \equiv C_0, \quad \vartheta_1 = \vartheta_2 \equiv \vartheta_0, \quad (9.35)$$

$$C_3 \equiv C_1, \quad \vartheta_3 \equiv \vartheta_1, \quad (9.36)$$

$$G(\alpha, \varphi) = G_1(\alpha) G_2(\varphi). \quad (9.37)$$

Функции $J(\lambda - \lambda_0)$ и $G_1(\alpha)$ изменяются незначительно в пределах угловых координат, отвечающих динамическим максимумам C_1 и C_0 . Поэтому они могут быть вынесены за знак интеграла и пределы интегрирования по переменным λ и α могут быть расширены до $\mp \infty$. Введем новые функции

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \varphi^2 \operatorname{tg} \vartheta_1 = \psi^2 k, \quad k = \frac{\operatorname{tg} \vartheta_1}{\operatorname{tg} \vartheta_0}, \quad \psi = \varphi \sqrt{\frac{\operatorname{tg} \vartheta_0}{2}}, \\
 \psi_m = \varphi_m \sqrt{\frac{\operatorname{tg} \vartheta_0}{2}}. \quad (9.38)
 \end{aligned}$$

Если обозначить значения дисперсии для кристаллов 1 и 2 через D_0 и кристалла 3 — через D_1 и использовать формулу Вульфа — Брэгга, то можно написать

$$\frac{D_1}{D_0} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_1^1 / \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^0 = \frac{d_0 \cos \vartheta_0}{d_1 \cos \vartheta_1} = \frac{\operatorname{tg} \vartheta_1}{\operatorname{tg} \vartheta_0} = k. \quad (9.39)$$

Далее

$$(\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0 = \beta, \quad (\lambda - \lambda_0) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_0^1 = k\beta. \quad (9.40)$$

Принимая $\Phi_0 \geq \Phi_1$, получаем $0 < k \leq 1$. Наконец, введем

$$x = -\psi^2 - \beta. \quad (9.41)$$

Уравнение (9.34) принимает вид

$$P(\pm \gamma) = A \int_{-\psi_m}^{\psi_m} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G_2(\psi) C_0(\alpha + x) C_0(-\alpha + x) \times \\ \times C_1[\pm(\gamma + \alpha) + kx] dx d\alpha d\psi. \quad (9.42)$$

Так как $G_2(\psi)$ не зависит от α и x , уравнение (9.42) может быть представлено

$$P(\pm \gamma) = ABP'(\pm \gamma), \quad (9.43)$$

$$B = \int_{-\psi_m}^{\psi_m} G_2(\psi) d\psi, \quad (9.44)$$

$$P'(\pm \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(\alpha + x) C_0(-\alpha + x) C_1(\pm \gamma \pm \alpha + kx) d\alpha dx. \quad (9.45)$$

Существенный результат (9.43), (9.44), (9.45) заключается в том, что форма кривой отражения, снятой на трехкристальном спектрометре, при сделанных допущениях не зависит от вертикальной расходимости падающего пучка [функции $G_2(\psi)$]. Для дальнейшего анализа полученных соотношений введем новую переменную

$$y = \pm \alpha + kx, \quad (9.46)$$

откуда

$$\alpha + x = \pm y + x(1 \mp k), \quad -\alpha + x = \mp y + x(1 \pm k), \quad (9.47)$$

и (9.45) преобразуется

$$P'(\pm \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0[y + x(1 - k)] C_0[-y + x(1 + k)] \times \\ \times C_1(\pm \gamma + y) dx dy. \quad (9.48)$$

Интегрирование может быть произведено отдельно, и мы получаем две функции

$$P'(\pm \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} C_1(\pm \gamma + y) [V(y)] dy, \quad (9.49)$$

$$V(y) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0[y + x(1 - k)] C_0[-y + x(1 + k)] dx, \quad (9.50)$$

при этом (9.50) зависит от свойств двухкристального монохроматора. $P'(\pm\gamma)$ представляет, следовательно, как и в случае двухкристального спектрометра, свертку двух функций: C_1 — функции динамического рассеяния от кристалла \mathcal{Z} и $V(y)$ — функции размывания. Важное свойство функции $P'(\gamma)$ заключается в том, что изменение знака в схеме ($n_1, n_2, \pm n_3$) дает две кривые отражения, которые являются *зеркально-симметричными*. Так как это свойство не зависит от $G_2(\psi)$, оно может служить методом проверки установки трехкристального спектрометра. Отсюда следует, что отклонение от зеркальной симметрии должно служить указанием на различие (например, степени совершенства) кристаллов, составляющих монохроматор, разумеется, если в остальном установка отвечает соответствующим требованиям.

Другое важное свойство прибора — соотношение между полушириной кривой отражения, полученной на этой установке, и полушириной динамического максимума кристалла \mathcal{Z} . Исследуем функцию $V(y)$, представленную в (9.50), при различных возможных значениях k .

Для $k = 1$ имеем

$$V_1(y) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(y) C_0(-y + 2x) dx = \rho C_0(y),$$

$$\rho = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(-y + 2x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(2x) dx. \quad (9.51)$$

Отсюда следует, что полуширина функции $V_1(y)$ равна полуширине $C_0(y)$:

$$w_{V_1} = w_0. \quad (9.52)$$

С другой стороны, при $k = 0$

$$V_0(y) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(y+x) C_0(-y+x) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} C_0(z) C_0(z-2y) dz. \quad (9.53)$$

Последняя справа форма функции $V_0(y)$ соответствует параллельному расположению ($n, -n$), но в «половинном» масштабе. Если полуширина при параллельном расположении составляет w_π , то

$$w_{V_0} = 1/2 w_\pi. \quad (9.54)$$

Аппроксимируя функцию C гауссовой кривой ошибок, мы получим $w_0 = 2^{-1/2} w_\pi \approx 0,71 w_\pi$. В таком случае пределы изменения полуширины функции w_V в интервале изменения величины k

будут

$$0,50 w_{\pi} < w_V = 0,71 w_{\pi}. \quad (9.55)$$

Величина w_V дает нам оценку *углового* расхождения луча, выходящего из двухкристального монохроматора и используемого в качестве зонда для получения кривой отражения от кристалла \mathcal{Z} . Эта величина на графике Дю-Монда (рис. 68) соответствует ширине по оси ϑ зачерненного ромба, полученного при пересечении «полосок» от кристаллов 1 и 2 при их антипараллельном расположении. Реннингер [101] оценил величину w_V из подобного графика, как $2/3 w_{\pi}$, т. е. в полном согласии с условием (9.55).

Для вычисления полуширины кривой отражения, получаемой на трехкристальном спектрометре, мы можем использовать ту же аппроксимацию гауссовой кривой для функции C_1 . В таком случае можно получить следующее соотношение:

$$w^2 = w_1^2 + \frac{w_0^2}{2} (1 + k^2), \quad (9.56)$$

где w , w_1 и w_0 обозначают значения полуширины кривых отражения и функций C_1 и C_0 соответственно.

Нетрудно видеть, что, согласно (9.56), наилучшее приближение к динамической кривой от исследуемого кристалла \mathcal{Z} достигается при использовании отражения высокого порядка, дающего острый максимум в монохроматоре, и отражения первого порядка от исследуемого кристалла. Так, в [120] авторы использовали схему (3,3,1), причем монохроматор состоял из двух монокристаллов Si и исследовался кристалл Ge при отражении 111 (излучение $\text{CuK}\alpha$). В этом эксперименте значения величин w_1 и k составляли $8''$ и $0,24$ соответственно. Используя $w_0 \approx 1,89''$, получаем

$$w = \left[w_1^2 + \frac{w_0^2}{2} (1 + 0,06) \right]^{1/2} \approx 8,06'' \approx 8,1''. \quad (9.57)$$

Таким образом, трехкристальный спектрометр при надлежащем выборе отражений позволяет получить кривую отражения, которая по форме практически совпадает с истинным профилем динамического максимума, в особенности, если учесть, что этот прибор не искажает истинную кривую из-за «паразитной» симметрии [121].

Рассматривая далее различные частные соотношения между тремя кристаллами, образующими спектрометр, можно получить основные характеристики ожидаемых кривых отражения и прежде всего — значения полуширины.

Наконец, аналогично двухкристальному спектрометру, в случае трехкристального прибора величина $R(0)$ в частном случае $(n_1, n_2, \pm n_3)$ определяется из формулы

$$R^{\text{III}}(0) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} C_0(\alpha+x) C_0(-\alpha+x) C_1(\pm \gamma \pm \alpha + kx) d\alpha dx}{\int_{-\infty}^{\infty} C_0(\alpha+x) C_0(-\alpha+x) d\alpha dx}. \quad (9.58)$$

В первой работе с использованием трехкристального спектрометра, выполненной Реннингером [101], в качестве монохроматора были взяты монокристаллы кальцита. Исследовалась кривая отражения также от кальцита в схемах $(2,2, \pm 1)$. При расчете теоретических кривых было принято, что после отражения по схеме $(2, \pm 2)$ в монохроматоре пучок, падающий на кристалл 3 имеет σ -компоненту интенсивности $\sim 85\%$ и π -компоненту $\sim 15\%$. Несмотря на существенное различие профилей теоретической и экспериментальной кривых, значения интегральных отражений, пропорциональных площади, ограниченной кривой, весьма близки:

$$R_i^T = 37,7 \cdot 10^{-6}, \quad R_i^3 = 36,5 \cdot 10^{-6}.$$

Близость этих величин свидетельствует о том, что при отражении рентгеновских лучей от почти совершенных кристаллов значение интегрального отражения слабо зависит от степени отклонения от идеальной структуры.

Наконец, в начале 1968 г. была опубликована работа японских авторов [114], в которой принцип трех- (и четырех-) кристального спектрометра успешно совмещен с асимметричной съемкой. Замечания о результатах, полученных этими авторами, приводятся ниже.

9.4. Другие типы спектрометров и монохроматоров

Двойные спектрометры типа Брэгг — Лауэ и Лауэ—Лауэ. Брогрен и Эделл [108] в своих исследованиях кривых отражения кальцита, кварца, а затем Ge и Si использовали двойные спектрометры по схемам Брэгг—Лауэ и Лауэ—Лауэ (рис. 69). В спектрометре Брэгг — Лауэ (рис. 69, а) используется в кристалле 1 симметричное отражение по Брэггу и в исследуемом кристалле 2 — симметричное отражение с теми же индексами по Лауэ. Для сопоставления с экспериментальными кривыми отражения эти авторы использовали формулы (9.25) — (9.28), в которых значения функций $C_\sigma(\alpha)$ и $C_\pi(\alpha)$ от кристалла 1 и $C_\sigma(\alpha - \beta)$ и $C_\pi(\alpha - \beta)$ от кристалла 2 соответствовали коэффициентам отражения и прохождения в зависимости от выбранной схемы прибора. Так, в случае схемы Брэгг — Лауэ для кристалла 1 использовались коэффициенты отражения по Брэггу и для кристалла 2 — коэффициенты отражения или прохождения по Лауэ. Хотя использование указанных формул в схемах Брэгг—Лауэ и Лауэ—Лауэ не было обосновано специальным анализом, правомерность такого расчета была подтверждена хорошим совпадением теоретических (т. е. вычисленных указанным путем) и экспериментальных кривых отражения в широкой области спектра. (Вместе с тем следует отметить, что все еще остается неясной теоретическая оценка таких основных характеристик кривых отражения, получаемых в схеме Брэгг — Лауэ, как наличие или отсутствие «паразитной» симмет-

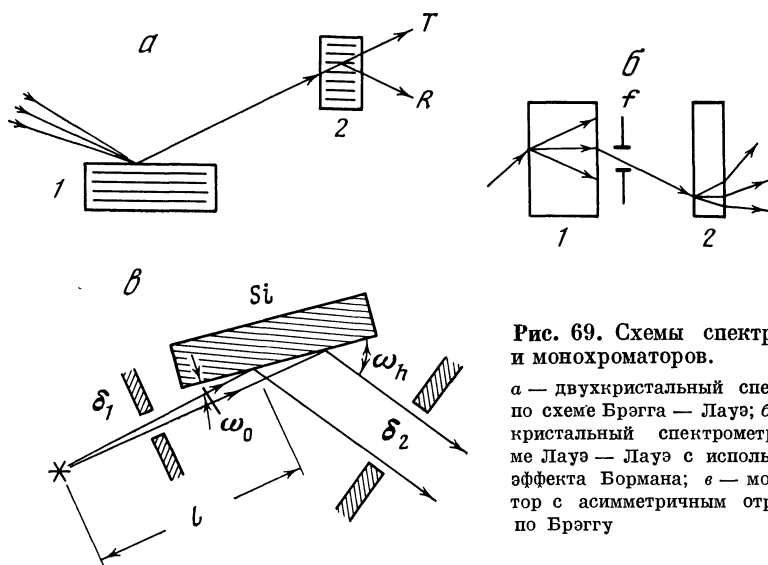


Рис. 69. Схемы спектрометров и монохроматоров.

a — двухкристалльный спектрометр по схеме Брэгга — Лауэ; *б* — двухкристалльный спектрометр по схеме Лауэ — Лауэ с использованием эффекта Бормана; *в* — монохроматор с асимметричным отражением по Брэггу

рии и соотношения между полушириной динамического максимума и кривой отражения.)

Схема монохроматора с отражением по Лауэ для изучения кривых отражения, разделения волновых полей в кристалле и интерференционных эффектов при динамическом рассеянии использовалась, начиная с 1961г., Отье и его сотрудниками [16, 117]. Характерной чертой этого монохроматора (рис. 69, б) является использование эффекта Бормана. Как отмечалось в гл. 5, при прохождении излучения через толстый кристалл происходит сильное сужение волнового фронта, а следовательно, уменьшение расходимости выходящих, отраженного и прошедшего, пучков.

Спектрометры с использованием асимметричной съемки по Брэггу. Зависимость угловой ширины области II полного отражения по Брэггу от угла падения ψ_0 или скользящего угла падения $\omega_0 = (\pi/2) - \psi_0 = (\pi/2) - (\vartheta - \varphi)$, рассмотрена в 7.1. Варьируя угол φ между входной поверхностью кристалла и отражающей плоскостью, что может быть сделано шлифовкой (и последующей обработкой) входной поверхности, можно существенно изменить угловую расходимость пучка, отраженного в пределах области II максимума. Согласно (7.43), эта угловая ширина выражается формулой

$$\Delta\eta_h = \Delta\eta_s \sqrt{\frac{\sin \omega_0}{\sin \omega_h}} = b\Delta\eta_0, \quad b = \frac{\sin(\vartheta - \varphi)}{\sin(\vartheta + \varphi)} = \frac{\sin \omega_0}{\sin \omega_h}. \quad (9.59)$$

Таким образом, для получения отраженного пучка с ничтожной угловой расходимостью необходимо использовать возможно малый скользящий угол падения.

Весьма наглядной иллюстрацией к соотношениям (9.59) являются кривые отражения 111 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Ge , полученные Бубаковой [112]. В этой работе был использован трехкристальный спектрометр, описанный выше. Кривые отражения, представленные на рис. 70, были сняты при трех различных углах падения ω_0 (соответственно, трех значениях φ). Средняя кривая 1 отвечает симметричному отражению, левая 2 — скользящему падению при $\varphi_1 = \varphi - \omega_0 = +4,5^\circ$ и правая 3 — значению $\varphi = \varphi - \omega_0 = -4,5^\circ$. Соответственно, левая кривая имеет полуширину меньшую и правая большую, чем средняя.

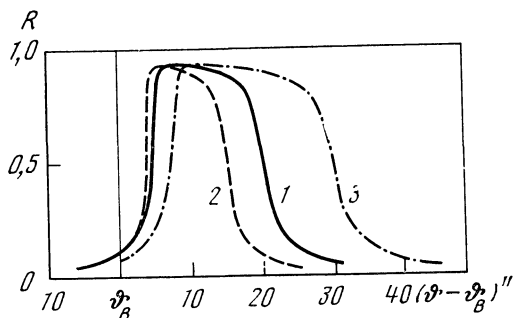


Рис. 70. Кривые отражения 111 $\text{CuK}\alpha$ от Ge , полученные при различных углах падения

Реннингер [111] рассмотрел ряд схем двухкристальных спектрометров с комбинацией либо асимметричного отражения от обоих кристаллов, либо асимметричного отражения от одного и симметричного отражения от другого кристалла. Он показал, что при асимметричном отражении от обоих кристаллов с параллельным расположением отражающих плоскостей достигаются как значительное сужение угловой ширины кривой отражения, так и большое увеличение интенсивности по сравнению с трехкристальной схемой. Однако полученная при этом кривая свертки обладает «паразитной» симметрией, как и в классическом двухкристальном спектрометре. В отличие от этого, двухкристальный спектрометр с асимметричным отражением от кристалла 1 и симметричным отражением от кристалла 2 (исследуемого) свободен от указанного недостатка.

Асимметричное отражение от одного кристалла было успешно использовано Баттерманом и Хильдебрандтом [116] для получения пучка с угловой расходимостью $\sim 0,4''$ и шириной когерентного фронта $\sim 0,5$ мм (рис. 63, в). Этот пучок направлялся на поверхность тонкой плоскопараллельной пластинки для получения кривой отражения по Брэггу, содержащей побочные максимумы маятникового решения. Диафрагма, установленная между описанным монокристалльным монохроматором и отражающей пластинкой, не может обеспечить достаточно полного устранения других пучков, помимо основного ($\lambda \neq \lambda_0$). Кроме того, при расширении волнового фронта происходит уменьшение интенсивности отраженных пучков.

Систематические исследования свойств асимметричных монохроматоров или, как их называют авторы, коллиматоров были выполнены на протяжении последних шести лет японскими исследователями Коора, Кикута и их сотрудниками [113—115, 122]. Общий подход к схемам двух- и трехкристалльных коллиматоров изложен в работе [115].

Рассмотрим задачу применительно к двухкристальному монохроматору.

Поскольку в пучках, отраженных монохроматором, наибольший интерес представляет область II полного отражения, рассматривается изменение трех параметров (в наших обозначениях): угловой величины области полного отражения $\Delta\eta_0$, согласно (7.32), и угловых смещений η_0 и η_h , падающего и отраженного лучей соответственно, согласно формулам (7.34), (7.35) и (7.39).

Следует сделать оговорку. Так как в цитируемых работах рассматривается отражение от поглощающего кристалла (Cu K α от Si или Ge), то полное отражение в области II максимума не имеет места. Вместе с тем эта область представляет основную часть площади под кривой отражения.

Исходим из выражения для угловой функции y_r в форме данной Захариасеном [уравнение (8.89)]. Учитывая далее, что величина η уменьшается при возрастании скользящего угла ω , получим

$$y_z = - [1/2(1 + b) \chi_{0r} - b(\omega - \omega_0) \sin 2\vartheta] / C | \chi_{hr} | \sqrt{b}. \quad (9.60)$$

Отсюда

$$\omega_0 = \vartheta + (1 + b^{-1}) A + b^{-1/2} B y_z, \quad (9.61a)$$

$$A = | \chi_{0r} | / 2 \sin 2\vartheta, \quad B = C | \chi_{hr} | / 2 \sin 2\vartheta, \quad (9.61b)$$

и, аналогично переходу от (7.34) к (7.39), умножая ω_0 на b , получаем

$$\omega_h = \vartheta + (1 + b) A + B y_z \sqrt{b}. \quad (9.62)$$

В выражениях для ω_0 и ω_h вторые члены справа дают угловое смещение средней точки максимума относительно угла падения, равного ϑ . Действительно, согласно (7.34) и (7.39),

$$\eta_0 = A(1 + b^{-1}), \quad \eta_h = A(1 + b). \quad (9.63)$$

Третьи члены справа в (9.61a) и (9.62) дают угловые «координаты» относительно нового «начала» — середины максимума — любой точки, отвечающей данному значению y_z . При $\Delta y_z = 2$ получим, согласно (7.32),

$$\Delta\eta_0 = 2B / \sqrt{b}, \quad \Delta\eta_h = 2B \sqrt{b}. \quad (9.64)$$

Рассмотрим теперь последовательно угловые положения средних точек максимумов η_0 и η_h и значения $1/2 \Delta\eta_0$ и $1/2 \Delta\eta_h$ при отражении от двух кристаллов относительно исходной величины ϑ .

На кристалл I падает пучок с большой угловой расходимостью. Однако эффективным для получения максимума отражения можно считать асимметричный относительно средней точки максимума ω_0 угловой интервал $2B/b_1^{1/2}$, где b_1 — соответствующий параметр для кристалла I . В этом интервале принимаем интенсивность постоянной. Отраженный от кристалла I максимум будет иметь среднюю точку на расстоянии $A(1 + b_1)$ от угла ϑ и эффективную область для получения отражения от кристалла 2 — $2B b_1^{1/2}$.

При рассмотрении отражения от кристалла 2 наиболее существенным является учет не только пучка, отраженного от области

$2B b_1^{1/2}$, который обозначается через R_I^* , но и другого отраженного пучка R_{II} , который возникает при падении на кристалл 2 фона, не попадающего в упомянутый максимум. Из этого фона эффективным будет угловой интервал $2B/b_2^{1/2}$, средняя точка которого отстоит от ϑ на величину $A(1 + b_2^{-1})$, где b_2 — соответствующий параметр для кристалла 2 . Пучок R_{II} будет, очевидно, иметь полуширину $2B b_2^{1/2}$ и среднюю точку на расстоянии $A(1 + b_2)$ от ϑ . В результате второй кристалл отразит два пучка: R_I^* и R_{II} , имеющие угловые размеры $2B b_2 b_1^{1/2}$ и $2B b_2^{1/2}$ соответственно.

Отстояние средней точки максимума R_I^* от ϑ составляет $A(1 + b_1)b_2$. Таким образом, окончательная кривая отражения после кристалла 2 $R_I^* R_{II}$ будет сверткой двух кривых, смещенных друг относительно друга на величину $A(1 - b_1 b_2)$, что приводит к образованию второго небольшого максимума и к резкому снижению интенсивности.

Наилучшим путем устранения этого эффекта является надлежащий поворот второго кристалла, что должно привести к наложению максимумов R_I^* и R_{II} . Угол поворота должен соответствовать разности между «угловыми координатами», или отклонениями от ϑ средних точек максимума, отраженного от кристалла I , и фона, т. е. величине

$$A(1 + b_2^{-1}) - A(1 + b_1) = \frac{\chi_{0r}}{2 \sin 2\vartheta} (b_2^{-1} - b_1). \quad (9.65)$$

Для такого поворота используется небольшая упругая деформация тонкой части монокристаллического блока (рис. 71). Далее, так

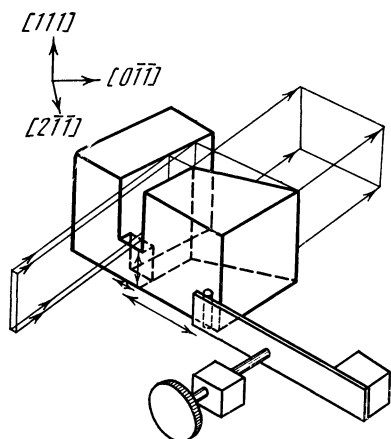


Рис. 71. Монохроматор асимметричного отражения

как величина B , согласно (9.616), будет значительно меньше для π -компоненты ввиду наличия множителя C , неполная компенсация угла, данного (9.65), приведет к затуханию π -компоненты. Отметим, что трехкристальный спектрометр из несвязанных кристаллов является более универсальным.

9.5. Некоторые итоги экспериментальной проверки динамической теории

Исследования кривых отражения. Итоги исследований кривых отражения от более или менее совершенных монокристаллов с использованием спектрометров за период времени до 40—50-х годов изложены в монографиях [6—8]. Здесь мы приведем некоторые результаты исследований, выполненных за последние 15—17 лет. Эти работы были проведены Брэгеном с сотрудниками [107, 123—125], Реннингером [101, 110], Бубаковой и др. [112, 120], Отье с сотрудниками [16, 117], Баттерманом и Хильдебрантом [116], Коора, Кикута и др. [122, 126]. Брэгген с сотрудниками получали кривые отражения и прохождения от кальцита и кварца (1954 г.), а также от кварца, германия и кремния (1962—1963 гг.) в более широком, чем ранее, спектральном диапазоне. Для получения кривых отражения использовались спектры, полученные главным образом по схеме Брэгг — Лауэ, и, в меньшей степени, по схемам Брэгг — Брэгг и Лауэ — Лауэ. Применялось как характеристическое излучение, так и белое от вольфрамового антикатада с кристаллом-монокроматором. Существенным результатом этих исследований было получение кривых отражения и прохождения от кристаллов в широком диапазоне толщин и длин волн. Эти кривые относятся как к K -, так и к L -поглощению, причем их форма в соответствии с теорией, изложенной в гл. 4, определяется только произведением μt . Это можно проиллюстрировать рис. 72, где показаны сходные кривые отражения от кристаллов кальцита разной толщины, полученные в лучах $MoK\alpha$ и $AuL\beta_1$, с величинами $\mu t = 2,6$ и $2,1$. Отметим также характерную форму кривых прохождения, обнаруживающих наличие эффекта Бормана (рис. 72, B). При обсуждении результатов авторы сопоставляли экспериментальные и рассчитанные (для кривой свертки) параметры полученных кривых: полуширину, R_{\max} , T_{\max} и их отношение, интегральные величины R_i , T_i и смещения максимумов R от максимумов T для толстых и от минимумов T для тонких образцов (рис. 73). В ряде случаев теоретические данные не могли быть получены.

Представляют интерес установленные в этих работах скачки значений полуширины, коэффициента и интегральной величины отражения на краях поглощения. Эти скачки более резко выражены при отражении по Лауэ, чем по Брэггу. Как показали Кол и Стемпл [100], отражение по Брэггу от мозаичного кристалла сопровождается более сильным скачком на крае поглощения, чем

при динамическом рассеянии. Это различие можно использовать для контроля степени совершенства кристаллических образцов (см. также [127]).

Систематическую экспериментальную проверку динамической теории в случае отражения и прохождения по Брэггу от Ge выполнил Бонзе [89]. Он использовал классический двухкристальный спектрометр по схеме $(n, -n)$. Представляют интерес результаты измерений, полученные этим автором, величины прохождения T_B . Используя машинный счет, он подбирал значения χ_{hi} для отражений 444 и 333, при которых теоретическая кривая по формуле свертки (9.26) для $T(\beta)$ наилучшим образом совпадает с экспериментальной (рис. 74). При расчете величины $C(\alpha - \beta)$ бра-

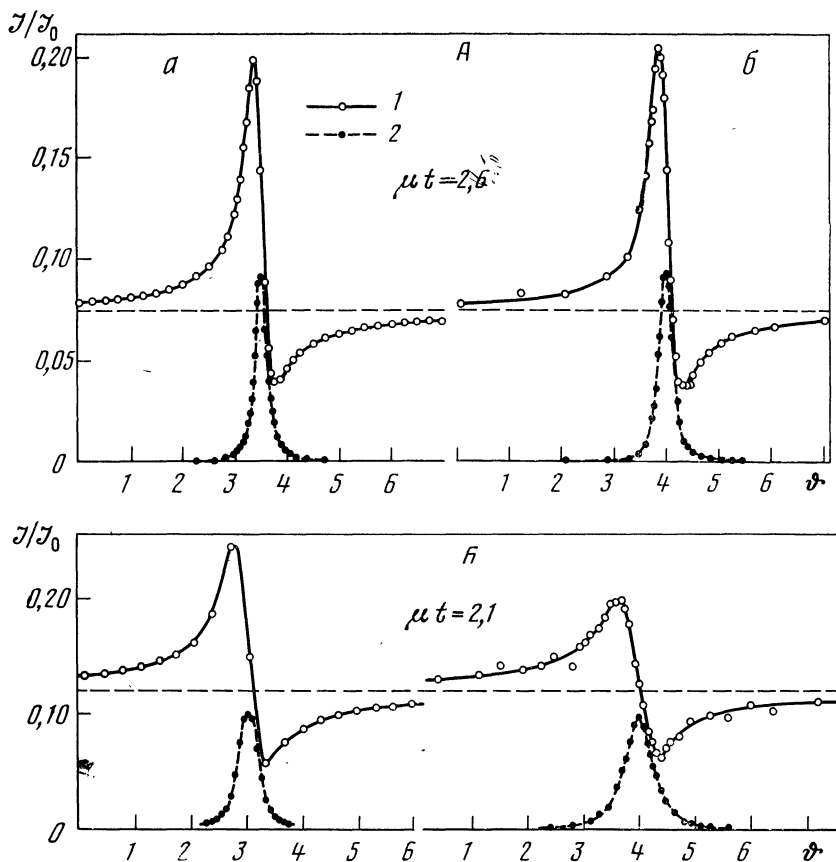


Рис. 72. Кривые отражения и прохождения 211

Излучение $Au L\beta_1$ (А) от кальцита толщиной 0,34 мм (схема съемки Лауэ — Лауэ) и $MoK\alpha_1$ (Б) от кальцита толщиной 0,91 мм (схема съемки Брэгга — Лауэ): а — теоретические кривые; б — экспериментальные кривые; 1 — кривые прохождения; 2 — кривые отражения

лись по формуле (8.98) для T_B . Им получены значения отношений χ_{hi}/χ_{oi} , равные 0,61 для 333 и 0,73 для 444.

Следует отметить, что сходимость экспериментальных и теоретических значений таких параметров, как полуширина и высота максимума кривых отражения в работах Бреггера и Бонзе определяется во многих случаях величинами порядка 10—15%. В некоторых случаях экспериментальные значения оказывались выше теоретических.

В работах Бубаковой [112] и Бубаковой, Драгокоупила и Фингерланда [109, 120], а в самое последнее время — Коора и Кикута [122, 126] была решена более специальная задача получения кривых отражения, возможно более близких к динамическому максимуму от одного кристалла. Решение было достигнуто применением трехкристалльных спектрометров. Приведем здесь результаты, по-

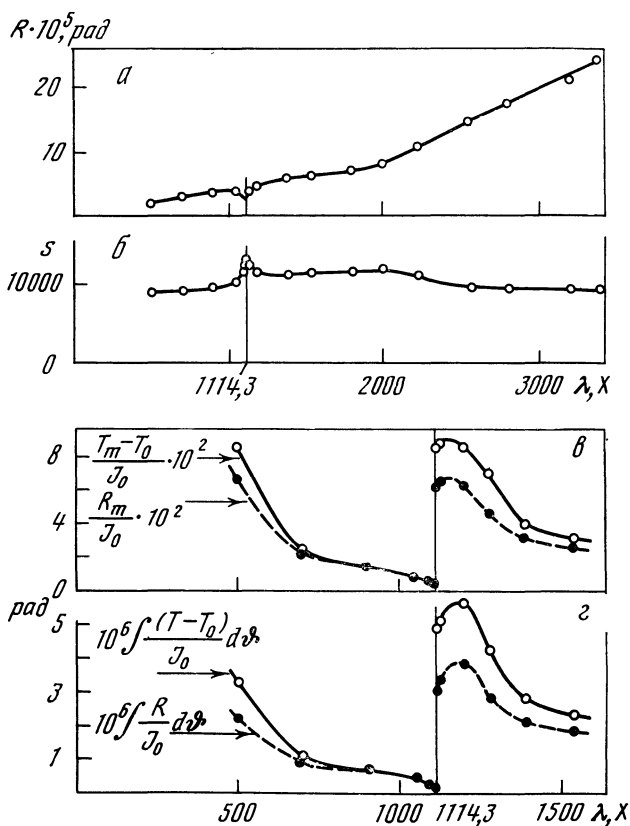


Рис. 73. Измерение параметров отражения и прохождения для рефлекса 220 Ge
 а — коэффициенты отражения в случае Брегга; б — разрешающая сила в случае Брегга;
 в — коэффициенты отражения и прохождения в случае Лауэ; г — интегральные значения
 отражения и прохождения в случае Лауэ

лученные в работе [126]. Автор поставил перед собой задачу определения структурных и атомных амплитуд из параметров кривых отражения по Брэггу. Были получены кривые отражений 422 и 333 излучения $\text{CuK}\alpha$ от Si. Использовалось излучение, прошедшее через двухкристальный монохроматор с компенсацией эффекта преломления, описанной в 9.4. Расходимость такого пучка составляла $0,10''$. Наибольший интерес представляют результаты, относящиеся к параметрам кривой отражения 422. Экспериментальная кривая отражения, средняя из тринадцати экс-

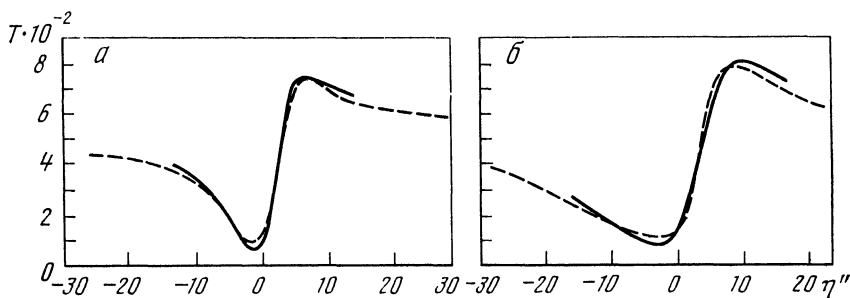


Рис. 74. Сопоставление экспериментальной и теоретической кривых прохождения в случае Брэгга (Ge, излучение $\text{CuK}\alpha$)

а — отражение 333, $t = 60$ мк; б — отражение 444, $t = 80$ мк; сплошная кривая — теоретическая, пунктирная — экспериментальная

периментов, имеет полуширину $2,963'' \pm 0,011''$ и отличается от полуширины кривой, вычисленной по формуле свертки для трехкристального спектрометра, $2,959''$ на $0,2\%$, в то время как полуширина динамического максимума для одного кристалла $2,931''$ отличается от экспериментальной величины на $1,5\%$. Хорошая сходимость достигнута для максимального отражения: экспериментальное значение — 93, теоретическое — $94,5\%$.

Исследования интерференционных эффектов маятникового решения. Начиная с работы Като и Ланга [23], было выполнено значительное число исследований, в которых удалось реализовать и более или менее детально изучить как линии равной толщины, так и побочные максимумы маятникового решения. Благодаря работам Като с сотрудниками весьма обстоятельно изучены рентнограммы с гиперболами, связанные с интерференционным эффектом при падении сферической вакуумной волны. В гл. 6 подобные секционные снимки подробно описаны в связи с теорией, развитой Като. Физические условия рассеяния, приводящие к интерференционным эффектам при сферической, а затем при плоской падающей волне, наглядно показаны в работе Харта и Милна [128] (рис. 75).

Тонкий пучок рентгеновских лучей в форме ножа без прохождения через монохроматоры падает на клин, составляющий часть

монокристаллического блока кремния. Проходя через клин при симметричном отражении, падающее излучение образует секционный снимок с гиперболами, который фиксируется на фотопластинке, укрепленной в положении 1. Если удалить фотопластинку, то рентгеновские пучки проникают в толстую плоскопараллельную пластинку, составляющую другую часть того же монокристаллического блока. После прохождения через толстую пластинку волновое поле с гиперболическими максимумами претерпевает существенное изменение как в геометрии, так и в интенсивности отдельных волн. Вследствие сужения угловой расходимости проходящих пучков каждая точка гиперболы представляет почти плоскую волну со своим значением угловой функции y . В результате вступают в силу соотношения, действительные для приближения плоской падающей волны вместо прежней, сферической волны.

Отличия обеих интерференционных картин сводятся в основном к следующему:

1) абсолютные положения полос плоской волны смещены относительно полос сферической волны на $1/4$ периода по направлению к выходной грани [ср. (6.57) и (6.54)];

2) в средней точке гиперболы, т. е. в направлении, параллельном отражающей плоскости, на достаточной глубине периоды обеих картин почти одинаковы;

3) в то время как для плоской волны периоды уменьшаются с увеличением $|y|$ внутри максимума, для сферической волны периоды возрастают; это объясняет обращение гипербол на картине плоской волны;

4) периоды обеих картин (для каждого данного значения y) слегка различаются, так как эффект модуляции картин сферической волны, связанный с интерференцией σ - и π -колебаний, пропадает ввиду поглощения π -слагающей в толстой пластинке (рис. 76). Эта интерпретация носит качественный характер и требует проверки на основе обобщенной теории.

Определение абсолютных значений атомных амплитуд. Большая серия работ, выполненных на протяжении последних семи лет, посвящена абсолютным определениям атомных амплитуд рассеяния с помощью рентгенограмм с гиперболическими полосами маятникового решения. Эти работы выполнены по преимуществу Като и его сотрудниками.

Метод, основанный на измерении периодов Λ_h интерференционных картин маятникового решения, противопоставляется методу определения структурных амплитуд из измеренных интенсивностей рассеяния от порошков. Необходимость учета вторичной экстинкции при рассеянии от порошков является источником ошибок, снижающих надежность и точность определений. От этих ошибок свободен метод измерений геометрии интерференционных картин от монокристаллов. Однако этот последний метод не может быть универсальным ввиду ограниченного числа кристаллических

веществ, которые могут быть получены в виде совершенных монокристаллов.

Вместе с тем возможность сопоставления результатов двух принципиально различных методов следует рассматривать с точки зрения точной количественной проверки динамической теории и контроля степени совершенства какой-либо кристаллической структуры.

Определение атомных амплитуд из интерференционных картин производилось с использованием клина, как это изложено в гл. 6. Однако непосредственное применение формул типа (6.76) и (6.77) затруднительно, так как геометрический фактор Φ_h при необходимости учета возможности отклонения от простейшей геометрии эксперимента требует специального исследования. В связи с этим Като [86, 129, 130] еще с 1967 г. разработал такую методику эксперимента, при которой один и тот же образец кристаллического клина используется последовательно сначала для получения секционного снимка с гиперболическими максимумами, а затем для определения χ_0 и F_0 с помощью интерферограмм. Эти последние получают внесением клина на пути одного из двух когерентных

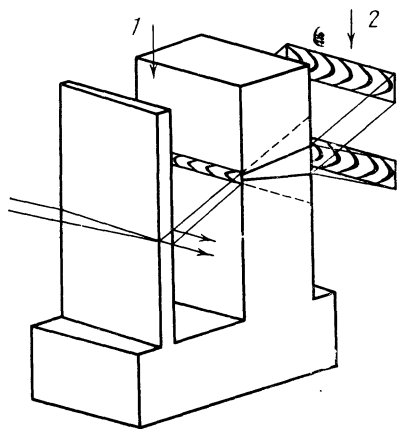
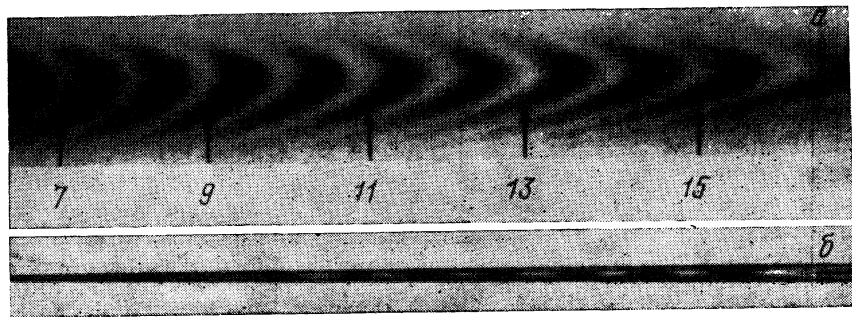


Рис. 75. Схема эксперимента для получения интерференционных полос, отвечающих падающей сферической (плоскость 1) и плоской волнам (плоскость 2)

Рис. 76. Изображение интерференционных полос, отвечающих плоской падающей (а) и сферической волнам (б)

Цифры обозначают номера максимумов



пучков в интерферометре, описанном в гл. 10. Прохождение рентгеновского пучка через клин при падении за пределами максимума влечет за собой возникновение периодически изменяющейся разности хода между когерентными волнами и образование интерференционной картины, период которой Λ_0 , аналогично Λ_h в (6.76), определяется формулой

$$\Lambda_0 = \frac{\lambda}{\chi_0} \Phi_0, \quad (9.66)$$

где Φ_0 — геометрический фактор, аналогичный Φ_h .

Переходя от χ_h и χ_0 к F_h и F_0 , заметим, что если схема эксперимента такова, что переход от секционного снимка к интерферограмме выполняется минимальным и вполне определенным числом операций, то для отношения величин двух структурных амплитуд можно написать:

$$\frac{F_h}{F_0} = \frac{1}{2 \cos \vartheta} \frac{\Lambda_0}{\Lambda_h} B, \quad B = \frac{\Phi_h}{\Phi_0}. \quad (9.67)$$

Таким путем достигается возможность более точного учета источников ошибок при определении геометрического фактора.

Здесь мы изложим в кратких чертах содержание последней работы Танемура и Като [130], посвященной определению абсолютных значений амплитуд F_h для Si. Для юстировки кристаллического клина при получении снимков обоих названных типов был изготовлен специальный двухкристальный спектрометр, в котором клин устанавливался в положение B в схеме ($n, -n$) на рис. 66. Оба кристалла в спектрометре могли перемещаться. Интерферометр был определенным образом связан с кристаллом A . Весь эксперимент проводился следующим образом. Сначала кристаллический клин устанавливался в отражающее положение по отношению к падающему пучку. Использовались симметричные отражения $AgK\alpha_1$ излучения. В этом положении клина производилась съемка секционной рентгенограммы с гиперболами. Затем клин поворачивался на угол ϑ и смещался параллельно входной грани на небольшую величину, составляющую половину ширины соответствующего пучка в интерферометре. Затем интерферометр ставился в такое положение, чтобы клин попал точно на пути одного из пучков, падающего нормально к входной грани. В этой установке клина получался снимок интерферограммы (рис. 77). Наконец, клин убирался и получался снимок картины муара, свойственной интерферометру и обязанной наличию нарушенной структуры в отдельных частях этого прибора (см. 10.3).

При расчете интерферограммы было принято, что наблюдаемый период Λ_r простейшим образом связан с периодом Λ_0 и периодом картины муара Λ_i :

$$\Lambda_r^{-1} = \Lambda_0^{-1} + \Lambda_i^{-1} \quad (9.68)$$

ввиду сложения сдвигов фаз $\varphi_r = \varphi_0 + \varphi_i$.

При расчете секционных снимков авторы исходили из схемы, показанной на рис. 78, в которой поясняются пространственные соотношения между дифракционной картиной на боковой поверхности клина A (см. также рис. 45, a) и на фотопластинке, установленной перпендикулярно к дифрагированному пучку. Необходимо учесть деформацию картины при переходе от грани A к выходной грани клина (см. рис. 45, b), а также нарушения строгой установки фотопластинки, а именно, отклонение действительной биссектрисы секционного снимка y от проекции η линии ρ и угол γ между отвесной прямой и границей снимка $W'R'$.

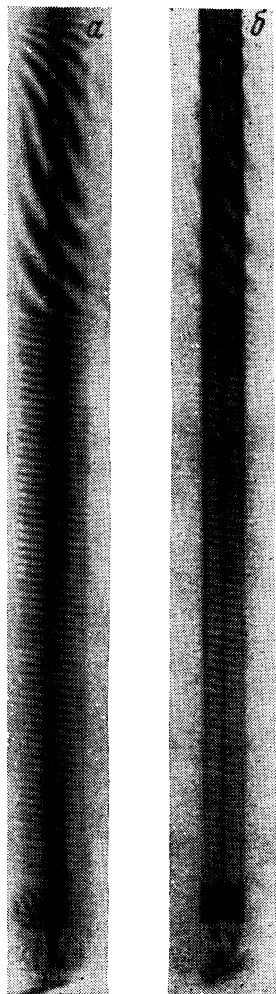
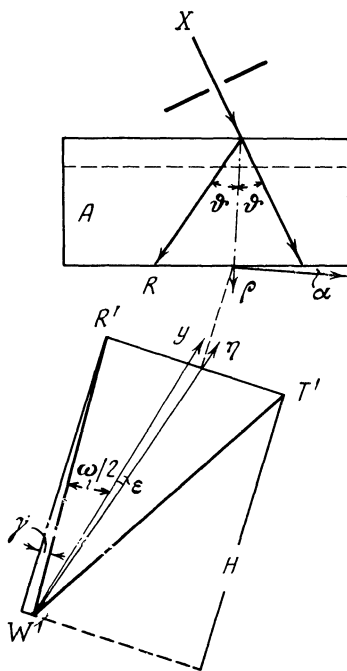


Рис. 77. Фотография интерференционных полос от клина, полученная с помощью интерферометра по схеме Жауэ

a — пучок $\mathcal{E}_0^{(d)}$; b — пучок $\mathcal{E}_h^{(d)}$

Рис. 78. Схема, поясняющая связь между картиной гипербол в кристалле и на секционном снимке



В таком случае для геометрического фактора Φ_h можно написать:

$$\Phi_h = \frac{\Delta y}{\Delta \eta} \frac{\Delta \eta}{\Delta r} \frac{\Delta r}{\Delta \rho}, \quad B = \frac{\Phi_h}{\Phi_0} \approx \frac{\cos(\omega/2)}{\sqrt{\cos \omega}}, \quad (9.69)$$

где ω — угол при вершине секционного снимка. Выражение (9.69) получено в результате анализа и исключения возможного влияния ряда источников ошибок, таких, как угол γ , отклонение от строго симметричного отражения и отклонение плоскости снимка от вертикальной. Кроме этих ошибок, были подвергнуты тщательному рассмотрению другие неточности эксперимента и основные источники ошибок при расчете теоретических значений параметров. Здесь можно отметить: 1) неточность в установке фотопластины и непостоянство расстояния образец — фотопластина как при изменении угла (переход к другим отражениям), так и при переходе от секционного снимка к интерферограмме; 2) поправки на температурный ход множителя Дебая — Валлера, на дисперсию ($\Delta f'$), на преломление в воздухе для F_0 и на рассеяние на ядрах для отражений высших порядков.

Итогом этого анализа, а также некоторых контрольных экспериментов и измерений была следующая оценка точности полученных значений атомных амплитуд рассеяния. Максимальные отклонения в сериях определений f для отражений 111, 220, 333, 440, 444 от 0,34% для 333 до 0,03% для 444. Вероятные ошибки измерений для первых четырех отражений 0,02; 0,01; 0,04 и 0,03% соответственно. Значения атомных амплитуд рассеяния $|f|$ кремния, согласно новейшим определениям различных авторов, представлены ниже.

Отражение	111	220	333	440	444
Танемура, Като [130]	10,66 ₁	8,46 ₃	5,84 ₃	5,40 ₈	4,17 ₂
Гетлихер, Вельфель [134]	10,72	8,45	5,90	5,36	4,18
Харт, Милн [131], [132]		8,478 (Mo) 8,448 (Ag) 8,487 (Mo) 8,494 (Ag)			

В работах Харта и Милна [131, 132] были также выполнены тщательные определения атомных амплитуд для отражения 220 излучений $MoK\alpha$ и $AgK\alpha$ от кремния. В работе [131] были использованы секционные снимки и особое внимание было обращено на устранение влияния деформаций и дефектов в структуре образца. В работе [132] авторы регистрировали интерференционную картину, возникающую при последовательном прохождении

двух пластин (из одного блока) и воздушного зазора между ними. Теорию этого метода, представляющего интерес при исследовании деформированных кристаллов, разработали Отье, Милн и Соваж [133]. Различие в значениях атомных амплитуд, полученных в работах [131, 132] при использовании двух различных излучений, авторы приписывают различиям в значениях дисперсионного члена $\Delta f'$.

Наконец, значения атомных амплитуд получены Гетлихером и Вэльфелем [134] из измерений интенсивности рессеяния в порошках и находятся в ряду лучших определений такого рода. Эти данные пересчитаны на излучение $AgK\alpha_1$. Добавим, что в работе Кикута [126] значение $f = 6,71 \pm 0,01$ для отражения 422 было определено из полуширины кривой отражения по Брэггу. Хорошая сходимость величин, полученных различными авторами, особенно относится к f_{220} , здесь расхождения 0,2% и менее. Существенно также подчеркнуть, что авторы [130] не считают возможным приводить какие-либо теоретические значения атомных амплитуд ввиду их недостаточной точности.

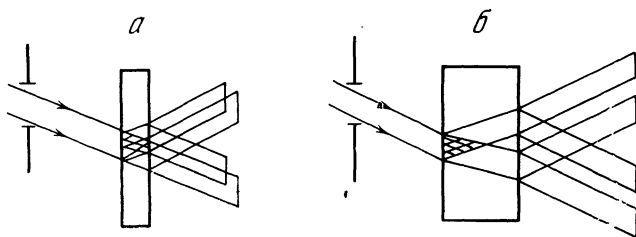


Рис. 79. Схема опыта Отье и Мальгранж

а — прохождение пучка через тонкую часть клина и образование полос маятникового решения постоянной толщины;

б — прохождение пучка через толстую часть клина и разделение волновых полей, возникших в кристалле

В работе Мальгранж и Отье [135] в одном эксперименте были реализованы две разные области рассеяния в смысле соотношения между шириной фронта падающей плоской волны и толщиной кристаллической пластинки. Авторы использовали монохроматор, основанный на эффекте Бормана (см. рис. 69). Рентгеновский пучок с сечением в форме ленты падал на кристаллический клин из Si таким образом, что пучок покрывал как толстую, так и тонкую части клина (рис. 79). В тонкой части клина (толщина ~ 50 мкм) происходило перекрытие волновых полей и образование интерференционной картины, теория которого дана в 3.4. Исследовалось отражение 220 в лучах $MoK\alpha$. Расчет периода Λ был основан на формуле (3.108) при $\gamma'_h \approx \cos \mu$. В таком случае

$$\Lambda = \lambda (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} (C | \chi_h | \operatorname{tg} \mu \sqrt{1 + y^2})^{-1}.$$

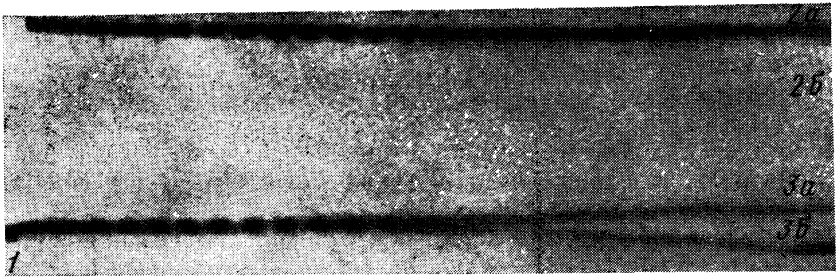


Рис. 80. Фотографии, полученные в работе Олье и Мальгранж

Левая часть соответствует прохождению через тонкую часть клина и содержит полосы постоянной толщины; правая часть соответствует прохождению через толстую часть клина; полоски *a* и *b* соответствуют двум волнам в кристалле

Подставляя $(\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} = 0,983$, $y \approx 0,6$, $\text{tg } \mu = 0,21$ и $|\chi_h| \approx \approx 2,04 \cdot 10^{-6}$, получаем $\Lambda = 140 \text{ мкм}$ при экспериментальной величине 132 мкм .

В толстой части клина происходило разделение двух полей. Для определения расстояния между участками обоих полей на выходной грани можно использовать формулу (5.276) для углов $\epsilon_2(y)$ и $\epsilon_1(-y)$, образуемых векторами $\bar{S}^{(2)}$ и $\bar{S}^{(1)}$ с биссектрисой j угла 2ϕ между s_0 и s_h . Использование формулы (5.276), выведенной для симметричного отражения, оправдывается близостью отношения γ_h/γ_0 к 1 в данном эксперименте. Итак,

$$\text{tg } \epsilon_2(y) = \text{tg } \epsilon_1(-y) = \frac{y \text{ tg } \phi}{(1 + y^2)^{1/2}} = 0,104.$$

Это расхождение векторов $\bar{S}^{(i)}$ на выходной границе пластинки толщиной $0,6 \text{ мм}$ составляет 120 мкм и на рис. 80 (с увеличением $\times 38$) величину $\sim 5 \text{ мм}$.

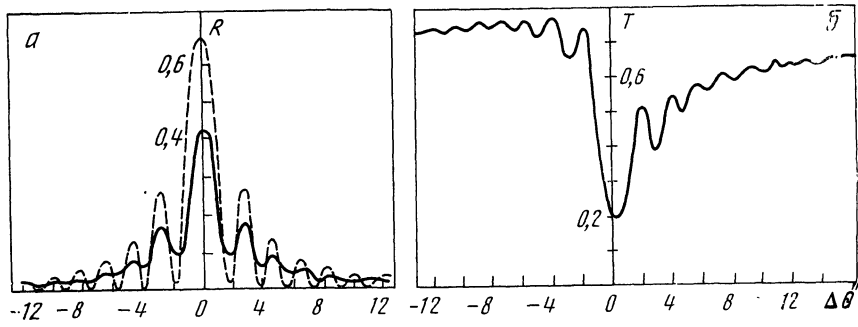


Рис. 81. Кривые отражения (а) и прохождения (б) с побочными максимумами маятникового решения (случай Лауэ)

Если в описанном исследовании наблюдались линии равной толщины, то в другой работе Лефельд-Сосновской и Мальгранж [117] были получены побочные максимумы маятникового решения от почти плоскопараллельной пластинки кремния в лучах $\text{CuK}\alpha$ и $\text{AgK}\alpha$. Исследовалось отражение 220. Использовался монохроматор того же типа, что и в работе Отье и Мальгранж. Кривые отражения и прохождения по Лауэ с побочными максимумами были получены от пластинок толщиной от 47 до 13 мк. Такие пластинки представляли донья ямок, вытравленных в монокристалле,

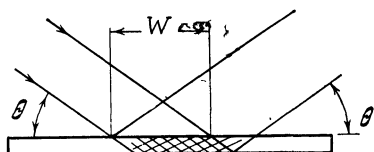


Рис. 82. Схема образования побочных максимумов в случае Брэгга

благодаря чему обладали достаточной жесткостью в ходе эксперимента. Как можно видеть из рис. 81, полученные кривые отражения и прохождения обладали достаточным разрешением, причем угловые расходимости максимумов находились в согласии с теорией. Вместе с тем обращает на себя внимание недостаточный контраст дифракционной картины. Сильный диффузный фон может быть связан как с неоднородностью пластинки по толщине, так и с влиянием щелевой диафрагмы, установленной между кристаллом-монохроматором и исследуемым образцом. Влияние диафрагмы анализируется в работе.

Аналогичные результаты были получены при отражении по Брэггу в работе [116]. Используя описанный выше однокристалльный монохроматор с асимметричным отражением по Брэггу, ав-

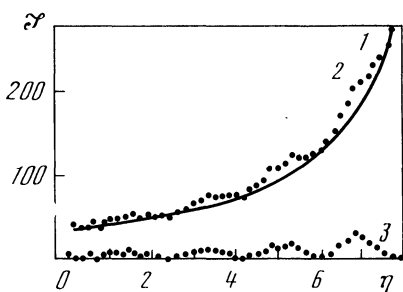


Рис. 83. Кривая отражения по Брэггу, содержащая побочные максимумы (Si , $t = 13,6$ мк, 333 , $\text{GuK}\alpha$)

- 1 — линия фона;
- 2 — линия фона и интенсивности;
- 3 — линия интенсивности за вычетом фона

торы получили кривую отражения от тонкой плоскопараллельной пластинки. Как ясно из рис. 82 [см. уравнения (7.46) — (7.48)], интерференция в пластинке возникает между вторым полем, идущим сверху, и первым полем, отраженным от нижней грани. Условие перекрытия этих полей является достаточная ширина фронта падающей волны. На экспериментальной кривой (рис. 83)

наблюдаются максимумы, положения которых находятся в соответствии с теорией [см. уравнения (8.39) и (8.72)]. Однако и здесь, как и в работе [117], контраст является очень слабым, что объясняется теми же причинами.

Заканчивая краткий обзор экспериментальных исследований, в которых ставилась задача количественной проверки теории, следует сделать три замечания.

Проверка теории в приближении падающей сферической волны достигла достаточно высокого экспериментального уровня, однако важный параметр рассеяния, а именно, ширина входной щели или фронта падающей волны, пока остается полностью неизученным.

Проверка теории в приближении плоской падающей волны развивается несравненно медленнее, что связано с отставанием в разработке монохроматоров и трудностями приготовления образцов для исследований в области малых и средних значений μt .

Наконец; сопоставление с теорией результатов прецизионных определений затруднительно ввиду отсутствия точных методов расчета тепловых параметров и параметров рассеяния и поглощения на отдельных атомах.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ. КАРТИНЫ МУАРА ПРИ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Рентгеновская интерферометрия является замечательным достижением современной экспериментальной физики. Действительно, подобные интерферометры позволили реализовать возможность абсолютных измерений длин с точностью порядка ангстрема. В первых же экспериментах с таким прибором было обнаружено явление муара при рентгеновской дифракции, которое является, по-видимому, самым чувствительным методом регистрации и точных измерений нарушений идеальной структуры кристаллов. В отличие от оптических интерферометров, в рентгеновских приборах для разделения и отклонения когерентных пучков используется дифракция. Явление преломления в линзах не может дать надлежащего эффекта ввиду ничтожной величины разности $(1 - n)$ для рентгеновских лучей.

Фундаментальная трудность, возникающая при создании рентгеновского интерферометра, это — необходимость обеспечить с точностью до долей ангстрема заданную разность хода двух когерентных пучков. Эта трудность была преодолена использованием одного монокристаллического блока высокосовершенного кристалла Si и кварца для изготовления всего прибора.

Рентгеновские интерферометры могут различаться в зависимости от используемого типа отражений. Соответственно могут быть интерферометры по Лауэ, по Брэггу и смешанного типа. Наибольшее значение до сих пор приобрел интерферометр по Лауэ.

10.1. Рентгеновские интерферометры

Интерферометр по Лауэ был описан Бонзе и Хартом в 1965 г. [28]. Схематический план прибора дает рис. 84. S , M и A — пластинки, перпендикулярные общему основанию, изготовленные из одного монокристаллического блока кремния. Пучок рентгеновских лучей $D_0^{(a)}$ падает на разделитель S , после которого прошедший и дифрагированный пучки D_0^I и D_h^{II} «преломляются» путем дифракции в зеркалах M^I и M^{II} . Дифрагированные пучки \mathcal{D}_h^I и \mathcal{D}_0^{II} рекомбинируют в кристалле-анализаторе A . В результате образуются два выходящих из интерферометра пучка $\mathcal{D}_0^{(d)}$ и

$\mathcal{D}_h^{(d)}$. Используя достаточно толстые пластинки S , M и A (отражение 220 $\text{CuK}\alpha$), авторы уменьшили число действующих волновых полей в кристаллах и обеспечили применимость приближения плоской падающей волны. Несколько позже [136, 137] хорошие результаты при пониженном контрасте были получены на интерферометре по Ляуэ в режиме прозрачного кристалла.

В теории прибора Бонзе и Харта [28] используются соотношения, относящиеся к прозрачному кристаллу, но применительно к пластинкам S и M учитывается лишь второе поле. В работе [138] Бонзе и Те-Каат рассмотрели интерференционные эффекты в приборе, возникающие при расфокусировке.

Здесь будем придерживаться следующих обозначений. Наряду с амплитудами D будем рассматривать волновые функции \mathcal{D} . Волны в воздушных промежутках снабжаются дополнительной цифрой I или II сверху, номером пути в интерферометре. Волны внутри кристаллов имеют номер волнового поля (арабские цифры) внизу и наименование кристалла и номер пути сверху. Волновые векторы имеют номер волнового поля также внизу, а величины δ — номер сверху.

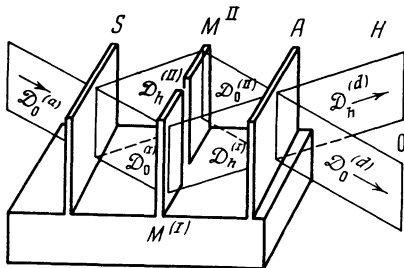


Рис. 84. Схема интерферометра с отражением по Ляуэ

Очевидно, что на всех границах кристалл — вакуум (воздух) используются пограничные условия для волновых векторов типа (3.1) для каждого из полей и для проходящей и дифрагированной волн отдельно:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_0^{(a)} - \mathbf{k}_{01} &= K\delta^{(1)}\mathbf{n}_0, & \mathbf{K}_0^{(a)} - \mathbf{k}_{02} &= K\delta^{(2)}\mathbf{n}_0, \\ \mathbf{K}_h^{(a)} - \mathbf{k}_{h1} &= K\delta^{(1)'}\mathbf{n}_0, & \mathbf{K}_h^{(a)} - \mathbf{k}_{h2} &= K\delta^{(2)'}\mathbf{n}_0. \end{aligned} \quad (10.1)$$

Используя стандартные пограничные условия для волновых функций типа (3.29), а также (3.50) на входных и выходных гранях кристаллов S , M , A , которые мы не будем здесь приводить, выпишем значения амплитуд, которые определяются из этих условий (индекс l относится к входным поверхностям, индекс u — к выходным).

1. Из условий на поверхности S_l ($r\mathbf{n}_0 = 0$) [см. (3.51) и (3.52)] получаем

$$D_{02}^S = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)}}{c^{(1)} - c^{(2)}}, \quad D_{h2}^S = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)}c^{(2)}}{c^{(1)} - c^{(2)}}. \quad (10.2)$$

2. Из условий на поверхности $S_u (rn_0) = t_S$

$$D_0^I = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)}}{c^{(1)} - c^{(2)}} \exp(2\pi i K \delta^{(2)} t_S),$$

$$D_h^{II} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)} c^{(2)}}{c^{(1)} - c^{(2)}} \exp(2\pi i K \delta^{(2)} t_S). \quad (10.3)$$

3. Из условий на поверхности $M_l^I (rn_0) = x_1 + t_S$:

$$D_{02}^{MI} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^2} \exp(-2\pi i K \delta^{(2)} x_1),$$

$$D_{h2}^{MI} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^2} \exp(-2\pi i K \delta^{(2)} x_1). \quad (10.4)$$

4. Из условий на поверхности $M_l^{II} (rn_0) = x_{II} + t_S$:

$$D_{h2}^{MII} = -D_0^{(a)} \frac{c^{(1)} c^{(2)^2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^2} \exp(-2\pi i K \delta^{(2)'} x_{II}),$$

$$D_{02}^{MII} = -D_0^{(a)} \frac{c^{(1)} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^2} \exp(-2\pi i K \delta^{(2)'} x_{II}). \quad (10.5)$$

5. Из условий на поверхности $M_u^I (rn_0) = t_S + x_I + M_{MI}$:

$$D_h^I = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^2} \exp\{2\pi i K [\delta^{(2)'} (t_S + x_I + t_{MI}) - \delta^{(2)} x_I]\}. \quad (10.6)$$

Из условий на поверхности $M_u^{II} (rn_0) = t_S + x_{II} + t_{MII}$:

$$D_0^{II} = -D_0^{(a)} \frac{c^{(1)} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^2} \exp\{2\pi i K [\delta^{(2)} (t_S + x_{II} + t_{MII}) - \delta^{(2)'} x_{II}]\}. \quad (10.7)$$

6. Из условий на поверхности $A_l (rn_0) = t_S + x_I + t_{MI} + y_I = t_S + x_{II} + t_{MII} + y_{II} = L$ (выписываем амплитуды для обоих полей):

для первого пути:

$$D_{h2}^{AI} = -D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^2} c^{(2)^2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp[-2\pi i K (\delta^{(2)'} y_I + \delta^{(2)} x_I)],$$

$$D_{02}^{AI} = -D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp[-2\pi i K (\delta^{(2)'} y_I + \delta^{(2)} x_I)], \quad (10.8)$$

$$D_{h1}^{AI} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^3} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp\{-2\pi i K [(\delta^{(1)'} - \delta^{(2)'}) L + \delta^{(2)} x_I + \delta^{(2)'} y_I]\}, \quad (10.9)$$

$$D_{01}^{AI} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)^2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp\{-2\pi i K [(\delta^{(1)'} - \delta^{(2)'}) L + \delta^{(2)} x_I + \delta^{(2)'} y_I]\};$$

для второго пути:

$$D_{02}^{AII} = - D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K (\delta^{(2)} y_{II} + \delta^{(2)'} x_{II})\}, \quad (10.10)$$

$$D_{h2}^{AII} = - D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K (\delta^{(2)} y_{II} + \delta^{(2)'} x_{II})\},$$

$$D_{01}^{AII} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)} c^{(2)2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K [(\delta^{(1)} - \delta^{(2)}) L + \delta^{(2)'} x_{II} + \delta^{(2)} y_{II}]\}, \quad (10.11)$$

$$D_{h1}^{AII} = D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K [(\delta^{(1)} - \delta^{(2)}) L + \delta^{(2)'} x_{II} + \delta^{(2)} y_{II}]\}.$$

7. Из условий на поверхности $A_u (r n_0) = L + t_A$:

$$D_0^{I(d)} = - D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K [\delta^{(2)'} y_I + \delta^{(2)} x_I - \delta^{(2)} (L + t_A)]\}, \quad (10.12)$$

$$D_h^{I(d)} = - D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K [\delta^{(2)'} y_I + \delta^{(2)} x_I - \delta^{(2)'} (L + t_A)]\},$$

$$D_0^{II(d)} = - D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K [\delta^{(2)'} x_{II} + \delta^{(2)} y_{II} - \delta^{(2)} (L + t_A)]\}, \quad (10.13)$$

$$D_h^{II(d)} = - D_0^{(a)} \frac{c^{(1)2} c^{(2)2}}{(c^{(1)} - c^{(2)})^3} \exp \{- 2\pi i K [\delta^{(2)'} x_{II} + \delta^{(2)} y_{II} - \delta^{(2)'} (L + t_A)]\}.$$

Для отношения амплитуд пар волн, формирующих выходные волны $\mathcal{D}_0^{(d)}$ и $\mathcal{D}_h^{(d)}$, получаем

$$D_0^{I(d)}/D_0^{II(d)} = D_h^{I(d)}/D_h^{II(d)} = \exp \{- 2\pi i K [\delta^{(2)'} (y_I - x_{II}) + \delta^{(2)} (x_I - y_{II})]\}. \quad (10.14)$$

Отсюда следуют условия для точного совпадения фаз этих пар волн:

$$y_I = x_{II}, \quad x_I = y_{II}. \quad (10.15)$$

Таким образом, интерферометр, собранный согласно описанной схеме и условиям (10.15), обеспечивает максимальную интенсивность на всей площади сечения пучков $\mathcal{D}_0^{(d)}$ и $\mathcal{D}_h^{(d)}$. При смещении фазы одного из пучков \mathcal{D}_0^I , \mathcal{D}_h^{II} , \mathcal{D}_h^I , \mathcal{D}_0^{II} на вели-

чину π пучки, представленные отношениями (10.14), будут иметь противоположные по знаку амплитуды и выходные пучки — нулевую интенсивность. Существенное значение имеют соотношения фаз и амплитуд волновых функций внутри кристалла анализатора. Для первого поля, сопоставляя попарно волновые функции преломленных (\mathcal{D}_{01}^{AI} и \mathcal{D}_{01}^{AII}) и дифрагированных волн (\mathcal{D}_{h1}^{AI} и \mathcal{D}_{h1}^{AII}), замечаем, что фазовые множители в каждой паре равны, если учесть условия идеальной геометрии (10.15 [см. (10.9) и (10.11)]).

Для сравнения амплитудных множителей необходимо использовать соотношения [см. (3.11)]

$$c^{(1)}c^{(2)} = (-\gamma_0/\gamma_h)(\chi_h/\chi_{\bar{h}}) = -1, \quad (10.16)$$

причем величина -1 соответствует случаю симметричного отражения от centrosymmetric кристалла. В таком случае мы получим для отношения амплитудных множителей в каждой паре волн, в первом поле, величину $-c^{(1)2}$. Если учесть сужение волнового фронта проходящих лучей в толстом поглощающем кристалле, эта величина будет близка к -1 .

Таким образом, безотносительно к поглощению волны, относящиеся к первому полю, будут взаимно поглощаться внутри кристалла-анализатора A . Однако это возможно лишь при условии точного совпадения положений отражающих плоскостей в кристаллах A , с одной стороны, и S и M , с другой. Это совпадение может быть достигнуто в однокристалльном интерферометре использованием высокосовершенного монокристаллического блока и в двухкристалльном — соответствующей взаимной юстировкой кристаллов. Если в двухкристалльном приборе анализатор A будет смещен точно в направлении вектора дифракции \mathbf{h} на отрезок $d_h/2$, то взаимная компенсация волн будет иметь место для второго поля, но, так как первое поле погашается вследствие поглощения, интенсивность выходящих пучков будет равна нулю. Отсюда следует, что подобный интерферометр может быть использован для измерения отрезков порядка долей одного ангстрема.

Как следует из условия (10.15), а также из условий на поверхности A_1 , необходимо выполнение равенства $t_{MI} = t_{MII}$, хотя, например, отстояния обоих зеркал M от разделителя S могут быть различными, что представляет известные удобства.

Рассматривая реальный эксперимент и трудность выполнения равенства (10.15), которое обеспечивает «идеальную геометрию» интерферометра, можно отметить, что «оптическая» полировка оказывается достаточной. Это следует из правой части (10.14), в которой величины $\delta^{(2)'} и \delta^{(2)}$ порядка $10^{-5} \div 10^{-6}$ и поэтому неровности порядка $10^4 \div 10^5$ от длины волны, т. е. от 1 до 10 мкм, приведут к изменениям фаз $\sim 2\pi/10$, что является еще вполне допустимым.

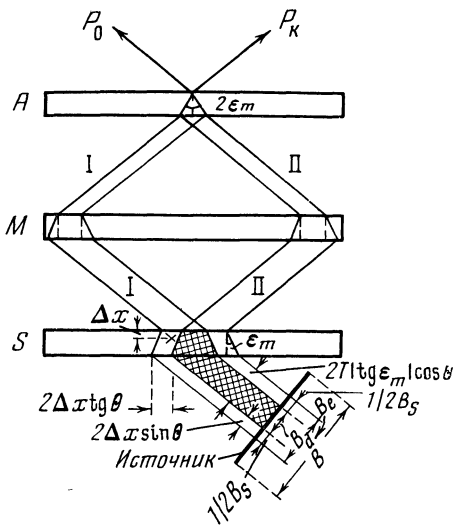


Рис. 85. Схема интерферометра с источником конечных размеров

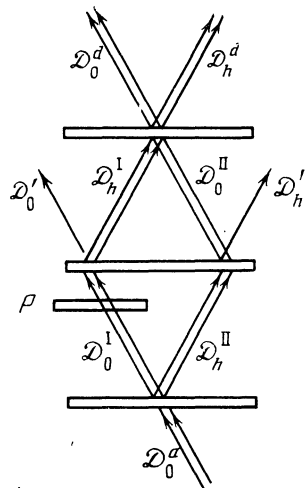


Рис. 86. Схема эксперимента с созданием разности хода когерентных волн

Переходим к численным оценкам применимости приближения плоской падающей волны, которой соответствует изложенная теория прибора. Как известно, антикатод рентгеновской трубки в совокупности с диафрагмами на пути пучка формирует сферическую падающую волну, которая может быть аппроксимирована суперпозицией плоских волн. Однако использование толстых поглощающих кристаллов радикально меняет ситуацию. В качестве типичного случая можно рассмотреть пример 220 отражения $\text{CuK}\alpha$ излучения от кристаллов Si, суммарной толщиной $T = t_s + t_m + t_A \approx 1,5 \text{ мм}$, что соответствует $\mu t = 22$. Излучение, проникающее через кристалл подобной толщины (при расстоянии от источника до $S_1 \approx 500 \text{ мм}$), будет иметь на выходной поверхности A_u расходимость $\sim 1''$. Это, в свою очередь, соответствует эффективной ширине источника рентгеновских лучей в $2,5 \text{ мкм}$ и такой же ширине области, прозрачной для этого источника, на входной поверхности S_1 . Поперечный размер френелевской зоны на S_1 от указанного малого источника составит примерно 30 мкм , что при ширине источника $2,5 \text{ мкм}$ с избытком обеспечит постоянство фазы вдоль фронта падающей волны.

С другой стороны, расходимость $\sim 1''$ на выходной поверхности кристалла-анализатора A соответствует когерентному участку волнового фронта $\sim 130 \text{ мкм}$. Это обстоятельство важно в двух отношениях. Во-первых, оно обеспечивает фокусировку бесконечно тонких лучей $\mathcal{D}_0^{I(d)}$, $\mathcal{D}_0^{II(d)}$, так же как и $\mathcal{D}_h^{I(d)}$, $\mathcal{D}_h^{II(d)}$, даже при

небольших отклонениях от идеальной геометрии уравнений (10.15). Эти уравнения, в свою очередь, можно рассматривать как условия фокусировки, действительные и в том случае, когда падающая волна не вполне строго является плоской, а скорее может рассматриваться как слегка сферическая. Во-вторых, наличие небольшой конечной угловой области для фокусировки пучков в кристалле A (ϵ_m , рис. 85) имеет непосредственное отношение к ширине источника или его размерам в плоскости, параллельной основанию интерферометра. Так как различные точки излучают взаимно некогерентно, то условия (10.15) означают, что поперечное смещение пучков I и II таково, что оно обеспечивает равенство фаз на выходе из кристалла A для всех точек эффективной части B_e источника, где

$$B_e = 2T |\operatorname{tg} \epsilon_m| \cos \vartheta. \quad (10.17)$$

Описываемый интерферометр является ахроматическим прибором, так как условия для минимума и максимума интенсивности не зависят от длины волны. При изменении длины волны должно наблюдаться смещение облучаемых областей в зеркалах M .

Вводя в один из промежуточных пучков (например, путь I) интерферометра клин P с ребром, параллельным основанию прибора (рис. 86), мы получим непрерывное и периодическое изме-

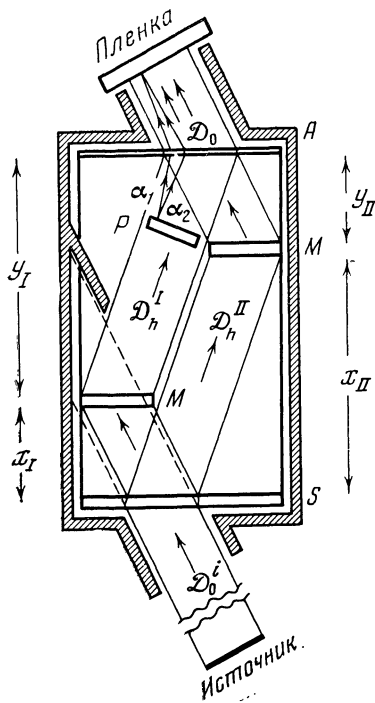
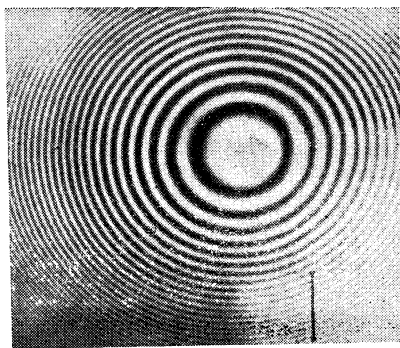


Рис. 87. Схема эксперимента с получением интерференционной картины от плосковогнутой линзы

Рис. 88. Интерференционная картина от плосковогнутой линзы с отверстием в центре



нение фазы для этого пучка относительно другого (путь II). Возникающая при этом интерференционная картина может быть использована для определения показателя преломления n для данного излучения в материала клина. Значения периодов изменений разности хода внутри клина Λ_0^K и на выходной грани Λ_0 при перпендикулярном падении на входную грань (за пределами максимума!) выражаются известными соотношениями

$$\Lambda_0^K = \frac{\lambda}{n-1} = \frac{2\lambda}{\chi_0}, \quad \Lambda_0 = \Lambda_0^K \operatorname{ctg} \mu. \quad (10.18)$$

где μ — угол клина. По существу, тот же эффект имел место при образовании интерференционной картины от плосковогнутой линзы, введенной на пути одного из пучков в интерферометре по Лауэ в первой работе Бонзе и Харта [28] (рис. 87 и 88).

10.2. Работа интерферометра при нарушенной фокусировке

Как мы отмечали выше, условия идеальной геометрии (10.15) одновременно являются условиями фокусировки пучков, излучаемых всеми точками линейного источника с шириной B_e в плоскости, параллельной основанию прибора.

В связи с процессом наладки подобного интерферометра, так же как и двухкристального прибора, возникает задача расчета и экспериментального исследования изображений, которые возникают в сечении выходных пучков в случае расфокусировки. Бонзе и те-Каат [138] выполнили подобное исследование применительно главным образом к двум типам нарушений: отклонение от условий (10.15) и использование источников с шириной $B > B_e$.

Для упрощения задачи рассматривался прибор, для которого условия идеальной геометрии имели вид

$$x = y, \quad x = x_I = x_{II}, \quad y = y_I = y_{II}. \quad (10.19)$$

В интерферометре осуществлялось симметричное отражение 220 излучения $\text{Cu } K\alpha$ в кристалле кремния.

Нарушение фокусировки определяется величиной

$$\Delta x = y - x \quad (10.20)$$

Для исследования влияния величины Δx на распределение интенсивности в поперечных сечениях выходных пучков был изготовлен интерферометр (рис. 89) с пластинкой анализатора A , наклоненной к плоскости, параллельной пластинкам S и M , на небольшой угол $\alpha' = \arctg \alpha = 1^\circ 15'$. При этом на некоторой высоте от основания переменная величина расстояния от M до A y точно отвечала условию (10.20). Выше этой идеальной плоскости $\Delta x > 0$, ниже — $\Delta x < 0$. В таком случае при фотографировании сечения выходных пучков $\mathcal{D}_0^{(d)}$ и $\mathcal{D}_h^{(d)}$ сверху вниз по

вертикали полученных изображений величина параметра Δx изменялась линейно, от Δx_{\max} до Δx_{\min} , проходя через значение 0.

Для описания интерференционных картин, возникающих при расфокусировке, необходимо вычислить величину разности фаз пучков, прошедших пути I и II интерферометра, в функции от Δx . Эту разность фаз можно отнести к оси l_1 (см. рис. 89), направленной параллельно основанию прибора, с началом в точке O ,

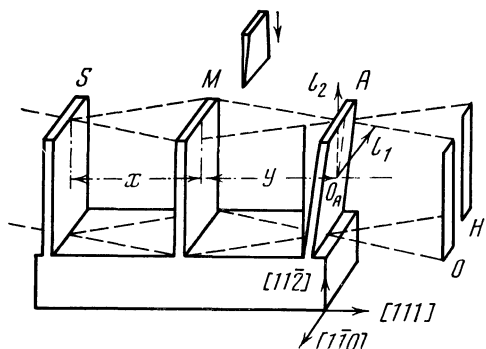


Рис. 89. Схема интерферометра, использованного при исследовании работы прибора с нарушенной фокусировкой

лежащей на средней плоскости с $\Delta x = 0$. Другая координата l_2 линейно связана с величиной Δx :

$$l_2 = \frac{\Delta x}{\alpha} = \frac{\Delta x}{\operatorname{tg} \alpha'} \quad (10.21)$$

Если обратиться сначала к источнику и учесть расходимость двух когерентных волн, выходящих из каждой его точки под малым (предельным) углом $\Delta\psi$, то можно ввести некоторый интервал Λ , аналогичный периоду стоячих волн $d/2$ при отражении под углом Вульфа — Брэгга. Уравнение для Λ при угле $\Delta\psi/2$ имеет вид

$$\Lambda = \frac{\lambda}{2 \sin(\Delta\psi/2)} \approx \frac{\lambda}{\Delta\psi} \quad (10.22)$$

Волны, различающиеся направлением на величину $\Delta\psi$, образуют соответственно два различных угла η внутри максимума, что и приводит к образованию интерференционных полос с указанным интервалом Λ .

Введем помимо accommodation δ_0 (см. рис. 90) соответствующую величину для отраженных волн δ_h :

$$\delta_0 = \overline{AP_0}, \quad \delta_h = \overline{AP_h}, \quad K(\delta_0 - \delta_h) = K\eta 2 \sin \vartheta. \quad (10.23)$$

Рассматривая распространение указанных двух волн по путям I и II в интерферометре и снабжая относящиеся к ним величины буквами a и b , запишем величину разности углов падения и, следовательно, углов η внутри максимума:

$$\Delta\psi = \frac{1}{2 \sin \vartheta} [(\delta_0^a - \delta_h^a) - (\delta_0^b - \delta_h^b)] = (\eta^a - \eta^b). \quad (10.24)$$

С другой стороны, величина $\Delta\psi$ связана с разностью хода и, следовательно, с разностью фаз волн, которые распространяются по первому и по второму пути. Эта разность фаз возникает, во-первых, внутри кристаллов, на отрезке пути T , во-вторых, вследствие расхождения на угол $\Delta\psi$ при выходе из источника и, наконец, ввиду различного поперечного смещения, главным образом в зеркале M . Выражение для полной разности фаз сначала задается в функции от аккомодаций δ . Затем, используя соотношения (3.7), (3.14) и (3.15), можно перейти к амплитудным коэффициентам отражения s , которые будут различными на путях I и II (соответственно s_a и s_b). Окончательные простые формулы были получены разложением выражений для s в ряд по степеням малых величин: $(l_1 \operatorname{ctg} \vartheta \pm \Delta x) T$. Отсюда связь между $\Delta\psi$ и Δx была получена в следующей форме:

$$\Delta\psi = 2 | \chi_h | \Delta x / T \sin 2\vartheta, \quad (10.25)$$

откуда (см. (10.22))

$$\Lambda = \Lambda_x, \quad \Delta x = \Lambda / \Lambda_x. \quad (10.26)$$

Таким образом, интерференционные картины, связанные с нарушением условий идеальной геометрии (10.15) или же с интерференцией волн, выходящих из источника под углом $\Delta\psi$, эквивалентны.

Заметим также, что в расфокусированном приборе описанного типа (рис. 89) возникает плоскость антисимметрии, перпендикулярная основанию интерферометра и проходящая через его середину. В точках, симметричных относительно этой плоскости, разность фаз волн, идущих по путям I и II, имеет противоположный знак. Вместе с тем на этой плоскости фокусировка сохраняется.

Изложенный в кратких чертах анализ приводит к следующему уравнению для линий равных фаз в плоскости поперечного сечения выходного пучка:

$$l_1 l_2 = \lambda T m \operatorname{tg} \vartheta / \alpha | \chi_h |, \quad (10.27)$$

где m принимает последовательный ряд целочисленных значений. Для того чтобы выявить гиперболы (10.27) в достаточной области изменений координат l_1 и l_2 , можно воспользоваться введением клина на пути одного из пучков в приборе. Если ребро клина параллельно одной из осей, картина смещается вдоль этой оси на отрезок, пропорциональный Λ^{-1} — величине, обратной периоду полос.

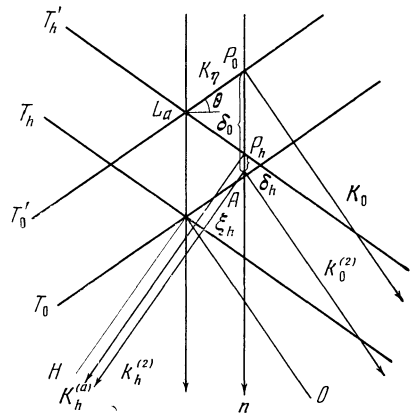


Рис. 90. К выводу формулы (10.23)

Рассмотрим теперь условия и соотношения, определяющие контраст и функцию видимости интерференционных картин в расфокусированном интерферометре. Заметим, что соотношение (10.17), относящееся к сфокусированному прибору, требует уточнения при наличии расфокусировки. В теоретической оптике [139] рассмотрение контраста интерференционных картин в зависимости от размеров источника связано с условиями и степенью частичной когерентности. В случае рентгеновских лучей расходимость пучка коллимируется конечной угловой шириной области максимума.

С другой стороны, при наличии расфокусировки эффективная ширина источника B_e включает в себя помимо пучков, дающих интерференционную картину, также и такие, которые дают вклад в образование фона (рис. 85). Можно считать, что полезная часть источника B_d оказывается меньше B_e и эта последняя делится на три участка

$$B_e = B_d + 2(B_s/2). \quad (10.28)$$

Два крайних участка $B_s/2$ дают пучки, проходящие лишь по одному из двух путей I или II, в то время как центральная часть дает пучки, проходящие внутри угла $2\varepsilon_m$ в пластинке A [см. (10.17)].

Очевидно, что величина контраста или функция видимости

$$v = \frac{\mathcal{J}_{\max} - \mathcal{J}_{\min}}{\mathcal{J}_{\max} + \mathcal{J}_{\min}} = \frac{2p}{1 + p^2} \frac{2B_d}{2B_d + B_s} \left| \frac{\sin W}{W} \right|, \quad p = \left| \frac{D_I}{D_{II}} \right|. \quad (10.29)$$

В интерферометре с идеальной геометрией $B_d = B_e$ и $v = 1$, т. е. контраст составляет 100%. В отличие от этого в интерферометре с прозрачными кристаллами может быть достигнут контраст 50%. При наличии расфокусировки контраст определяется осциллирующей функцией типа $\sin \eta/\eta$ при

$$\eta = \frac{2\pi |\Delta x| |\operatorname{tg} \varepsilon_m|}{\tau_0 \operatorname{tg} \vartheta}. \quad (10.30)$$

Так, в реальных условиях эксперимента значение $|\operatorname{tg} \varepsilon_m| = 0,136$ привело к потере видимости при первом минимуме функции $\sin \eta/\eta$ для $\Delta x < 40$ мкм, что согласуется с экспериментальным значением 28 мкм и с оценкой допустимых нарушений условий (10.15), приведенной выше.

Представляет также интерес наложение на интерференционную картину расфокусировки с периодом $\Lambda = \lambda/\Delta\psi$, картины муара, возникающей в интерферометре в результате различия межплоскостных расстояний в пластинах. Если, в частности, период d сохраняется в S и M , в то время как в A изменяется на $d + \Delta d$, то предельный угол $\Delta\psi$ принимает значение $\Delta\psi'$. В результате при $\Delta x = 0$ $\Delta\psi \neq 0$. Если добиться максимального контраста при $\Delta\psi = 0$, то остающаяся часть $\Delta\psi' = \lambda/\Lambda$ позволит

определить $|\Delta d|$,

$$\Delta d/d = \lambda/2\Lambda \operatorname{tg} \vartheta. \quad (10.31)$$

Фактически, подобная ситуация встречается обычно при работе с интерферометром Лауэ ввиду нарушений структуры в отдельных участках монокристаллических блоков.

В работе [138] приводятся также краткие замечания о влиянии на различные интерференционные картины в сечениях выходных пучков вертикальной расходимости и размера источника в вертикальном направлении.

10.3. Образование и использование картин рентгеновского муара

Как известно, различают оптический, или геометрический, и дифракционный муар. Согласно Шубникову [140] оптический муар наблюдается при последовательном прохождении света через изображения двух решеток: A с повторяющимся изображением и B с сеткой, периоды которой совпадают (решетки не параллельны) или близки (решетки параллельны) периодам A . Изображения в A , разбитые на элементы, синтезируются с увеличенными интервалами. При этом складываются интенсивности световых пучков. Дифракционный муар возникает при последовательном прохождении (падение лучей в области максимума) излучения через два кристалла с соотношениями периодов и ориентаций, аналогичными решеткам при оптическом муаре, при этом складываются волновые функции рассеяния на отдельных кристаллах. Очевидно, в этом случае периоды решеток близки к длинам волн излучений.

Муар при дифракции электронов был обнаружен несколько ранее рентгеновского муара. Подробное рассмотрение электронного муара приводится в монографиях [141] и [27]. Соответствующая теория развита Хашимото и др. [142] и Дживерсом [143]. Теория Дживерса может быть применена и к описанию рентгеновского муара в приближении падающей плоской волны, что эквивалентно использованию обобщенной динамической теории, основанной на уравнениях типа Такаги [41]. Основы этой теории изложены в гл. 11. Здесь мы применим ее к образованию муара в приближении падающей плоской волны, рассматривая оба рассеивающих кристалла как идеальные. В таком случае уравнения для волнового поля в первом кристалле имеют вид [см. (11.90)].

$$\begin{aligned} i \frac{\pi}{\lambda} \gamma_0 \frac{d\mathcal{D}_0}{dz} &= \chi_0 \mathcal{D}_0 + C \chi_h \mathcal{D}_h, \\ i \frac{\pi}{\lambda} \gamma_h \frac{d\mathcal{D}_h}{dz} &= \chi_0 \mathcal{D}_h - \alpha \mathcal{D}_h + C \chi_h \mathcal{D}_0. \end{aligned} \quad (10.32)$$

Переходим к симметричному отражению ($\gamma_0 = \gamma_h = \cos \vartheta$) и

задаем нижеследующие значения волновых функций \mathcal{D}_0 и \mathcal{D}_h :

$$\mathcal{D}_0 = D_0 \exp[-i\pi\chi_0(\mathbf{k}_0\mathbf{r})] = D_0 \exp\left[-i\frac{\pi\chi_0}{\lambda \cos \vartheta} z\right], \quad (10.33)$$

$$\mathcal{D}_h = D_h \exp\{-i\pi\chi_0[(\mathbf{k}_h\mathbf{r}) + (\mathbf{s}\mathbf{r})]\},$$

$$|\mathbf{s}| = K\alpha = 2K\eta \sin 2\vartheta. \quad (10.34)$$

В результате подстановки (10.33) и (10.34) в (10.32) эти последние уравнения принимают вид

$$i\frac{\lambda \cos \vartheta}{\pi} \frac{dD_0}{dz} \exp\left[-i\frac{\pi\chi_0}{\lambda \cos \vartheta} z\right] = C\chi_h D_h \exp\{-i\pi\chi_0[(\mathbf{k}_h\mathbf{r}) + (\mathbf{s}\mathbf{r})]\},$$

$$i\frac{\lambda \cos \vartheta}{\pi} \frac{dD_h}{dz} \exp\{-i\pi\chi_0[(\mathbf{k}_h\mathbf{r}) + (\mathbf{s}\mathbf{r})]\} =$$

$$= C\chi_h D_0 \exp\left[-i\frac{\pi\chi_0}{\lambda \cos \vartheta} z\right],$$

или, заменяя,

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}, \quad |\mathbf{s}| = K\alpha, \quad \tau_0 = \frac{\lambda \cos \vartheta}{C|\chi_h|},$$

получим

$$\frac{dD_0}{dz} = i\frac{\pi}{\tau_0} D_h \exp[-i\pi\chi_0(\mathbf{h} + \mathbf{s}, \mathbf{r})],$$

$$\frac{dD_h}{dz} = i\frac{\pi}{\tau_0} D_0 \exp[i\pi\chi_0(\mathbf{h} + \mathbf{s}, \mathbf{r})]. \quad (10.35)$$

Отметим, что приближение падающей плоской волны находит свое выражение в том, что амплитуды D_0 и D_h являются функциями лишь глубины z . Отсутствие нарушений в рассеивающем кристалле означает, что угловая координата внутри максимума для падающей волны \mathbf{s} не зависит от глубины z .

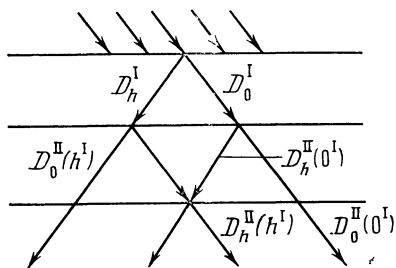


Рис. 91. Модель образования дифракционного муара

Модель образования муара при использовании обобщенной теории, в частности уравнений (10.35), приведена на рис. 91. Уравнения (10.35) относятся к волновому полю внутри первого кристалла. Для описания поля внутри второго кристалла следует, во-первых, ввести некоторое постоянное приращение $\Delta\mathbf{r}$ к радиусу-вектору \mathbf{r} , что соответствует либо смещению, либо повороту второго кристалла, и во-вторых, для того чтобы сохранить неиз-

менной величину χ_h , использовать известное приближение

$$\chi_h^{\text{II}} = \chi_h^{\text{I}} \exp[-2\pi i (\Delta \mathbf{h} \mathbf{r})],$$

а также заменить

$(\mathbf{h} + \Delta \mathbf{h}, \mathbf{r} + \Delta \mathbf{r})$ на $(\mathbf{h} \Delta \mathbf{r}) + (\mathbf{r} \Delta \mathbf{h})$, причем $(\mathbf{h} \Delta \mathbf{r}) = (-\mathbf{r} \Delta \mathbf{h})$.

В таком случае уравнения (10.35) переписываются следующим образом:

$$\frac{dD_0^{\text{II}}}{dz^{\text{II}}} = i \frac{\pi}{\tau_0} D_h \{1 - [1 - \exp i\alpha]\} \exp[-i\pi\chi_0(\mathbf{s}\mathbf{r})], \quad (10.36)$$

$$\frac{dD_h^{\text{II}}}{dz^{\text{II}}} = i \frac{\pi}{\tau_0} D_0 \{1 - [1 - \exp i\alpha]\} \exp[i\pi\chi_0(\mathbf{s}\mathbf{r})],$$

$$i\alpha \equiv 2\pi i \chi_0 x |\Delta \mathbf{h}|. \quad (10.37)$$

Здесь x — координата в направлении \mathbf{h} , т. е. перпендикулярно отражающим плоскостям.

Так как значения производных в (10.36) зависят от x только через α , то геометрические места точек равных или постоянных значений амплитуды и интенсивностей рассеяния будут отвечать условиям

$$x = \frac{\text{const}}{|\Delta \mathbf{h}|} = \Lambda \text{ const}, \quad \Lambda = |\Delta \mathbf{h}|^{-1}. \quad (10.38)$$

Следовательно, период муара Λ определяется величиной изменения вектора дифракции $\Delta \mathbf{h}$. Из этого результата получаются формулы для периодов муара: параллельного, или дилатационного, поворотного и смешанного:

$$\Lambda_{\text{пар}} = d_h/l, \quad l = \Delta d/d, \quad \Lambda_{\text{пов}} = d_h/\alpha,$$

$$\Lambda_{\text{смеш}} \approx \left[\sqrt{\Lambda_{\text{пар}}^{-2} + \Lambda_{\text{пов}}^{-2}} \right]^{-1}. \quad (10.39)$$

Эти формулы совпадают с соотношениями для геометрического муара, которые вывел Шубников.

Если падающая волна испытывает в кристаллах A и B отражения от различных систем плоскостей с векторами \mathbf{h} и \mathbf{g} соответственно, значение периода муара определяется из формулы

$$\Lambda = |\mathbf{h} - \mathbf{g}|^{-1}. \quad (10.40)$$

Как следует из выражений (10.38), полосы параллельного муара параллельны отражающим плоскостям и полосы поворотного муара параллельны вектору дифракции \mathbf{h} .

Далее, по Дживерсу [143] можно получить выражения для интенсивностей картины муара. Согласно рис. 91, муар возникает при интерференции пар волн либо в направлении волны дифрагированной, либо преломленной в первом кристалле.

Применяя последовательно теорию в приближении плоской падающей волны к рассеянию в первом и втором кристаллах, можно показать, что интенсивность на выходной грани второго кристалла может быть представлена следующим образом (для направления отражения от первого кристалла):

$$\mathcal{Y}_h = \mathcal{Y}_h^I \mathcal{Y}_0^{II} (h^I) + \mathcal{Y}_0^I \mathcal{Y}_h^{II} (0^I) + 2 (\mathcal{Y}_h^I \mathcal{Y}_0^{II} \mathcal{Y}_0^I \mathcal{Y}_h^{II}) \cos 2\pi (x - x_0) \Lambda^{-1}, \quad (10.41)$$

где x_0 — некоторая функция от толщин обоих кристаллов и величины отклонения от угла Вульфа — Брэгга.

Если рассматривать образование муара при падающей сферической волне, то необходимо привлечь более общую форму уравнений Такаги, в которой амплитуды или волновые функции волн в кристалле зависят от двух аргументов. Эти аргументы могут быть связаны либо с прямоугольными осями x и z , либо с косоугольными $x_0 \mathbf{s}_0$ и $x_h \mathbf{s}_h$, направленными вдоль волновых векторов преломленной и дифрагированной волны в кристалле: (см. (11.36))

$$\begin{aligned} i \frac{\lambda}{\pi} \frac{\partial D_0}{\partial x_0} &= \chi_0 D_0 + C \chi_h D_h, \\ i \frac{\lambda}{\pi} \frac{\partial D_h}{\partial x_h} &= (\chi_0 - \alpha) D_h + C \chi_h D_0. \end{aligned} \quad (10.42)$$

В работах Отье и Симона [44, 144] авторы переходят от уравнений типа (10.42) к уравнениям второго порядка [см., например, (11.54)] и далее используют решение, аналогичное (11.49), (11.50), для сферической падающей волны. В случае фронта падающей волны произвольной протяженности:

$$D_h(P) = - \frac{i\pi K \chi_h \gamma_0 C}{\sin 2\theta} \int_{\overline{AB}} D_0^{(a)}(x) J_0(B \sqrt{b^2 - x^2}) dx, \quad (10.43)$$

$$D_0(P) = D_0^{(a)}(A) - \frac{B}{2} \int_{\overline{BA}} D_0^{(a)}(x) \sqrt{\frac{b+x}{b-x}} J_1(B \sqrt{b^2 - x^2}) dx. \quad (10.44)$$

Приведенные значения $D_h(P)$ и $D_0(P)$ относятся к произвольной точке P волнового поля на выходной грани кристаллической пластинки. Интегрирование производится по некоторому контуру \overline{AB} на входной грани, который является сечением ограниченной по фронту падающей волны. Этот контур делится пополам началом, точкой O ; $b = \overline{OA} = \overline{OB}$, x — переменная координата на линии \overline{AB} ,

$$B = \frac{2\pi K \sqrt{\chi_h \chi_h^-} |C| \sqrt{\gamma_0 \gamma_h^-}}{\sin 2\theta}. \quad (10.45)$$

С другой стороны, при почти точечной протяженности \overline{AB} , т. е. в случае сферической падающей волны, значения амплитуд D_h и D_0 в произвольной точке p_0 на выходной грани выражаются следующим образом:

$$D_h(p_0) = -iD_0^{(a)}(4r_0)^{-1} \sqrt{Kr_0} \frac{C\chi_h}{\sin 2\theta} \exp \left[-i \frac{\pi}{4} \right] J_0(B\sqrt{b^2 - p_0^2}), \quad (10.46)$$

$$D_0(p_0) = \frac{D_0^{(a)}}{4\pi r_0} \left\{ \exp \left[-i\pi \frac{K\gamma_0^2}{r_0} (b - p_0)^2 \right] - \exp \left[-i \frac{\pi}{4} \right] \times \right. \\ \left. \times \frac{\pi \sqrt{Kr_0} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{\frac{b + p_0}{b - p_0}} J_1(B\sqrt{b^2 - p_0^2}) \right\}. \quad (10.47)$$

Очевидно, в этом случае область волнового поля в кристалле ограничена треугольником, образованным направлениями \mathbf{s}_0 и \mathbf{s}_h и выходной гранью кристалла (см. рис. 40); r_0 соответствует P на указанном рисунке; далее, b и p_0 в (10.46) и (10.47) аналогичны величинам b и x в (10.43) и (10.44), но относятся к выходной границе.

Рассматривая более общий случай по сравнению со схемой рис. 91, а именно, наличие небольшой прослойки воздуха (вакуума) между кристаллами, мы можем написать для волн, прошедших эту прослойку, следующие выражения:

$$D_h^I = D_h^I(p^I) \exp \left[-2\pi i \frac{K\chi_0}{2\gamma_h} z^I \right] \exp \left[-2\pi i K_h^I r^I \right], \quad (10.48)$$

$$D_0^I = D_0^I(p^I) \exp \left[-2\pi i \frac{K\chi_0}{2\gamma_0} z^I \right] \exp \left[-2\pi i K_0^I r^I \right], \quad (10.49)$$

где $D_h^I(p^I)$ и $D_0^I(p^I)$ даны в уравнениях (10.46) и (10.47).

Характерной чертой метода, используемого в реферируемой работе [44], является произвольный выбор волнового вектора в данном кристалле. Для этого вектора принимаются два условия: 1) равные тангенциальные слагающие с волновым вектором падающей вакуумной волны; 2) модуль, равный Kn , где n — коэффициент преломления.

Обращаемся опять к образованию муара. Пусть второй кристалл, из такого же материала, что и первый, будет слегка повернут, причем волны, описываемые (10.48) и (10.49), претерпевают в нем отражение от той же плоскости, что и в первом кристалле. Выбираем в качестве волновых векторов внутри этих кристаллов векторы, соединяющие в обратном пространстве точки O и H с точкой L_0 (рис. 92). Далее, мы принимаем

$$|k_0^{II}| = |k_h^{II}| = |k_0'^{II}| = |k_h'^{II}|, \quad (10.50)$$

где векторы со штрихом соответствуют отраженным волнам $D_0^{II}(h^I)$ и $D_h^{II}(h^I)$.

На рис. 92 вакуумные волны после прохождения через первый кристалл представлены волновыми векторами $\mathbf{K}_0^I \equiv \mathbf{OM}$, $\mathbf{K}_h^I \equiv \mathbf{HN}$. Если вектор дифракции \mathbf{h} для отражения в первом кристалле представлен прямой \mathbf{OH} , то во втором кристалле для волны, прошедшей через первый кристалл, вектор дифракции

представлен прямой $\mathbf{H'O} = \mathbf{h} - \mathbf{dh}$. Для волновых векторов во втором кристалле мы имеем $\mathbf{K}_h^{II} \equiv \mathbf{H'L'_0}$, $\mathbf{K}_0^{II} = \mathbf{OL'_0}$. Аналогично, для волны, отраженной от первого кристалла, вектор дифракции и волновые векторы во втором кристалле будут представлены в виде

$$\mathbf{O'H} = -\mathbf{h} + \mathbf{dh},$$

$$\mathbf{K}_h'^{II} \equiv \mathbf{HL''_0},$$

$$\mathbf{K}_0'^{II} = \mathbf{O'L''_0}.$$

Выразим теперь волны, падающие на второй кристалл, с помощью следующих формул [ср. с (10.48) и (10.49)]:

Рис. 92. Обратное пространство при образовании дифракционного муара

$$D_0^I = \left\{ D_0^I(x^I) \exp\left(-2\pi i \frac{K\chi_0 z^I}{2\gamma_0}\right) \exp[-2\pi i (\mathbf{K}_0^I - \mathbf{K}_0^{II}) \mathbf{r}^I] \right\} \times \exp(-2\pi i \mathbf{K}_0^{II} \mathbf{r}^I), \quad (10.51)$$

$$D_h^I = \left\{ D_h^I(x^I) \exp\left(-2\pi i \frac{K\chi_0}{2\gamma_h} z^I\right) \exp[-2\pi i (\mathbf{K}_h^I - \mathbf{K}_h^{II}) \mathbf{r}^I] \right\} \times \exp(-\varepsilon \pi i \mathbf{K}_h^{II} \mathbf{r}^I). \quad (10.52)$$

Разности векторов в фазовых множителях в фигурных скобках непосредственно определяются из рис. 92. Скалярные произведения этих величин на \mathbf{r}^I разлагаем на суммы произведений модуля векторной разности на проекции \mathbf{r}^I , нормальные и касательные к плоскости раздела. В результате для «псевдоамплитуд» получаем

$$D_0^I(x^I, z^I) = D_0^I(x^I) \exp(-2\pi i K \eta_0 \gamma_0 x^I) \times \exp(2\pi i K \eta_0 \alpha_0 z^I) \exp\left[-2\pi i K \frac{\chi_0}{2\gamma_0} z^I\right] = D_0^I(x^I) \exp(2\pi i K \eta_0 \alpha_0 z^I) \exp\left(-2\pi i K \frac{\chi_0}{2\gamma_0} z^I\right), \quad (10.53)$$

$$D_h^I(x^I, z^I) = D_h^I(x^I) \exp(2\pi i K \eta_h \alpha_h z^I) \exp\left[-2\pi i \frac{K\chi_0}{2\gamma_h} z^I\right]. \quad (10.54)$$

После прохождения обоих кристаллов суммарная отраженная волна имеет величину

$$D_h = D_h^{\text{II}}(0^{\text{I}}) + D_0^{\text{II}}(h^{\text{I}}). \quad (10.55)$$

Для вычисления каждой из этих волн можно воспользоваться формулами для волны с конечной шириной фронта (10.43) и (10.44). При этом в качестве $D_0^{(\alpha)}$, или «псевдоамплитуды», берутся волны (10.53) и (10.54). Получаем

$$D_h^{\text{II}}(0^{\text{I}}) = -\frac{i\pi K\chi_h^{\text{II}}\gamma_0}{\sin 2\theta} \int_{A_2 B_2} D_0^{\text{I}} J_0(B' \sqrt{b^{\text{II}2} - x^{\text{II}2}}) dx^{\text{II}}, \quad (10.56)$$

$$D_0^{\text{II}}(h^{\text{I}}) = D_h^{\text{I}}(x^{\text{I}} = X + b^{\text{II}}) - \frac{B'}{2} \int_{A_2 B_2} D_h^{\text{I}}(x^{\text{I}}) \times \\ \times \sqrt{\frac{b^{\text{II}} + x^{\text{II}}}{b^{\text{II}} - x^{\text{II}}}} J_1(B' \sqrt{b^{\text{II}2} - x^{\text{II}2}}) dx^{\text{II}}. \quad (10.57)$$

Наконец, если ввести величины

$$D_h^{\text{II}}(x^{\text{II}}) = -\frac{i\pi K\chi_h^{\text{II}}\gamma_0}{\sin 2\theta} J_0(B' \sqrt{b^{\text{II}2} - x^{\text{II}2}}), \quad (10.58)$$

$$D_0^{\text{II}}(x^{\text{II}}) = \gamma_0 \sqrt{K/r_0} \exp \left[-i\pi \frac{K\gamma_0^2}{r_0} (b^{\text{II}} - x^{\text{II}})^2 + i\frac{\pi}{4} \right] - \\ - \frac{B'}{2} \sqrt{\frac{b^{\text{II}} + x^{\text{II}}}{b^{\text{II}} - x^{\text{II}}}} J_1(B' \sqrt{b^{\text{II}2} - x^{\text{II}2}}), \quad (10.59)$$

то значения $D_h^{\text{II}}(0^{\text{I}})$ и $D_0^{\text{II}}(h^{\text{I}})$ могут быть представлены в функции от амплитуд $\mathcal{D}_h^i(x^i)$:

$$\mathcal{D}_h^i(x^i) = \begin{cases} D_h^i(x^i), & |x^i| \leq b^i, \\ 0, & |x^i| > b^i, \end{cases} \quad (10.60)$$

$$D_h^{\text{II}}(0^{\text{I}}) = \mathcal{D}_0^{\text{I}}(X)^* \mathcal{D}_h^{\text{II}}(X) \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{K\chi_0}{2\gamma_0} - K\eta_0\alpha_0 \right] z^{\text{I}} \right\}, \quad (10.61)$$

$$D_0^{\text{II}}(h^{\text{I}}) = \mathcal{D}_h^{\text{I}}(X)^* \mathcal{D}_0^{\text{II}}(-X) \exp \left\{ -2\pi i \left[\frac{K\chi_0}{2\gamma_h} - K\eta_h\alpha_h \right] z^{\text{I}} \right\}. \quad (10.62)$$

Окончательно выражение для «псевдоамплитуды» отраженной волны после прохождения через оба кристалла имеет вид

$$D_h(X) \approx \mathcal{D}_0^{\text{I}}(X) \mathcal{D}_h^{\text{II}}(X) + \mathcal{D}_h^{\text{I}}(X) \mathcal{D}_0^{\text{II}}(-X) \times \\ \times \exp \{ (-2\pi i K\chi_0/2) z^{\text{I}} (\gamma_h^{-1} - \gamma_0^{-1}) \} \exp(-2\pi i d h_{\perp} z^{\text{I}}), \quad (10.63)$$

где dh_{\perp} означает слагающую от вектора $d\mathbf{h}$ по нормали к плоскости раздела.

На рис. 93 показана схема прохождения падающей сферической волны через оба кристалла. Там же нанесены оси отсчета координат x^I и x^{II} в плоскости раздела и X на выходной грани второго кристалла. Согласно обозначениям этого рисунка, величина $b^I = \overline{O_1A_1} = \overline{O_1B_1}$, $b^{II} = \overline{O_2A_2} = \overline{O_2B_2}$ и $b = \overline{OA} = \overline{OB}$. Отрезок $OP = X$ представляет переменную координату, для которой дается величина $D_h(X)$ в (10.63).

Достаточно сложное выражение (10.63) упрощается в частном

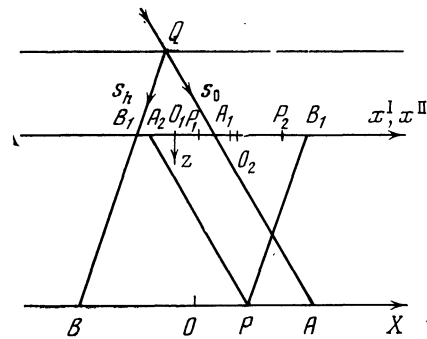


Рис. 93. К теории муара в приближении падающей сферической волны

случае малой толщины первого кристалла. Интенсивность картины муара при таком допущении может быть представлена следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_h = & \frac{\pi^2 K r_0}{\sin^2 2\theta} \chi_h^I \left[\mathcal{Y}_0^I J_0^2 (B \sqrt{b^{II^2} - X^2}) + \right. \\ & + \mathcal{Y}_h^I \frac{b^{II} - X}{b^{II} + X} J_1^2 (B \sqrt{b^{II^2} - X^2}) + 2 \sqrt{\mathcal{Y}_0^I \mathcal{Y}_h^I} J_0 \times \\ & \left. \times (B \sqrt{b^{II^2} - X^2}) \frac{b^{II} - X}{b^{II} + X} J_1 (B \sqrt{b^{II^2} - X^2}) \cos \Phi \right], \end{aligned} \quad (10.64)$$

где величины \mathcal{Y}_0^I и \mathcal{Y}_h^I и аргумент Φ имеют следующие значения:

$$\mathcal{Y}_0^I = \mathcal{Y}_0 \left\{ 1 - \frac{\sin^2 B b^I \sqrt{1+y^2}}{1+y^2} \right\}, \quad \mathcal{Y}_h^I = \mathcal{Y}_0 \frac{\sin^2 B b^I \sqrt{1+y^2}}{1+y^2}, \quad (10.65)$$

$$\Phi = 2\pi(d\mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) - \pi K \chi_0 \left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0} \right) - 2\pi d h_{\perp} z^I + \varphi. \quad (10.66)$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{\sqrt{1+y^2}} \operatorname{tg} B b^I \sqrt{1+y^2}. \quad (10.67)$$

Используя для описания волнового поля в первом кристалле схему рис. 40, заметим, что [см. (3.66)]

$$\begin{aligned} 2b^I &= d(\operatorname{tg} \psi_0 + \operatorname{tg} \psi_h) = \frac{\sin 2\theta}{\gamma_0 \gamma_h}, \\ B b^I &= \frac{\pi K |C| t \chi_h \chi_{\bar{h}}}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} = A. \end{aligned} \quad (10.68)$$

В результате выражения (10.65) для интенсивностей \mathcal{Y}_0^I и \mathcal{Y}_h^I совпадают с формулами (3.62) для интенсивностей в случае

прозрачного кристалла в приближении плоской падающей волны (принимая $\chi_h = \chi_{\bar{h}}$).

В то же время множители при величинах \mathcal{J}_0^I и \mathcal{J}_h^I в выражении (10.64) близки к квадратам модулей величин интегралов U_0 и U_h в теории Като [см. формулы (6.29) и (6.32)].

Таким образом, выражения (10.64)—(10.68) допускают наглядную, качественную интерпретацию.

С другой стороны, сравнивая (10.64) с формулой Дживерса (10.41), можно заметить, что величины интенсивностей \mathcal{J}_0 и \mathcal{J}_h как в первом, так и во втором кристаллах, очевидно, должны отвечать приближению плоской падающей волны. Следует помнить, что теория Дживерса, развития для дифракции электронов, применима к рассеянию рентгеновских лучей лишь при симметричном отражении. В таком случае фаза Φ , данная в (10.66), получает более простую форму:

$$\Phi = 2\pi[(d\mathbf{h}, \mathbf{r}) + \varphi], \quad (10.69)$$

которая вполне аналогична величине $2\pi(x - x_0)/\Lambda$ в (10.41), если учесть последнюю из формул (10.38).

Переходя к анализу результатов изложенных теорий и сопоставления теории с экспериментом, заметим, что в опубликованных работах интерпретация эксперимента сводится преимущественно к применению простых геометрических соотношений типа (10.39), а также к использованию некоторых качественных и полуколичественных закономерностей.

Как следует из тех же формул (10.39), период муара не зависит от длины волны используемого излучения. Однако при наблюдении картин муара в интерферометре изменение длины волны может привести к изменению этих картин, что должно быть связано с перемещением облучаемого участка кристалла (пластинки M).

Площади кристаллических пластин, облучаемые при образовании рентгеновского муара, определяются геометрией освещения и могут быть увеличены сканированием. В опубликованных работах эти площади имеют поперечники порядка 1—5 мм и более. Периоды муара меняются в пределах от немногих микрон до миллиметров, откуда следует, что этим методом можно изучать относительные деформации $\Delta d/d$ в пределах от 10^{-4} до 10^{-8} и повороты отдельных участков кристалла на величины от одной до десятых долей угловой секунды. Интерпретация подобных деформаций в настоящее время представляется неясной.

Необходимо также иметь в виду, что интерференционные эффекты типа линий равной толщины, отвечающие параметрам χ_0 и χ_h , могут привести к ошибкам в индцировании наблюдаемых полос. Периоды подобных полос согласно (3.109); (10.18) составляют десятки и сотни микрон, т. е. имеют тот же порядок величин, что и линии муара. Поэтому требуются дополнительные

признаки, чтобы различить природу этих картин. Так, Λ муара всегда уменьшается при переходе к высшим порядкам отражений, в то время как Λ_h может увеличиваться, если структурные амплитуды соответствующих отражений уменьшаются. Кроме того, полосы равной толщины, связанные как с χ_0 , так и с χ_h , всегда параллельны входной грани.

Переходя к отдельным экспериментальным работам, заметим, что лишь в некоторых случаях можно полагать, что возникновение картин муара обязано специальной подлежащей ориентации

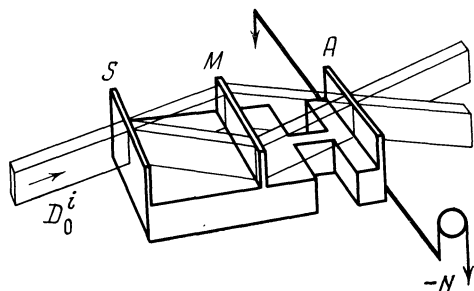


Рис. 94. Устройство для изучения деформаций в интерферометре

рассеивающих кристаллов, выполненной автором. В работах Чикава [145] и Ланга и Миускова [146] эффекты муара возникали при последовательной дифракции волн от двух участков монокристалла с разницей в значениях d_{hkl} или с взаимным поворотом.

В отличие от этого, в работах Бонзе и Харта [28], Бредлера и Ланга [147], а также Харта [136] и Дислейта [137] картины муара были результатом специальной взаимной юстировки рассеивающих кристаллов. Из этой группы работ авторы [28], [136] и [137] применяли интерферометрическую аппаратуру. В работе [28] часть монокристалльного блока кремния, примыкающая к пластине-анализатору А, связывается с остальной частью узкой полоской (рис. 94) и снабжается устройством (рычагом, блоком и грузиком), которое позволяет поворачивать анализатор относительно остальной части прибора на небольшой угол; поворот пластинки А на угол $0,01''$ приведет к образованию муара с интервалом полос в ~ 4 м.м. На рис. 95, а показана серия картин, полученных при разных значениях момента пары сил, поворачивающих пластинку А. Из наблюдаемого максимального наклона полос можно определить отношение $\Delta d/d \approx 8 \cdot 10^{-8}$. На рис. 95, б показаны изображения дислокаций на картинах муара. Не вдаваясь в детали, заметим, что лишь при $\Delta d > 0$ (верхние снимки) две избыточные полосы муара находятся над изображением дислокации, при $\Delta d < 0$ (нижние снимки) избыточные полосы — под изображением дислокации. Из условия эксперимента удалось установить, что вектор Бюргера этих дислокаций составляет $1/2 [110]$ или $3,84 \text{ \AA}$, что соответствует кратчайшему межплоскостному рассеянию в Si с решеткой алмаза.

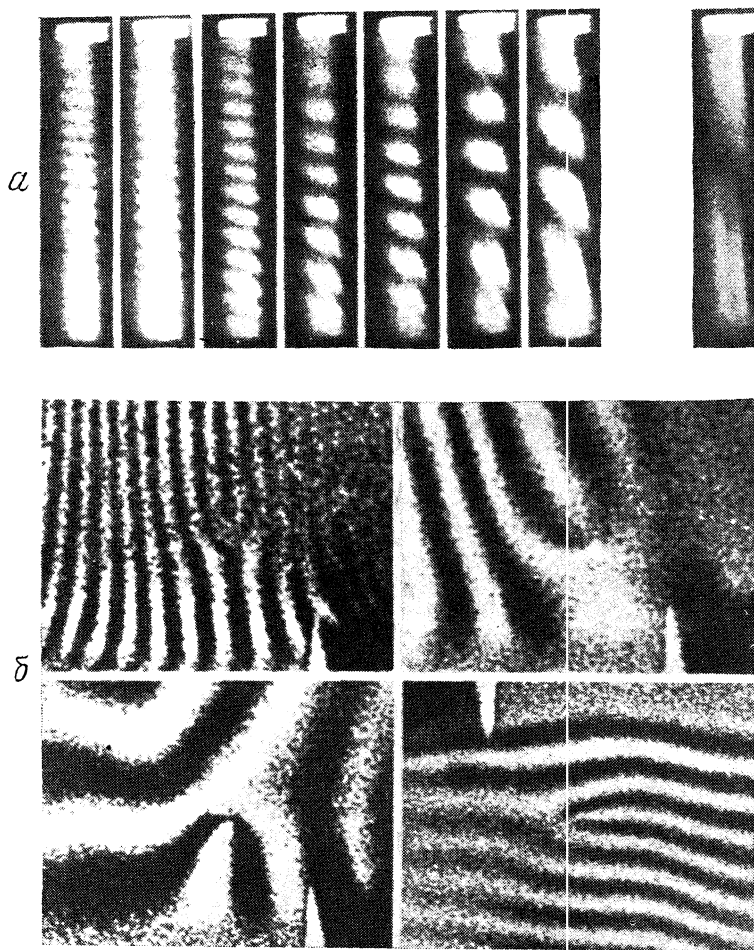


Рис. 95. Снимки муара, полученные в интерферометре

a — картины, возникающие при закручивании (повороте анализатора *A*), момент закручивающей пары уменьшается слева направо; *b* — изображения дислокаций

В работах В. Ф. Миускова¹ эффекты муара систематически используются в рентгеновской топографии реальных кристаллов. На рис. 96, *a* приведена рентгенограмма картин муара от бездислокационного кристалла кремния повышенной чистоты, полученная в трехкристальном интерферометре. Горизонтальные полосы муара отвечают повороту на $\sim 0,8''$, вертикальные — величине

¹ Устное сообщение.

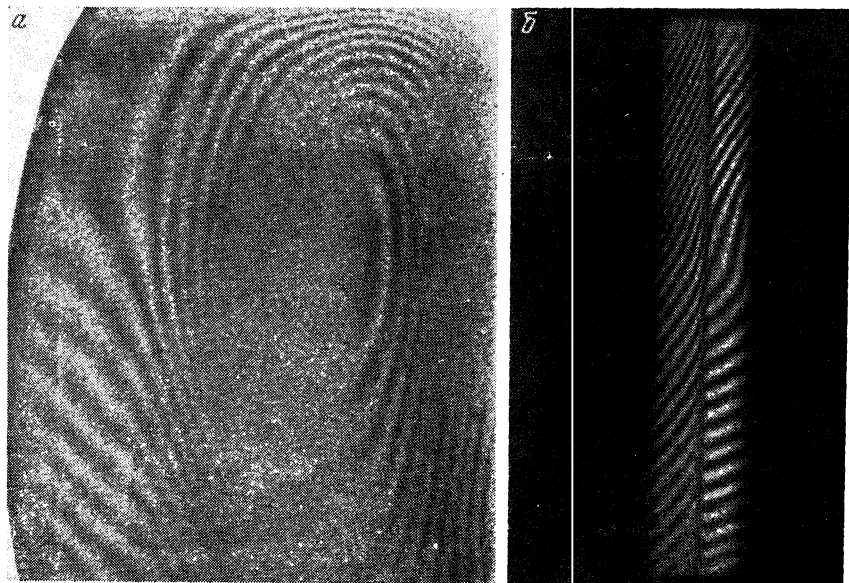


Рис. 96. Снимки муара, полученные в интерферометре

a — картина поворотного и дилатационного муара, полученная в трехкристальном интерферометре (220 , $\text{MoK}\alpha$, Si ; $\mu t = 25$);
б — модуляция картины муара (справа) интерференцией от клина

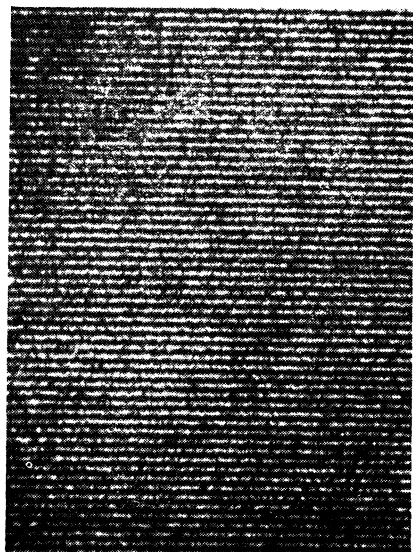


Рис. 97. Поворотный муар от двух пластинок Si , угол поворота $2,5''$

$\Delta d/d \approx 4 \cdot 10^{-8}$. Центральная часть снимка представляет сильно нарушенную область, крайняя правая часть не имеет фиксируемых нарушений. Таким образом, в поверхностном слое кристалл обладает более совершенной структурой. Очевидно, интерферометрическая методика позволяет фиксировать имеющиеся в кристалле градиенты тех или иных нарушений.

На рис. 96, б, полученном П. А. Безирганяном и Ф. О. Эйрамджяном¹ в трехкристальном интерферометре можно наблюдать модуляцию картины муара (справа) интерференцией от клина (слева). Кли́н был введен в один из пучков интерферометра (см. рис. 86).

В работе Бредлера и Ланга [147] картина муара была получена от двух монокристалльных пластинок кремния, ориентированных в ходе эксперимента с небольшим взаимным поворотом. Полученная весьма контрастная картина соответствует чисто поворотному муару (рис. 97).

10.4. Другие типы интерферометров.

Трансляционный муар

Интерферометр с отражением и прохождением по Брэггу [148]. Общая схема интерферометра ясна из рис. 98. В отличие от интерферометра с отражением по Лауэ, здесь центральная пластинка выполняет (двумя различными участками) функции разделителя и анализатора, в то время как боковые части являются непрозрачными зеркалами. Ход лучей в интерферометре можно кратко свести к следующему. Первичная вакуумная волна $\mathcal{D}_0^{(a)}$ падает на центральную пластинку, вызывая образование отраженной (по Брэггу) волны $\mathcal{D}_h^{\text{II}}$ и волнового поля в кристалле. Это поле в тонкой пластинке претерпевает частичное отражение на выходной поверхности, причем другая часть энергии поля выходит в вакуум в виде волны \mathcal{D}_0^{I} . Волны $\mathcal{D}_h^{\text{II}}$ и \mathcal{D}_0^{I} испытывают отражение по Брэггу от боковых кристаллов-зеркал, и отраженные волны вновь попадают на среднюю пластинку. Здесь волна \mathcal{D}_h^{I} отражается, образуя выходную волну $\mathcal{D}^{\text{I}(d)}$, другая выходная волна $\mathcal{D}^{\text{II}(d)}$ является волной, прошедшей (по Брэггу) через тонкую пластинку в результате падения волны $\mathcal{D}_0^{\text{II}}$. Отражения в средней пластинке и боковых кристаллах соответствуют асимметричной схеме при угле между входными поверхностями кристаллов и отражающими плоскостями $\varphi = 13,7^\circ$. В интерферометре используется отражение $220 \text{ Cu } K\alpha$ излучения от Si.

Существенной чертой экспериментов с интерферометром по Брэггу является использование сферической волны, образованной из пучка, выходящего из рентгеновской трубки и прошедшего

¹ Устное сообщение.

через систему диафрагм. Сечение падающей на среднюю пластинку волны составляло 20 мкм при толщине пластинки 504 мкм. Тем не менее при расчете интерферометра использовалось приближение плоской падающей волны.

При проверке работы прибора введением пластмассового клина на пути одного из лучей ($\mathcal{L}^{I(d)}$ или $\mathcal{L}^{II(d)}$) наблюдалось усложнение и размытие интерференционной картины, связанное с рядом факторов. Помимо нарушений «идеальной» геометрии, которая вполне аналогична соотношениям для интерферометра по Лауэ, различные области кривой отражения несли информацию о реальной структуре различных участков стенок желобков между центральной пластинкой и боковыми зеркалами. Наряду с этим была обнаружена полосчатость, связанная с процессом получения монокристалльного блока кремния.

По-видимому, использование интерферометра по Брэггу представляет более сложную задачу, чем работа с интерферометром по Лауэ. Это может относиться как к технике изготовления, так и к более корректному расчету, основанному на приближении сферической падающей волны. Интересно отметить, что авторами обнаружено сильное расхождение падающего пучка внутри кристалла в противоположность случаю Лауэ при прохождении через толстый поглощающий кристалл. В заключение можно привести указание, сделанное в работе о возможности использования подобной схемы для построения нейтронного интерферометра.

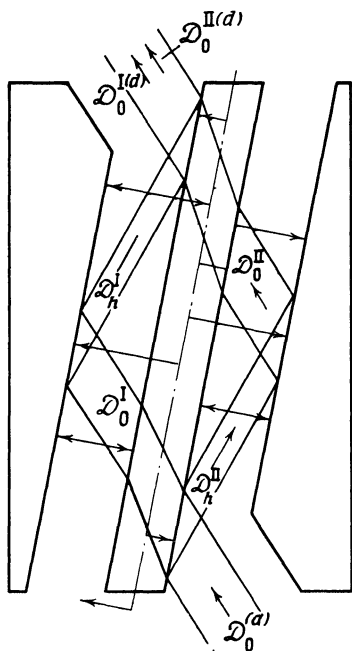
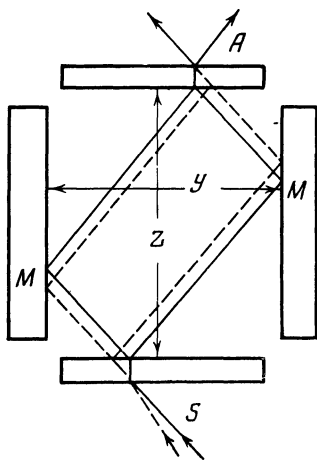


Рис. 98. Схема интерферометра с отражением по Брэггу

Рис. 99. Схема комбинированного интерферометра (разделитель и анализатор по Лауэ, зеркала по Брэггу)



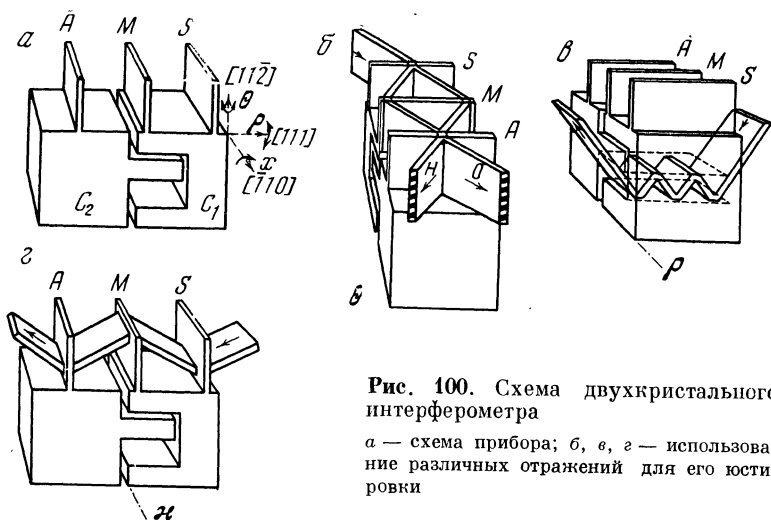


Рис. 100. Схема двухкристального интерферометра

а — схема прибора; б, в, г — использование различных отражений для его юстировки

В работе [149] описан *комбинированный интерферометр*, в котором разделитель и анализатор работают на основе отражения по Лауэ, а зеркала — по Брэггу (рис. 99).

Принципиальное преимущество подобной схемы — в более высокой интенсивности выходных пучков. Действительно, при прохождении через пластинку с заданной величиной поглощения отношение интенсивностей проходящих пучков $T_B/T_L \sim (1 - R)^2/R$, где R — коэффициент отражения. Наоборот, интегральное отражение по Брэггу в два раза больше отражения по Лауэ.

Двухкристальный интерферометр. В интерферометрах, изготовленных из одного монокристаллического блока, помимо решения задачи рекомбинации когерентных пучков, обеспечивается механическая и «тепловая» стабильность. Однако при использовании интерферометрического метода изучения и контроля совершенства структуры с помощью картин муара представляет интерес создание прибора из двух независимых частей, одна из которых является данным образцом. Подобный прибор важен также при точных измерениях длин и параметров с помощью трансляционного муара. В работе Бонзе и те-Каата [150] описан двухкристальный интерферометр, в котором (рис. 100) разделитель и зеркало изготовлены из одного блока C_1 , а анализатор — из другого C_2 . Как показано на рисунке, кристалл C_2 закрепляется неподвижно, а кристалл C_1 снабжается механизмом с тремя взаимно перпендикулярными поворотами. Интерферометр рассчитан для отражения $220 \text{ Cu } K\alpha$ от Si. Оси указанных поворотов имеют рациональные ориентации: ось θ (рис. 100) направлена вдоль $[11\bar{2}]$, ось ρ — вдоль $[111]$ и ось κ — вдоль $[\bar{1}10]$. Таким образом, ось θ позволяет установить угол отражения

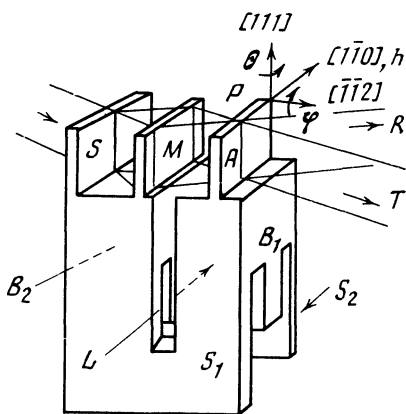


Рис. 101. Схема интерферометра для получения трансляционного муара

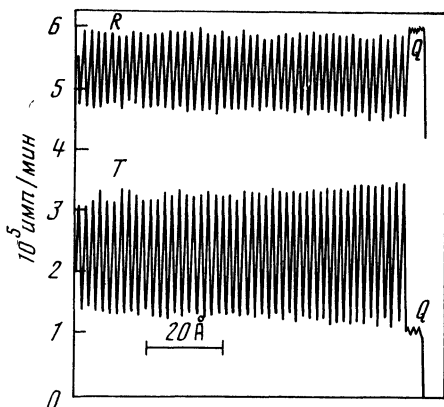


Рис. 102. Запись трансляционного муара в лучах отраженного (R) и прошедшего (T) пучков

220 по Лауэ по отношению к падающей волне. Ось ρ — позволяет либо вызвать, либо устранить поворотный муар между пластинками A , M и S . Наконец, ось κ — нормальна к отражающей плоскости 220. Соответственно основной дифракционный эксперимент, отражение от плоскостей (220), по схеме интерферометра позволяет юстировать кристалл C_1 относительно оси θ . С помощью отражения 224 излучения $MoK\alpha$ от тех же трех пластинок SMA C_1 юстируется относительно оси κ . Для юстировки относительно оси ρ используется многократное отражение $11\bar{2}$ внутри полости, образованной обоими кристаллами, как показано на рис. 100, в. Наиболее точной должна быть юстировка относительно последней оси. Точность установки по ρ и θ контролировалась с помощью пьезоэлемента. Прибор был термостатирован с точностью до $\pm 10^{-3}^\circ C$ в продолжение часа и $\pm 10^{-2}^\circ C$ в течение суток, а также защищен от механических вибраций и дрейфа.

Исследование режима работы прибора показало, что в системе происходят медленные движения двух типов: взаимное поступательное смещение ($0,2 \text{ \AA}$ в минуту) кристаллов C_1 и C_2 , эффект которого можно компенсировать, и взаимный их поворот.

Таким образом, была доказана возможность юстировки частей прибора с точностью порядка 10^{-3} от угловой секунды.

К а р т и н ы т р а н с л я ц и о н н о г о м у а р а. В работах Харта [136] и Дислейта [137] для осуществления взаимного смещения частей интерферометра использовался тот же принцип упругой деформации более тонких частей монокристалльного блока, что и в работе Бонзе и Харта [28]. Харт [136] поставил задачу использования трансляционного муара, возникающего в интерферометре по Лауэ, для абсолютных и точных измерений небольших отрезков ($\sim 0,1 \text{ мкм}$). Схема интерферометра представлена на

рис. 101. С помощью соответствующего давления можно упруго деформировать пружины S_1 и S_2 и смещать анализатор относительно пластинки S и M . При этом смещение микрометрического винта, деформирующего пружины на 20 мк , приводит к относительному смещению частей интерферометра на $d_{220} = 1,92 \text{ \AA}$. Запись трансляционного муара дана на рис. 102.

Дислейт [137] использовал аналогичное устройство, дополненное оптическим интерферометром, смонтированным вместе с рентгеновским на общей латунной основе. Работа такого комбинированного прибора с одновременной записью по двум каналам — оптическому и рентгеновскому — позволяет производить абсолютные измерения с ошибкой порядка ангстрема отрезков до 50 мкм .

ОБОБЩЕННАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ИДЕАЛЬНЫХ И ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

В главе 1, посвященной историческому обзору развития наших представлений о процессах распространения рентгеновских лучей в идеальных (и почти идеальных) кристаллах, отмечалось, что за последние годы наблюдается своеобразное возрождение динамической теории Дарвина. Преимуществом первоначальной формы этой теории является большая простота выводов, с помощью которых ее автор, а также Принс [87] и другие получили результаты, подтвержденные более строгой теорией Эвальда — Лауэ — Захариасена. Когда актуальной стала задача построения теории рассеяния рентгеновских лучей в деформированных кристаллах, Пеннингом и Полдером [38] и Като [39] была рассмотрена эта задача для слабдеформированных кристаллов, с использованием слегка модифицированной теории Лауэ — Захариасена. При этом выявились принципиальные трудности, стоящие на этом пути и вызванные неприменимостью к иным условиям рассеяния таких понятий, как обычная блоховская волна и ее аппроксимация суперпозицией плоских волн, дисперсионная поверхность, экспоненциальные комплексные волновые функции.

В это же время в небольшой заметке, опубликованной в 1962 г., Такаги [41] предложил использовать другой подход к той же задаче и привел фундаментальные уравнения для описания волн в кристалле, близкие по форме к уравнениям типа

$$\frac{dD_0}{dt} = c_0 D_0 + c_h D_h, \quad (11.1a)$$

$$\frac{dD_h}{dt} = c_h D_0 + (c_0 + 2\alpha) D_h, \quad (11.1b)$$

где c_0 и c_h — некоторые комплексные коэффициенты прохождения и отражения и 2α — функция отклонения от точного значения угла Вульфа — Брэгга, например типа (3.6).

Между тем уравнения (11.1) являются не чем иным, как рекуррентными соотношениями Дарвина, записанными в дифференциальной форме [7].

Теория, основанная на подобных уравнениях, как было показано для дифракции электронов [27, 40] и рядом авторов для ди-

фракции рентгеновских лучей [42—46, 151], непосредственно обобщается для деформированного кристалла и общего случая падающего волнового пакета.

В настоящей главе, следуя Топену [42], мы прежде всего приводим вывод уравнений типа Такаги из уравнений Максвелла. Далее, согласно [43], рассматривается применение теории в приближении падающего волнового пакета к рассеянию в идеальном кристалле как для случая Лауэ, так и для случая Брэгга.

Возможности теории для решения задачи дифракции по Брэггу применительно к деформированному кристаллу иллюстрируются в 4.3.

11.1. Вывод фундаментальных уравнений в общем случае деформированного кристалла

В данной теории область дефекта делится на две части: слабо искаженная и сильно нарушенная, в которой практически отсутствует динамическое равновесие проходящей и отраженной волн. Для слабо искаженной области не делается никакого предположения о роде деформаций и используется лишь единственное ограничение на порядок возрастания их величины: относительное изменение деформации принимается малым сравнительно с единицей

$$|\partial u_j / \partial x_i| \ll 1 \quad (11.2)$$

($u_j(\mathbf{r})$ — вектор смещения, \mathbf{r} — радиус-вектор в реальном кристалле, $i, j = 1, 2, 3$).

Вектор электрической индукции в вакууме описывается выражением

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_0(\mathbf{r}) \exp i[\omega_0 t - 2\pi\Phi_0(\mathbf{r})], \quad (11.3)$$

где вводится циклическая частота

$$\omega_0 = 2\pi\nu_0.$$

Выражение (11.3) является обобщением (2.19) и описывает произвольную (в смысле формы поверхности равной фазы) волну. В частности, для плоской волны: $\Phi_0(\mathbf{r}) = (\mathbf{k}_0 \mathbf{r})$, $|\mathbf{k}_0| = 1/\lambda$. В общем случае \mathbf{D} удовлетворяет волновому уравнению для вакуума:

$$\Delta \mathbf{D} + \frac{\omega_0^2}{c^2} \mathbf{D} = 0. \quad (11.4)$$

Подставляя (11.3) в (11.4), получаем

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{D}_0 - i4\pi \sum_i \frac{\partial \Phi_0}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{D}_0}{\partial x_i} - i2\pi \mathbf{D}_0 \Delta \Phi_0 - \\ - 4\pi^2 \sum_j \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial x_j} \right)^2 \mathbf{D}_0 + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \mathbf{D}_0 = 0. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Так как D_0 и Φ_0 действительные функции координат, разделение действительной и мнимой частей уравнения (11.5) проводится непосредственно.

Мы будем рассматривать волны, для которых радиусы кривизны поверхностей одинаковой фазы много больше длины волны λ , например для сферической волны радиуса R будем считать $\lambda/R \ll \ll 1$. Легко видеть, что в этом случае

$$|\text{grad } \Phi_0| \simeq \lambda^{-1} \left[1 + 0 \left(\frac{\lambda^2}{R^2} \right) \right], \quad (11.6)$$

где второй член в скобках справа обозначает пренебрежимо малые члены высших порядков малости относительно λ .

Если падающая волна является почти плоской, т. е.

$$\text{grad } \Phi_0 = \mathbf{k}_0 + \Delta \mathbf{k}_0, \quad (11.7)$$

причем $\mathbf{k}_0 \Delta \mathbf{k}_0 = 0$ и $|\Delta \mathbf{k}_0| \ll |\mathbf{k}_0|$, то из (11.6) следует, что

$$|\mathbf{k}_0| = \lambda^{-1}, \quad |\Delta \mathbf{k}_0| = R^{-1}, \quad (11.8)$$

что соответствует падающему волновому пакету с угловой шириной порядка λ/R .

Для описания волны внутри кристалла мы сохраним (обобщенную) функцию Φ_0 для фазы. Амплитуда D_0 становится комплексной функцией координат, зависящей от разности хода в кристалле и в вакууме. В частности, в случае совершенного кристалла мы имеем одну псевдопериодическую волну, отвечающую правой части уравнения (3.34), для каждого состояния поляризации. Из этого следует, что пограничное условие (3.29а) сводится к рассмотрению D_0 как непрерывной функции координат при переходе из вакуума в кристалл.

Волновое поле в кристалле будем описывать с помощью блоховской функции, однако теперь с переменными амплитудами [см. (2.36) и (2.38)]:

$$D = \sum_m D_m \exp i [\omega t - 2\pi (\mathbf{k}_m \mathbf{r})]. \quad (11.9)$$

В случае совершенного кристалла и плоских волн остаются постоянными (2.37):

$$\mathbf{k}_m = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_m, \quad \mathbf{k}_0 = \text{grad } \Phi_0. \quad (11.10)$$

Однако в общем случае \mathbf{k}_0 и \mathbf{h}_m являются функциями координат. Мы можем определить в каждой точке вектор \mathbf{h}_m , нормальный к системе плоскостей m (тройка индексов), причем

$$|\mathbf{h}_m| = d_m^{-1}(\mathbf{r}). \quad (11.11)$$

Тогда при переходе от плоскости с номером n_m к плоскости той же системы $n_m + 1$ имеем соотношение

$$\Delta n_m = 1 = \mathbf{h}_m \mathbf{d} \mathbf{r}, \quad (11.12)$$

где $d\mathbf{r}$ — приращение радиуса-вектора \mathbf{r} при переходе от данной точки \mathbf{r} на n_m -й плоскости к точке $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ на $(n_m + 1)$ -й плоскости.

Считая далее чисто формально n_m непрерывной функцией координат, которая принимает целочисленные значения на каждой плоскости m , находим

$$\mathbf{h}_m = \text{grad } n_m, \quad (11.13)$$

$$\mathbf{D} = \sum_m \mathbf{D}_m \exp i(\omega_0 t - 2\pi\Phi_m), \quad (11.14)$$

где

$$\Phi_m(\mathbf{r}) = \Phi_0(\mathbf{r}) + n_m(\mathbf{r}). \quad (11.15)$$

Заметим, что изложенный здесь способ введения функции n_m не является строгим. Непрерывность n_m , в частности, нарушается в кристаллах, содержащих дислокации. Тем не менее можно показать, что результаты излагаемой теории применимы в общем случае произвольного распределения n_m , если в деформированном кристалле выполняется условие (11.2).

Переходим к замечанию, касающемуся диэлектрической постоянной и поляризуемости в общем случае деформированного кристалла. Хотя диэлектрическая постоянная при этом не остается периодической функцией координат, но сохраняется условие (11.2), можно приближенно принимать $\epsilon(\mathbf{r})$ экспоненциальной функцией n_m в каждой системе m отражающих плоскостей. Для поляризуемости остаются в силе формулы (2.24), (2.34) и (2.35). В разложении Фурье (2.30), в соответствии со сделанным замечанием, учитываем (11.11). Таким образом, мы записываем

$$\epsilon(\mathbf{r}) = 1 + \chi, \quad \chi = \sum_m \chi_m \exp(-2\pi i n_m), \quad (11.16a)$$

$$\chi_0 = \frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi\Omega} F_0, \quad \chi_m = \chi_h = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda^2}{\pi\Omega} F_h. \quad (11.16b)$$

Далее, соответственно анализу, проведенному в 4.1 и 4.2 [например, (4.48)—(4.50)], запишем для общего случая поглощающего кристалла:

$$\chi_0 = \chi_{0r} + i\chi_{0i}, \quad \chi_h = \chi_{hr} + i\chi_{hi} \quad (11.17)$$

Одно из характерных отличий рассеяния в деформированных кристаллах есть зависимость угла отражения, или отклонения η от координат. В этой главе в качестве угловой переменной используется величина

$$\alpha = 2\eta \sin 2\theta, \quad (11.18)$$

соответствующая удвоенной величине α из уравнения (3.6). Нетрудно видеть, что величина α из выражения (11.18) соответствует

приближенному значению выражений

$$\alpha = k_0^{-2} [h_m^2 + 2(k_0 h_m)] = \lambda^2 \left(\frac{1}{d_h^2} - \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda d_h} \right), \quad (11.19)$$

где как d , так и $\sin \vartheta$ зависят от координат.

Перейдем теперь к выводу волнового уравнения для поля внутри кристалла и фундаментальных уравнений. При этом, так же как и в гл. 2, мы будем исходить из уравнений Максвелла.

Взяв ротор от обеих частей уравнений (2.2), получаем

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \text{rot } \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \frac{d}{dt} \text{rot } \mathbf{H}. \quad (11.20)$$

Перепишем теперь (2.2) в виде [см. (2.9) и (2.10)]

$$\text{rot } \mathbf{H} = c^{-1} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (11.21)$$

Подставляя (11.21) в (11.20) и переходя от вектора \mathbf{E} в левой части (11.20) к вектору \mathbf{D} , согласно соотношению

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} = (1 + \chi) \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} \approx (1 - \chi) \mathbf{D}, \quad (11.22)$$

получаем волновое уравнение для волн индукции \mathbf{D} :

$$\text{rot rot } (1 - \chi) \mathbf{D} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \mathbf{D}. \quad (11.23)$$

При этом формально принято, что \mathbf{D} зависит от времени так же, как и каждая из плоских волн в (11.14).

Для вычисления в явном виде левой части (11.23) перепишем сначала величину $(1 - \chi) \mathbf{D}$, используя решение волнового уравнения (11.14) и Фурье-разложение поляризуемости (11.16а). При этом, по аналогии с соотношением обратных векторов в идеальном кристалле $h_k + h_l = h_{k+l}$, принимаем $n_k + n_l = n_{k+l}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = (1 + \chi) \mathbf{D} &= \exp i\omega_0 t \left\{ \sum_m \mathbf{D}_m \exp(-i2\pi\Phi_m) - \right. \\ &\left. - \sum_m \sum_h \chi_m \mathbf{D}_h \exp[-i2\pi(n_m + \Phi_h)] \right\} = \\ &= \exp i\omega_0 t \sum_m \mathbf{Q}_m \exp(-i2\pi\Phi_m), \end{aligned} \quad (11.24)$$

$$\mathbf{Q}_m = \mathbf{D}_m - \sum_h \chi_{m-h} \mathbf{D}_h. \quad (11.25)$$

В дальнейшем множитель $\exp(i\omega_0 t)$ опускается. Кроме того, используются связи

$$\mathbf{k}_0 = \text{grad } \Phi_0, \quad \mathbf{h}_m = \text{grad } n_m, \quad \mathbf{k}_m = \text{grad } \Phi_m. \quad (11.26)$$

Слагающие по осям от двойного векторного произведения, согласно известным формулам векторного анализа, имеют вид

$$(\text{rot rot } \mathbf{E})_i = -\frac{\partial^2 E_i}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2 E_k}{\partial x_i \partial x_k}, \quad (11.27)$$

где индексы i и k независимо принимают значения 1, 2, 3.

Для члена номер m в сумме в правой части (11.24) появятся следующие значения слагающих по осям после первого дифференцирования:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (1 - \chi) \mathbf{D}_{mi} = \exp(-i2\pi\Phi_n) \left\{ \frac{\partial \mathbf{Q}_{mi}}{\partial x_k} - i2\pi k_{mk} \mathbf{Q}_{mi} \right\}. \quad (11.28)$$

Проведя второе дифференцирование и учитывая, что

$$\frac{\partial}{\partial x_k} k_{mk} = \frac{\partial^2 \Phi_m}{\partial x_i \partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} k_{mi},$$

получаем окончательно

$$\begin{aligned} \text{rot rot } (1 - \chi) \mathbf{D} = \sum_m \exp(-i2\pi\Phi_m) \{ & 4\pi^2 [k_m^2 \mathbf{Q}_m - \\ & - (k_m \mathbf{Q}_m) k_m] + i4\pi k_m \frac{\partial \mathbf{Q}_m}{\partial \mathbf{r}} - i2\pi \text{grad } (k_m \mathbf{Q}_m) - \\ & - i2\pi k_m \text{div } \mathbf{Q}_m + i2\pi \mathbf{Q}_m \Delta \Phi_m - \Delta \mathbf{Q}_m + \\ & + \text{grad div } \mathbf{Q}_m \} = \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (11.29)$$

Подставляя (11.29) и блоховское решение в (11.23), получаем

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \sum_m \mathbf{D}_m \exp(-i2\pi\Phi_m) = \mathbf{A}. \quad (11.30)$$

Уравнение (11.30) имеет бесконечное число неизвестных. Предполагая, что эффективные расстояния, на которых меняются предэкспоненциальные множители с номером m в (11.30), много больше длины волны с волновым вектором k_m (как будет показано последующими оценками), можно приравнять члены, относящиеся к различным волнам m . Составляя скалярные произведения каждого из членов (11.30) на \mathbf{Q}_m , получим для каждой волны

$$\begin{aligned} 4\pi^2 \{ k_m^2 \mathbf{Q}_m^2 - k_0^2 (\mathbf{D}_m \mathbf{Q}_m) - (\mathbf{Q}_m k_m)^2 \} + i2\pi k_m \text{grad } \mathbf{Q}_m^2 + i2\pi \{ \mathbf{Q}_m^2 \times \\ \times \Delta \Phi_m - \mathbf{Q}_m \text{grad } (k_m \mathbf{Q}_m) - (k_m \mathbf{Q}_m) \text{div } \mathbf{Q}_m + \\ + \mathbf{Q}_m \text{grad div } \mathbf{Q}_m - \mathbf{Q}_m \Delta \mathbf{Q}_m \} = 0. \end{aligned} \quad (11.31)$$

Заменяя в (11.31) k_m^2 на α_m , согласно (11.19) получаем

$$\begin{aligned} 4\pi^2 \{ k_0^2 \alpha_m \mathbf{Q}_m^2 - k_0^2 \sum_n \chi_{m-h} \mathbf{D}_n \mathbf{Q}_m - (\mathbf{Q}_m k_m)^2 \} + \\ + i2\pi \{ k_m \text{grad } \mathbf{Q}_m^2 + \mathbf{Q}_m^2 \Delta \Phi_m - \mathbf{Q}_m \text{grad } (k_m \mathbf{Q}_m) - \\ - (k_m \mathbf{Q}_m) \text{div } \mathbf{Q}_m + \mathbf{Q}_m \text{grad div } \mathbf{Q}_m - \mathbf{Q}_m \Delta \mathbf{Q}_m \}. \end{aligned} \quad (11.32)$$

Система уравнений (11.32) содержит члены, существенно различающиеся по порядку величины. В последующем мы исключаем члены, малые сравнительно с $Q_m^2/\lambda^2 \approx 1$. Ниже дается оценка порядка величины всех членов уравнения (11.32). Буквой τ здесь обозначаются величины, малые по сравнению с единицей.

1. $k_0^2 \alpha_m Q_m^2$: $\alpha_m \ll 1$, откуда $k_0^2 \alpha_m Q_m^2 \sim \tau Q_m^2 \lambda^{-2}$;
2. $k_0^2 \chi_{m-h} \mathbf{D}_h \mathbf{Q}_m$: $\chi_{m-h} \ll 1$, откуда $k_0^2 \chi_{m-h} \mathbf{D}_h \mathbf{Q}_m \sim \tau Q_m^2 \lambda^{-2}$;
3. $(Q_m \mathbf{k}_m)^2$: ввиду достаточно точной поперечности $\mathbf{D}_{\text{волн}}$: $(Q_m \mathbf{k}_m) \sim \tau Q_m / \lambda$, $(Q_m \mathbf{k}_m)^2 \sim \tau^2 Q_m^2 / \lambda^2$;
4. $\mathbf{k}_m \text{grad } Q_m^2$: Q_m медленно меняется на отрезках порядка λ , $\mathbf{k}_m \text{grad } Q_m^2 \sim \tau Q_m^2 / \lambda^2$;
5. $Q_m^2 \Delta \Phi_m$: из (11.4) — (11.6), а также и (11.25) следует, что $\Delta \Phi_m \sim \Phi_m \tau^2 / \lambda^2$, отсюда $Q_m^2 \Delta \Phi_m \sim \tau^2 Q_m^2 / \lambda^2$;
6. $Q_m \text{grad } (Q_m \mathbf{k}_m)$: $\mathbf{k}_m Q_m \sim \tau Q_m / \lambda$ медленно, отсюда $Q_m \text{grad } (Q_m \mathbf{k}_m) \sim \tau^2 Q_m^2 / \lambda^2$;
7. $(\mathbf{k}_m Q_m) \text{div } \mathbf{Q}_m$: $(\mathbf{k}_m Q_m) \sim \tau Q_m / \lambda$, так как Q_m медленно меняется на отрезках порядка λ , то $\text{div } \mathbf{Q}_m \ll Q_m / \lambda$;
 $(\mathbf{k}_m Q_m) \text{div } \mathbf{Q}_m \sim \tau^2 Q_m^2 / \lambda^2$;
8. $Q_m \text{grad div } \mathbf{Q}_m$: $\text{div } \mathbf{Q}_m \sim \tau Q_m / \lambda$ медленно меняется на отрезках порядка λ и $Q_m \text{grad div } \mathbf{Q}_m \sim \tau^2 Q_m^2 / \lambda^2$;
9. $Q_m \Delta Q_m$: $\Delta Q_m \sim \text{grad div } \mathbf{Q}_m$, $Q_m \Delta Q_m \sim \tau^2 Q_m^2 / \lambda^2$.

Учитывая приведенные оценки и пренебрегая в (11.32) другими членами второго порядка малости, которые появляются при исключении Q_m , согласно (11.25) перепишем (11.32) в следующем виде (после сокращения на $k_0^2 \mathbf{D}_m$, $\cos X_{mh}$ — поляризационный множитель)

$$\alpha_m \mathbf{D}_m - \sum_h \chi_{m-h} \mathbf{D}_h \cos X_{mh} + \frac{i\lambda^2}{2\pi} \mathbf{k}_m \text{grad } \mathbf{D}_m = 0. \quad (11.33)$$

Кроме того, следует подчеркнуть, что в уравнениях (11.33) величины \mathbf{k}_m являются постоянными и соответствуют волновым векторам в идеальном кристалле. Таким образом, задача о распространении рентгеновских волн в реальном кристалле сводится к решению системы уравнений (11.33) в частных производных первого порядка с переменными α_m , рассчитанными с учетом локального поля деформаций в данной точке кристалла.

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только двух волн (двухволновое приближение) 0 и h и рассеянием в centrosymmetric кристалле.

Пусть \mathbf{s}_0 и \mathbf{s}_h — единичные векторы в направлениях распространения преломленной и отраженной волн соответственно:

$$\mathbf{s}_0 = \lambda \mathbf{k}_0, \quad \mathbf{s}_h = \lambda \mathbf{k}_h. \quad (11.34)$$

Для любой точки плоскости отражения в кристалле имеем

$$\mathbf{r} = x_0 \mathbf{s}_0 + x_h \mathbf{s}_h, \quad (11.35)$$

и система уравнений (11.33) в двухволновом приближении записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} i \frac{\lambda}{\pi} \frac{\partial D_0}{\partial x_0} &= \chi_0 D_0 + \chi_h D_h, \\ i \frac{\lambda}{\pi} \frac{\partial D_h}{\partial x_h} &= (\chi_0 - \alpha_h) D_h + \chi_h D_0. \end{aligned} \quad (11.36)$$

Как и в гл. 2 при выводе основных соотношений теории Эвальда—Лауэ, переход к двухволновому приближению позволил получить фундаментальные уравнения (11.36) в скалярной форме.

Очевидно далее, что в двухволновом случае мы можем включить поляризационный множитель $\cos X_{mh}$, входящий в выражение (11.33), в величину χ_h , добавляя значки \perp (σ_{\perp} -поляризация) и \parallel (π -поляризация), при этом

$$\chi_h^{\perp} = \chi_h^{\parallel} (|\cos 2\theta|)^{-1}. \quad (11.37)$$

Система (11.36) была впервые получена Такаги в 1962 г. [41]. В настоящее время она является основной системой уравнений при решении задачи о распространении пространственно-неоднородных рентгеновских волновых пакетов в кристалле и анализе проблемы изображения в рентгеновской дифракционной оптике (как в идеальном, так и в деформированном кристалле).

11.2. Дифракция рентгеновских лучей в идеальном кристалле в условиях пространственно-неоднородной динамической задачи.

Функция влияния точечного источника

Рассмотрим общий случай волнового пакета, падающего на поверхность идеального кристалла. Введем в плоскости отражения прямоугольную систему безразмерных координат с осью Ox , направленной антипараллельно вектору отражения \mathbf{h} , и перейдем от косоугольной системы $(\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_h)$ в уравнениях (11.36) к новой прямоугольной системе с помощью соотношений

$$x = \frac{2\pi}{\lambda} (x_0 - x_h), \quad z = \frac{2\pi}{\lambda} (x_0 + x_h). \quad (11.38)$$

Уравнения (11.36) принимают вид

$$\begin{aligned} -2i \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) D_0 &= \chi_0 D_0 + \chi_h D_h, \\ -2i \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) D_h &= (\chi_0 - \alpha_0) D_h + \chi_h D_0, \end{aligned} \quad (11.39)$$

или, используя подстановки

$$D'_0 = D_0 \exp \left[-\frac{i\chi_0 z}{2} \right], \quad D'_h = D_h \exp \left[-\frac{i\chi_h z}{2} \right], \quad (11.40)$$

получаем

$$\begin{aligned} -2i \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) D'_0 &= \chi_h D'_h, \\ -2i \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) D'_h &= -\alpha D'_h + \chi_{\bar{h}} D'_0. \end{aligned} \quad (11.41)$$

В последующем изложении мы отбрасываем штрихи при D_0 и D_h .

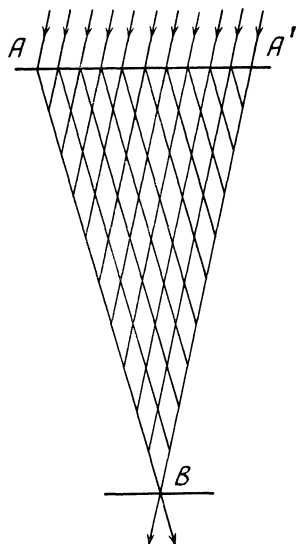
Система (11.41) соответствует телеграфному уравнению для амплитуд D_0 и D_h [152]:

$$\hat{L}[D_j] \equiv \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + i \frac{\alpha}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right] + \frac{\chi^2}{4} \right\} D_j = 0; \quad j = 0, h. \quad (11.42)$$

Для построения решений (11.42) при произвольных граничных условиях введем в рассмотрение функции $G(\xi - x, \zeta - z)$, удовлетворяющие уравнению [47]

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\zeta\xi}[G] &= \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + i \frac{\alpha}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\chi^2}{4} \right\} G = \delta(\xi - x) \delta(\zeta - z). \end{aligned} \quad (11.43)$$

Здесь $\delta(\epsilon)$ — дельта-функция Дирака. В формулах (11.42) — (11.52) используется обозначение $\chi^2 \equiv \chi_h \chi_{\bar{h}}$. Из определения функции $G(\xi - x, \zeta - z)$ и выражения (11.43) также следует



$$\begin{aligned} \hat{L}_{z,x}[G] &= \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{i\alpha}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\chi^2}{4} \right] G = \delta(\xi - x) \delta(\zeta - z). \end{aligned} \quad (11.44)$$

В теории линейные дифференциальные операторы функции G , удовлетворяющие уравнениям с δ -функцией в правой части, носят название функций Грина.

Составим билинейную комбинацию — тождество

$$\begin{aligned} \{D_j \hat{L}_{z,x}[G] - G \hat{L}[D_j]\} &= \\ &= D_j \delta(\xi - x) \delta(\zeta - z). \end{aligned} \quad (11.45)$$

Интегрируя тождество (11.45) в плоскости (xz) и переходя с помощью теоремы Грина от интеграла по площади к интегралу по контуру, ограничивающему данную площадь, находим интегральное соотношение, связывающее волновые поля внутри кристалла и на произволь-

Рис. 103. Схема Такаги

Поясняет определение волнового поля в точке B кристалла с помощью известных данных для D_j и ее нормальной производной на $AA' \equiv C$

по заданном контуре C :

$$D_j(\xi, \zeta) = \int_C \left\{ D_j \left(\frac{\partial G}{\partial z} dx + \frac{\partial G}{\partial x} dz \right) - G \left(\frac{\partial D_j}{\partial z} dx + \frac{\partial D_j}{\partial x} dz \right) + i \frac{\alpha_j}{2} G D_j (dz - dx) \right\}. \quad (11.46)$$

Если на контуре C известны значения функции D_j и ее нормальной производной $\partial D_j / \partial n$ (эти значения могут быть заданы произвольно лишь для контуров, которые пересекаются прямыми $x + z = \text{const}$ в одной точке [153]), то (11.46) дает решение задачи об определении волнового поля в любой точке кристалла (рис. 103). При этом функция G и ее производные являются функциями влияния, описывающими распространение локального возмущения волнового поля и играют в оптике рентгеновских лучей такую же роль, какую в световой оптике играет функция $R^{-1} \exp(ikR)$, описывающая, согласно принципу Гюйгенса-Френеля, распространение возмущения от элементарного источника.

В дальнейшем мы для простоты ограничимся рассмотрением симметричной дифракции рентгеновской волны по Лауэ и Брэггу на идеальном кристалле в виде плоскопараллельной пластины толщиной t .

11.3. Отражение по Лауэ в идеальном кристалле

Будем считать, что кристаллу соответствуют $z > 0$, входная поверхность кристалла совпадает с плоскостью $z = 0$. Распределение падающей волны при $z = 0$ имеет вид

$$D_0 = D_0^{(a)}(x, y), \quad D_h = 0. \quad (11.47)$$

Волновое поле в кристалле распространяется в положительном направлении оси z . Из физических соображений ясно, что в этом случае удобно выбрать в качестве функции G в (11.45) запаздывающую функцию Грина $G^{(r)}$

$$G_{(\xi-z, \xi-x)}^{(r)} = \frac{1}{2} J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{(\xi-z)^2 - (\xi-x)^2} \right) \times \\ \times \exp \left\{ -i \frac{\alpha}{4} [\xi-z] - (\xi-x) \right\} \theta(\xi-z) [\theta(\xi-z + \\ + \xi-x) - \theta(\xi-x-\xi-z)], \quad (11.48)$$

где $J_0(z)$ — функция Бесселя нулевого порядка; $\theta(z)$ — ступенчатая функция: $\theta(z) = 1$ при $z > 0$; $\theta(z) = 0$ при $z < 0$ и $\partial \theta(z) / \partial z = \delta(z)$. Непосредственной подстановкой (11.48) в уравнения (11.44) или (11.45) можно убедиться, что $G^{(r)}$ обращает эти уравнения в тождества. Выражение (11.48) для функции G было впервые получено в работе Слободецкого, Чуховского и Инденбома [43] и независимо в работе Отье и Симона [44].

Из (11.46), используя (11.47) — (11.48), а также (11.41), и опуская промежуточные выкладки, получаем для волнового поля внутри кристалла следующие выражения:

$$D_0(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' D_0^{(a)}(x', y) G_{00}(x - x', z), \quad (11.49)$$

$$D_h(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' D_0^{(a)}(x', y) G_{h0}(x - x', z),$$

$$G_{00}(x, z) = -\exp\left[-i\frac{\alpha}{4}(z-x)\right] \left\{ \delta(z-x) - \frac{\chi}{4} \sqrt{\frac{z+x}{z-x}} \times \right. \\ \left. \times J_1\left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2-x^2}\right) \theta(z) [\theta(x+z) - \theta(x-z)] \right\}, \quad (11.50)$$

$$G_{h0}(x, z) = -\frac{i\chi_h}{4} \exp\left[-i\frac{\alpha}{4}(z-x)\right] \times \\ \times J_0\left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2-x^2}\right) \theta(z) [\theta(x+z) - \theta(x-z)].$$

Формулы (11.49), (11.50) позволяют построить волновое поле внутри кристалла при произвольном распределении падающей волны на входной поверхности $z = 0$. Рассмотрим в качестве приложения полученных формул изображение щели в поле дифрагированной волны, когда $D_0^{(a)}(x, y) = D_0^{(a)}[\theta(x+a) - \theta(x-a)]$, где a — полуширина щели. В этом случае для поля дифрагированной волны из (11.49), (11.50) имеем

$$D_h(x, t) = \frac{i\chi_h}{4} \int_{\max(x-z, -a)}^{\min(x+z, a)} dx' \times \\ \times J_0\left(\frac{\chi}{2} \sqrt{t^2 - (x-x')^2}\right) \exp\left[-\frac{i\alpha}{2}(t-x+x')\right]. \quad (11.51)$$

При $a \rightarrow \infty$ (11.51) естественно переходят в классическое решение динамической задачи (см., например, (3.41))

$$D_h(t) = \frac{i \sin(\chi t/2) \sqrt{1 + (\alpha/2\chi)^2}}{\sqrt{1 + (\alpha/2\chi)^2}} \exp\left(-\frac{i\alpha t}{4}\right). \quad (11.52)$$

Если полуширина щели a больше толщины кристалла t , решение (11.52) справедливо лишь для центральной «равномерно освещенной» области $|x| < a - t$, а по краям изображения $a - t < |x| < a + t$ должны наблюдаться осцилляции интенсивности.

Если полуширина щели меньше толщины кристалла, равномерно освещенная область исчезает, а области осциллирующей интенсивности накладываются, причем с уменьшением ширины щели или с увеличением толщины кристалла максимума интенсивности возрастают к краям изображения для прозрачного кристалла.

Напротив, в сильно поглощающем кристалле эти осцилляции интенсивности сглаживаются. На рис. 104, 105 приведены примеры изображений щели в дифрагированной волне, полученные с помощью формулы (11.51) для прозрачного и сильно поглощающего кристалла и различных значений параметров α , a и t .

Отметим, что, как следует из (11.49), (11.50), в предельном случае бесконечно узкой щели ее изображение непосредственно дается функциями G_{00} в проходящей и G_{h0} в дифрагированной волнах, что соответствует результату теории Като (1961 г.) для падающей на кристалл сферической волны (см. гл. 6).

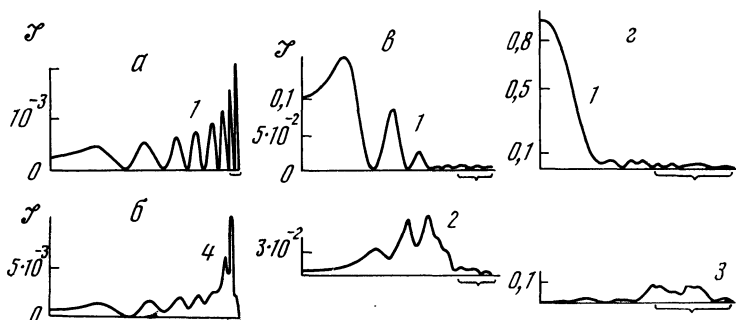


Рис. 104. Распределение интенсивности дифрагированной волны в случае прозрачного кристалла постоянной толщины

α — $a/z = 10^{-2}$; б — $2 \cdot 10^{-2}$; в — 0,1; г — 0,25; 1 — $\alpha/|x| = 0$; 2 — 2; 3 — 4; 4 — 8

Представляет интерес вывод и физическая интерпретация функций влияния точечного источника, основанные на переходе от уравнений гиперболического типа для волнового поля в кристалле (задача Коши) к уравнениям эллиптического типа (задача Лапласа) [154]. Ниже кратко приводится теория построения функций влияния, как суперпозиции «обобщенных» плоских волн.

Выполняя замену переменных в уравнениях Такаги (11.36)

$$\gamma_h [X + iY] = x_0, \quad \gamma_0 [X - iY] = x_h \quad (11.53)$$

для амплитуды $D_h(X, Y)$ находим следующее уравнение:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + 4\pi^2 k^2 \chi_h \chi_{\bar{h}} \gamma_0 \gamma_h \right) D_h = 0. \quad (11.54)$$

Амплитуду $D_h(X, Y)$ можно формально рассматривать как комплексную амплитуду электромагнитной волны, удовлетворяющую уравнению (11.54) и граничным условиям на контуре Γ ($X = 0$)

$$\begin{aligned} D_h(XY)|_{\Gamma} = 0, \quad \frac{\partial D_h(XY)}{\partial Y} \Big|_{\Gamma} = 0, \\ \frac{\partial D_h}{\partial X}(XY) \Big|_{\Gamma} = -2\pi i k C \chi_h \gamma_0 D_0(X, Y) \Big|_{\Gamma}. \end{aligned} \quad (11.55)$$

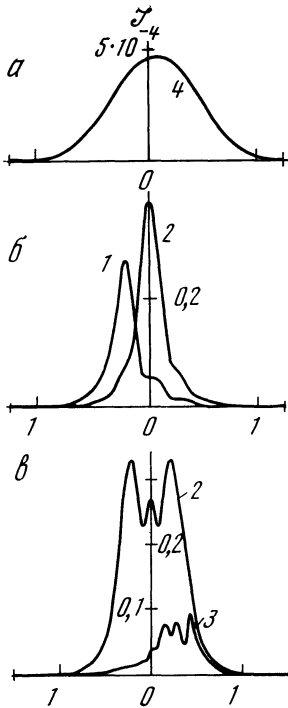


Рис. 105. Распределение интенсивности дифрагированной волны в случае поглощающего кристалла

$a - a/z = 4 \cdot 10^{-2}$; $\sigma - 0,25$;
 $\varepsilon - 0,5$; $\alpha/|\chi|$ равно: $\vartheta - 0,5$;
 $z - 0$; $\lambda - 1$; $\mu - 5$

Из физических соображений ясно, что $D_h(X, Y)$ не может нарастать на бесконечности, когда $(X^2 + Y^2) \rightarrow \infty$, т. е. имеет место асимптотическое равенство $\nabla D_h(X, Y) \rightarrow \infty$ при $X^2 + Y^2 \rightarrow \infty$. Уравнение (11.54) удобно представить в виде

$$\hat{L}D_h = 0. \quad (11.56)$$

Здесь дифференциальный оператор \hat{L} равен

$$\hat{L} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \sigma^2, \quad (11.57)$$

$$\sigma^2 = 4\pi^2 k^2 C^2 \chi_h \chi_{-h} \gamma_0 \gamma_h$$

и действует на амплитуду $D_h(X, Y)$ в области Ω' ($X > 0$).

Введем функцию распределения $T(X, Y)$ следующим образом:

$$T = D_h \theta(X), \quad (11.58)$$

где $\theta(X)$ — ступенчатая функция.

Действуя оператором \hat{L} на тождество (11.58), находим уравнение для T -функции:

$$\hat{L}T = -D_h \frac{d^2}{dX^2} \theta(X) - 2 \frac{\partial D_h}{\partial X} \frac{d\theta(X)}{dX}, \quad (11.59)$$

которое является неоднородным (с правой частью) двумерным волновым уравнением. Решение этого уравнения может

быть написано в виде «запаздывающих» и «опережающих» потенциалов:

$$T = \frac{i}{4} \iint dX' dY' [H_0^{(1)}(\sigma R) + H_0^{(2)}(\sigma R)] \times$$

$$\times \left[D_h \frac{d^2 \theta(X')}{dX'^2} + 2 \frac{\partial D_h}{\partial X'} \frac{d\theta(X')}{dX'} \right],$$

$$R^2 = (X - X')^2 + (Y - Y')^2, \quad (11.60)$$

где $H_0^{(i)}(\sigma R)$ — функция Ханкеля нулевого порядка первого или второго рода.

Учитывая граничные условия (11.55), соотношение

$$d\theta(X)/dX = \delta(X),$$

а также вспоминая, что в области Ω' T -функция совпадает с амплитудой D_h , окончательно находим

$$D_h(XY) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dY^s \frac{\partial}{\partial X} D_h(0, Y^s) [H_0^{(1)}(\sigma | R - R^s |) + H_0^{(2)}(\sigma | R - R^s |)] \theta(|R - R^s|), \quad (11.61)$$

где R^s — радиус-вектор контура $\Gamma \equiv (0, Y^s)$. Выражение (11.61) для амплитуды D_h полностью эквивалентно результату (11.49), полученному методом Римана, если воспользоваться функциональным соотношением

$$J_0(u) = \frac{1}{2} [H_0^{(1)}(u) - H_0^{(2)}(u)].$$

С другой стороны, последнее соотношение позволяет интерпретировать функцию влияния (11.48) как суперпозицию «обобщенных» плоских волн (математически описываемых функциями Ханкеля), распространяющихся от точечного источника, расположенного на поверхности кристалла.

Таким образом, изложенная трактовка процесса распространения рентгеновских волн в кристалле при наличии ограниченного волнового фронта падающей волны приводит к более общему представлению, согласно которому наблюдаемое распределение интенсивности может рассматриваться как интерференционная картина. В тех или иных специальных условиях эта картина отвечает наличию двух волновых полей (опыт Отье [16, 135]). В случае падающей плоской волны с неограниченным волновым фронтом интерференционная картина, известная как маятниковое решение динамической задачи, может быть вычислена как интерференция двух волновых полей — физическая модель, использование которой не обязательно. Тот же результат может быть получен при использовании функций влияния по методу Римана.

Отсюда следует, что изложенная в гл. 2—5 и 7, 8 теория Эвальда — Лауэ — Захариасена не является единственно возможной трактовкой динамического рассеяния. Вопрос о многоволновом рассеянии, который освещен в гл. 12 с позиций теории Эвальда — Лауэ в том случае, если желательно использовать функции влияния, требует специального рассмотрения.

11.4. Отражение по Брэггу в идеальном кристалле

С учетом выбранной нами системы координат области кристалла соответствует теперь $x > 0$. Граничные условия имеют вид

$$\begin{aligned} D_0 &= D_0^{(e)}(z, y), & x &= 0, \\ D_h &= 0, & x &= t. \end{aligned} \quad (11.62)$$

Отметим, что в случае дифракции по Брэггу граничные условия задаются при различных значениях переменной x , поэтому построение решения для волнового поля не является столь очевидным, как это было в случае дифракции по Лауэ. Тем не менее эта задача была впервые решена Афанасьевым и Коном [45] и независимо Урагами [46] методом Римана, обобщенного этими авторами на случай задания граничных условий (11.62).

Для единства изложения приведем здесь решение, основанное на использовании функций Грина G .

Введем в рассмотрение запаздывающую и опережающую функции Грина:

$$G_{(\xi-x, \zeta-z)}^{(r)} = -\frac{1}{2} J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2} \times \right. \\ \times \theta(\xi-x) |\theta(\zeta-z + \xi-x) - \theta(\zeta-z - \xi+x)| \times \\ \times \exp \left[-i \frac{\alpha}{4} (\zeta-z - \xi+x) \right], \quad (11.63a)$$

$$G_{(\xi-x, \zeta-z)}^{(a)} = -\frac{1}{2} J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{(\zeta-z)^2 - (\xi-x)^2} \right) \times \\ \times \theta(x-\xi) |\theta(\zeta-z + \xi-x) - \theta(\zeta-z - \xi+x)| \times \\ \times \exp \left[-i \frac{\alpha}{4} (\zeta-z - \xi+x) \right], \quad (11.63b)$$

удовлетворяющие уравнениям (11.43), (11.44).

Полагая в (11.46) $G = G^{(a)}$ и учитывая, что для $G = G^{(a)}$ интеграл по прямой $x = 0$ равен нулю, имеем

$$D_h(\xi, \zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(D_h \frac{\partial G^{(a)}}{\partial x} - G^{(a)} \frac{\partial D_h}{\partial x} + i G^{(a)} D_h \right)_{x=t}. \quad (11.64)$$

Вспоминая, что $D_h|_{x=t} = 0$ и $\frac{\partial D_h}{\partial x}|_{x=t} = -\frac{i\chi_h}{2} D_0$ (см. (11.41)), (11.64) можно представить в виде

$$D_h(\xi, \zeta) = -i \frac{\chi_h}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz G^{(a)}(\zeta-z, \xi-t) D_0(t, z). \quad (11.65)$$

Для определения $D_0(t, z)$ в (11.65) снова используем (11.46) с $G = G^{(r)}$, для которой обращается в нуль интеграл по прямой $x = t$:

$$D_0(t, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \left[D_0 \frac{dG^{(r)}}{dx'} - G^{(r)} \frac{\partial D_0}{\partial x'} + i \frac{\alpha}{2} G^{(r)} D_0 \right]_{x=0}. \quad (11.66)$$

Учитывая (11.41) и проводя тождественные преобразования,

преобразуем (11.66) к виду

$$D_0(t, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \left[D_0^{(a)} \left(\frac{\partial G^{(r)}}{\partial x'} - \frac{\partial G^{(r)}}{\partial z'} \right) + \right. \\ \left. + \frac{i}{2} \alpha_0 D_0^{(a)} - \frac{i\chi_h}{2} D_h \right]_{x'=0}. \quad (11.67)$$

Подставим (11.67) в (11.65). При этом мы получаем интегральное уравнение поля дифрагированной волны для каждого значения толщины ξ . Так как нас в случае дифракции Брэгга интересует поле отраженной волны на входной поверхности кристалла, то, полагая $\xi = 0$ и учитывая явный вид функций $G^{(a)}$ и $G^{(r)}$ [(11.62), (11.63)], получаем искомое интегральное уравнение:

$$D_h(0, \xi) + \frac{\chi^2}{16} \int_{-t}^{+t} dz dz' J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2 - t^2} \right) J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z'^2 - t^2} \right) \times \\ \times \exp \left[-\frac{i\alpha}{4} (z + z') \right] E_1(\xi - z - z') = \\ = \frac{i\chi^2}{16} \int_{-t}^{+t} dz dz' \frac{J_1 \left(\frac{\chi^2}{2} \sqrt{z'^2 - t^2} \right)}{\sqrt{z'^2 - t^2}} (z' + t) \times \\ \times J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2 - t^2} \right) \exp \left[-\frac{i\alpha}{4} (z + z') \right] D_0(\xi - z - z') + \\ + \frac{i\chi_h}{4} \exp \left[-\frac{i\alpha t}{4} \right] \int_{-t}^{+t} dz J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2 - t^2} \right) \times \\ \times \exp \left[-\frac{i\alpha z}{4} \right] D_0(\xi - z - t). \quad (11.68)$$

Интегральное уравнение (11.68) проще всего решить методом Фурье-преобразования:

$$D_h(0, \xi) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} D_h(\alpha) \exp(i\alpha\xi) d\alpha, \quad (11.69)$$

$$D_h(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} D_h(0, \xi) \exp(-i\alpha\xi) d\xi,$$

В результате такого преобразования после проведения непосредственных вычислений и использования табличного интеграла

$$\int_{-t}^{+t} dz \exp(-i\alpha z) J_0 \left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2 - t^2} \right) = 2 \frac{\sin(t \sqrt{\alpha^2 - (\chi^2/4)})}{\sqrt{\alpha^2 - (\chi^2/4)}} \quad (11.70)$$

Находим

$$D_h(\alpha) = G^{(B)}(\alpha) D_0(\alpha), \quad (11.71)$$

$$G_{(\alpha)}^{(B)} = \frac{\sin(t \sqrt{\alpha^2 - (\chi^2/4)})}{\sin(t \sqrt{\alpha^2 - (\chi^2/4)}) - i \sqrt{\alpha^2 - (\chi^2/4)} \cos(t \sqrt{\alpha^2 - (\chi^2/4)}}. \quad (11.72)$$

Функция $G_{(\alpha)}^{(B)}$ устанавливает связь между Фурье-компонентами искомой функции $D_h(0, \xi)$ и заданной на поверхности кристалла $D_0^{(\alpha)}(\zeta)$. В координатном пространстве эта связь имеет вид

$$D_h(0, \zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{(B)}(\zeta - z) D_0^{(\alpha)}(z) dz, \quad (11.73)$$

$$G^{(B)}(\zeta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G^{(B)}(\alpha) \exp(i\alpha\zeta) d\alpha. \quad (11.74)$$

Если на кристалл падает плоская волна, то

$$D_0^{(\alpha)}(z) = D \exp\left(-i \frac{\chi_0}{2} z\right), \quad D = \text{const.} \quad (11.75)$$

Легко проверить, что, подставляя (11.75) в (11.74) и выполняя интегрирование сначала по z и затем по α , мы получим результат, который в точности соответствует результату классической динамической теории для дифракции Брэгга.

Отметим, что формулы (11.71), (11.72) можно получить непосредственно, раскладывая падающую волну на плоские волны и решая для каждой Фурье-компоненты динамическую задачу в ее классической постановке.

Таким образом, формулы (11.72) — (11.74) полностью решают поставленную задачу определения поля отраженной волны на входной поверхности кристалла при произвольном распределении падающей волны в случае дифракции Брэгга.

Нам осталось привести окончательное выражение для интеграла (11.74). Используя известные табличные интегралы, можно получить для $G^{(B)}(z)$ выражение в виде конечной суммы для любого фиксированного z :

$$G^B(z) = \frac{i\chi_h}{4} \exp\left(-i \frac{\alpha}{4} z\right) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n, n+1} (-1)^m \left(\frac{z-2tm}{z+2tm}\right)^n \times \\ \times \left\{ J_{2n}\left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2 - (2tm)^2}\right) + \right. \\ \left. + \frac{z-2tm}{z+2tm} J_{2n+2}\left(\frac{\chi}{2} \sqrt{z^2 - (2tm)^2}\right) \theta(z-2tm) \right\}. \quad (11.76)$$

В важном для приложений случае бесконечно толстого кристалла ($t \rightarrow \infty$) в (11.76) остается только первый член ряда с $n = 0$:

$$G^B(z)|_{t \rightarrow \infty} = \frac{i\chi_h}{4} \exp\left(-i \frac{\alpha}{4} z\right) \left[J_0\left(\frac{\chi z}{2}\right) + J_2\left(\frac{\chi z}{2}\right) \right] \theta(z). \quad (11.77)$$

11.5. Применение обобщенной теории к деформированному кристаллу. Связь угловой переменной α_h с полем деформаций

Пусть точка с радиус-вектором \mathbf{r}^* в результате деформации переходит в точку \mathbf{r} . Аналогично, пусть \mathbf{h}_m^* есть значение вектора \mathbf{h}_m до деформации. Тогда уравнение плоскости с номером n_h до деформации имеет вид

$$n_h = \mathbf{h}_m^* \mathbf{r}^*. \quad (11.78)$$

Предположим, что при деформации кристалла точка O не подвергается смещению, т. е.

$$\mathbf{h}_m(O) = \mathbf{h}_m^*. \quad (11.79)$$

С другой стороны,

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}^* + \mathbf{u} \quad (11.80)$$

(\mathbf{u} — вектор смещения). Подставляя (11.80) в (11.78) и учитывая (11.79), находим

$$n_h = (\mathbf{h}_m(O) | \mathbf{r} - \mathbf{u}), \quad (11.81)$$

$$\mathbf{h}_m = \text{grad } n_h = \mathbf{h}_m(O) - \text{grad}(\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}). \quad (11.82)$$

Тогда величина α равна [см. (11.18), (11.19)]

$$\begin{aligned} \alpha_h = \lambda^2 \{ & \mathbf{h}_m^2(O) + \text{grad}^2[\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}] - 2\mathbf{h}_m(O) \text{grad}[\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}] + \\ & + 2\mathbf{k}_0 \mathbf{h}_m(O) + 2\mathbf{k}_0 \text{grad}[\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}] \} = \alpha_h(O) - \\ & - 2\lambda^2 \mathbf{k}_h \text{grad}[\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}] + O(\tau^2), \end{aligned} \quad (11.83)$$

или, используя (11.34), (11.35), получаем

$$\alpha_h = \alpha_h(O) - 2\lambda \frac{\partial}{\partial x_h} [\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}], \quad (11.84)$$

где α_h (см. (11.19)) определяет отклонение общей ориентации кристалла от точного условия Брэгга. Полагая окончательно

$$\chi_h = \chi_{hr}(1 + i\kappa), \quad \chi_{hr} < 0 \quad (11.85)$$

(χ_{hr} — действительная величина), получим

$$x_h = - \frac{\lambda A_h}{\pi \chi_h}, \quad (11.86)$$

$$x_0 = - \frac{\lambda A_0}{\pi \chi_h}. \quad (11.87)$$

Представим систему уравнений (11.36) в виде

$$i \frac{\partial D_h}{\partial A_h} = \left\{ \frac{\alpha_h(O)}{\chi_{hr}} + 2 \frac{\partial \Phi}{\partial A_h} - \frac{\chi_0}{\chi_{hr}} \right\} D_h - (1 + i\kappa) D_0, \quad (11.88)$$

$$i \frac{\partial D_0}{\partial A_0} = \left\{ -\frac{\chi_0}{\chi_{hr}} \right\} D_0 - (1 + i\kappa) D_h,$$

$$\Phi = \pi(\mathbf{h}_m(O) \mathbf{u}). \quad (11.89)$$

11.6. Изучение частного случая зависимости D_0 и D_h только от толщины кристалла [155]

Будем искать решения основной системы (11.36), для которой амплитуды D_0 и D_h зависят только от одной переменной $t = (\mathbf{n}, \mathbf{r})$, где \mathbf{n} — единичный вектор нормали к поверхности входа кристалла ($t < 0$ в кристалле и $t = 0$ на входной поверхности).

Ясно, что существование подобных решений, которые в дальнейшем будут называться «собственными волнами», накладывает определенные ограничения на форму падающей волны и тип деформации кристалла, например, случай дифракции плоских рентгеновских волн на совершенном кристалле. Тем не менее изучение подобных решений имеет методическое значение, так как оно приводит к существенному упрощению расчетов. В частности, мы увидим, что число переменных в основной системе уравнений от двух сводится к одному и даже нулю, например в случае постоянного градиента деформации в кристалле бесконечной толщины.

Собственные волны. Мы называем «собственной волной» такую волну, для которой α_h зависит только от t . В общем случае падающий на кристалл пучок всегда расходящийся и дифракционная картина — суперпозиция бесконечного количества картин, соответствующих различным волновым векторам, содержащимся в падающем пучке. Для изучения дифракции на совершенных кристаллах этот пучок обычно разлагают на плоские волны. Метод Топэна заключается в том, что тип волны, выбираемой для этого разложения, зависит от рода деформации кристалла. Кроме того, необходимо, чтобы система собственных волн была полной, т. е. чтобы любая падающая волна могла быть представлена в виде суммы собственных волн.

Система дифференциальных уравнений для собственных волн [ср. (11.36)]

$$i \frac{\lambda}{\pi} \gamma_0 \frac{\partial D_0}{\partial t} = \chi_0 D_0 + \chi_h D_h, \quad (11.90)$$

$$i \frac{\lambda}{\pi} \gamma_h \frac{\partial D_h}{\partial t} = \chi_0 D_h - \alpha_h D_h + \chi_h D_h,$$

при этом

$$\alpha_h = \alpha_h(O) + \int_0^t \frac{\partial \alpha_h}{\partial t} dt, \quad (11.91)$$

$$t = \gamma_0 x_0 + \gamma_h x_h, \quad \gamma_0 = (n s_0); \quad \gamma_h = (n s_h). \quad (11.92)$$

Систему уравнений (11.90) необходимо дополнить граничными условиями, причем возможны два случая:

а) случай Лауэ ($b = \gamma_h/\gamma_0 > 0$):

$$D_h = 0, \quad D_0 = D_0^{(a)} \quad (t = 0) \quad (11.93)$$

($D_0^{(a)}$ — амплитуда волн в вакууме);

б) случай Брэгга ($b = \gamma_h/\gamma_0 < 0$):

$D_h = 0$ при $t = t_{\max}$ (t_{\max} — нижняя грань кристалла, для бесконечно толстого кристалла $t_{\max} = -\infty$)

$$D_0 = D_0^{(a)} \quad (t = 0). \quad (11.94)$$

Рассмотрим в качестве примера изогнутый кристалл. Пусть R — радиус кривизны плоскостей, положительный для $t > 0$. Ось OX лежит в плоскости падения, перпендикулярной оси Ot , ось OY параллельна оси кривизны. Считая, что изгиб является строго цилиндрическим, имеем

$$u_x = -\frac{tx}{R}, \quad u_y = 0, \quad u_t = \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{R} + L \frac{t^2}{R} \right), \quad (11.95)$$

где $L = (\lambda^* + 2\mu^*)/\lambda^*$ (μ^* , λ^* — коэффициенты Ламэ).

Учитывая (11.84), находим

$$\frac{\partial \alpha_h}{\partial t} = \frac{2(b-1)}{bR} (1 - b\gamma_h^2 + bL\gamma_h^2).$$

В частности, в симметричном случае Брэгга $b = -1$, $\gamma_h = \sin \vartheta$,

$$\frac{\partial \alpha_h}{\partial t} = \frac{4}{R} (\cos^2 \vartheta - L \sin^2 \vartheta). \quad (11.96)$$

В симметричном случае Лауэ $b = 1$

$$\partial \alpha_h / \partial t = 0. \quad (11.97)$$

Следовательно, интегральная отражательная способность та же самая, что и для неизогнутого кристалла. Действительно, в этом случае величины ϑ и d изменяются, но величина $d \sin \vartheta$ остается постоянной вдоль хода лучей [38].

11.7. Модификация основных уравнений (поглощающий кристалл)

Введем следующие обозначения:

$$D_0 = Q_0 \frac{1}{V|\gamma_0|} \exp \left[-i\chi_{0r} \frac{\pi t}{\lambda\gamma_0} \right] \exp \left[-\frac{\mu t}{2\gamma_0} \right], \quad (11.98)$$

$$D_h = Q_h \frac{1}{V|\gamma_h|} \exp \left[-i\chi_{0r} \frac{\pi t}{\lambda\gamma_0} \right] \exp \left[-\frac{\mu t}{2\gamma_0} \right], \quad (11.99)$$

$$A = \frac{\gamma_h A_h - \gamma_0 A_0}{V|\gamma_0||\gamma_h|}. \quad (11.100)$$

Введем также величину

$$\varepsilon = \begin{cases} 1 & \text{в случае Лауэ,} \\ -1 & \text{в случае Брэгга.} \end{cases} \quad (11.101)$$

Основная система уравнений (11.90) принимает вид

$$i \frac{dQ_0}{dA} = (1 + i\kappa) Q_h, \quad -i \frac{dQ_h}{dA} = 2Q_h(y + ig) + \varepsilon(1 + i\kappa). \quad (11.102)$$

Здесь величины y и g даны в (8.89), $\kappa = \chi_{hi}/\chi_{hr}$. Кроме того,

$$y(A) = y_0 + \int_0^A C(A) dA,$$

$$C(A) = \frac{dy}{dA} = -\frac{\varepsilon\lambda}{\pi\chi_{hr}^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} s_0^{(i)} s_h^{(j)} (s_h^{(k)} - s_0^{(k)}), \quad (11.103)$$

где i, j, k — независимо принимают значения 1, 2; $s_h^{(k)}$ и $s_0^{(k)}$ являются проекциями соответствующих единичных векторов на нормаль n .

Рассмотрим случай отражения по Брэггу. Заметим, что в этом случае нас интересует величина

$$X_0(O) = \frac{Q_h(O)}{Q_0(O)} = \frac{D_h(O) V|\gamma_h|}{D_0(O) V|\gamma_0|}. \quad (11.104)$$

Естественно поэтому попытаться получить уравнение для определения только функции $X(A)$. Система (11.102) делением соответствующих уравнений на Q_h и Q_0 преобразуется к виду

$$-iQ_0^{-1} \frac{\partial Q_0}{\partial A} = X(1 + i\kappa), \quad (11.105)$$

$$-iQ_h^{-1} \frac{\partial Q_h}{\partial A} = 2(y + ig) - \frac{1}{X}(1 + i\kappa).$$

Вычитая почленно из первого уравнения второе, находим искомое уравнение:

$$i(dX/dA) = X^2(1 + i\kappa) - 2X(y + ig) + (1 + i\kappa) \quad (11.106)$$

с граничным условием

$$X = 0 \quad (A = A_{\max}). \quad (11.107)$$

Рассмотрим дифракцию Брэгга в случае однородного изгиба толстого кристалла много больше длины обычного поглощения, т. е.

$$t_{\max} \gg \mu^{-1}.$$

При этом энергия, выходящая с обратной стороны кристалла, будет пренебрежимо мала (бесконечно толстый кристалл, $t_{\max} = -\infty$). С учетом этого обстоятельства граничное условие (11.107) можно заменить следующим:

$$X = 0, \quad (A = -\kappa_{hr} \cdot \infty). \quad (11.108)$$

Так как для однородного изгиба

$$y = y(0) + CA, \quad (11.109)$$

то удобно преобразовать уравнение (11.106), введя независимую переменную y :

$$ic (dX/dy) = X^2 (1 + i\kappa) - 2X (y + ig) + (1 + i\kappa) \quad (11.110)$$

с граничным условием

$$X = 0 \quad (y = -cg \cdot \infty). \quad (11.111)$$

Уравнение (11.110) является исходным для проверки динамической теории в однородно деформированном кристалле в случае дифракции Брэгга [155]. Исследование кривых отражения обнаруживает, что при $|c| < 0,1$ нет отличия от кривой для совершенного кристалла. При $|c| = 0,01$ кривые имеют со стороны $ycg > 0$ осциллирующий хвост, убывающий в среднем как $\exp(-|4gy/c|)$, в то время как часть кривой, заключенная в интервале от -1 до 1 , остается практически неизменной. Если $|c| > 1$, главный максимум уменьшается и смещается вправо ($ycg > 0$), между тем как «хвост» вытягивается, давая широкую и сильно сплюснутую кривую отражения.

ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ
В СЛУЧАЕ ТРЕХ СИЛЬНЫХ ВОЛН

Принципиальное рассмотрение многоволнового рассеяния было впервые выполнено Эвальдом в 1937 г. [156] на основе его динамической теории. В этой работе рассматривалось рентгеновское волновое поле, состоящее из n взаимодействующих между собой плоских волн, распространяющихся в кристалле. Согласно точке зрения автора, основные характеристики поля, а именно длины и направления волновых векторов \mathbf{k}_n и относительные значения амплитуд или напряженностей электрических и магнитных полей, определяются точкой A в обратном пространстве, названной автором точкой связи. При этом условие самосопряженности полного волнового поля приводит к выводу, что точка A должна лежать на дисперсионной поверхности $\Delta = 0$ (см. гл. 2 и рис. 3). Эта поверхность должна иметь $2n$ листов. Такой подход принципиально позволяет определить преломленные и дифрагированные волны в вакууме использованием соответствующих условий на границах кристалл — вакуум.

Наряду с указанной теоретической работой Эвальда, следует отметить экспериментальное обнаружение и детальное исследование в двадцатых и тридцатых годах нашего века двух чисто динамических эффектов, связанных с многоволновым рассеянием.

Прежде всего это «просветление» (Aufhellung), открытое в 1923 г. Вагнером и детально исследованное Бергом и в особенности учеником Эвальда Майером [157]. Явление просветления заключается в том, что при использовании слегка расходящегося пучка лучей с конечным спектральным интервалом для получения определенного отражения от монокристалла можно поворотом вокруг одной из осей спектрографа юстировать кристалл в положение, отвечающее одновременно второму отражению. В таком случае на спектральной полосе, отвечающей первому отражению, возникает узкая светлая линия, обязанная изменению относительной интенсивности первого (главного) отражения при переходе к трехволновому рассеянию. Необходимо отметить, что уже в 1928 г. Майер использовал динамическую теорию Эвальда для расчета эффекта просветления, который рассматривался как трехволновое рассеяние с лежащими в одной плоскости волновыми векторами падающей (преломленной) и двух дифрагированных волн. В тео-

ретической части этой работы для рассмотрения трехволнового рассеяния использовался метод дисперсионной поверхности, и Майера можно считать предшественником современных исследователей.

Трехволновое рассеяние в более прямом смысле было открыто и исследовано Реннингером в 1937 г. и было им названо «непрямым возбуждением» (Umweganregung). Исследуя отражение рентгеновских лучей от кристалла алмаза, Реннингер наблюдал (обнаруженное еще до него) отражение 222, запрещенное для алмазной структуры. Как известно [158], возникновение этого отражения объясняется отклонением электронной оболочки атомов углерода в этой структуре от сферической симметрии и сосредоточением некоторой доли электронной плотности в межатомных «мостиках». Впрочем, это объяснение может считаться подтвержденным экспериментально скорее качественно, чем количественно.

Реннингер применил оригинальную методику эксперимента. Установив кристалл по отношению к падающему пучку в положение отражения (по Брэггу) второго порядка от плоскости (111), он регистрировал ионизационной камерой интенсивность отраженного пучка, вращая кристалл вокруг оси, нормальной к плоскости (111). При этом наблюдалось слабое постоянное отражение 222 и периодическое возникновение более или менее сильных пиков, связанных отражениями от других плоскостей кристалла. Период этих «всплесков» интенсивности, в соответствии с шестерной симметрией оси [111] в обратной решетке, составлял 60° . Образование обнаруженных отражений при вращении кристалла алмаза вокруг оси [111] при угле падения, отвечающем отражению 222, непосредственно прослеживается на стереографической проекции кубического кристалла вдоль оси третьего порядка, если нанести соответствующие проекции окружностей основания конусов Косселя. Окружность конуса отражений 222 (которая проектируется без искажения) пересекает с указанным интервалом в 60° окружности конусов отражений 111, 133 и 113 поочередно. Легко показать, что, несмотря на пересечение окружностей конусов более сильных отражений 220 и 400, возникновение этих отражений невозможно, если учесть поляризацию отраженных волн.

Толчок к новым детальным исследованиям многоволнового рассеяния был вызван работой Бормана и Хартвига 1965 г. [30]. В этой работе исследовалось одновременное отражение 111 (пучок II) и $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ (пучок III) по Лауэ излучения $\text{Cu K}\alpha$ от кристаллической пластинки Ge. Применялся широкоугольный пучок и отражения регистрировались на фотопленке. Снимок представляет собой полосы двухволнового отражения, с более интенсивными пятнами, возникавшими в результате трехволнового рассеяния. Так как толщина пластинок Ge была ~ 1 мм ($\mu t \approx 30$), то полученную картину можно было объяснить усилением аномального прохождения по сравнению с двухволновым случаем. Этот вывод

подтверждается тем, что при переходе от толщины 0,8 мм к 1,2 мм полоски исчезали, в то время как точки оставались. Используя приближенное соотношение интенсивностей отражений от пластинок указанных толщин, авторы нашли минимальный коэффициент поглощения $\sim 45 \text{ см}^{-1}$ и сопоставили его с соответствующими величинами:

$$\begin{aligned} \mu &= 352 \text{ см}^{-1}, & \sigma_{\min}^{(2)}(111) &= 105 \text{ см}^{-1}, \\ \sigma_{\min}^{(2)}(220) &= 15 \text{ см}^{-1}, & \sigma_{\min}^{(3)}(111) &= 45 \text{ см}^{-1}. \end{aligned}$$

На другом снимке зафиксированы случаи отражения, возникающие, если направить падающий пучок вдоль отраженных пучков *II* и *III*. Полученные снимки интересны, по меньшей мере, с двух точек зрения. Во-первых, иллюстрируется эквивалентность трехволнового отражения (но не двухволнового!) при циклической замене пучков $I \rightarrow II \rightarrow III \rightarrow I \rightarrow \dots$ Во-вторых, обнаруживается образование отражения 200, запрещенного при двухволновом рассеянии.

Следует отметить, что дальнейшие экспериментальные исследования многоволнового рассеяния немногочисленны. Можно привести измерения Саксисо и Заяк [159], Уэбаха и Хильдебрандта [160] и Кацнельсона, Кисина и Поляковой [161], а также очень краткую заметку Хильдебрандта [162], в которой дана сводка выполненных им измерений ряда трех-, четырех- и шестиволновых отражений. Для отражений 111 зафиксированы многочисленные случаи усиления аномального прохождения по сравнению с двухволновым рассеянием. Вместе с тем до сих пор не зафиксированы надежные данные, указывающие на возрастание аномального прохождения для отражений типа 220.

Наряду с экспериментальными работами, начиная от 1965 г. были опубликованы теоретические работы, задачей которых наряду с разработкой общей теории многоволнового рассеяния был расчет векторов индукции, коэффициентов поглощения и интенсивностей прошедших и дифрагированных волн [159, 163—165] и [33]. Как будет показано далее, существенно различаются два типа многоволнового рассеяния (по преимуществу, трехволнового): первый тип, при котором волновые векторы k_0, k_h, k_l лежат в одной плоскости, и второй тип, при котором указанные векторы не компланарны.

Рассеяние первого типа описывается уравнениями, которые являются обобщением системы (2.63) или (2.64). Аналогично уравнениям в форме (2.68), используя соотношения (2.70) и (2.76), запишем систему для случая трех отражений, для σ -поляризации

$$\begin{aligned} (\chi_0 - 2\varepsilon_0) D_0 + \chi_{\bar{h}} D_h + \chi_{\bar{l}} D_l &= 0, \\ \chi_h D_0 + (\chi_0 - 2\varepsilon_h) D_h + \chi_{h-l} D_l &= 0, \\ \chi_l D_0 + \chi_{l-h} D_h + (\chi_0 - 2\varepsilon_l) D_l &= 0 \end{aligned} \tag{12.1}$$

и для π -поляризации

$$\begin{aligned}(\chi_0 - 2\varepsilon_0) H_0 + \chi_{\bar{h}} \cos 2\vartheta_{0h} H_h + \chi_{\bar{l}} \cos 2\vartheta_{0l} H_l &= 0, \\ \chi_h \cos 2\vartheta_{0h} H_0 + (\chi_0 - 2\varepsilon_h) H_h + \chi_{h-l} \cos 2\vartheta_{hl} H_l &= 0, \\ \chi_l \cos 2\vartheta_{0l} H_0 + \chi_{l-h} \cos 2\vartheta_{hl} H_h + (\chi_0 - 2\varepsilon_l) H_l &= 0.\end{aligned}\quad (12.2)$$

Отсюда можно получить

$$-D_h = \frac{\chi_h (2\varepsilon_l - \chi_0) + \chi_l \chi_{h-l}}{(2\varepsilon_h - \chi_0)(2\varepsilon_l - \chi_0) - |\chi_{h-l}|^2} D_0, \quad (12.3)$$

$$-H_h = \frac{\chi_h (2\varepsilon_l - \chi_0) \cos 2\vartheta_{0h} + \chi_l \chi_{h-l} \cos 2\vartheta_{0l} \cos 2\vartheta_{hl}}{(2\varepsilon_h - \chi_0)(2\varepsilon_l - \chi_0) - |\chi_{h-l}|^2 \cos^2 2\vartheta_{hl}}. \quad (12.4)$$

Выражения (12.3) и (12.4) обнаруживают две интересные особенности многоволнового рассеяния. Во-первых, в том случае, если $\chi_h = 0$, т. е., например, данное отражение является запрещенным, величины D_h и H_h , а следовательно, и интенсивности отражения не обязательно обращаются в нуль. Этот результат объясняет эффект Реннингера или «непрямое возбуждение». Наоборот, при отличных от нуля значениях χ_h , χ_l и χ_{h-l} второе слагаемое в числителе (12.3) и (12.4) может иметь знак, обратный первому, в результате чего значения D_h и H_h , а значит, и интенсивностей, могут быть сильно уменьшены. Это объясняет эффект «прояснения».

Основной интерес представляет, однако, многоволновое рассеяние с некопланарными волновыми векторами. Этот случай связан с трудностью в определении направлений и величин векторов индукции ввиду отсутствия стандартных направлений σ - и π -поляризаций. Задача оказывается сложной также и потому, что дисперсионная поверхность является поверхностью шестого и более высокого порядка и ее исследование становится чрезвычайно трудным.

Общее и вместе с тем детальное рассмотрение трехволнового рассеяния дано в работах Эвальда и Хено [31, 32] к изложению которых мы и перейдем.

12.1. Рассеяние в прозрачном кристалле.

Опорные системы координат

Для анализа и описания волнового поля в кристалле в трехволновом приближении широко используется образ дисперсионной поверхности в обратном пространстве. При этом возможен различный выбор системы координат. Наиболее общей следует считать систему, связанную с тройкой волновых векторов, проведенных из точки E — точки Лоренца (на рис. 3 и 6) к соответствующим узлам обратной решетки. Эта тройка векторов показана на рис. 106. По построению точка Лоренца (Lo) является точкой

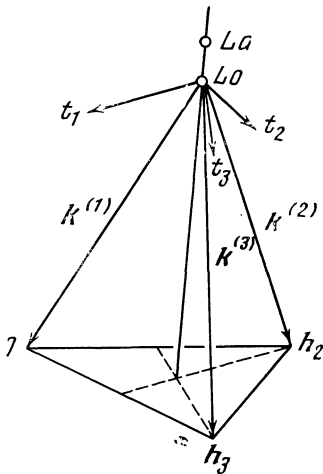


Рис. 106. Опорная система координат в обратном пространстве, используемая в теории трехволнового рассеяния Эвальда—Хено

новое начало, точку L_0 , которая смещена относительно O на вектор L_0 , согласно (12.6). Для определения величины вектора L_0 , выраженной через векторы h_i , используем то обстоятельство, что точка L_0 лежит на пересечении плоскостей, равноотстоящих от O и h_2 и O и h_3 соответственно. Уравнения этих плоскостей получаются непосредственно, так как для любого вектора Ox , кончающегося на такой плоскости, величина его проекций на прямую Oh_2 составит $(1/2)(h_2h_2)$, на прямую Oh_3 — $(1/2)(h_3h_3)$. Искомые уравнения имеют вид

$$(xh_2) = \frac{1}{2} h_2^2, \quad (xh_3) = \frac{1}{2} h_3^2, \quad h_i = |Oh_i|. \quad (12.8)$$

Вектор $Ox = Ox'$, лежащий на пересечении указанных плоскостей в плоскости (h_2h_3) , с одной стороны, удовлетворяет уравнениям (12.8) и, с другой, может быть определен как $Ox' = \alpha h_2 + \beta h_3$. Скалярным умножением этого уравнения на h_2 и h_3 и использованием (12.4) мы определяем α и β . В результате

$$Ox' \equiv x' = \frac{1}{2[h_2h_3]^2} \{h_3^2[h_2^2 - (h_2h_3)]h_2 + h_2^2[h_3^2 - (h_2h_3)]h_3\}. \quad (12.9)$$

Расстояние OL_0 , очевидно, будет равно векторной сумме вектора Ox' и некоторого вектора, нормального к плоскости (h_2h_3) ,

$$L_0 = x' - \nu [h_2h_3] = x. \quad (12.10)$$

пересечения сфер радиусом

$$k = K(1 - 1/2|\chi_0|), \quad k = Kn. \quad (12.5)$$

Соответствующие векторы обозначаются буквами $k^{(1)}$, $k^{(2)}$ и $k^{(3)}$, причем, если обозначить вектор L_0 $O = L_0$, $k^{(1)} \equiv -L_0$, $k^{(2)} = -L_0 + h_2$, $k^{(3)} = -L_0 + h_3$. (12.6)

Очевидно, что волновые векторы динамического трехволнового рассеяния k_i отличаются по направлениям от векторов $k^{(i)}$ лишь весьма незначительно. Мы вводим далее единичные векторы:

$$s_1 = -\frac{L_0}{k}, \quad s_2 = \frac{-L_0 + h_2}{k},$$

$$s_3 = \frac{-L_0 + h_3}{k}. \quad (12.7)$$

Таким образом, наряду со стандартным началом координат в обратном пространстве, точкой O , мы вводим

таким образом, наряду со стандартным началом координат в обратном пространстве, точкой O , мы вводим

Возводя (12.10) в квадрат, подставляя $x^2 = k^2$ и значение x' из (12.9), определяем неизвестное v . Окончательное выражение для вектора \mathbf{Lo} имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{Lo} &= \frac{1}{2[\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]^2} \{[\mathbf{h}_2^2 - (\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3)]\mathbf{h}_3^2\mathbf{h}_2 + \\ &+ [\mathbf{h}_3^2 - (\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3)]\mathbf{h}_2^2\mathbf{h}_3 - w[\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3], \\ w &= \{4k^2[\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]^2 - \mathbf{h}_2^2\mathbf{h}_3^2(\mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_3)^2\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (12.11)$$

Точка Лауэ La (точка M на рис. 3 и 6), по определению, соответствует пересечению сфер, проведенных из точек O , \mathbf{h}_2 , \mathbf{h}_3 радиусами K . Ввиду малого различия величин k и K значение расстояния La Lo можно получить, заменяя в (12.7) k на K и используя переход

$$\lim \left(\frac{\Delta |\mathbf{Lo}|}{\Delta k^2} \right) \Delta k^2 = \frac{d |\mathbf{Lo}|}{dk^2} \Delta k^2. \quad (12.12)$$

Отсюда

$$- \text{La Lo} = \frac{\chi_0 K^2 [\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]}{(4K^2 [\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]^2 - \mathbf{h}_2^2\mathbf{h}_3^2(\mathbf{h}_2 - \mathbf{h}_3)^2)^{1/2}}. \quad (12.13)$$

Итак, роль исходной или «прямой» системы координат будет играть тройка векторов \mathbf{s}_i , согласно (12.7), с общим началом в Lo . Объем «ячейки», опирающейся на векторы \mathbf{s}_i , составляет

$$\begin{aligned} v_s &= (\mathbf{s}_1 [\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3]) = k^{-3} (-\text{Lo} [(-\text{Lo} + \mathbf{h}_2)(-\text{Lo} + \mathbf{h}_3)]) = \\ &= k^{-3} (-\text{Lo} [\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]) = k^{-3} \frac{w}{2[\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]^2} [\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]^2 = \frac{w}{2k^3}. \end{aligned} \quad (12.14)$$

Далее будут также использоваться безразмерные векторы

$$\boldsymbol{\eta}_2 = \mathbf{h}_2 k^{-1}, \quad \boldsymbol{\eta}_3 = \mathbf{h}_3 k^{-1}, \quad (12.15)$$

модули которых соответственно условию Вульфа — Брэгга отвечают величинам $2 \sin \vartheta_2$ и $2 \sin \vartheta_3$, где углы ϑ_2 и ϑ_3 отвечают направлению (на преломление) закону Вульфа — Брэгга. С использованием новых переменных значения w и v_s переписываются в виде

$$\begin{aligned} w &= k^3 \sqrt{4[\boldsymbol{\eta}_2\boldsymbol{\eta}_3]^2 - \boldsymbol{\eta}_2^2\boldsymbol{\eta}_3^2(\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)^2}, \\ v_s &= 1/2 \sqrt{4[\boldsymbol{\eta}_2\boldsymbol{\eta}_3]^2 - \boldsymbol{\eta}_2^2\boldsymbol{\eta}_3^2(\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)^2}. \end{aligned} \quad (12.16)$$

Для исследования дисперсионной поверхности используется система координат, обратная по отношению к системе \mathbf{s}_i . Единичные векторы обратных осей \mathbf{t}_i определяются с помощью стандартных соотношений:

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_3 &= [\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2]/v_s = [-\text{Lo } \mathbf{h}_2]/k^2 v_s, \\ \mathbf{t}_2 &= [\mathbf{s}_3\mathbf{s}_1]/v_s = [\text{Lo } \mathbf{h}_3]/k^2 v_s, \\ \mathbf{t}_1 &= [\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3]/v_s = \{[-\text{Lo}, \mathbf{h}_3 - \mathbf{h}_2] + [\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]\}/k^2 v_s = \\ &= -\mathbf{t}_2 - \mathbf{t}_3 + [\mathbf{h}_2\mathbf{h}_3]/k^2 v_s. \end{aligned} \quad (12.17)$$

Из этих соотношений следует, что векторная сумма

$$\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3 = [\mathbf{h}_2 \mathbf{h}_3] / k^2 v_s \equiv [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] / v_s \quad (12.18)$$

направлена нормально к плоскости $(\mathbf{h}_2 \mathbf{h}_3)$, т. е. совпадает с направлением $\mathbf{La Lo}$.

Явные выражения для \mathbf{t}_i в функции от $\boldsymbol{\eta}_i$ имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_1 &= \frac{1}{2v_s [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3]^2} \{([\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)^2 [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] - 2v_s [[\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] (\boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_3)])\}, \\ \mathbf{t}_2 &= \frac{1}{2v_s [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3]^2} \{[\boldsymbol{\eta}_2^2 \boldsymbol{\eta}_3^2 - \boldsymbol{\eta}_3^2 (\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3)] [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] - 2v_s [[\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] \boldsymbol{\eta}_3]\}, \\ \mathbf{t}_3 &= \frac{1}{2v_s [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3]^2} \{[\boldsymbol{\eta}_2^2 \boldsymbol{\eta}_3^2 - \boldsymbol{\eta}_2^2 (\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3)] [\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] - 2v_s [[\boldsymbol{\eta}_2 \boldsymbol{\eta}_3] \boldsymbol{\eta}_2]\}. \end{aligned} \quad (12.19)$$

Пространственное соотношение между системами \mathbf{s}_i (\mathbf{k}_i) и \mathbf{t}_i было показано на рис. 106.

Для вектора $-\mathbf{La Lo}$ вместо (12.9) можно написать (используя (12.18))

$$-\mathbf{La Lo} = 1/2 k \chi_0 (n^2) (\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3) \approx 1/2 k \chi_0 (\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3), \quad (12.20)$$

где n — показатель преломления.

Ось, направленная вдоль $(\mathbf{h}_3 \mathbf{h}_2)$ и проходящая через точки Lo и La , получает наименование *главной оси* и точки ее пересечения с дисперсионной поверхностью — наименование *главных точек*.

Положение точки возбуждения A относительно точки O определяется вектором

$$\mathbf{Lo A} \equiv \mathbf{T} = \mathbf{Lo} + 1/2 k \chi_0 \mathbf{v}, \quad (12.21)$$

где \mathbf{v} — безразмерный единичный вектор, направленный от Lo к A . Соответственно, точка Лауэ определяется соотношением

$$\mathbf{v}_{\text{La}} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3. \quad (12.22)$$

Понимая под вектором \mathbf{k}_i волновой вектор, относящийся к точке возбуждения A , запишем его значение в виде

$$\mathbf{k}_i = k (\mathbf{s}_i - 1/2 \chi_0 \mathbf{v}), \quad (12.23)$$

где в общем случае

$$\mathbf{v} = \sum_i \tau_i \mathbf{t}_i, \quad (12.24)$$

Множитель τ_i связывает \mathbf{v} с величинами ε_i и, следовательно, с нашими угловыми функциями. Запишем

$$\tau_i = - \frac{2\varepsilon_i - \chi_0}{\chi_0} = \frac{2\varepsilon_i + |\chi_0|}{|\chi_0|},$$

или, так как

$$2\varepsilon_1 + |\chi_0| \approx 2(k_i - k)K^{-1} + |\chi_0| = 2(k_i - K)K^{-1},$$

то

$$\tau_i \approx \frac{(k_i - k)}{1/2 K |\chi_0|}. \quad (12.25)$$

12.2. Система фундаментальных уравнений (2.49) в случае трех сильных волн и уравнение дисперсионной поверхности при рассеянии в прозрачном кристалле

Перенесем в уравнениях (2.49) в левую сторону члены $\chi_{m-n}D_{n[m]}$. Для трех волн система (2.49) может быть переписана следующим образом:

$$\begin{aligned} (2\varepsilon_1 - \chi_1) D_1 - \chi_{12} D_{2[1]} - \chi_{13} D_{3[1]} &= 0, \\ -\chi_{21} D_{1[2]} + (2\varepsilon_2 - \chi_1) D_2 - \chi_{23} D_{3[2]} &= 0, \\ -\chi_{31} D_{1[3]} - \chi_{32} D_{2[3]} + (2\varepsilon_3 - \chi_1) D_3 &= 0. \end{aligned} \quad (12.26)$$

Здесь используется соотношение, вытекающее из (2.55) ввиду малости величин ε_m :

$$K^{-2}(k_m^2 - K^2) \approx 2\varepsilon_m. \quad (12.27)$$

Далее мы разлагаем каждый из векторов D_m на слагающие, параллельные и перпендикулярные каждому из волновых векторов k_m :

$$D_m = D_{m[n]} + D_{m||n}, \quad m, n = 1, 2, 3, \quad m \neq n. \quad (12.28)$$

Принимая в дальнейшем изложении $\chi_0 \equiv \chi_1$, введем величины

$$\alpha_{mn} = \frac{|\chi_{mn}|}{|\chi_1|}, \quad \alpha_{m=n} = 1. \quad (12.29)$$

Подставляя (12.28) и (12.29) в систему (12.26), получим

$$\begin{aligned} \tau_1 D_1 + \alpha_{12} D_2 + \alpha_{13} D_3 &= \lambda_1 s_1, \\ \alpha_{21} D_1 + \tau_2 D_2 + \alpha_{23} D_3 &= \lambda_2 s_2, \\ \alpha_{31} D_1 + \alpha_{32} D_2 + \tau_3 D_3 &= \lambda_3 s_3. \end{aligned} \quad (12.30)$$

В этих уравнениях принято, что значения коэффициентов λ_i лишь незначительно изменились бы при замене единичных векторов s_i на те, которые точно отвечают направлениям k_i , согласно (12.23).

Переходим к рассмотрению решения данной системы в двух принципиально различных случаях.

1. Все λ_m равны нулю. Тогда векторы D_n не дают вклада в направление вектора k_m , другими словами, $D_n \perp D_m$, или все три

вектора индукции лежат в одной плоскости. Определение величин этих векторов сводится к решению скалярной системы уравнений, основанному на значении детерминанта

$$\Delta = \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \tau_2 & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \tau_3 \end{vmatrix} = 0. \quad (12.31)$$

Этот случай рассмотрен выше [см. (12.4) — (12.4)].

2. Детерминант Δ и хотя бы одна из величин λ_i не равны нулю. Тогда решение системы (12.30) для векторов индукции имеет вид

$$\Delta \mathbf{D}_1 = \begin{vmatrix} \lambda_1 \mathbf{s}_1 & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \lambda_2 \mathbf{s}_2 & \tau_2 & \alpha_{23} \\ \lambda_3 \mathbf{s}_3 & \alpha_{32} & \tau_3 \end{vmatrix}, \quad \Delta \mathbf{D}_2 = \begin{vmatrix} \tau_1 & \lambda_1 \mathbf{s}_1 & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \lambda_2 \mathbf{s}_2 & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \lambda_3 \mathbf{s}_3 & \tau_3 \end{vmatrix}, \quad (12.32)$$

$$\Delta \mathbf{D}_3 = \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{12} & \lambda_1 \mathbf{s}_1 \\ \alpha_{21} & \tau_2 & \lambda_2 \mathbf{s}_2 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \lambda_3 \mathbf{s}_3 \end{vmatrix}.$$

Очевидно, для получения величин \mathbf{D}_i в явном виде необходимо исключить неизвестные коэффициенты λ_i . С этой целью прежде всего составим скалярные произведения уравнений (12.32) на единичные векторы \mathbf{s}_1 , \mathbf{s}_2 и \mathbf{s}_3 соответственно. При этом мы получим систему линейных однородных уравнений для λ_i . Эта система имеет решение при условии равенства нулю детерминанта, составленного из коэффициентов при λ_i . Следовательно, соответствующее уравнение (12.33) является уравнением дисперсионной поверхности в трехволновом случае. Вводя обозначения для скаляров $s_{mn} = (\mathbf{s}_m \mathbf{s}_n)$, $s_{mm} = 1$, получим

$$\Delta' = \begin{vmatrix} \begin{vmatrix} \tau_2 & \alpha_{23} \\ \alpha_{32} & \tau_3 \end{vmatrix} & -s_{21} \begin{vmatrix} \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{32} & \tau_3 \end{vmatrix} & s_{31} \begin{vmatrix} \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \tau_2 & \alpha_{23} \end{vmatrix} \\ -s_{12} \begin{vmatrix} \alpha_{21} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \tau_3 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{13} \\ \alpha_{31} & \tau_3 \end{vmatrix} & -s_{23} \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{23} \end{vmatrix} \\ s_{13} \begin{vmatrix} \alpha_{21} & \tau_2 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} \end{vmatrix} & -s_{23} \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{12} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} \tau_1 & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \tau_2 \end{vmatrix} \end{vmatrix} = 0. \quad (12.33)$$

Первое весьма существенное замечание, касающееся детерминанта Δ' , относится к оценке относительных значений образующих его элементов; s_{mn} имеют значения косинусов соответствующих углов между волновыми векторами; численные значения α_{mn} заключены в пределах от ~ 1 до $\sim 0,5 \div 0,6$, наконец, τ_i имеют значения, которые можно пояснить отношением величин ξ к $1/2 K |\chi_0|$ на

рис. 6 и которые, следовательно, меняются в области максимума в пределах от $\sim 0,5$ до $\sim 2 \div 3$ и могут принимать большие значения на самых краях области отражения.

Отсюда мы заключаем, что помимо случаев значительного отклонения падающей волны от середины максимума, все элементы детерминанта в (12.33) являются величинами порядка единицы.

Вводим дополнительно следующие обозначения: $(s_1 s_2) (s_2 s_3) \cdot (s_3 s_1) \equiv s_{123}$. В тех случаях, когда необходимо показать циклическую переменную индексов, не используются соотношения $s_{mn} = s_{nm}$

$$\begin{aligned} 2C &\equiv \alpha_{123} + \alpha_{321}, & \tau_1 \tau_2 &\equiv \tau_{12}, & \tau_1 \tau_2 \tau_3 &\equiv \tau_{123}, \\ \alpha_{12} \alpha_{23} &\equiv \alpha_{1223}, & \alpha_{12} \alpha_{23} \alpha_{31} &\equiv \alpha_{123}. \end{aligned} \quad (12.34)$$

Величины α_{mn} являются выражением динамической связи или взаимодействия соответствующих волн в кристалле. Величины типа α_{1223} отражают более сложное не прямое взаимодействие волн I и 2 через посредство волны 3 . Наконец, величина α_{123} относится к обратному эффекту взаимодействия волн $I \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow I$, аналогично обратной связи или самоиндукции.

Перепишем теперь уравнение (12.33) по нисходящим степеням τ , но с использованием (12.34):

$$\begin{aligned} \Delta' &= \tau_{123}^2 - \tau_{123} \{ [\tau_1 |\alpha_{23}|^2 (1 + s_{23}^2) + \tau_2 |\alpha_{31}|^2 (1 + s_{31}^2) + \\ &+ \tau_3 |\alpha_{12}|^2 (1 + s_{12}^2)] - \tau_{123} 2C (s_{123} - s_{12}^2 - s_{23}^2 - s_{31}^2) + \\ &+ 2s_{123} \{ [\tau_{12} |\alpha_{1332}|^2 + \tau_{23} |\alpha_{2113}|^2 + \tau_{31} |\alpha_{3221}|^2] \} + \\ &+ [\tau_{12} |\alpha_{1332}|^2 (1 - s_{12}^2) + \tau_{23} |\alpha_{2113}|^2 (1 - s_{23}^2) + \tau_{31} |\alpha_{3221}|^2 \times \\ &\times (1 - s_{31}^2)] + [\tau_1^2 |\alpha_{23}|^4 s_{23}^2 + \tau_2^2 |\alpha_{31}|^4 s_{31}^2 + \tau_3^2 |\alpha_{12}|^4 s_{12}^2] - \\ &- 2C [\tau_1 |\alpha_{23}|^2 (s_{123} + s_{23}^2) + \tau_2 |\alpha_{31}|^2 (s_{123} + s_{31}^2) + \tau_3 |\alpha_{12}|^2 \times \\ &\times (s_{123} + s_{12}^2)] + 4C^2 s_{123} - |\alpha_{123}|^2 v_s^2 = 0, \end{aligned} \quad (12.35)$$

$$v_s^2 = 1 + 2s_{123} - s_{12}^2 - s_{23}^2 - s_{31}^2. \quad (12.36)$$

Выражение (12.36) — стандартное для объема триклинной элементарной ячейки с периодами $a = b = c = 1$ [см. также (12.14)].

12.3. Анализ уравнения дисперсионной поверхности в случае прозрачного кристалла

1. *Асимптотические свойства.* Допустим, что один из τ_i , например τ_3 , значительно больше двух других. Это означает, что для одной из двух отражающих плоскостей угол падения значительно отклоняется от значения, отвечающего середине максимума. В этом случае в уравнении (12.35) достаточно учесть лишь члены, содержащие τ_3^2 :

$$\tau_3^2 \{ (\tau_1^2 \tau_2^2) - \tau_1 \tau_2 |\alpha_{12}|^2 (1 + s_{12}^2) + s_{12}^2 |\alpha_{12}|^4 \} = 0. \quad (12.37)$$

Приравнивая нулю содержимое в фигурных скобках, мы получаем для $(\tau_1 \tau_2)$ два значения:

$$\tau_1 \tau_2 = \begin{cases} |\alpha_{12}|^2 \\ |\alpha_{12}|^2 s_{12}^2 \end{cases} \quad (12.38)$$

Нетрудно видеть, что эти два решения различаются множителем, который совпадает со значением множителя поляризации для π -колебаний вектора индукции. Решения (12.38) соответствуют гиперболическим цилиндрам (вдоль оси t_3). Другими словами, они означают переход от трехволнового к двухволновому приближению.

2. *Зависимость от перестановок (номеров) векторов k_i .* Как и следовало ожидать, дисперсионная поверхность инвариантна к циклическим перестановкам номеров 1, 2, 3 волновых векторов. Это видно из того, что отдельные части Δ' в (12.35), отвечающие каждой степени τ_i , образуются по правилу циклических перестановок, а величины $|\alpha_{123}|^2$, $2C$, s_{123} и v_s^2 остаются при этом неизменными. При нециклических перестановках изменяется положительное направление главной оси и дисперсионная поверхность строится с обратной стороны плоскости векторов h_2 и h_3 .

3. *Фазовые соотношения.* Из уравнения (12.35) следует, что фазы коэффициентов связи $\alpha_{mn} = |\alpha_{mn}| \exp i\varphi_{mn}$ входят только через посредство величины

$$2C = \alpha_{123} + \alpha_{321} = |\alpha_{123}| 2 \cos \varphi, \quad (12.39)$$

$$\varphi = \varphi_{12} + \varphi_{23} + \varphi_{31}. \quad (12.40)$$

Таким образом, отдельные фазы не влияют на дисперсионную поверхность, и, следовательно, при фиксированных значениях двух отдельных фаз третья может быть определена из геометрии дисперсионной поверхности.

В связи с этим следует сделать принципиальное замечание, касающееся выполнимости закона Фриделя при трехволновом рассеянии. Как было специально отмечено в конце гл. 4, закон Фриделя при двухволновом рассеянии нарушается лишь для случая поглощающего кристалла без центра симметрии. В отличие от этого при трехволновом рассеянии закон Фриделя нарушается также и в случае прозрачного кристалла. Действительно, при обращении (переориентации) полярного направления в нецентросимметричном кристалле изменяется знак φ , а следовательно, и интенсивность отражений [166].

4. *Центросимметричность дисперсионной поверхности.* Имеет место лишь при условии $C = 0$, так как величина C входит в оба члена в Δ' (12.35), содержащие нечетные степени τ . Нулевое значение C может определяться либо равенством нулю одного из α_{mn} , либо значением $\varphi = \pi/2$ в (12.39). Центром симметрии дисперсионной поверхности в указанных случаях, очевидно, будет точка Lo .

5. *Следствия обращения в нуль величины α_{123} .* В этом случае постоянные члены в (12.35) (не зависящие от τ_i) обращаются в нуль, и, кроме того, при этом нижняя степень τ — квадратная. В результате точка L_0 , для которой все $\tau_i = 0$, является по меньшей мере двойной, т. е. через нее проходят два из шести листов дисперсионной поверхности. Кроме того, при этом, согласно условию 4, точка L_0 будет также центром симметрии дисперсионной поверхности.

6. *Главные точки при $\alpha_{123} = 0$.* Допустим, что один из коэффициентов связи, например, $\alpha_{23} = 0$. В этом случае все шесть главных точек действительны. Пусть $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau$. Уравнение (12.35) сведется к следующему:

$$\Delta' = \tau^2 [\tau^4 - \tau^2 N_1 + N_2] = 0, \quad (12.41)$$

где

$$N_1 = \{|\alpha_{12}|^2 (1 + s_{12}^2) + |\alpha_{13}|^2 (1 + s_{13}^2)\},$$

$$N_2 = \{|\alpha_{3112}|^2 (1 + 2s_{123} - s_{23}^2) + |\alpha_{12}|^4 s_{12}^2 + |\alpha_{13}|^4 s_{13}^2\}.$$

Решая уравнение (12.41), получаем соответствующие шесть значений τ , положительных и отрицательных. Четыре корня, отвечающие выражению в квадратных скобках, являются действительными, так как дискриминант $[N_1^2 - 4N_2] > 0$.

7. *Сечение дисперсионной поверхности в случае $\alpha_{23} = 0$.* Сечение плоскостью (t_2, t_3) состоит из пары прямых, проходящих через L_0 . Если единичные векторы s_2 и s_3 связаны плоскостью симметрии, проходящей через s_1 , тогда вектор T перпендикулярен к t_1 . Сечение состоит из двух осей T и двух пар гипербол, взаимное расположение которых зависит от соотношения параметров a и d , являющихся функциями α и s .

8. *Точечная решетка.* В некоторых случаях представляет интерес рассмотрение рассеяния в точечной решетке, для которой все α , заданные выражением (12.29), обращаются в единицу (например, рассеяние нейтронов при единичном температурном множителе). Эта модель соответствует в теории Эвальда точечным диполям. Благодаря условию $\alpha = 1$ упрощаются выражения для Δ' , например, (12.33).

9. *Условие, определяющее прохождение дисперсионной поверхности через точку L_0 .* Принимая, согласно (12.22), все $\tau_i = 1$ и используя модель точечной решетки, т. е. условия $\alpha = 1$ и $C = 1$, получим из уравнения (12.35)

$$1 + 2s_{123} - \sum s_{mn}^2 - v_s^2 = 0, \quad (12.42)$$

условие, которое всегда выполняется [см. 12.36].

10. *Три (взаимно) ортогональных волновых вектора.* Если все $s_{mn} = 0$, то из уравнения (12.35) остается лишь первое (тройное) произведение:

$$\Delta' (s_{mn} = 0) = (\tau_{12} - |\alpha_{12}|^2) (\tau_{23} - |\alpha_{23}|^2) (\tau_{13} - |\alpha_{13}|^2) = 0. \quad (12.43)$$

Это уравнение в обратном пространстве описывает три пары взаимно пересекающихся недеформированных гиперболических цилиндра для трех пар векторов $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2; \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3; \mathbf{s}_3, \mathbf{s}_1$. Существенной чертой полученного решения является такая ориентация векторов индукции, которая исключает распространение волнового поля в третьем (по отношению к данной паре mn) направлении. Другими словами, соответствующие волновые поля не связаны между собой. Трехволновое поле распадается на три двухволновых.

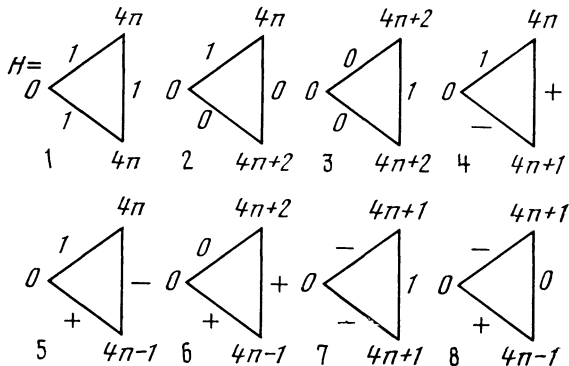
12.4. Рассеяние в кристаллах кремния и германия

Очевидно, представляет интерес применение изложенной общей теории (без учета поглощения) к наиболее важному в настоящее время случаю рассеяния в кристаллах Ge и Si. Структурные амплитуды, а следовательно, и величины α_{mn} для алмазной решетки зависят только от суммы индексов $H = \sum h_i$ и принимают одно из четырех значений:

$$\begin{aligned} H = 4n, & \quad \text{откуда } \alpha = 1, \\ H = 4n + 2, & \quad \alpha = 0, \\ H = 4n + 1, & \quad \alpha = \exp(-i\pi/4): \sqrt{2}, \\ H = 4n - 1, & \quad \alpha = \exp(+i\pi/4): \sqrt{2} \end{aligned}$$

(n — любое целое число), и обозначаются 1, 0, «-», «+» соответственно.

Так как волна I , или 000, соответствует величине $H = 4n$ при $n = 0$, то коэффициенты связи α_{12} и α_{13} соответствуют коэффициентам α_2 и α_3 . Используя циклические перестановки, можно составить следующую схему всех возможных комбинаций значений H и коэффициентов связи в случае Ge и Si для точечной решетки (в вершинах треугольников даны значения H , на серединах граней — значения α_{mn}):



Рассматривая диаграмму, можно отметить, что случаи 2 и 3 не представляют интереса, так как одно из отражений не взаимодействует с остальными. Случаи 4 и 5 принципиально эквивалентны. Наибольший интерес, помимо случая 1, представляют случаи 6 и 8, соответствующие «непрямому возбуждению». При этом случай 6 соответствует истинному «непрямому возбуждению», если учесть, что волна 1 есть падающая волна. Случай 8 — это «непрямое возбуждение» в том смысле, что обе отраженные волны взаимодействуют не непосредственно, а через падающую волну.

При переходе к кубической структуре с использованием безразмерных векторов η , согласно (12.15), значения скалярных произведений принимают простую форму

$$\begin{aligned} s_{12} &= \left(1 - \frac{1}{2} \eta_2^2\right), & s_{13} &= \left(1 - \frac{1}{2} \eta_3^2\right), \\ s_{23} &= \left[1 - \frac{1}{2} (\eta_2 - \eta_3)^2\right]. \end{aligned} \quad (12.44)$$

Рассмотрим теперь случаи 1, 6 и 8 на схеме.

1. Случай 1 — *максимальная связь между отражениями*, $\alpha_{mn} = 1$. Принимая также $\tau_i = \tau$, получим из (12.35).

$$\Delta' = (\tau - 1)^3 [(\tau + 1)^3 - (\tau + 1) \sum s_{mn}^2 - 2s_{123}] = 0. \quad (12.45)$$

Для точки Лауэ La первых три корня ($\tau = 1$) независимы от углов между волновыми векторами. Что касается уравнения третьей степени относительно $(\tau + 1)$, то непосредственно устанавливаем, что оно не имеет корней, отвечающих $\tau > 1$, т. е. дисперсионная поверхность не проходит над точкой Лауэ.

2. Случай 6 — *истинное «непрямое возбуждение»*. Отражение $4n + 2$ является запрещенным и непосредственно не связано с падающей волной 1. Однако обе волны связаны через $4n - 1$. Принимая $\alpha_{12} = 0$ и для простоты $\alpha_{13} = \alpha_{23} = \alpha$, получим для главной точки ($\tau_i = \tau$)

$$\begin{aligned} \Delta' &= \tau^2 [\tau^4 - \tau^2 |\alpha|^2 (2 + s_{13}^2 + s_{23}^2) + |\alpha|^4 (2s_{123} + 1 - s_{12}^2 + \\ &+ s_{23}^2 + s_{13}^2)]. \end{aligned} \quad (12.46)$$

В этом случае точка Lo соответствует двум корням $\tau = 0$, являясь центром симметрии дисперсионной поверхности. Значения других главных точек определяются решением уравнения, отвечающего выражению в квадратных скобках в (12.46). В частном случае, когда волновые векторы 1 и 2 взаимно перпендикулярны, соответствующие корни принимают значения $\tau^2 = 1$, $\tau^2 = 1 + s_{13}^2 + s_{23}^2$. Случай соответствует определенному значению a/λ .

3. Случай 8 — *окольное «непрямое возбуждение»*. Этот случай представляет особый интерес по двум причинам. Во-первых, он отвечает схеме эксперимента Бормана и Хартвига [30], рассмотренного в 12.1. Кроме того, как уже указывалось, он был детально рассмотрен в работе Хильдебрандта [33]. Здесь отражения 111

и $1\bar{1}1$ непосредственно между собой не взаимодействуют, а лишь через посредство падающей волны. Это объясняется тем, что значение коэффициента α_{23} , отвечающего отражению $(111) - (1\bar{1}1) = 020$, равно нулю, отражение $020 -$ запрещено. Уравнение дисперсионной поверхности (12.35) принимает вид

$$\Delta' = \tau_{123}^2 - 1/2 \tau_{123} [\tau_2(1 + s_{13}^2) + \tau_3(1 + s_{12}^2)] + 1/4 \tau_2 \tau_3 (1 + 2s_{123} - s_{23}^2 + 1/4 (\tau_2^2 s_{13}^2 + \tau_3^2 s_{12}^2)) = 0. \quad (12.47)$$

Весьма существенным здесь является анализ сечения дисперсионной поверхности плоскостью симметрии, каковой является плоскость (100) . Такое сечение описывается уравнением, которое можно получить из (12.47), если учесть, что в этом случае $\tau_2 = \tau_3 = \tau$, $s_{12} = s_{13} = s$, $s_{23} = s'$. Откуда уравнение сечения

$$\Delta' = \tau^2 [\tau_1 \tau - 1/2 (1 + 2s^2 - s')] [\tau_1 \tau - 1/2 (1 + s')] = 0. \quad (12.48)$$

Решением этого уравнения являются две асимптоты, на которых $\tau_2 = \tau_3 = 0$, и две гиперболы. Асимптоты пересекаются в точке Lo . Обе гиперболы отвечают значениям τ и τ_1 , имеющим одинаковый знак, что следует из положительного знака величины $(1 + 2s^2 - s')$.

Отметим полное соответствие между изложенной характеристикой сечения дисперсионной поверхности плоскостью симметрии и чертежом, приведенным в работе Хильдебрандта [33]. Ниже мы еще остановимся на сопоставлении результатов обеих работ.

Эвальд и Хено показали, что в трехволновом случае отражений $111/1\bar{1}1/020$ излучения $CuK\alpha$ от Ge лист дисперсионной поверхности, расположенный между точками Lo и La , пересекает главную ось ближе к точке La , чем в случаях одной или двух волн. В случае одной волны точкой возбуждения следует считать точку Lo , находящуюся на расстоянии $\tau = 1$ от точки La . В двухволновом случае для точечной решетки можно использовать решение дисперсионной поверхности в асимптотическом рассмотрении (12.38):

$$\tau_1 = \tau_2 = |\alpha_{12}| = 2^{-1/2} \approx 0,707.$$

Наконец, в трехволновом случае для точечной решетки следует использовать решение (12.48). При этом $s = s_{12} = s_{13} = \cos 2\vartheta_{111} = 0,889$, $s' = s_{23} = \cos 2\vartheta_{200} = 0,852$, соответственно корни (12.44) составляют $\tau^{(1)} = 0,9623$, $\tau^{(2)} = 0,9297$.

В результате минимальное расстояние дисперсионной поверхности от точки La в случаях изолированной волны (I), двух волн (II) и трех волн (III) равно

$$(I) - 26,5, \quad (II) - 7,76, \quad (III) - 1.$$

Каково физическое содержание этих параметров? Согласно модели Эвальда, диполи, образующие кристаллическую решетку,

приходят в колебание под влиянием внешнего поля. Колебания диполей, в свою очередь, являются источником электромагнитного поля внутри кристалла. Можно показать, что уменьшение расстояния точки возбуждения, лежащей на дисперсионной поверхности, от точки La означает усиление резонанса, т. е. уменьшение амплитуды дипольных волн, необходимых для создания волнового поля в кристалле. Соответственно увеличение указанного расстояния означает увеличение дипольной амплитуды. Между тем поглощение энергии поля в кристалле пропорционально дипольной амплитуде и, следовательно, растет с увеличением расстояния точки A от точки La .

Следует подчеркнуть, что изложенная модель находится в соответствии с той формой динамической теории, которая используется в гл. 2—8, хотя представления о диполях там не привлекаются. Действительно, согласно теории рассеяния в поглощающем кристалле, изложенной в гл. 4, наименьшим поглощением сопровождаются волны, связанные с точкой возбуждения на второй дисперсионной кривой, лежащей ближе к точке $La_{\text{уэ}}$. Кроме того, величина интерференционного коэффициента поглощения [см. (4.93) и (4.94)]

$$\sigma_h \sim (1 + y_r^2)^{-1/2}, \quad (12.49)$$

и, следовательно, с возрастанием y_r или с удалением от точки La величина σ_h уменьшается и полный коэффициент поглощения $(\sigma_m - \sigma_h)$ возрастает.

Обращаясь к трехволновому случаю, замечаем, что сопоставление расстояний от La указывает на усиление эффекта аномального прохождения рентгеновских лучей в поглощающем кристалле.

12.5. Рассеяние в поглощающем кристалле.

Введение комплексных параметров рассеяния

Дополнительно к параметрам рассеяния в поглощающем кристалле, введенным в 4.2, здесь необходимо ввести комплексные величины α и τ , заданные в действительной форме в (12.29) и (12.25). Величины α_{mn} преобразуются следующим образом:

$$\alpha_{mn} = \frac{\chi_{mn}^d + i\chi_{mn}^a}{\chi_{0r} + i\chi_{0i}} = \alpha_{mn}^d + i\alpha_{mn}^a,$$

$$\alpha_{mn}^d = \left[\frac{\chi_{mn}^d}{\chi_{0r}} + \frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{0r}} \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right] / \left[1 + \left(\frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right)^2 \right], \quad \chi_{mn}^d \equiv \chi_{hr}, \quad (12.50)$$

$$\alpha_{mn}^a = \left[\frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{0r}} - \frac{\chi_{mn}^d}{\chi_{0r}} \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right] / \left[1 + \left(\frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right)^2 \right], \quad \chi_{mn}^a \equiv \chi_{hi}.$$

Нетрудно видеть, что

$$\alpha_{mn}^d = \frac{\chi_{mn}^d}{\chi_{0r}} + \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \alpha_{mn}^a, \quad \alpha_{mn}^a = \frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{0r}} - \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \alpha_{mn}^d. \quad (12.51)$$

Для комплексной формы параметров τ_h можно написать

$$\tau_h = \frac{k - k_h}{1/2 K \chi_0} = \frac{[(k_r - k_{hr}) + i(k_i - k_{hi})](\chi_{0r} - i\chi_{0i})}{1/2 K |\chi_{0r} + i\chi_{0i}|^2}. \quad (12.52)$$

Учитывая, что

$$k_r = K(1 + 1/2 \chi_{0r}), \quad k_i = 1/2 K \chi_{0i}, \quad 4\pi k_{hi} = 4\pi \delta_i K n = \sigma n$$

и коэффициент поглощения (полный) в направлении k_h для волны h динамического рассеяния

$$\sigma_h = \sigma \gamma_h, \quad (12.53)$$

получим, после выполнения действий, указанных в числителе (12.52), и деления числителя и знаменателя на $1/2 K \chi_{0r}^2$,

$$\tau_h^d = \left[\frac{k_r - k_{hr}}{1/2 K \chi_{0r}} + \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \left(1 - \frac{\sigma \gamma_h}{\mu} \right) \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right] / \left[1 + \left(\frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right)^2 \right], \quad (12.54)$$

$$\tau_h^a = \left[\left(1 - \frac{\sigma \gamma_h}{\mu} \right) \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} - \frac{k_r - k_{hr}}{1/2 K \chi_{0r}} \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right] / \left[1 + \left(\frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \right)^2 \right].$$

При этом, аналогично (12.51),

$$\tau_h^d = T'_h + \tau_h^a \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}}, \quad \tau_h^a = T''_h - \tau_h^d \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}},$$

$$\tau_h^d \equiv \tau_{hr},$$

$$T'_h = \frac{k_r - k_{hr}}{1/2 K \chi_{0r}}, \quad T''_h = \left(1 - \frac{\sigma \gamma_h}{\mu} \right) \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}}, \quad (12.55)$$

$$\tau_h^a \equiv \tau_{hi}.$$

Теперь введем формальный способ записи величин α и τ , используя обозначение β_{mn} , согласно условию

$$\beta_{mn} = \begin{cases} \alpha_{mn}, & m \neq n, \\ \tau_h, & m = n \equiv h. \end{cases} \quad (12.56)$$

Далее, $\beta = \beta^d + i\beta^a$ и величины β^d и β^a связаны соотношениями типа (12.55). Величины β^d и β^a имеют следующий смысл:

$$\beta_{mn}^{d,a} = b_{mn}^{d,a} \pm \frac{\chi_{0i}}{\chi_{0r}} \beta_{mn}^{a,d}, \quad b_{mn}^{d,a} = \begin{cases} \frac{\chi_{mn}^{d,a}}{\chi_{0r}}, & m \neq n, \\ T'_h, T''_h, & m = n \equiv h. \end{cases} \quad (12.57)$$

12.6. Уравнение дисперсионной поверхности в случае поглощающего кристалла.

Коэффициент поглощения

Используя формальный способ записи (12.56), получим уравнение (12.33) в виде

$$\Delta'(\beta_{mn}) = 0, \quad \Delta'(\tau_h, \alpha_{mn}) = 0. \quad (12.58)$$

При введении в (12.58) разложения β на действительную и мнимую части мы получаем детерминант, который в отличие от прежнего включает величины, отличающиеся по порядку, хотя это различие имеет место «внутри» каждого элемента Δ' . Разложением дисперсионной функции в ряд Тэйлора удастся разделить Δ' на две функции, зависящие только от действительных и от мнимых частей. Этот результат является фундаментальным в излагаемой теории. Приводим упомянутое разложение уравнения дисперсионной поверхности:

$$\begin{aligned} \Delta'(\beta_{mn}) = & \Delta' \left(\beta_{mn}^d + \frac{i}{1!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{i^2}{2!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(2)} + \dots + \frac{i^v}{v!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(6)} = 0, \end{aligned} \quad (12.59)$$

где

$$\frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \equiv \left[\frac{\partial \Delta'(\beta_{mn})}{\partial \beta_{mn}} \right]_{\beta_{mn} = \beta_{mn}^d} = \frac{\partial \Delta'(\beta_{mn}^d)}{\partial \beta_{mn}^d}. \quad (12.60)$$

Разложение (12.59), очевидно, можно записать кратко следующим образом:

$$\Delta' \equiv \Delta'_r + i\Delta'_i = 0, \quad (12.61)$$

где Δ'_r и Δ'_i являются действительными функциями и равенство нулю детерминанта в (12.58) может быть выполнено лишь при одновременном выполнении двух условий:

$$\Delta'_r = 0, \quad \Delta'_i = 0. \quad (12.62)$$

В нашем случае четной степени функции Δ' выражения (12.62) переписываются так:

$$\begin{aligned} \Delta'_r \equiv & \Delta'(\beta_{mn}^d) - \frac{1}{2!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(2)} + \frac{1}{4!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(4)} - \\ & - \frac{1}{6!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(6)} = 0, \end{aligned} \quad (12.63)$$

$$\Delta'_i \equiv \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right) - \frac{1}{3!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(3)} + \frac{1}{5!} \left(\sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} \right)^{(5)} = 0.$$

Очевидно, числа в круглых скобках справа наверху при членах разложения одновременно обозначают степень при β_{mn}^a и порядок производной. Отсюда, если использовать приближение, лежащее в основе теории для поглощающего кристалла, а именно, малость β_{mn}^a сравнительно с β_{mn}^d (см. соотношения (12.57)), мы получим из (12.63) нужный результат

$$\Delta'_r \approx \Delta'(\beta_{mn}^d) = 0, \quad (12.64a)$$

$$\Delta'_i \approx \sum_{mn} \beta_{mn}^a \frac{\partial \Delta'}{\partial \beta_{mn}^d} = \sum_h T_h'' \frac{\partial \Delta'(T_h', a_{mn}^d)}{\partial T_h'} + \\ + \sum_{mn} \frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{mn}^d} a_{mn}^d \frac{\partial \Delta'(T_h', a_{mn}^d)}{\partial a_{mn}^d} = 0,$$

$$a_{mn}^d = \frac{\chi_{mn}^d}{\chi_{0r}^d}. \quad (12.64b)$$

Уравнение (12.64a), очевидно, является уравнением дисперсионной поверхности в случае поглощающего кристалла. Что касается уравнения (12.64b), то оно непосредственно позволяет получить общее выражение для относительного коэффициента поглощения $\mu' = \sigma \mu^{-1}$. Для этого достаточно заменить в нем величину T_h'' ее значением из (12.55):

$$\mu' = \frac{\sigma}{\mu} = \frac{\sum_h \frac{\partial \Delta'}{\partial T_h'}}{\sum_h \gamma_h \frac{\partial \Delta'}{\partial T_h'}} \left[1 + \frac{\chi_{0r}^d}{\chi_{0i}^d} \frac{\sum_{mn} \frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{mn}^d} a_{mn}^d \frac{\partial \Delta'}{\partial a_{mn}^d}}{\sum_h \frac{\partial \Delta'}{\partial T_h'}} \right]. \quad (12.65)$$

Тем самым принципиально решена задача теории в приближении трех сильных волн (включая падающую) для рассеяния в поглощающем кристалле при условии малости мнимых параметров β_{mn}^a .

Помимо величин σ и μ , можно рассматривать коэффициенты поглощения вдоль нормали к дисперсионной поверхности или вдоль вектора распространения потока энергии (вектора Пойнтинга):

$$\mu^{S^{(i)}} \equiv \mu^{L^{(i)}} = \sigma \cos \varphi_i, \quad (12.66)$$

где $L^{(i)}$ определяется выражением (5.77). Напомним, что в гл. 5 было показано, что теорема Эвальда — Като, согласно которой векторы $\bar{S}^{(i)}$ или $L^{(i)}$ направлены вдоль упомянутой нормали, применима как в двухволновом, так и во многоволновом случаях. Угол φ_i в (12.66) образован направлениями вектора $L^{(i)}$ и нормали \mathbf{n} к входной грани.

Обращаясь к формуле (12.65), замечаем, что некоторые из входящих в нее сумм имеют простой геометрический смысл.

Прежде всего величина $\sum_h \left(\frac{\partial \Delta'}{\partial T'_h} \right)$, очевидно, является соответствующей слагающей по \mathbf{s}_i от единичного вектора \mathbf{c} вдоль градиента функции Δ' :

$$\text{grad } \Delta' (T'_h, a_{mn}^d) = \sum_h \frac{\partial \Delta'}{\partial T'_h} \mathbf{s}_i, \quad h = i = 1, 2, 3. \quad (12.67)$$

В таком случае, используя систему единичных векторов \mathbf{t}_i , обратных векторам \mathbf{s}_i [см. (12.13), (12.16), (12.17) и (12.18)],

$$\mathbf{n} = \sum_i \gamma_i \mathbf{t}_i, \quad \text{Lo La} = - \sum_i \mathbf{t}_i, \quad \text{Lo A} = - \sum_i T'_i \mathbf{t}_i, \quad (12.68)$$

получим нижеследующие значения для сумм в (12.65):

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial \Delta'}{\partial T'_i} &= (-\text{Lo La } \mathbf{c}), & \sum_i \gamma_i \frac{\partial \Delta'}{\partial T'_i} &= \cos(\mathbf{n}, \mathbf{c}) = \cos \varphi, \\ \sum_i T'_i \frac{\partial \Delta'}{\partial T'_i} &= (\text{Lo A } \mathbf{c}). \end{aligned} \quad (12.69)$$

Выражение в квадратных скобках в правой части (12.65) преобразуется следующим образом:

$$V = 1 + P - \frac{\sum_{mn} \left[1 - \frac{\chi_{0r}}{\chi_{0i}} \frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{mn}^d} \right] a_{mn}^d \frac{\partial \Delta'}{\partial a_{mn}^d}}{\sum_h \partial \Delta' / \partial T'_h} = 1 + P - B. \quad (12.70)$$

Здесь P , согласно теореме Эйлера, имеет вид

$$P = \frac{\sum_{mn} a_{mn}^d (\partial \Delta' / \partial a_{mn}^d)}{\sum_h (\partial \Delta' / \partial T'_h)} = - \frac{\sum_h T'_h (\partial \Delta' / \partial T'_h)}{\sum_h (\partial \Delta' / \partial T'_h)} = - \frac{(\text{Lo A } \mathbf{c})}{(\text{Lo La } \mathbf{c})}. \quad (12.71)$$

Отсюда

$$V = 1 + P - B = 1 + \frac{(\text{A La}, \mathbf{c})}{(\text{Lo La } \mathbf{c})} - B. \quad (12.72)$$

Рассматривая выражение для величины B , замечаем, что так как

$$\frac{\chi_{0r}}{\chi_{0i}} \frac{\chi_{mn}^a}{\chi_{mn}^d} \approx 1,$$

то $B \approx 0$ (разумеется, только для качественной оценки выражения (12.65) и величины в квадратных скобках).

Как показывает рис. 107, скалярные произведения, входящие в правую часть (12.71), представляют собой проекции на общее направление \mathbf{c} отрезков $A \text{La}$ и LoLa . Очевидно, что в случае главного сечения, т. е. пересечения дисперсионной поверхности с осью LoLa , точка A ложится на главную ось и значение скобок преобразуется следующим образом:

$$V = 1 - T', \quad T' = T'_1 = T'_2 = T'_3. \quad (12.73)$$

Для главной точки величина коэффициента поглощения, с точностью до приближения $B \approx 0$, составит $\mu = \sigma/\mu_0 \approx -(\text{LoLa} \mathbf{c})(1 - T')/\cos \varphi$. (12.74)

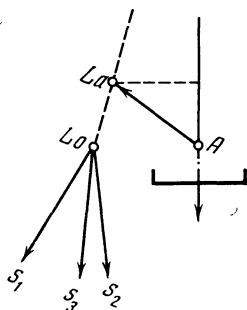


Рис. 107. К геометрической интерпретации критерия Эвальда для коэффициента поглощения при трехволновом рассеянии, $A \equiv T$

Это выражение можно рассматривать как обоснование критерия Эвальда, сформулированного выше при рассмотрении трехволнового рассеяния в прозрачном кристалле. Как мы отметили в гл. 4, критерий Эвальда выполняется и при двухволновом рассеянии.

Сделаем два замечания по поводу указанного критерия. Во-первых, так как он относится к положению дисперсионной поверхности в обратном пространстве, то он определяет лишь значения величин τ и, следовательно, действительных частей атомных амплитуд f_{hr} и f_{or} . Между тем, как будет показано далее, окончательные выражения для коэффициентов поглощения, на-

пример, (12.84), так же как и формулы для μ в двухволновом случае (4.107), (4.108), содержат в скобках вычитаемое, зависящее как от f_r , так и от f_i , что, вообще говоря, может существенно влиять на значение величин σ и μ' . С другой стороны, в работе [31], посвященной рассеянию в прозрачном кристалле, не рассматривается случай 7 (см. стр. 332), примером которого может служить отражение $111/\bar{1}\bar{1}1/220$. Этот случай анализируется в работе Хено и Эвальда [32] и кратко рассматривается ниже. Усложнение формы дисперсионной поверхности делает менее наглядным и однозначным указанный критерий Эвальда. Вместе с тем, формула (12.65) имеет общее значение.

Рассмотрим применения уравнения дисперсионной поверхности (12.64а) и формулы (12.65) для коэффициента поглощения в случае рассеяния в кристаллах с одним сортом атомов.

Придерживаясь по-прежнему приближения малости мнимых составляющих τ и α по сравнению с действительными, перепишем уравнение (12.64), опуская индекс «г»:

$$\Delta'(T'_i, a_{mn}^d) = 0. \quad (12.75)$$

В важном частном случае кристаллов элементарного состава (Ge, Si, Cu и т. д.) значение a_{mn}^d в (12.64) преобразуется [см. (2.35) и (4.41)] в

$$a_{mn}^d = \frac{F_{mn}^d}{F_0^d} = \frac{f'_{mn}}{f'_0} \frac{\sum_j \exp(2\pi i h r_j)}{\sum_j 1} = \frac{f'_{mn}}{f'_0} G, \quad f' \equiv f^d. \quad (12.76a)$$

Если ни одна из величин α_{mn} не равна нулю, используем обозначения

$$\frac{f'_{12}}{f'_0} = f'_3, \quad \frac{f'_{23}}{f'_0} = f'_1, \quad \frac{f'_{13}}{f'_0} = f'_2, \quad f'_h \equiv f_{hr} \quad (12.76b)$$

для введения новых переменных

$$T_1 = T'_1 \frac{f'_1}{f'_2 f'_3}, \quad T_2 = T'_2 \frac{f'_2}{f'_3 f'_1}, \quad T_3 = T'_3 \frac{f'_3}{f'_1 f'_2}. \quad (12.76b)$$

Напомним, что T'_i — координаты конца переменного радиуса-вектора, соединяющего точку Lo с любой точкой в обратном пространстве, прежде всего с любой точкой возбуждения на дисперсионной поверхности. Нормировка величин T'_i устанавливается таким образом, что координаты точки La отвечают значениям $T'_i = 1$. Новые переменные T_i меньше соответствующих T'_i . Поэтому, в частности, точка La' на главной оси, отвечающая значениям $T_i = 1$, и, следовательно, $T'_i \approx f'_h/f'_0$, находится между точками Lo и La .

Уравнение дисперсионной поверхности в новых переменных принимает вид

$$\Delta'(T'_i, a_{mn}^d) = \Delta'(T'_i, (f'_{mn}/f'_0) G_{mn}) = (f'_1 f'_2 f'_3)^2 F(T_i, G_{mn}) = 0. \quad (12.77)$$

Формула для коэффициента поглощения (12.65) преобразуется

в

$$\begin{aligned} \mu' = & \left(\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'_2 f'_3} + \frac{\partial F}{\partial T_2} \frac{f'_2}{f'_3 f'_1} + \frac{\partial F}{\partial T_3} \frac{f'_3}{f'_1 f'_2} \right) \left(\gamma_1 \frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'_2 f'_3} + \right. \\ & + \gamma_2 \frac{\partial F}{\partial T_2} \frac{f'_2}{f'_3 f'_1} + \gamma_3 \frac{\partial F}{\partial T_3} \frac{f'_3}{f'_1 f'_2} \left. \right)^{-1} \left\{ 1 + \left[2 \left(\frac{f'_{12}}{f'_2} \frac{1}{f'_3} G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + \right. \right. \right. \\ & + \frac{f'_{23}}{f'_0} \frac{1}{f'_1} G_{23} \frac{\partial F}{\partial G_{23}} + \frac{f'_{13}}{f'_0} \frac{1}{f'_2} G_{31} \frac{\partial F}{\partial G_{31}} \left. \right) \left(\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'_2 f'_3} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial F}{\partial T_2} \frac{f'_2}{f'_3 f'_1} + \frac{\partial F}{\partial T_3} \frac{f'_3}{f'_1 f'_2} \right)^{-1} \right] \right\}. \quad (12.78) \end{aligned}$$

Цифра 2 перед скобкой означает удвоение в случае центросимметричных структур. При отсутствии центра симметрии, очевидно, необходимо включить члены с перестановкой индексов. Коэффициенты перед каждым из членов, содержащих $\partial F/\partial G_{mn}$, соответствуют произведениям [см. (12.65)]

$$\frac{\chi_{0r}}{\chi_{0i}} \frac{\chi_{mn}^{\alpha}}{\chi_{mn}^d} = \frac{f''_{mn}}{f''_0} \frac{f'_0}{f'_{mn}}.$$

Заметим, что уравнение $F(T_i, G_{mn}) = 0$ непосредственно получается из $\Delta(\tau_i, \alpha_{mn}) = 0$ путем замены τ_i на T_i и α_{mn} на G_{mn} . Рассмотрим теперь важнейшие частные случаи.

1. $s_{12} = s_{13}$, $f'_{12} = f'_{13}$, $f''_{12} = f''_{13}$. Принимая $f'_2 = f'_3 = f'$, получим

$$T'_1 = T_1(f'^2/f'_1), \quad T'_2 = T_2 f'_1, \quad T'_3 = T_3 f'_1. \quad (12.79)$$

В этом случае прямая $T_1 = T_2 = T_3 = T$ не совпадает с главной осью $T'_1 = T'_2 = T'_3 = T'$, что имело бы место при усреднении всех f'_{mn} . Выражение для коэффициента поглощения получается из (12.78) с учетом указанных соотношений (12.79):

$$\begin{aligned} \mu' = & \left[\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'^2} + \left(\frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) (f'_1)^{-1} \right] \left[\gamma'_1 \frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'^2} + \right. \\ & \left. + \left(\gamma'_2 \frac{\partial F}{\partial T_2} + \gamma'_3 \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) (f'_1)^{-1} \right]^{-1} \left\{ 1 - \frac{f'_0}{f'_0} \left[2 \frac{f''_{12}}{f'_{12}} \left(G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + G_{13} \frac{\partial F}{\partial G_{13}} \right) + 2 \frac{f''_{23}}{f'_{23}} G_{23} \frac{\partial F}{\partial G_{23}} \right] \left[\frac{\partial F}{\partial T_1} \frac{f'_1}{f'^2} + \left(\frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) (f'_1)^{-1} \right]^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (12.80)$$

2. Пусть при этом одна из величин α_{mn} , например α_{23} , равна 0. Наши переменные T_i принимают следующие значения:

$$T'_1 = T_1 \sqrt{f'_2 f'_3}, \quad T'_2 = T_2 \sqrt{f'_2 f'_3} \frac{f'_3}{f'_2}, \quad T'_3 = T_3 \sqrt{f'_2 f'_3} \frac{f'_2}{f'_3}. \quad (12.81)$$

Откуда уравнение дисперсионной поверхности

$$\Delta' \left(T'_1, \frac{f'_{mn}}{f'_0} G_{mn} \right) \equiv f'^2_2 f'^2_3 F(T_i, G_{mn}) = 0 \quad (12.82)$$

и выражение для коэффициента поглощения

$$\begin{aligned} \mu' = & \left(\frac{\partial F}{\partial T_1} + \frac{f'_2}{f'_3} \frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{f'_3}{f'_2} \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) \left(\gamma'_1 \frac{\partial F}{\partial T_1} + \right. \\ & \left. + \gamma'_2 \frac{f'_2}{f'_3} \frac{\partial F}{\partial T_2} + \gamma'_3 \frac{f'_3}{f'_2} \frac{\partial F}{\partial T_3} \right)^{-1} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ 1 + \left[f'_{02} \left(\frac{f''_{12}}{f'_{12}} G_{12} \frac{\partial F}{\partial G_{12}} + \frac{f''_{13}}{f'_{13}} G_{13} \frac{\partial F}{\partial G_{13}} \right) \right] \times \right. \\ & \left. \times \left[f''_0 \frac{1}{V f'_2 f'_3} \left(\frac{\partial F}{\partial T_1} + \frac{f'_2}{f'_3} \frac{\partial F}{\partial T_2} + \frac{f'_3}{f'_2} \frac{\partial F}{\partial T_3} \right) \right]^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (12.83)$$

3. Если дополнительно к условию $\alpha_{23} = 0$ еще имеем $s_{12} = s_{13}$ и $f'_{12} = f'_{13}$, $f''_{12} = f''_{13}$, задача существенно упрощается. Вводя $f'_2 = f'_3 = f'$, получим вместо (12.81) $T'_i = T_i f'$. Выражение для коэффициента поглощения ($i = h$)

$$\mu' = \left(\sum_{h=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_h} \right) \left(\sum_{h=1}^3 \gamma_h \frac{\partial F}{\partial T_h} \right)^{-1} \left[1 - \frac{f''_0}{f'_0} \left(\sum_{h=1}^3 T_h \frac{\partial F}{\partial T_h} \right) \left(\sum_{h=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_h} \right)^{-1} \right]. \quad (12.84)$$

Примером этого случая может служить рассмотренное ниже отражение 111/111/020 от кристалла Ge.

Принимаем

$$000 - h_1, 111 - h_2, 1\bar{1}1 - h_3, 020 - (h_2 - h_3). \quad (12.85)$$

Далее, учитывая, что при рассеянии алмазной решеткой отражение типа 020 является запрещенным, записываем

$$\alpha_{23} = \alpha_{32} = 0.$$

Что касается произведений s_{mn} , то они принимают следующие простые значения:

$$s_{12} = s_{13} = s = \cos 2\vartheta_{111} = 1 - \frac{3}{2} \beta^2,$$

$$s_{23} = s' = \cos 2\vartheta_{200} = 1 - 2\beta^2, \quad (12.86a)$$

$$|G_{12}|^2 = |G_{13}|^2 = 1/2, \quad \beta = \lambda/a_{\text{Ge}}. \quad (12.86b)$$

Уравнение дисперсионной поверхности записывается как

$$\begin{aligned} F(T_i, \beta^2) = T_{123}^2 - (1 + s^2) T_{123} \frac{T_2 + T_3}{2} + \frac{s^2 s'}{2} T_{23} + \\ + \frac{1 - s'^2}{4} T_{23} + \frac{s^2}{4} (T_2^2 + T_3^2) = 0. \end{aligned} \quad (12.87)$$

Выпишем значения производных, входящих в формулу для коэффициента поглощения,

$$\frac{\partial F}{\partial T_1} = T_{23} [T_2 (T_{31} - 1/2) + T_3 (T_{12} - 1/2) - \frac{s^2}{2} (T_2 + T_3)],$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial T_2} = T_3 (T_{31} - 1/2) (T_{12} - 1/2) + T_{123} (T_{31} - 1/2) + \\ + \frac{s^2 s'}{2} T_3 - \frac{s^2}{2} T_3^2 T_1 - s^2 T_2 (T_{31} - 1/2) - \frac{s'^2}{4} T_3, \end{aligned} \quad (12.88)$$

$\partial F/\partial T_3$ получается из предыдущего выражения заменой индексов 2 на 3. Отсюда

$$\sum_{h=1}^3 T_h \frac{\partial F}{\partial T_h} = T_{23} [T_1 (T_2 + T_3) - 1] - 2s^2 s' T_{23} + s^2 T_2^2 \times \\ \times (T_{31} - 1) + s^2 T_3^2 (T_{12} - 1) + s' T_{23}, \quad (12.89)$$

$$\sum_{h=1}^3 \frac{\partial F}{\partial T_h} = (T_2 + T_3) (T_{13} - 1/2) (T_{12} - 1/2) + \\ + (T_1 + T_2) T_{23} (T_{12} - 1/2) + (T_1 + T_2) (T_{13} - 1/2) T_{23} + \\ + \frac{s^2 s'}{2} (T_2 + T_3) - s^2 T_2 (T_{13} - 1/2) - \\ - \frac{s^2}{2} T_2^2 (T_1 + T_3) - s^2 T_3 (T_{12} - 1/2) - \\ - \frac{s^2}{2} T_3^2 (T_1 + T_2) - \frac{s'^2}{4} (T_2 + T_3). \quad (12.90)$$

С помощью этих выражений можно вычислить величину μ' в любой точке дисперсионной поверхности, согласно (12.84).

Наибольший интерес представляет сечение дисперсионной поверхности ее плоскостью симметрии, которая параллельна грани куба (100). В этой плоскости $T_2 = T_3 = T$ и $T \neq T_1$. Подставляя эти соотношения в уравнение (12.77), получаем уравнение сечения, которое легко приводится к виду

$$T^2 \left[T_1 T - 1/2 - \frac{s'}{2} \right] \left[T_1 T - 1/2 - s^2 + \frac{s'}{2} \right] = 0. \quad (12.91)$$

Это уравнение, как легко видеть, распадается на уравнение пары прямых (асимптот) и два уравнения гипербол. Центром симметрии сечения является точка L_0 , в согласии с анализом уравнения дисперсионной поверхности (12.35), проведенным выше.

Переходим к исследованию векторов индукции D_h . Для этого следует обратиться к уравнениям (12.32), которые можно переписать в виде

$$D_h = \frac{1}{\Delta} \Delta_h, \quad (12.92)$$

где Δ_h отличается от Δ заменой одного из столбцов на произведения $\lambda_i s_i$. Малый детерминант Δ применительно к рассматриваемому сечению и с заменой

$$\tau_i = T_i = T_i' f', \quad f' = f'_{111}/f_0, \quad \alpha = G = \frac{\exp i\pi/4}{\sqrt{2}} \quad (12.93)$$

имеет простое значение

$$\Delta = (f'_{111}/f_0) T (T_1 T - 1). \quad (12.94)$$

При вычислении Δ_h мы вводим в наши выражения величины λ_i , пока еще не определенные. Так как система уравнений для λ_i

является однородной, то мы определяем из нее соответствующие отношения λ_i/λ_k и далее переходим к новым переменным, учитывая условия, относящиеся к данному сечению. При этом мы получаем два решения применительно к каждой из гипербол в уравнении (12.91).

Для первой гиперболы $[T_1 T - 1/2 - (s'/2)]$ указанные отношения составляют $\lambda_1/\lambda_3 = 0$, $\lambda_2/\lambda_3 = -1$, в результате чего получаем из (12.32)

$$D_0^\perp \equiv D_1^\perp = \frac{\lambda_3 \alpha^* (s_2 - s_3)}{f'T (T_1 T - 1)}, \quad D_2^\perp = \frac{\lambda_3 (\alpha^*)^2 (-s' s_2 + s_3)}{f'T (T_1 T - 1)}, \quad (12.95)$$

$$D_3^\perp = \frac{\lambda_3}{2} \frac{(-s_2 + s' s_3)}{f'T (T_1 T - 1)}. \quad (12.96)$$

Формула (12.96) соответствует нормальной или σ -компоненте для вектора индукции падающей волны, так как она осциллирует параллельно вектору $s_2 - s_3$, т. е. перпендикулярно плоскости падения, в которой лежат векторы n и s_1 . Векторы, обозначенные через D_2^\perp и D_3^\perp , лежат вместе с вектором D_1^\perp в плоскости, проходящей через s_3 и s_2 . Однако их направления

$$D_2^\perp \parallel (-s_2 \cos 2\theta_{200} + s_3) \quad \text{и} \quad D_3^\perp \parallel (-s_2 + s_3 \cos 2\theta_{200}) \quad (12.97)$$

отличаются от перпендикуляра к плоскости падения.

Как следует из уравнений (12.26), для рассматриваемого случая ($\alpha_{23} = \alpha_{32} = 0$)

$$\tau_1 D_1 + \alpha_{12} D_{2[1]} + \alpha_{13} D_{3[1]} = 0, \\ \alpha_{21} D_{1[2]} + \tau_2 D_2 = 0, \quad \alpha_{31} D_{1[3]} + \tau_3 D_3 = 0, \quad (12.98)$$

D_2^\perp и D_3^\perp соответственно параллельны проекциям вектора D_1 на направления, перпендикулярные s_2 и s_3 . Это же относится и к слагающим, лежащим в плоскости $(s_2 s_3)$.

Из уравнений (12.91) непосредственно следует, что для всех точек гиперболы

$$|D_2^\perp|^2 = |D_3^\perp|^2 = \frac{T_1}{2T} |D_1^\perp|^2, \quad (12.99)$$

для главных точек $T_1/2T = 1/2$.

Аналогично, для второй гиперболы $[T_1 T - 1/2 - s^2 + (s'/2)]$ указанным путем могут быть получены следующие выражения:

$$D_1^\parallel = \frac{\lambda_1 T^2}{f'T (T_1 T - 1)} \left[s_1 - \frac{1}{2s} s_2 - \frac{1}{2s} s_3 \right], \quad (12.100a)$$

$$D_2^\parallel = \frac{-\lambda_1 \alpha^* T}{f'T (T_1 T - 1)} \left[s_1 - \frac{s^2 - 2s'}{2s} s_2 - \frac{1}{2s} s_3 \right], \quad (12.100б)$$

$$D_3^\parallel = \frac{-\lambda_1 \alpha T}{f'T (T_1 T - 1)} \left[s_1 - \frac{s_2}{2s} - \frac{s^2 - 2s'}{2s} s_3 \right]. \quad (12.100в)$$

Нетрудно видеть, что D_1^{\parallel} лежит в плоскости падения, так как коэффициенты при векторах s_2 и s_3 в (12.100а) равны между собой. Соответственно различие коэффициентов при s_2 и s_3 в (12.100в) указывает, что, вообще говоря, векторы D_2^{\parallel} и D_3^{\parallel} не лежат в плоскости падения. Для отношений $|D_2^{\parallel}|^2/|D_1^{\parallel}|^2$ и $|D_3^{\parallel}|^2/|D_1^{\parallel}|^2$ могут быть получены выражения, аналогичные (12.99).

Анализируя полученные результаты для ориентации векторов D_h , замечаем, что в трехволновом случае (точнее, в указанном сечении) наблюдается та же закономерность, что и в двухволновом, а именно, гипербола с бóльшим значением действительного диаметра отвечает σ -поляризации векторов индукции.

Наконец, полученные выше соотношения позволяют непосредственно вычислить значения коэффициентов поглощения.

Так, для точек дисперсионной поверхности, лежащих на сечении ее плоскостью симметрии, согласно формулам (12.80) (12.87) и (12.90), коэффициент поглощения выражается формулой

$$\mu' = \frac{2(T + T_1)}{2\gamma_1 T + T_1(\gamma_2 + \gamma_3)} \left[1 - \frac{f_{12}''}{f_0''} \frac{2\gamma T_1}{T + T_1} \right]. \quad (12.101)$$

Для главных точек этих гипербол, лежащих на главной оси, для которых $T_1 = T_2 = T_3 = T$, причем для двух гипербол соответственно

$$T^I = \pm \sqrt{\frac{1+s'}{2}} = \pm \sqrt{1-\beta^2},$$

$$T^{II} = \pm \sqrt{s^2 + \frac{1}{2}(1-s')} = \pm \sqrt{(1-\beta^2)^2 + \frac{5}{4}\beta^4},$$

или $T^I = 0,96$ и $T^{II} = 0,93$, получаем

$$\mu'_{\min} = \frac{\sigma_{\min}^{\perp}}{\mu} = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{f_{12}''}{f_0''} T^I \right] = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} 0,96 \sqrt{2} \right],$$

$$\mu'_{\min} = \frac{\sigma_{\min}^{\parallel}}{\mu} = \frac{1}{\gamma} \left[1 - \frac{\chi_{hi}}{\chi_{oi}} 0,93 \sqrt{2} \right]. \quad (12.102)$$

Сравнивая этот результат с выражением для коэффициента поглощения в двухволновом случае (4.107), замечаем, что значение скобок различается на множитель $2^{1/2} T$ в вычитаемом, и, следовательно, в трехволновом случае для отражений типа 111 наблюдается существенное возрастание аномального прохождения.

Формулы (12.102) совпадают с теми, которые были выведены Хильдебрандтом более специальным методом [33]. Заметим, также, что соотношение между величинами T в (12.102) $T^I > T^{II}$ и, следовательно,

$$\mu_{\min}^{II} > \mu_{\min}^I \quad (12.103)$$

вполне аналогично соотношениям между μ и σ для двух гипербол

или двух состояний поляризации в двухволновом случае. В формуле (4.107) наличие поляризационного множителя C приводит к увеличению μ в случае π -поляризации.

Другие вопросы, относящиеся к трехволновому рассеянию, в том числе форма дисперсионной поверхности, коэффициент поглощения вдоль вектора Пойнтинга, а также переход к двухволновому случаю: 000—111 или 000— $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ рассмотрены в работе Хено и Эвальда [32] с помощью изложенной общей теории.

При отражении $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}/220$ от кристалла Ge, более сложном по сравнению с предыдущим, исходные точки обратной решетки есть 000 — h_1 , 111 — h_2 , $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ — h_3 , 220 — (h_2 — h_3) при этом $\alpha_{23} \neq 0$, $s_{12} = s_{13} = 1 - 3/2\beta^2 = s$, $s_{23} = s' = 1 - 4\beta^2$. Уравнение дисперсионной поверхности, выраженное через переменные T_i , имеет вид

$$F(T_i, \beta^2) \equiv (T_{23} - 1)(T_{13} - 1/2)(T_{12} - 1/2) + s^2 s' (1 - T_2)(1 - T_3)(1/2 - T_1) - \frac{s^2}{2} \left(T_{13} - \frac{1}{2}\right) (1 - T_2)^2 - \frac{s^2}{2} \left(T_{12} - \frac{1}{2}\right) \times \times (1 - T_3)^2 - s'^2 (T_{23} - 1)(1/2 - T_1^2) = 0. \quad (12.104)$$

Здесь переменные T_i связаны с координатными функциями T'_i соотношениями (12.76в).

Напомним, что

$$f' = \frac{f'_{12}}{f'_0} = \frac{f'_{13}}{f'_0}, \quad f'_1 = \frac{f'_{23}}{f'_0}. \quad (12.105)$$

Плоскость симметрии дисперсионной поверхности в данном случае $T_2 = T_3$, а следовательно, и $T'_2 = T'_3$; однако в отличие от предшествующей задачи здесь главная ось ($T'_1 = T'_2 = T'_3$) не совпадает с осью ($T_1 = T_2 = T_3$).

Пересечение дисперсионной поверхности с главной осью отвечает указанным соотношениям: $T'_1 = T'_2 = T'_3 = T'$, и, следовательно, согласно (12.79),

$$T_1 \frac{f'^2}{f_1^2} = T_2 = T_3 = T = \frac{T'}{f_1}. \quad (12.106)$$

Значения величины T в точках пересечения определяются из уравнения

$$(T - 1) [(T + 1)(\alpha T^2 - 1/2)^2 + s^2 s' (T - 1)(1/2 - \alpha T) - s^2 (T - 1)(\alpha T^2 - 1/2) - s'^2 (T + 1)(1/2 - \alpha T)^2] = 0, \\ \alpha = (f'_1 / f')^2. \quad (12.107)$$

Одной из точек пересечения является точка, отвечающая условию

$$T'_1 = T'_2 = T'_3 = f'_1. \quad (12.108)$$

Коэффициент поглощения в этой точке

$$\mu' = \frac{2}{\gamma_2 + \gamma_3} \left[1 - \frac{f''_{220}}{f''_0} \right]. \quad (12.109)$$

Заметим также, что коэффициент поглощения, измеренный вдоль направления падения, составляет величину

$$\mu_\gamma = 1 - (f''_{220}/f''_0), \quad (12.110)$$

и вдоль нормали к дисперсионной кривой (ближайшей к точке La)

$$\mu'_c = \gamma^{-1} \left[1 - \frac{f''_{220}}{f''_0} \right], \quad \gamma = \sqrt{1 - \frac{9}{4} \beta^2}. \quad (12.111)$$

Рассмотрим теперь пересечение дисперсионной поверхности прямой, отвечающей условию

$$T = T_1 = T_2 = T_3 \quad \text{или} \quad T'_2 = T'_3 = T'_1 \frac{f'^2_{220}}{f'^2_{111}}. \quad (12.112)$$

Согласно (12.104), точки пересечения удовлетворяют уравнению

$$(T - 1) [T^2 - 1/2 - s' (1/2 - T)] [(T^2 - 1/2) (T + 1) + s' (T + 1) (1/2 - T) - s^2 (T - 1)] = 0. \quad (12.113)$$

Учитывая выражение (12.80), можно вычислить значения величин μ' , отвечающих различным корням уравнения (12.113). Наибольший интерес представляет значение μ' для $T = 1$. В этом случае μ' отвечает формуле (12.109). Это означает, что, в отличие от более простого случая $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$, здесь минимальные значения величин μ' и σ соответствуют не только пересечению дисперсионной поверхности с главной осью, но и другим точкам дисперсионной поверхности.

Интересно сравнить координаты точек в обратном пространстве, для которых в случаях $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ и $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ установлены минимальные значения величин μ' и σ .

В случае $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ координаты соответствующей точки на главной оси

$$T'_1 = T'_2 = T'_3 = 0,78.$$

В случае $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ координаты точки на главной оси

$$T'_1 = T'_2 = T'_3 = 0,69.$$

В том же случае координаты точки с одинаковыми значениями μ' и σ

$$T'_1 = 1,03, T'_2 = T'_3 = 0,69.$$

Основной результат рассмотрения отражений $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ заключается в том, что с точностью до множителя $(\gamma_2 + \gamma_3)^{-1}$ минимальное значение коэффициента поглощения σ в этом трехволновом случае совпадает со значением σ при двухволновом отражении 220. Интересно отметить, что μ'_{\min} определяется как действительными амплитудами f'_{mn} (через посредство переменных T'_i , т. е. координат точки на дисперсионной поверхности), так и мнимыми f''_{mn} . В связи с этим необходимо отметить, что критерий Эвальда, основанный на учете лишь f'_{mn} , здесь недостаточен и дает неправильный ответ, т. е. точка пересечения дисперсионной поверхности с главной осью в случае $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ расположена ближе к точке La, чем в случае $111/\bar{1}\bar{1}\bar{1}$.

По-видимому, в случаях, когда ни одно из отражений не является запрещенным, а также в еще более сложных случаях, когда все α_{mn} различны, необходимо более общее детальное исследование дисперсионной поверхности и величин, входящих в формулу (12.78), для определения «абсолютных» значений μ'_{\min} и σ_{\min} .

Как уже отмечалось, работа Бормана и Хартвига [30], в которой было обнаружено возрастание аномального прохождения в трехволновом случае, послужила толчком к теоретической разработке многоволнового рассеяния.

12.7. Обзор других теоретических и экспериментальных работ

Независимо от изложенной теории Эвальда — Хено, хотя частично и по инициативе Эвальда, в 1965—1968 гг. были опубликованы работы, в которых излагались расчеты различных типов многоволнового рассеяния в случае Лауэ [159, 163—165, 167, 168, 33].

В работах [159, 163] авторы поставили перед собой частную задачу в многоволновом рассеянии, отвечающую точному соблюдению условия Вульфа — Брэгга для каждого из отражений и такой ориентации отражающих плоскостей, при которой входная грань кристаллической пластинки параллельна плоскости, проходящей через многоугольник векторов \mathbf{h}_{mn} . Это ограничение позволило авторам [163] вычислить значения интенсивностей рассеяния и минимальных коэффициентов поглощения для двух примеров трехволнового случая, а также для четырех- и шестиволнового рассеяния.

В этих работах авторы исходили из фундаментальных уравнений для слагающих волновых векторов D_h по двум взаимно перпендикулярным направлениям в плоскости, перпендикулярной соответствующему волновому вектору \mathbf{k}_h . Используя угловой параметр типа

$$x = \frac{k_0^2 - k^2}{K^2}, \quad k^2 = K^2(1 + \chi_0), \quad (12.114)$$

и вводя для каждой диффрагированной волны в кристалле единичные векторы поляризации π_h и σ_h , авторы составляли уравнения следующего вида:

$$x\mathbf{D}_{m\pi} = \sum'_{n \neq m} \chi_{m-n} [(\pi_m \pi_n) \mathbf{D}_{n\pi} + (\pi_m \sigma_n) \mathbf{D}_{n\sigma}], \quad (12.115)$$

$$x\mathbf{D}_{m\sigma} = \sum'_{n \neq m} \chi_{m-n} [(\sigma_m \pi_n) \mathbf{D}_{n\pi} + (\sigma_m \sigma_n) \mathbf{D}_{n\sigma}].$$

Для относительных интенсивностей выходящих диффрагированных волн в вакууме использовались выражения

$$y_{h\sigma}^{\pi}(z) = \left| \sum_j \mathbf{D}_{0\pi}^{(j)} \mathbf{D}_{h\sigma}^{(j)} \exp \left\{ \frac{iz}{2K \cos \psi_h} (x_0 + x_j) \right\} \right|^2, \quad (12.116)$$

где j обозначает различные решения системы (12.115). Каждому решению соответствуют определенные значения x и векторов индукции. В работе [163] рассматривались отражения $111/11\bar{1}$, $220/202$, $220/2\bar{2}0/400$, $220/242/044/\bar{2}24/\bar{2}02$. Для всех этих случаев соответствующие системы уравнений решены и значения x и \mathbf{D} определены.

Вычисление минимальных коэффициентов поглощения производится в [163] по аналогии с двухволновым рассеянием (для угловой функции $y = 0$):

$$\mu_j = \mu_0 + \Delta\mu_j = \mu_0 - K |\chi_{0i}|. \quad (12.117)$$

Отражение $220/202$ исследовалось ранее [159]. В обеих работах было показано, что при этом усиление эффекта Бормана либо очень незначительно, либо вообще отсутствует (в [159] даже ослабление).

В остальных исследованных в работе [163] случаях расчет приводит к заметному усилению эффекта Бормана.

Весьма обстоятельное рассмотрение трехволнового отражения $111/\bar{1}11$ выполнено в работе [33]. Автор исходил из системы фундаментальных уравнений типа (12.26) и выбрал для описания дисперсионной поверхности прямоугольную систему координат с началом в точке La. Ось u — вдоль \mathbf{s}_1 (в нашем обозначении), плоскость (uw) — в плоскости симметрии и ось v перпендикулярна к этой плоскости (единичные векторы \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} соответственно). Выбор прямоугольной системы координат с указанным направлением осей удобен для исследования нормальной (D_{0v}) и параллельной (D_{0w}) слагающих индукции падающей волны и соответствующих величин для диффрагированных волн.

Уравнение дисперсионной поверхности имеет вид (частично в наших обозначениях)

$$KN - LM = 0, \quad K, N = |\chi_0|^3 |\tau_1 \tau_2 \tau_3 - C_{K,N}^2 (\tau_2 + \tau_3) \alpha_{12}^2|,$$

$$L = M = [-2bc(\tau_2 - \tau_3) \alpha_{12}^2 |\chi_0|^3, \quad b = \beta = \sqrt{\frac{(1 - s_{23})}{2}},$$

$$c^2 = (1 - s_{23}) - (1 - s_{12})^2, \quad C_K^2 = 1 - b^2, \quad C_N^2 = 1 - c^2. \quad (12.118)$$

Введение слагающих радиуса-вектора $r(u, v, w)$ в уравнение дисперсионной поверхности позволяет провести исследование этой поверхности. Как и следовало ожидать, в сечении дисперсионной поверхности плоскостью симметрии получаются уравнения, описывающие пару прямых

$$u_3 = (K |\chi_0| + 2cw)/2a, \quad a = s_{12} \quad (12.119)$$

и две пары гиперболических кривых

$$u_{1,2} = \frac{1}{4a} \{K |\chi_0| (1 + a) + 2cw \pm$$

$$\pm \sqrt{[K |\chi_0| (1 - a) + 2cw]^2 + 8aC_{K,N}^2 K^2 \chi_L^2}\} \quad (12.120)$$

в полном согласии с результатом, полученным выше с помощью общей теории Эвальда — Хено.

Для вычисления коэффициента поглощения автор исходит из формулы

$$\sigma = 4\pi\delta_i, \quad \delta = u/K(\mathbf{s}\mathbf{n}), \quad \delta = \delta_r + i\delta_i. \quad (12.121)$$

На сечении дисперсионной поверхности плоскостью симметрии гипербола, ближайшая к точке La , пересекается двумя прямыми: нормалью к входной грани и осью u . Из треугольника, образованного точкой La и двумя упомянутыми точками, пересечения, можно найти приближенное соотношение

$$w = \frac{u(a-1)}{c}. \quad (12.122)$$

Исключая величину w из этого уравнения и (12.120) и приравнявая эти значения, определяем u и подставляем в (12.121). Мнимая часть δ_i , определяющая σ_{\min} , вычисляется на основе стандартного приближения $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$. Для σ_{\min} получаем формулу (12.102)

$$\sigma_{\min} = \frac{\mu}{(\mathbf{s}\mathbf{i}\mathbf{n})} \left(1 - CD_L \frac{\tau(2\theta)}{\tau}\right), \quad (12.123)$$

$$D_L \frac{\tau(2\theta)}{\tau} = \left| \frac{\chi_{hi}}{\chi_{0i}} \right| \sqrt{2}.$$

Для определения направлений векторов индукции автор исходит из соотношений [см. (12.118)]

$$KD_{0v} = 0, \quad ND_{0w} = 0, \quad KN = 0, \quad (12.124)$$

справедливых для сечения плоскостью симметрии. Здесь

$$D_0^\perp = jD_{0v} \text{ и } D_0^\parallel = kD_{0w}. \quad (12.125)$$

Точкам на гиперболах отвечает условие $2\varepsilon_L - \chi_0 \neq 0$, причем $\varepsilon_L = \varepsilon_M$

Если $K = 0$, $N \neq 0$ и из (12.120) следует, что $D_{0w} = 0$, т. е. $D_0 \equiv D_0^\perp = jD_{0v}$, колебания D_0 направлены перпендикулярно к плоскости симметрии. Так как условие $K = 0$ относится к гиперболе внешней, т. е. расположенной ближе к точке La , то получаем соответствие с двухволновым случаем.

Аналогично, для $N = 0$ (внутренняя гипербола) $D_0 \equiv D_0^\parallel = kD_{0w}$.

Далее из фундаментальных уравнений следует

$$(2\varepsilon_L - \chi_0) D_{L,M}^\perp = jD_{0v}\chi_{L,M} \pm bD_{0v}\chi_{L,M}s_{L,M}, \quad (12.126)$$

$$(2\varepsilon_L - \chi_0) D_{L,M}^\parallel = kD_{0w}\chi_{L,M} + cD_{0w}\chi_{L,M}s_{L,M}.$$

Из уравнения (12.126) видно, что векторы $D_2^\perp \equiv D_L^\perp$ и $D_3^\perp \equiv D_M^\perp$ лежат в одной плоскости с вектором D_1^\perp , а также векторами k_2 и k_3 или s_2 и s_3 .

В отличие от этого, как следует из уравнения (12.126), векторы D_2^\parallel и D_3^\parallel в общем случае не лежат в плоскости симметрии, так как их направление определяется также и векторами s_2 и s_3 .

Эти результаты иллюстрирует рис. 108.

Наконец, представляет интерес указание, сделанное в [33], относительно более сильной зависимости коэффициентов поглощения в трехволновом случае (чем в двухволновом) от длины волны λ .

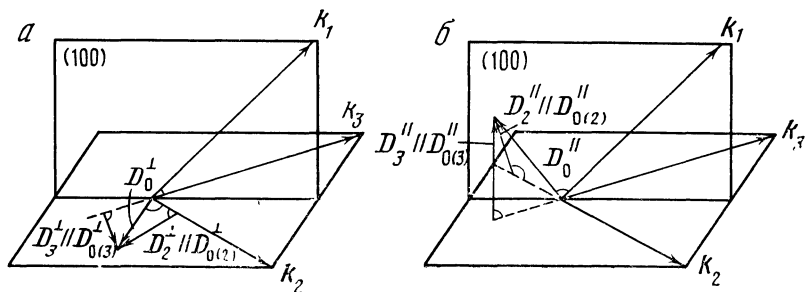


Рис. 108. Расположение векторов индукции в случае трехволнового отражения $111/\bar{1}\bar{1}1$ от Ge

a — векторы, отвечающие σ -поляризации; б — векторы, отвечающие λ -поляризации

Эта последняя связана с наличием множителя T (λ^2/a^2) в формуле (12.102) для коэффициента поглощения. Приведенные автором кривые для σ^\perp/σ_0 и $\sigma^\parallel/\sigma_0$ обнаруживают сильный спад с уменьшением λ ; обе кривые пересекаются при $\lambda \approx 3,75 \text{ \AA}$.

Переходя к оценке соответствия между теоретическими и экспериментальными значениями σ_{\min} для рассматриваемого отражения 111/ $\bar{1}\bar{1}1$, отметим работу Уэбаха и Хильдебрандта [160], в которой было проведено более тщательное измерение интенсивностей прошедших волн на образце Ge для излучений CuK α и MoK α .

Весьма существенные условия получения правильных результатов в данном эксперименте — это, во-первых, измерение интегральных интенсивностей и, во-вторых, при измерении прошедшей волны — использование достаточно толстого образца. Как следует из формул (4.167) и (4.169), интегральные отражения для прошедшей волны T_i и отношение $Q = T_i/R_i$ в случае симметричного двухволнового отражения являются функциями толщины кристалла. Эта зависимость может быть формально записана так:

$$\mu \approx 2t^{-1} + \mu_{\min}.$$

Авторы [160] использовали другие формулы, ссылаясь на Като

$$\mu \approx (2t)^{-1} + \mu_{\min}, \quad (12.127a)$$

$$\mu \approx (t)^{-1} + \mu_{\min}. \quad (12.127b)$$

Формула (12.127b) относится к более толстому кристаллу. Следует сделать оговорку, что закон изменения указанных величин с толщиной кристалла при трехволновом рассеянии нам неизвестен.

Далее необходимо иметь в виду, что при исследовании прошедших через кристалл волн мы измеряем в определенном интервале толщин суммарную величину T_i^\perp и T_i^\parallel , а следовательно, σ_{\min}^\perp и σ_{\min}^\parallel . Авторы [160] измеряли интегральные интенсивности T_i и R_i при прохождении излучения через ступенчатую пластинку Ge с максимальными толщинами $\sim 1,81 \text{ мм}$ ($\mu t = 64$ для Cu K α и $\mu t = 58$ для MoK α) и $2,05 \text{ мм}$ (соответственно, $\mu t = 72,5$ и $65,5$). Полученные из их экспериментов значения σ_{\min} составляют ($t = 1,81 \text{ мм}$)

$$\sigma_{\min} \approx 25 \text{ см}^{-1} \text{ для Cu K}\alpha \text{ и } \sigma_{\min} \approx 14 \text{ см}^{-1} \text{ для Mo K}\alpha.$$

Существенно, что в трех- и двухволновом случаях экспериментальные значения

$$\left[\frac{\sigma_{\min}^{\text{MoK}\alpha}}{\sigma_{\min}^{\text{Cu K}\alpha}} \right] = 0,56, \quad \left[\frac{\sigma_{\min}^{\text{MoK}\alpha}}{\sigma_{\min}^{\text{Cu K}\alpha}} \right] = 0,91. \quad (12.128)$$

Что касается численных результатов теоретического расчета σ_{\min}^\perp и σ_{\min}^\parallel , то, очевидно, они зависят от принятых значений исходных параметров.

Хильдебрандт, используя старые данные Вагенфельда для χ_{hi}/χ_{oi} и значение $\mu = 350 \text{ см}^{-1}$, получил (излучение $\text{Cu } K\alpha$) $\sigma_{\min}^{\perp} = 19 \text{ см}^{-1}$, $\sigma_{\min}^{\parallel} = 31 \text{ см}^{-1}$. Если воспользоваться нашими табл. 3 и 4 и величиной $\mu = 352 \text{ см}^{-1}$, то можно получить $\sigma_{\min}^{\perp} = 28 \text{ см}^{-1}$, $\sigma_{\min}^{\parallel} = 39 \text{ см}^{-1}$. Величина 28 см^{-1} близка к результату авторов работы [160].

Необходимо также подчеркнуть расхождение между расчетами и экспериментальными данными для коэффициентов поглощения в случаях многоволнового рассеяния, включающих отражения типа 220. Так, по расчетам [163] для отражений 220/400/220 и 220/242/044/ $\sqrt{2}24$ /202 должно наблюдаться значительное снижение σ_{\min} сравнительно с величиной σ_{\min} при двухволновом рассеянии ($5,2 \text{ см}^{-1}$ вместо $14,4 \text{ см}^{-1}$). Между тем в заметке [162] подчеркивается, что как в только что указанных, так и в других случаях, включающих отражения типа 220, на линиях этих отражений не наблюдалось более интенсивных пятен, обязанных усилению аномального прохождения. В той же заметке отмечается, что подобные пятна наблюдались на линиях, отвечающих отраженным пучкам 111, 311, и 331. Очевидно, необходимо продолжать экспериментальные исследования с более совершенной методикой. Вместе с тем теоретические расчеты, в которых были получены сниженные значения для σ_{\min} , возможно, должны быть проверены более прецизионным путем. Для трехволнового рассеяния в изложенной работе Эвальда и Хено для отражения 220 было получено значение σ_{\min} , совпадающее с величиной, отвечающей двухволновому рассеянию.

Оценивая возможности дальнейшей разработки вопросов многоволнового рассеяния, приходится признать, что существенный прогресс может быть достигнут при условии использования машинного счета для вычисления интенсивностей и коэффициентов поглощения во всей области максимума, т. е. для всех точек дисперсионной поверхности. Примером такого исследования могут быть работы [167, 168], посвященные трехволновому отражению 111/111 $\text{Cu } K\alpha$ излучения от Ge.

В заключение заметим, что трактовка многоволнового рассеяния в случае Брэгга отличается от изложенной теории для случая Лауэ необходимостью учета эффектов экстинкции. В результате при анализе различных возможных решений дисперсионного уравнения устанавливается мнимость некоторых из них. Экспериментальные исследования отражений по Брэггу почти отсутствуют. Основной экспериментальный метод исследованию многократных отражений в случае Брэгга—это метод Реннингера [29].

Рассмотрение геометрии образования многократных отражений при съемке кристалла по методу Реннингера дано в работе Кола, Чемберса и Дана [169]. Проведенный анализ позволяет индексировать пики на кривой интенсивности, которая получается при азимутальном вращении кристалла.

Авторы [168] приводят график, на котором даны кривые зависимости параметра $\beta^{-1} = a\lambda^{-1}$ от азимутального угла α для структуры алмаза. Подобные кривые, очевидно, могут быть полезны и при исследовании многократных отражений по Лауэ.

Примером использования указанного метода может служить работа Лафуркада, Кудерка и Ларока [170] по исследованию многократных отражений по Брэггу от кристаллов цинка. Реннингер отметил, что измерения положения подобных пиков дают возможность прецизионного измерения периодов решетки.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

ЗНАЧЕНИЯ ИНТЕГРАЛА $\int_0^{2A} J_0(x) dx$ ДЛЯ $A < 5$

2A	∫	2A	∫	2A	∫
0,00	0,00000	3,40	1,26056	6,80	0,89512
0,10	0,09991	3,50	1,22330	6,90	0,92470
0,20	0,19933	3,60	1,18467	7,00	0,95464
0,30	0,29775	3,70	1,14509	7,10	0,98462
0,40	0,39469	3,80	1,10496	7,20	1,01435
0,50	0,48968	3,90	1,06471	7,30	1,04354
0,60	0,58224	4,00	1,02473	7,40	1,07190
0,70	0,67193	4,10	0,98541	7,50	1,09917
0,80	0,75834	4,20	0,94712	7,60	1,12508
0,90	0,84106	4,30	0,91021	7,70	1,14941
1,00	0,91973	4,40	0,87502	7,80	1,17192
1,10	0,99399	4,50	0,84186	7,90	1,19243
1,20	1,06355	4,60	0,81100	8,00	1,21074
1,30	1,12813	4,70	0,78271	8,10	1,22671
1,40	1,18750	4,80	0,75721	8,20	1,24021
1,50	1,24144	4,90	0,73468	8,30	1,25112
1,60	1,28982	5,00	0,71531	8,40	1,25939
1,70	1,33249	5,10	0,69920	8,50	1,26494
1,80	1,36939	5,20	0,68647	8,60	1,26777
1,90	1,40048	5,30	0,67716	8,70	1,26787
2,00	1,42577	5,40	0,67131	8,80	1,26528
2,10	1,44528	5,50	0,66891	8,90	1,26005
2,20	1,45912	5,60	0,66992	9,00	1,25226
2,30	1,46740	5,70	0,67427	9,10	1,24202
2,40	1,47029	5,80	0,68187	9,20	1,22946
2,50	1,46738	5,90	0,69257	9,30	1,21473
2,60	1,46069	6,00	0,70622	9,40	1,19739
2,70	1,44871	6,10	0,72263	9,50	1,17344
2,80	1,43231	6,20	0,74160	9,60	1,15927
2,90	1,41181	6,30	0,76290	9,70	1,13772
3,00	1,38756	6,40	0,78628	9,80	1,11499
3,10	1,35992	6,50	0,81147	9,90	1,09134
3,20	1,32928	6,60	0,83820	10,00	1,06701
3,30	1,29602	6,70	0,86618		

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ЗНАЧЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ОТРАЖЕНИЙ R_i^y В СЛУЧАЕ БРЕГГА ОТ БЕСКОНЕЧНО ТОЛСТОГО КРИСТАЛЛЯ ($A > 4$)

Таблица 1. ($0 \leq -g \leq 3,000$, $0 \leq \kappa \leq 1,000$)

$-g$	$\kappa = 0$	0,025	0,050	0,075	0,100	0,125	0,150	0,175	0,200
0,000	2,6667								
0,005	2,6357								
0,010	2,6059								
0,015	2,5769								
0,020	2,5487								
0,025	2,5207	2,5278							
0,030	2,4937	2,4998							
0,035	2,4674	2,4730							
0,040	2,4415	2,4468							
0,045	2,4162	2,4212							
0,050	2,3913	2,3959	2,4113						
0,055	2,3669	2,3713	2,3855						
0,060	2,3430	2,3472	2,3606						
0,065	2,3195	2,3236	2,3364						
0,070	2,2964	2,3004	2,3126						
0,075	2,2738	2,2775	2,2893	2,3106					
0,080	2,2515	2,2552	2,2664	2,2864					
0,085	2,2296	2,2332	2,2440	2,2631					
0,090	2,2081	2,2115	2,2220	2,2404					
0,095	2,1870	2,1903	2,2005	2,2182					
0,100	2,1662	2,1694	2,1793	2,1961	2,2230				
0,105	2,1457	2,1488	2,1584	2,1748	2,1994				
0,110	2,1256	2,1286	2,1380	2,1538	2,1774				
0,115	2,1058	2,1088	2,1178	2,1332	2,1557				
0,120	2,0863	2,0892	2,0980	2,1130	2,1347				
0,125	2,0671	2,0700	2,0785	2,0931	2,1142	2,1442			
0,130	2,0483	2,0510	2,0594	2,0736	2,0941	2,1224			
0,135	2,0297	2,0324	2,0405	2,0544	2,0743	2,1016			
0,140	2,0114	2,0140	2,0220	2,0355	2,0549	2,0810			
0,145	1,9934	1,9960	2,0037	2,0169	2,0358	2,0611			
0,150	1,9757	1,9781	1,9858	1,9986	2,0170	2,0416	2,0773		
0,155	1,9582	1,9606	1,9681	1,9806	1,9986	2,0225	2,0540		
0,160	1,9410	1,9434	1,9506	1,9629	1,9804	2,0038	2,0339		
0,165	1,9240	1,9264	1,9335	1,9455	1,9626	1,9854	2,0145		
0,170	1,9073	1,9096	1,9166	1,9283	1,9450	1,9672	1,9956		
0,175	1,8909	1,8931	1,8999	1,9114	1,9278	1,9494	1,9771	2,0129	
0,180	1,8746	1,8768	1,8835	1,8948	1,9107	1,9320	1,9589	1,9930	
0,185	1,8586	1,8608	1,8673	1,8783	1,8940	1,9147	1,9410	1,9740	
0,190	1,8429	1,8450	1,8514	1,8622	1,8776	1,8978	1,9234	1,9555	
0,195	1,8273	1,8294	1,8357	1,8463	1,8614	1,8812	1,9062	1,9373	
0,200	1,8120	1,8140	1,8202	1,8306	1,8454	1,8648	1,8893	1,9196	1,9576
0,210	1,7820	1,7840	1,7899	1,7999	1,8141	1,8328	1,8562	1,8849	1,9202
0,220	1,7529	1,7547	1,7605	1,7701	1,7838	1,8017	1,8242	1,8516	1,8851
0,230	1,7244	1,7263	1,7319	1,7411	1,7544	1,7716	1,7932	1,8195	1,8512
0,240	1,6969	1,6986	1,7040	1,7130	1,7257	1,7424	1,7632	1,7885	1,8187

Таблица 1 (продолжение)

$-g$	$x = 0$	0,025	0,050	0,075	0,100	0,125	0,150	0,175	0,200
0,250	1,6700	1,6717	1,6769	1,6856	1,6979	1,7140	1,7341	1,7584	1,7874
0,260	1,6438	1,6455	1,6505	1,6589	1,6709	1,6864	1,7058	1,7292	1,7571
0,270	1,6183	1,6199	1,6248	1,6330	1,6446	1,6596	1,6783	1,7010	1,7278
0,280	1,5935	1,5951	1,5998	1,6077	1,6190	1,6335	1,6517	1,6735	1,6994
0,290	1,5693	1,5708	1,5754	1,5831	1,5940	1,6082	1,6257	1,6469	1,6719
0,300	1,5457	1,5472	1,5516	1,5592	1,5697	1,5835	1,6005	1,6210	1,6452
0,310	1,5227	1,5242	1,5285	1,5358	1,5461	1,5594	1,5760	1,5959	1,6192
0,320	1,5003	1,5017	1,5059	1,5130	1,5230	1,5360	1,5521	1,5714	1,5941
0,330	1,4784	1,4798	1,4839	1,4908	1,5006	1,5132	1,5288	1,5476	1,5695
0,340	1,4571	1,4584	1,4625	1,4692	1,4787	1,4910	1,5062	1,5244	1,5458
0,350	1,4363	1,4376	1,4415	1,4481	1,4573	1,4693	1,4841	1,5019	1,5227
0,360	1,4160	1,4172	1,4211	1,4275	1,4365	1,4482	1,4626	1,4799	1,5001
0,370	1,3962	1,3974	1,4011	1,4074	1,4162	1,4276	1,4417	1,4585	1,4782
0,380	1,3768	1,3780	1,3816	1,3877	1,3964	1,4075	1,4212	1,4376	1,4568
0,390	1,3578	1,3591	1,3626	1,3686	1,3770	1,3879	1,4013	1,4173	1,4360
0,400	1,3394	1,3406	1,3441	1,3499	1,3581	1,3687	1,3818	1,3975	1,4157
0,410	1,3213	1,3225	1,3259	1,3316	1,3397	1,3500	1,3628	1,3781	1,3960
0,420	1,3037	1,3048	1,3082	1,3138	1,3216	1,3318	1,3443	1,3592	1,3767
0,430	1,2865	1,2876	1,2909	1,2963	1,3040	1,3139	1,3262	1,3408	1,3578
0,440	1,2697	1,2707	1,2739	1,2793	1,2868	1,2965	1,3085	1,3228	1,3394
0,450	1,2532	1,2542	1,2574	1,2626	1,2700	1,2795	1,2913	1,3052	1,3215
0,460	1,2371	1,2381	1,2412	1,2463	1,2536	1,2629	1,2744	1,2881	1,3040
0,470	1,2213	1,2223	1,2253	1,2304	1,2375	1,2466	1,2579	1,2713	1,2869
0,480	1,2059	1,2069	1,2098	1,2148	1,2218	1,2307	1,2418	1,2549	1,2702
0,490	1,1909	1,1918	1,1947	1,1996	1,2064	1,2152	1,2260	1,2389	1,2539
0,500	1,1761	1,1770	1,1799	1,1847	1,1913	1,2000	1,2106	1,2233	1,2379
0,525	1,1406	1,1415	1,1442	1,1488	1,1551	1,1634	1,1735	1,1856	1,1996
0,550	1,1069	1,1078	1,1103	1,1148	1,1209	1,1287	1,1384	1,1500	1,1634
0,575	1,0749	1,0758	1,0783	1,0824	1,0883	1,0959	1,1052	1,1162	1,1290
0,600	1,0446	1,0453	1,0477	1,0517	1,0574	1,0646	1,0735	1,0841	1,0964
0,625	1,0156	1,0164	1,0187	1,0226	1,0280	1,0350	1,0436	1,0537	1,0655
0,650	0,9881	0,9889	0,9911	0,9948	1,0000	1,0067	1,0150	1,0248	1,0361
0,675	0,9619	0,9626	0,9648	0,9683	0,9734	0,9798	0,9878	0,9972	1,0082
0,700	0,9369	0,9376	0,9396	0,9431	0,9479	0,9542	0,9619	0,9710	0,9815
0,725	0,9130	0,9137	0,9157	0,9191	0,9238	0,9298	0,9372	0,9460	0,9562
0,750	0,8602	0,8609	0,8628	0,8661	0,9036	0,9065	0,9136	0,9221	0,9320
0,775	0,8185	0,8691	0,8710	0,8741	0,8785	0,8842	0,8911	0,8993	0,9089
0,800	0,8476	0,8482	0,8500	0,8531	0,8573	0,8628	0,8696	0,8776	0,8868
0,825	0,8277	0,8282	0,8300	0,8330	0,8371	0,8424	0,8490	0,8567	0,8657
0,850	0,8086	0,8091	0,8108	0,8137	0,8178	0,8229	0,8293	0,8368	0,8455
0,875	0,7903	0,7908	0,7925	0,7953	0,7992	0,8042	0,8104	0,8177	0,8261
0,900	0,7727	0,7732	0,7749	0,7776	0,7814	0,7863	0,7922	0,7993	0,8075
0,925	0,7558	0,7564	0,7579	0,7606	0,7643	0,7690	0,7749	0,7818	0,7898
0,950	0,7397	0,7401	0,7416	0,7443	0,7478	0,7525	0,7582	0,7649	0,7727
0,975	0,7240	0,7245	0,7260	0,7286	0,7321	0,7366	0,7421	0,7487	0,7563
1,000	0,7091	0,7096	0,7110	0,7135	0,7169	0,7213	0,7267	0,7331	0,7405
1,050	0,6808	0,6813	0,6826	0,6850	0,6882	0,6924	0,6976	0,7037	0,7107
1,100	0,6546	0,6550	0,6563	0,6585	0,6617	0,6657	0,6706	0,6764	0,6831
1,150	0,6301	0,6306	0,6318	0,6339	0,6369	0,6407	0,6455	0,6510	0,6574
1,200	0,6073	0,6078	0,6090	0,6110	0,6139	0,6176	0,6221	0,6274	0,6335
1,250	0,5861	0,5865	0,5877	0,5896	0,5924	0,5959	0,6003	0,6053	0,6112
1,300	0,5662	0,5666	0,5677	0,5696	0,5722	0,5756	0,5798	0,5847	0,5904
1,350	0,5474	0,5479	0,5490	0,5508	0,5534	0,5566	0,5606	0,5654	0,5708

	0,250	0,300	0,400	0,500	0,600	0,700	0,800	0,900	1,000
1,8637									
1,8290									
1,7964									
1,7652									
1,7350									
1,7059	1,7886								
1,6779	1,7561								
1,6507	1,7256								
1,6244	1,6963								
1,5989	1,6681								
1,5742	1,6409								
1,5502	1,6147								
1,5268	1,5893								
1,5041	1,5647								
1,4821	1,5409								
1,4606	1,5178	1,6816							
1,4397	1,4953	1,6524							
1,4194	1,4735	1,6252							
1,3995	1,4523	1,5990							
1,3802	1,4317	1,5739							
1,3613	1,4116	1,5496							
1,3430	1,3920	1,5261							
1,3250	1,3730	1,5035							
1,3075	1,3544	1,4815							
1,2904	1,3363	1,4602							
1,2737	1,3186	1,4396	1,6178						
1,2337	1,2763	1,3903	1,5540						
1,1959	1,2365	1,3444	1,4969						
1,1601	1,1988	1,3014	1,4446						
1,1262	1,1633	1,2610	1,3962	1,5852					
1,0941	1,1296	1,2229	1,3511	1,5257					
1,0636	1,0977	1,1871	1,3091	1,4726					
1,0346	1,0674	1,1531	1,2696	1,4238					
1,0071	1,0386	1,1210	1,2324	1,3786	1,5759				
0,9808	1,0113	1,0905	1,1974	1,3365	1,5198				
0,9558	0,9852	1,0616	1,1642	1,2972	1,4695				
0,9319	0,9603	1,0341	1,1329	1,2620	1,4234				
0,9091	0,9366	1,0079	1,1032	1,2253	1,3806	1,5844			
0,8873	0,9140	0,9830	1,0749	1,1924	1,3407	1,5309			
0,8665	0,8923	0,9591	1,0480	1,1612	1,3032	1,4828			
0,8465	0,8716	0,9364	1,0224	1,1317	1,2680	1,4387			
0,8274	0,8517	0,9147	0,9980	1,1036	1,2348	1,3976	1,6069		
0,8090	0,8327	0,8938	0,9747	1,0769	1,2034	1,3593	1,5553		
0,7914	0,8145	0,8739	0,9525	1,0514	1,1736	1,3233	1,5090		
0,7745	0,7970	0,8548	0,9311	1,0271	1,1453	1,2894	1,4663		
0,7583	0,7802	0,8366	0,9107	1,0040	1,1184	1,2573	1,4266	1,6402	
0,7277	0,7485	0,8021	0,8724	0,9605	1,0682	1,1981	1,3544	1,5452	
0,6993	0,7192	0,7702	0,8371	0,9207	1,0225	1,1446	1,2902	1,4649	
0,6729	0,6919	0,7407	0,8044	0,8840	0,9805	1,0958	1,2324	1,3944	
0,6484	0,6666	0,7133	0,7741	0,8500	0,9419	1,0512	1,1800	1,3314	
0,6254	0,6429	0,6877	0,7460	0,8185	0,9062	1,0101	1,1321	1,2746	
0,6041	0,6209	0,6638	0,7198	0,7892	0,8730	0,9722	1,0881	1,2228	
0,5840	0,6000	0,6415	0,6953	0,7620	0,8422	0,9370	1,0476	1,1755	

Таблица 1 (окончание)

$-g$	$x = 0$	0,025	0,050	0,075	0,100	0,125	0,150	0,175	0,200
1,400	0,5300	0,5304	0,5314	0,5332	0,5356	0,5388	0,5426	0,5472	0,5525
1,450	0,5136	0,5139	0,5149	0,5166	0,5190	0,5220	0,5257	0,5302	0,5353
1,500	0,4980	0,4983	0,4993	0,5010	0,5033	0,5062	0,5098	0,5141	0,5190
1,550	0,4834	0,4837	0,4847	0,4862	0,4885	0,4913	0,4948	0,4989	0,5037
1,600	0,4696	0,4698	0,4708	0,4723	0,4744	0,4772	0,4806	0,4846	0,4892
1,700	0,4440	0,4443	0,4452	0,4467	0,4487	0,4513	0,4545	0,4582	0,4625
1,800	0,4211	0,4214	0,4222	0,4235	0,4254	0,4279	0,4309	0,4344	0,4386
1,900	0,4003	0,4006	0,4014	0,4026	0,4045	0,4068	0,4096	0,4130	0,4169
2,000	0,3815	0,3817	0,3824	0,3837	0,3854	0,3876	0,3903	0,3935	0,3962
2,100	0,3642	0,3645	0,3652	0,3664	0,3680	0,3701	0,3727	0,3757	0,3792
2,200	0,3485	0,3487	0,3494	0,3505	0,3521	0,3541	0,3566	0,3594	0,3628
2,300	0,3341	0,3343	0,3349	0,3359	0,3374	0,3394	0,3418	0,3445	0,3477
2,400	0,3207	0,3209	0,3216	0,3225	0,3240	0,3258	0,3281	0,3307	0,3338
2,500	0,3084	0,3086	0,3092	0,3102	0,3115	0,3133	0,3155	0,3180	0,3210
2,600	0,2970	0,2971	0,2977	0,2987	0,3000	0,3017	0,3038	0,3062	0,3091
2,700	0,2863	0,2865	0,2871	0,2880	0,2892	0,2909	0,2929	0,2952	0,2980
2,800	0,2764	0,2766	0,2771	0,2780	0,2792	0,2808	0,2828	0,2850	0,2877
2,900	0,2672	0,2674	0,2679	0,2687	0,2699	0,2714	0,2733	0,2755	0,2780
3,000	0,2586	0,2587	0,2592	0,2600	0,2612	0,2626	0,2644	0,2666	0,2690

Таблица 2 ($0,000 \leq -g = x \leq 0,190$)

$x=g$	R_i^y	$x=g$	R_i^y	$x=g$	R_i^y
0,000	2,6667	0,100	2,2230	0,200	0,9576
0,005	2,6366	0,105	2,2059	0,210	1,9371
0,010	2,6038	0,110	2,1899	0,220	1,9175
0,015	2,5801	0,115	2,1743	0,230	1,8988
0,020	2,5535	0,120	2,1590	0,240	1,8809
0,025	2,5278	0,125	2,1442	0,250	1,8637
0,030	2,5030	0,130	2,1297	0,260	1,8474
0,035	2,4790	0,135	2,1154	0,270	1,8317
0,040	2,4558	0,140	2,1016	0,280	1,8167
0,045	2,4332	0,145	2,0880	0,290	1,8023
0,050	2,4113	0,150	2,0773	0,300	1,7886
0,055	2,3901	0,155	2,0618	0,310	1,7755
0,060	2,3694	0,160	2,0492	0,320	1,7630
0,065	2,3493	0,165	2,0368	0,330	1,7511
0,070	2,3297	0,170	2,0247	0,340	1,7397
0,075	2,3106	0,175	2,0129	0,350	1,7288
0,080	2,2920	0,180	2,0013	0,360	1,7184
0,085	2,2739	0,185	1,9900	0,370	1,7085
0,090	2,2563	0,190	1,9789	0,380	1,6991
0,095	2,2391	0,195	1,9681	0,390	1,6902

0,250	0,300	0,400	0,500	0,600	0,700	0,800	0,900	1,000
0,5651	0,5807	0,6205	0,6723	0,7365	0,8135	0,9044	1,0100	1,1318
0,5475	0,5624	0,6004	0,6508	0,7126	0,7867	0,8740	0,9751	1,0915
0,5308	0,5454	0,5824	0,6306	0,6902	0,7616	0,8455	0,9427	1,0541
0,5151	0,5290	0,5651	0,6116	0,6691	0,7380	0,8189	0,9123	1,0193
0,5003	0,5139	0,5486	0,5937	0,6493	0,7158	0,7938	0,8839	0,9868
0,4730	0,4858	0,5184	0,5607	0,6129	0,6752	0,7481	0,8321	0,9277
0,4484	0,4605	0,4913	0,5311	0,5803	0,6389	0,7074	0,7861	0,8755
0,4262	0,4376	0,4668	0,5045	0,5510	0,6063	0,6709	0,7449	0,8290
0,4060	0,4169	0,4446	0,4804	0,5244	0,5767	0,6379	0,7079	0,7872
0,3877	0,3980	0,4244	0,4584	0,5003	0,5501	0,6081	0,6744	0,7495
0,3708	0,3807	0,4059	0,4383	0,4782	0,5257	0,5809	0,6440	0,7152
0,3554	0,3648	0,3889	0,4199	0,4580	0,5034	0,5560	0,6161	0,6840
0,3412	0,3502	0,3732	0,4029	0,4395	0,4828	0,5331	0,5906	0,6554
0,3280	0,3367	0,3588	0,3873	0,4223	0,4639	0,5121	0,5671	0,6291
0,3158	0,3242	0,3454	0,3728	0,4064	0,4464	0,4927	0,5455	0,6049
0,3045	0,3126	0,3330	0,3594	0,3917	0,4301	0,4746	0,5254	0,5825
0,2940	0,3017	0,3215	0,3469	0,3780	0,4150	0,4579	0,5067	0,5617
0,2842	0,2916	0,3106	0,3352	0,3653	0,4009	0,4423	0,4894	0,5423
0,2749	0,2821	0,3006	0,3243	0,3533	0,3878	0,4277	0,4732	0,5242

$x=g$	R_i^y	$x=g$	R_i^y	$x=g$	R_i^y
0,400	1,6816	0,750	1,5782	1,500	1,9105
0,410	1,6736	0,775	1,5809	1,550	1,9438
0,420	1,6659	0,800	1,5844	1,600	1,9779
0,430	1,6586	0,825	1,5889	1,700	2,0481
0,440	1,6517	0,850	1,5941	1,800	2,1208
0,450	1,6452	0,875	1,6001	1,900	2,1957
0,460	1,6390	0,900	1,6069	2,000	2,2724
0,470	1,6332	0,925	1,6143	2,100	2,3507
0,480	1,6277	0,950	1,6223	2,200	2,4305
0,490	1,6226	0,975	1,6310	2,300	2,5115
0,500	1,6178	1,000	1,6402	2,400	2,5937
0,525	1,6071	1,050	1,6603	2,500	2,6768
0,550	1,5981	1,100	1,6824	2,600	2,7608
0,575	1,5903	1,150	1,7062	2,700	2,8457
0,600	1,5852	1,200	1,7316	2,800	2,9313
0,625	1,5809	1,250	1,7585	2,900	3,0175
0,650	1,5780	1,300	1,7867	3,000	3,1044
0,675	1,5763	1,350	1,8161		
0,700	1,5759	1,400	1,8466		
0,725	1,5765	1,450	1,8781		

ЛИТЕРАТУРА

1. *M. Laue, W. Fridrich, P. Knipping.* Münchener Sitzungsberichte. 1912, 303; Ann. Phys., 1913, 41, 971.
2. *Е. С. Федоров.* Зап. СПб., минерал. об-ва, 2-я серия, 1891, 28.
3. *A. Schoenflies.* Kristallsysteme und Kristallstruktur. Leipzig, 1891.
4. Fifty Years of X-Ray Diffraction. By P. P. Ewald N. V. A. Oosthoek's Nitgevers Mij, Utrecht, 1962, 248.
5. *C. G. Darwin.* Phil. Mag., 1914, 27, 315, 675.
6. *А. Комpton, С. Алисон.* Рентгеновские лучи. Перев. под ред. Д. Д. Гогоберизде. М.—Л., Гостехиздат, 1941.
7. *Г. С. Жданов.* Основы рентгеновского структурного анализа. М.—Л., Гостехиздат, 1940.
8. *Р. Джеймс.* Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Перев. с англ. под ред. В. И. Ивероновой. М., ИЛ, 1950.
9. *P. P. Ewald.* Fortschr. Chemie, Physik und physik. Chemie, Ser. B, 1925, 18, 492; Physika, 1924, 4, 234.
10. *P. P. Ewald.* Ann. Phys., 1917, 54, 332; Z. Phys., 1920, 2, 519; 1924, 30, 1; Phys. Zschr., 1925, 26, 29.
11. *H. A. Bethe.* Ann. Phys., 1928, 87, 55.
12. *M. Laue.* Ergebnisse exact. Naturwiss., 1931, 10, 133.
13. *M. Kohler.* Ann. Phys., 1933, 18, 265.
14. *M. Laue.* Röntgenstrahlinterferenzen. Изд. 3, Frankfurt/M., 1960.
15. *W. H. Zachariasen.* Theory of X-Ray Diffraction in Crystals. N. Y., 1945.
16. *A. Authier.* Bull. Soc. Fr. Miner., 1961, 84, 51.
17. *R. W. James.* Solid State Physics, 1963, 15, 53.
18. *B. W. Batterman, H. Cole.* Revue Modern Physics, 1964, 35, 681.
19. *A. H. Compton.* Phys. Rev., 1917, 9, 29.
20. *K. Kohra.* J. Phys. Soc. Japan, 1971, 30, 1136.
21. *G. Borrmann.* Z. Phys., 1941, 42, 157; Z. Phys., 1950, 127, 297; Z. Kristall., 1954, 106, 109; Beitrage zur Physik und Chemie der 20 Jahrhunderts. Vicweg ung Sohn, 1959, 26.
22. *M. Laue.* Acta Cryst., 1949, 2, 106.
23. *W. Kato, A. R. Lang.* Acta Cryst., 1959, 12, 787.
24. *N. Kato.* Acta Cryst., 1961, 14, 526, 627.
25. *N. Kato.* J. Appl. Phys., 1968, 39, 2225, 2231.
26. *З. Г. Пинскер.* Дифракция электронов. М., Изд-во АН СССР, 1949.
27. *П. Б. Хириш, А. Хови, Р. Б. Николсон* и др. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М., изд-во «Мир». Перев. с англ., 1968.
28. *U. Bonze, M. Hart.* Appl. Phys. Letters, 1965, 6, 155; Z. Phys., 1965, 188, 154; 1966, 190, 455.
29. *M. Reinninger.* Naturwissenschaften, 1937, 25, 42.
30. *G. Borrmann, W. Hartwig.* Z. Kristall., 1965, 121, 401.
31. *P. P. Ewald, Y. Héno.* Acta Cryst., 1968, A24, 5.

32. Y. Héno, P. P. Ewald. Acta Cryst., 1968, A24, 16.
33. G. Hildebrandt. Phys. status solidi, 1967, 24, 245.
34. Y. H. Otsuki. J. Phys. Soc. Japan, 1964, 19, 2285.
35. A. M. Afanasiev, Yu. Kagan. Acta Cryst., 1968, A24, 163.
36. Ч. Вустер. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах. Перев. с англ. М., ИЛ, 1963.
37. Прямые методы исследования дефектов в кристаллах. М., изд-во «Мир», 1963.
38. P. Penning, D. Polder. Phillips Res. Repts, 1961, 16, 419.
39. N. Kato. J. Phys. Soc. Japan, 1963, 18, 1785; 1964, 19, 67, 971.
40. A. Howie, M. J. Whelan. Proc. Eur. Reg. Conf. on Electron. Microscopy, 1960, 1, 194; Delft; Proc. Roy. Soc., 1961, A263, 217.
41. S. Takagi. Acta Cryst., 1962, 15, 1311; J. Phys. Soc. Japan, 1969, 26, 1239.
42. D. Taupin. Bulletin de la Société franc. de Mineralogir et Cristall., 1964, 87, 469.
43. И. Ш. Слободецкий, Ф. Н. Чуховский, В. Л. Инденбом. Письма в ЖЭТФ, 1968, 8, 90.
44. A. Authier, D. Simon. Acta Cryst., 1968, A24, 517.
45. А. М. Афанасьев, В. Г. Кон. Динамическая теория рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами. Препринт. Изд. Ин-та атомн. энергии им. Курчатова. М., 1969; Acta Cryst., 1971, A27, 421.
46. T. Uragami. J. Phys. Soc. Japan, 1969, 27, 147.
47. В. Л. Инденбом, Ф. Н. Чуховский. Проблема изображения в рентгеновской оптике. Препринт. Ин-т кристаллографии АН СССР. М., 1971.
48. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. М., Физматгиз, 1959, стр. 403.
49. H. Wagenfeld. Acta Cryst., 1968, A24, 170.
50. S. Kishino, K. Kohra. Japan. J. Appl. Phys., 1971, 10, 551.
51. S. Kishino, A. Noda, K. Kohra. J. Phys. Soc. Japan, 1972, 33, 158.
52. M. Renninger. Acta Cryst., 1968, A24, 143; 1969, A25, S3, 214.
53. J. J. De-Marco, R. J. Weiss. Acta Cryst., 1965, 19, 68.
54. G. Moliere. Ann. Phys., 1935, 24, 591; 1939, 35, 272; 1939, 36, 265.
55. R. W. James. The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays. London, Bell, 1962.
- 55a. D. T. Cromer, J. B. Mann. Acta Cryst., 1968, A24, 321.
56. International Tables for X-Ray Crystallography, 3. Birmingham, Kynoch Press. 1962.
57. D. T. Cromer. Acta Cryst., 1965, 18, 17.
58. H. Hönl. Z. Physik., 1933, 84, 1.
59. H. Wagenfeld. Phys. Rev., 1966, 144, 216.
60. Y. Sugiura. J. Phys. rad., 1927, 8, 113.
61. A. J. Guttman., H. Wagenfeld. Acta Cryst., 1967, 22, 334.
62. G. Grimvall, E. Persson. Acta Cryst., 1969, A25, 417.
63. З. Г. Пинскер. Кристаллография, 1970, 15, 658.
64. E. Zielinska-Rohozinska. Acta physica polonica, 1965, 27, 4, 587.
65. M. Lefeld-Sosnowska, E. Zielinska-Rohozinska. Acta physica polonica, 1962, 21, 329.
66. З. Г. Пинскер. Кристаллография, 1966, 11, 505; 1971, 16, 1117.
67. P. P. Ewald. Acta Cryst., 1958, 11, 888.
68. P. V. Hirsch. Acta Cryst., 1952, 5, 176.
69. G. N. Ramachandran. Proc. Indian Acad. Sci., 1954, A39, 65.
70. N. Kato. J. Phys. Soc. Japan, 1955, 10, 46.
71. Е. К. Ковьев, О. Н. Ефимов, Л. И. Коровин. Phys. status solidi, 1969, 35, 455.
72. Э. Грей, Г. Б. Мэтьюз. Функции Бесселя. М., ИЛ, 1953.
73. Г. М. Фихтенгольц. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 2. М.—Л., Гостехиздат, 1948, 144.
74. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм и т. д. М., Физматгиз, 1962.
75. Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. Специальные функции, М., изд-во «Наука», 1964.

76. *N. Kato*. Acta Cryst., 1958, **11**, 885.
77. *Р. Курант, Г. Гильберт*. Методы математической физики. Т. 1. М.—Л., Гостехиздат, 1951, 442.
78. *И. Снеддон*. Преобразование Фурье. М., ИЛ., 1955, 583.
79. *A. Authier*. Acta geologica et geographica. Universitatis Comenianaе. Geologica, 1968, **N14**, 37.
80. *N. Kato*. J. Phys. Soc. Japan, 1966, **21**, 1160.
81. *N. Kato*. Acta geologica et geographica. Universitatis Comenianaе. Geologica, 1968, **N4**, 43.
82. *А. Зоммерфельд*. Оптика. § 45. М., ИЛ, 1953, 411.
83. *N. Kato*. J. Phys. Soc. Japan, 1965, **20**, 1047.
84. *M. Hart, A. R. Lang*. Acta Cryst., 1965, **19**, 73.
85. *N. Kato*. J. Phys. Soc. Japan, 1966, **21**, 1772.
86. *N. Kato*. Acta Cryst., 1969, **A25**, 119.
87. *J. A. Princ*. Z. Phys., 1930, **63**, 477.
88. *H. Wagner*. Z. Phys., 1956, **146**, 127.
89. *U. Bonse*. Z. Phys., 1961, **161**, 310.
90. *U. Bonse*. Z. Phys., 1964, **177**, 385.
91. *T. Saka, T. Katagawa, N. Kato*. Acta Cryst., 1972, **A28**, 102.
92. *T. Saka, T. Katagawa, N. Kato*. Acta Cryst., 1972, **A28**, 113.
93. *T. S. Uragami*. J. Phys. Soc. Japan, 1971, **31**, 1141.
94. *T. S. Uragami*. J. Phys. Soc. Japan, 1970, **28**, 1508.
95. *T. S. Uragami*. J. Phys. Soc. Japan, 1969, **27**, 147.
96. *G. Borrmann, K. Lehmann*. Crystallography and Crystal perfection. London, Academic Press, 1963, 101.
97. *K. Lehmann, G. Borrmann*. Z. Kristall., 1967, **125**, 234.
98. *G. N. Ramachandran, C. Kartha*. Proc. Indian Acad. Sci., 1952, **35**, 145.
99. *P. B. Hirsch, G. N. Ramachandran*. Acta Cryst., 1950, **3**, 187.
100. *H. Cole, N. R. Stemple*. J. Appl. Phys., 1962, **33**, 7, 2227.
101. *M. Renninger*. Acta Cryst., 1955, **8**, 597.
102. *R. Bucksch, J. Otto, M. Renninger*. Acta Cryst., 1967, **23**, 507.
103. *A. M. Afanasiev, I. P. Persnev*. Acta Cryst., 1969, **A25**, 520.
104. *A. Erdelyi*. Higher Transcendental Functions, **2**, N. Y.—Toronto — London, McGraw — Gill, 1953.
105. *R. J. Weiss*. Acta Cryst., 1965, **18**, 814.
106. *М. А. Блохин*. Физика рентгеновских лучей, гл. 3. М., Гостехиздат, 1953.
107. *G. Brogren*. Arkiv phys., 1954, **8**, 391.
108. *G. Brogren, Ö. Adell*. Arkiv phys., 1954, **8**, 297.
109. *R. Bubakova, J. Drahekoupil, A. Fingerland*. Czech. J. Phys., 1961, **B11**, 205.
110. *M. Renninger*. Z. Naturforsch., 1961, **16a**, 1110.
111. *M. Renninger*. Advances in X-Ray Analysis, 1967, **10**, 32.
112. *R. Bubakova*. Czech. J. Phys., 1962, **B12**, 776.
113. *K. Kohra, S. Kikuta, S. Annaka* а. о. J. Phys. Soc. Japan, 1966, **21**, 1565.
114. *K. Kohra, S. Kikuta*. Acta Cryst. 1968, **A24**, 200.
115. *S. Kikuta, K. Kohra*. J. Phys. Soc. Japan, 1970, **29**, 1322.
116. *B. M. Batterman, G. Hildebrandt*. Acta Cryst., 1968, **A24**, 150.
117. *M. Lefeld-Sosnovska, C. Malgrange*. Phys. Status solidi, 1969, **34**, 635.
118. *M. Laue*. Z. Phys., 1931, **72**, 472.
119. *J. Du-Mond*. Phys. Rev., 1937, **52**, 872.
120. *R. Bubakova, J. Drahekoupil, A. Fingerland*. Czech. J. Phys., 1962, **B12**, 776; 1961, **B11**, 199.
121. *A. Fingerland*. Czech. J. Phys., 1960, **B10**, 233; 1962, **B12**, 264.
122. *T. Matsushita, S. Kikuta, K. Kohra*. J. Phys. Soc. Japan, 1971, **30**, 1136.
123. *G. Brogren*. Arkiv fys., 1954, **8**, 371; 1962, **22**, 87; 1963, **23**, 87.
124. *G. Brogren., Ö. Adell*. Arkiv fys., 1954, **8**, 401.
125. *G. Brogren, E. Hörnström*. Arkiv fys., 1963, **23**, 81; 1964, **24**, 81.
126. *S. Kikuta*. Phys., Status solidi, 1971, **45**, 333.

127. Б. Т. Захаров. Кристаллография, 1965, 10, 442; 1966, 11, 227.
128. M. Hart, A. D. Milne. Phys. Status solidi, 1968, 26, 185.
129. N. Kato, S. Tanemura. Phys. Rev. Letters, 1967, 19, 22.
130. S. Tanemura, S. Kato. Acta Cryst., 1972, A28, 69.
131. M. Hart, A. D. Milne. Acta Cryst., 1969, A25, 134.
132. M. Hart, A. D. Milne. Acta Cryst., 1970, A26, 223.
133. A. Authier, A. D. Milne, M. Sawage. Phys. Status solidi, 1968, 26, 469.
134. S. Göttlicher, E. Wölfel. Z. Elek. Chem., 1959, 63, 891.
135. C. Malgrange, A. Authier. C. R. Acad. Sc. Paris, 1965, 261, 3774.
136. M. Hart. Brit. J. Appl. Phys., 1968, 1, 2, 1405.
137. R. D. Deslattes. Appl. Phys. Letters, 1969, 15, 386.
138. U. Bonse, E. te-Kaat. Z. Phys., 1971, 243, 14.
139. М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. М., изд-во «Наука», 1970.
140. А. В. Шубников. Природа, 1927, № 2, 83; 1953, № 1, 20; 1965, № 11, 61.
141. S. Amelinckx. The Direct Observation of Dislocations. N. Y., Academic Press, 1964.
142. H. Hashimoto, M. Mannami, T. Naiki. Phil. Trans. Roy. Soc. 1961, A253, 459.
143. R. Gevers. Phil. Mag., 1962, 7, 1681.
144. D. Simon, A. Authier. Acta Cryst., 1968, A24, 527.
145. J. Chikawa. J. Appl. Letters, 1965, 7, 193.
146. A. R. Lang, V. F. Miuskov. Appl. Phys. Letters, 1965, 7, 214.
147. J. Bradler, A. R. Lang. Acta Cryst., 1968, A24, 246.
148. U. Bonse, M. Hart. Z. Phys., 1966, 194, 1.
149. U. Bonse, M. Hart. Acta Cryst., 1968, A24.
150. U. Bonse, E. te-Kaat. Z. Phys., 1968, 214, 16.
151. S. Takagi. J. Phys. Soc. Japan, 1969, 26, 1239.
152. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. Уравнения математической физики. М., изд-во «Наука», 1966.
153. Р. Курант. Уравнения с частными производными. М., изд-во «Мир», 1964.
154. F. Balibar. These, Paris, 1969.
155. D. Taupin. These, Paris, 1964.
156. P. P. Ewald. Z. Kristall., 1937, A97, 1.
157. G. Mayer. Z. Kristall., 1928, 66, 585.
158. B. Dawson. Proc. Roy. Soc., 1967, A298, 264.
159. E. J. Saccosio, A. Zajac. Phys. Rev., 1965, A139, 255.
160. W. Uebach, G. Hildebrandt. Z. Kristall., 1968, 129, 1.
161. А. А. Кацнельсон, В. И. Кисин, Н. А. Полякова. Кристаллография, 1969, 17, 965.
162. G. Hildebrandt, Acta Cryst., 1969, A25, pt S3, XVI; S209.
163. T. Joko, A. Fukuhara. J. Phys., Soc. Japan, 1967, 22, 597.
164. P. Penning, D. Polder. Philips. Res. Rep., 1968, 23, 1.
165. P. Penning. Philips. Res. Rep., 1968, 23, 12.
166. K. Kambe. J. Phys. Soc. Japan, 1957, 12, 25.
167. S. Balter, R. Feldman, B. Post. Phys. Rev. Letters, 1971, 27, 307.
168. R. Feldman, B. Post. Phys. Status solidi, 1972, 12a, 273.
169. H. Cole, E. W. Chambers, H. M. Dunn. Acta Cryst., 1962, 15, 138.
170. J. Lafourcade, J.-J. Couderc, P. Larroque. C. R. Acad. Sc. Paris, 1965, 260, 5752.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Глава 1. Введение. Исторический обзор	5
Глава 2. Волновое уравнение и его решение для прозрачного неограниченного кристалла	17
2.1. Волновое уравнение и его решение	17
2.2. Двухволновое приближение. Дисперсионная поверхность	27
Глава 3. Прохождение рентгеновских лучей через прозрачную кристаллическую пластинку. Отражение по Лауэ	35
3.1. Волновые поля внутри кристалла.	35
I. Полукристалл. Связь с условиями эксперимента. Эффект преломления	35
II. Амплитуды волн. Маятниковое решение. Экстинкция. Квазистоячие волны	43
3.2. Коэффициенты прохождения и отражения. Анализ маятникового решения в случае плоскопараллельной пластинки	49
3.3. Прохождение через клиновидную пластинку.	59
Глава 4. Рассеяние рентгеновских лучей в поглощающем кристалле. Отражение по Лауэ	68
4.1. Атомное рассеяние и поглощение	68
4.2. Комплексная форма параметров динамического рассеяния [63]	77
4.3. Вывод точных формул для коэффициентов прохождения T и отражения R в случае поглощающего кристалла	84
4.4. Вывод приближенных формул для коэффициентов прохождения T и отражения R	87
4.5. Анализ приближенных формул для коэффициентов прохождения T и отражения R	91
4.6. Интегральные значения отражения R_i и прохождения T_i в случае поглощающего кристалла [66]	102
4.7. Анализ выражений для интегральных величин R_i и T_i применительно к важнейшим частным случаям	109
Глава 5. Векторы Пойнтинга и распространение энергии рентгеновских волн	119
5.1. Усредненный вектор Пойнтинга в общем случае	119
5.2. Трижды усредненный вектор Пойнтинга в прозрачном кристалле. Слагающие вектора по полям. Теорема Эвальда—Като	123
5.3. Трижды усредненный вектор Пойнтинга в поглощающем центросимметричном кристалле	131

	5.4. Распространение энергии в поглощающем кристалле без центра симметрии. Учет периодической составляющей вектора Пойнтинга. Дополнительные замечания	141
Глава 6.	Динамическая теория в приближении падающей сферической волны	146
	6.1. Динамическая теория в двухволновом приближении при условии падающей на кристалл сферической волны. Применение к рассеянию в прозрачной плоскопараллельной кристаллической пластинке	147
	6.2. Применение изложенной теории к рассеянию в поглощающем кристалле	166
Глава 7.	Отражение рентгеновских лучей по Брэггу. I Основные определения. Коэффициенты поглощения. Дифракция в конечном кристалле	173
	7.1. Отражение от прозрачного кристалла	175
	7.2. Истинное поглощение при отражении по Брэггу. Исследование величины σ	186
	7.3. Дифракция в конечном кристалле в приближении сферической падающей волны или падающего волнового пакета	193
Глава 8.	Отражение рентгеновских лучей по Брэггу. II Коэффициенты и интегральные значения отражения и прохождения	202
	8.1. Вывод общих выражений для коэффициентов отражения и прохождения	202
	8.2. Отражение по Брэггу от прозрачного кристалла	206
	8.3. Отражение по Брэггу от толстого поглощающего кристалла	213
	8.4. Интегральное отражение от поглощающего кристалла в случае Брэгга	225
Глава 9.	Рентгеновские спектрометры, используемые при исследовании динамического рассеяния. Некоторые итоги экспериментальной проверки теории	233
	9.1. Оценка спектральной ширины и угловой расходимости излучения рентгеновской трубки	234
	9.2. Двухкристальный спектрометр с использованием отражений по Брэггу в обоих кристаллах (схема Брэгг—Брэгг)	237
	9.3. Трехкристальный спектрометр	246
	9.4. Другие типы спектрометров и монохроматоров	252
	9.5. Некоторые итоги экспериментальной проверки динамической теории	257
Глава 10.	Рентгеновская интерферометрия. Картины муара при дифракции рентгеновских лучей	270
	10.1. Рентгеновские интерферометры	270
	10.2. Работа интерферометра при нарушенной фокусировке	277
	10.3. Образование и использование картин рентгеновского муара	281
	10.4. Другие типы интерферометров. Трансляционный муар	293
Глава 11.	Обобщенная динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей в идеальных и деформированных кристаллах	298
	11.1. Вывод фундаментальных уравнений в общем случае деформированного кристалла	299
	11.2. Дифракция рентгеновских лучей в идеальном кристалле в условиях пространственно-неоднородной динамической задачи. Функция влияния точечного источника	305

11.3.	Отражение по Лауэ в идеальном кристалле	307
11.4.	Отражение по Брэггу в идеальном кристалле	311
11.5.	Применение обобщенной теории к деформированному кристаллу. Связь угловой переменной σ_h с полем деформаций	315
11.6.	Изучение частного случая зависимости D_0 и D_h только от толщины кристалла	316
11.7.	Модификация основных уравнений (поглощающий кристалл)	318
Глава 12.	Динамическое рассеяние в случае трех сильных волн . .	320
12.1.	Рассеяние в прозрачном кристалле. Опорные системы координат	323
12.2.	Система фундаментальных уравнений (2.49) в случае трех сильных волн и уравнение дисперсионной поверхности при рассеянии в прозрачном кристалле	327
12.3.	Анализ уравнения дисперсионной поверхности в случае прозрачного кристалла	329
12.4.	Рассеяние в кристаллах кремния и германия	332
12.5.	Рассеяние в поглощающем кристалле. Введение комплексных параметров рассеяния	335
12.6.	Уравнение дисперсионной поверхности в случае поглощающего кристалла. Коэффициент поглощения	337
12.7.	Обзор других теоретических и экспериментальных работ	349
Приложение 1	356
Приложение 2	357
Литература	362

ЗИНОВИЙ ГРИГОРЬЕВИЧ ПИНСКЕР

**ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ
В ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

*Утверждено к печати Ордена Трудового Красного Знамени
Институтом кристаллографии АН СССР им. А. В. Шубникова*

Редактор В. В. Удалова, Редактор издательства М. С. Райкова
Художник А. Г. Кобрин, Художественный редактор Н. Н. Власик
Технический редактор Э. Л. Кунин

Сдано в набор 27/VIII 1973 г. Подписано к печати 28/XII 1973 г. Формат 60×90^{1/16}.
Бумага книжно-журнальная № 2. Усл. печ. л. 23. Уч.-изд. л. 24. Тираж 2100. Т-18354.
Тип. зак. 2876. Цена 1 р. 67 к.

Издательство «Наука». 103717 ГСП, Москва, К-62, Подсосенский пер., 21
2-я типография издательства «Наука». 121099, Москва, Г-99, Шубинский пер., 10

Опечатки

Страница	Строка	Напечатано	Должно быть
169	13 св.	$\mathcal{F}_0(u)$	$J_0(u)$
190	7 св.	$\sqrt{y_r^2 - 1}$	$\sqrt{1 - y_r^2}$
190	8 св.	$\frac{b_i^2}{8(y_r^2 - 1)}$	$\frac{b_i^2}{8(1 - y_r^2)}$
358	18 сл.	0,8602	0,8902
358	17 сл.	0,8185	0,8685

З. Г. Пинскер