Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 2 — 1970

УДК 548.7

А. В. КОЛПАКОВ

ДИФРАКЦИОННОЕ ОТРАЖЕНИЕ И ПРОХОЖДЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

При рассмотрении дифракции рентгеновских лучей в идеальных кристаллах вводится нелокальная связь между векторами электрической индукции и напряженностью поля $\vec{D}(\vec{k}_i)=\int\varepsilon'(\vec{k}_i-\vec{k}_j)\vec{E}(\vec{k}_j)\,dv$. Это позволяет свести задачу к распространению связанных дифракционных волн. В качестве примера проводится решение двухлучевых задач отражения и прохождения. В качестве метода решения используется метод укороченных уравнений.

Проблема дифракции рентгеновских лучей в идеальных или почти идеальных кристаллах может быть сведена к задаче о распространении связанных дифракционных волн в непрерывной дипольной среде [1]. При этом каждому дифракционному направлению следует приписать свою диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\vec{k})$. Тогда амплитуды рассеянных волн могут быть определены из некоторой системы волновых уравнений, решение которой может быть найдено методом укороченных уравнений [2—3].

Указанный подход будет продемонстрирован на примере решения классических двухлучевых задач дифракционного отражения и прохождения [4—7] рентгеновских лучей в идеальных непоглощающих кристаллах, с постоянными вдоль данного направления диэлектрическими проницаемостями.

Определение электрической индукции

Поле излучения в кристалле описывается уравнениями Максвелла:

$$\begin{aligned} &\operatorname{rot}\vec{H}=\frac{1}{c}\,\frac{\partial\vec{D}}{\partial t}, \qquad \operatorname{div}\vec{D}=4\pi\rho,\\ &\operatorname{rot}\vec{E}=-\frac{1}{c}\,\frac{\partial\vec{H}}{\partial t}, \qquad \operatorname{div}\vec{H}=0. \end{aligned} \tag{1}$$

Полагая, что поле в кристалле чисто поперечное из (1) получим

$$\nabla^2\vec{E}-\frac{1}{c^2}\,\frac{\partial^2\vec{D}}{\partial t^2}=0. \tag{2}$$

Для монохроматических по времени полей волновое уравнение (2) принимает вид

$$\nabla^2\vec{E}(\vec{r})+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\vec{D}(\vec{r})=0. \tag{3}$$

Согласно [1], будем рассматривать кристалл как среду с нелокальным взаимодействием. Тогда индукция $\vec{D}$ и напряженность $\vec{E}$ оказываются связанными интегральным соотношением

$$\vec{D}(\vec{k}_i)=\int\varepsilon'(\vec{k}_i-\vec{k}_j)\vec{E}(\vec{k}_j)=dV, \tag{4}$$

где $\vec{k}_i$ — волновой вектор i-того дифракционного пучка, так что волновое уравнение (3) становится интегро-дифференциальным. Поскольку условия дифракции накладывают весьма строгие ограничения на возможные направления распространения волн в кристалле, можно считать, что $\varepsilon'(\vec{k}_i-\vec{k}_j)$ отлична от нуля только при $\vec{k}_i-\vec{k}_j=\vec{H}$, где $\vec{H}$ — какой-либо вектор обратной решетки.

Следовательно, можно положить $\varepsilon'(\vec{k}_i-\vec{k}_j)=\varepsilon_{ij}(\vec{r})\,\delta(\vec{k}_i-\vec{k}_j-\vec{H})$, тогда интегрирование в (4) выполняется непосредственно:

$$\vec{D}_i(\vec{r})=\varepsilon_{ij}(\vec{r})\vec{E}_j(\vec{r})=(\delta_{ij}+4\pi\chi_i(\vec{r}))\vec{E}_j(\vec{r}), \tag{5}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Подставляя (5) в (3), приходим к системе волновых уравнений, описывающей взаимодействующие дифракционные пучки:

$$\nabla^2\vec{E}_i(\vec{r})+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\varepsilon_{ij}(\vec{r})\vec{E}_j(\vec{r})=0. \tag{6}$$

Задача определения волнового поля в кристалле, таким образом, сводится к отысканию решения системы (6) при соответствующих граничных условиях.

Уравнения поля в двухволновом случае

Рассмотрим решение системы уравнений (6) на примере двухлучевой дифракции плоской волны, падающей под углом $\psi=\varphi+\theta_0$ на бесконечно протяженную плоско-параллельную пластину толщиной z_0. Вектор обратной решетки, соответствующий дифрагированной волне, может составлять произвольный угол φ с нормалью к поверхности кристалла. При этом возможны два случая: 1) если $\varphi<\theta_0$, где θ_0 — неисправленный на преломление угол Брэгга, то падающая и дифрагированная волны лежат по одну сторону пластины (отражение) и 2) если $\varphi>\theta_0$, то падающая и дифрагированная волны лежат с разных сторон пластины (прохождение). Введем систему координат так, чтобы ось x шла вдоль поверхности кристалла, а ось z — перпендикулярно ей. Тогда система уравнений (6) примет вид

$$\frac{\partial^2E_i}{\partial x^2}+\frac{\partial^2E_i}{\partial z^2}+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2E_i+4\pi\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\chi_{ii}E_i+4\pi\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\chi_{ij}E_j=0, \tag{7}$$

где $ij=1,\ 2;\ i\neq j$.

Система уравнений (7) эквивалентна дифференциальным уравнениям четвертого порядка для напряженностей E_1 и E_2, которые могут быть решены точно в случае постоянных χ_{ij}. Если же χ_{ij} являются функциями координат, то даже при самых простых зависимостях при решении этих уравнений возникают непреодолимые трудности[1]. Поэтому вместо прямого решения системы (7) мы воспользуемся методом [2, 3 и 8, 9], который может быть применен и в случае зависящих от координат величин χ_{ij}.

Решение системы волновых уравнений

Будем искать решение системы (7) в виде распространяющихся волн с переменными амплитудами. В выбранной нами системе координат имеем

$$E_1 = E_1(x, z)\, e^{i\frac{\omega}{c}\cos(\varphi+\theta_0)x}\, e^{i\frac{\omega}{c}\sin(\varphi+\theta_0)z},$$

$$E_2 = E_2(x, z)\, e^{i\left(\frac{\omega}{c}\right)'\cos(\varphi-\theta_0)x}\, e^{i\left(\frac{\omega}{c}\right)'\sin(\varphi-\theta_0)z}, \tag{8}$$

где $\left(\frac{\omega}{c}\right)' = \left(\frac{\omega}{c}\right)(1+\alpha_H)$, а α_H — величина, пропорциональна необходимому для выполнения условий дифракции отклонению от неисправленного угла Брэгга θ_0: $\alpha_H = -\Delta\sin 2\theta_0$. Будем считать, что излучение поляризовано полностью, причем вектор напряженности $\vec{E}$ перпендикулярен плоскости падения. Подставляя (8) в (7) и учитывая малость взаимодействия с отдельной атомной плоскостью (в силу чего имеет место неравенство $\partial^2E/\partial r^2 \ll k\partial E/\partial r$), вместо волновых уравнений (7) получим систему линейных дифференциальных уравнений с частными производными для амплитуд $E_i(x, z)$ и $E_2(x, z)$

$$\cos(\varphi+\theta_0)\frac{\partial E_1}{\partial x} + \sin(\varphi+\theta_0)\frac{\partial E_1}{\partial z} + a_{11}E_1 + a_{12}E_2 = 0, \tag{9'}$$

$$\cos(\varphi-\theta_0)\frac{\partial E_2}{\partial x} + \sin(\varphi-\theta_0)\frac{\partial E_2}{\partial z} + a_{21}E_1 + a_{22}E_2 = 0, \tag{9''}$$

где $a_{ij} = i\,\frac{\omega}{c}\,(2\pi\chi_{ij} + \alpha_{ij})$ и имеют смысл коэффициентов отражения, а матрица $\|\alpha_{ij}\|$ имеет вид $\|\alpha_{ij}\| = \begin{bmatrix} 0. & 0. \\ 0 & \alpha_H \end{bmatrix}$.

Исключая из (9′) E_2 и подставляя в (9″), получим уравнение второго порядка для амплитуды E_1

$$\cos(\varphi+\theta_0)\cos(\varphi-\theta_0)\frac{\partial^2E_1}{\partial x^2} + \sin 2\varphi\,\frac{\partial^2E_1}{\partial x\partial z} +$$
$$+ \sin(\varphi+\theta_0)\sin(\varphi-\theta_0)\frac{\partial^2E_1}{\partial z^2} + (a_{11}\cos(\varphi-\theta_0) +$$
$$+ a_{22}\cos(\varphi+\theta_0))\frac{\partial E_1}{\partial x} + (a_{11}\sin(\varphi-\theta_0) + a_{22}\sin(\varphi+\theta_0)) \times$$
$$\times \frac{\partial E_1}{\partial z} + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})E_1 = 0. \tag{10}$$

---

[1] Величины χ_{ij} могут оказаться функциями координат по двум причинам: если атомные плоскости несколько смещены или деформированы, тогда χ_{ij}, оставаясь постоянными, приобретают зависящие от координат фазовые множители; в другом предельном случае атомные плоскости могут быть расположены в идеальном порядке, но их рассеивающие способности меняются от точки к точке, тогда и χ_{ij} становятся зависящими от координат.

Общее решение уравнения (10) имеет вид

$$E_1(x, z) = (c_1' e^{\lambda_1 z} + c_2' e^{\lambda_2 z})(c_1'' e^{\mu_1 x + \nu_1 z} + c_2'' e^{\mu_2 x + \nu_2 z}), \tag{11}$$

где

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{\sin 2\theta_0}\left(a_{11}\cos(\varphi - \theta_0) - a_{22}\cos(\varphi + \theta_0)\right) \pm$$

$$\pm \sqrt{\frac{a_{12}a_{21} + m}{\sin(\varphi - \theta_0)\sin(\varphi + \theta_0)}},$$

$$\mu_{1,2} = \frac{1}{\sin 2\theta_0}\left(a_{11}\sin(\varphi - \theta_0) - a_{22}\sin(\varphi + \theta_0)\right) \pm$$

$$\pm 2\sqrt{m\sin(\varphi - \theta_0)\sin(\varphi + \theta_0)},$$

$$\nu_{1,2} = \pm\frac{\sin 2\varphi}{\sin 2\theta_0}\sqrt{\frac{m}{\sin(\varphi - \theta_0)\sin(\varphi + \theta_0)}},$$

m — постоянная разделения, которая должна быть найдена из граничных условий.

Граничное условие для амплитуды E_1 на верхней поверхности кристалла $z=0$ имеет вид $E_1(x, 0) = E_0$ и является общим и для случая отражения и для случая прохождения. Используя его, находим

$$m = \frac{1}{4}\frac{(a_{11}\sin(\varphi - \theta_0) - a_{22}\sin(\varphi + \theta_0))^2}{\sin(\varphi - \theta_0)\sin(\varphi + \theta_0)},$$

откуда получаем решение уравнения (10), зависящее только от координаты z:

$$E_1(z) = c_1 e^{\varkappa_1 z} + c_2 e^{\varkappa_2 z}, \tag{12'}$$

где

$$\varkappa_{1,2} = -\frac{1}{2}\frac{a_{11}\gamma_H + a_{22}\gamma_0}{\gamma_H\gamma_0} \pm \frac{1}{2\gamma_H\gamma_0}\sqrt{(a_{11}\gamma_H - a_{22}\gamma_0)^2 + 4\gamma_0\gamma_H a_{12}a_{21}},$$

$$\gamma_H = \sin(\varphi - \theta_0), \quad \gamma_0 = \sin(\varphi + \theta_0).$$

Подставляя (12′), например в (9′), находим решение для амплитуды E_2:

$$E_2(z) = -\frac{\gamma_0 H_1 + a_{11}}{a_{12}} c_1 e^{\varkappa_1 z} - \frac{\gamma_0\varkappa_2 + a_{11}}{a_{12}} c_2 e^{\varkappa_2 z}. \tag{12''}$$

Постоянные c_1 и c_2 в (12′) и (12″) определяются из граничных условий.

Дифракционное отражение

Если падающий и дифракционный лучи лежат по одну сторону пластины, то полная система граничных условий имеет вид

$$E_1(0) = E_0, \quad \gamma_H\frac{\partial E_2}{\partial z} + a_{22}E_2|_{z=0} = -a_{21}E_0,$$

$$E_2(Z_0) = 0, \quad \gamma_0\frac{\partial E}{\partial z} + a_{11}E_1|_{z=z_0} = 0.$$

Находя с помощью этих условий c_1 и c_2 в (12′) и (12″), получаем окончательные выражения для амплитуд E_1 и E_2

$$E_1(z) = E_0\frac{\eta\,\mathrm{sh}\,\frac{\xi}{2\gamma_H}(z - z_0) + \xi\,\mathrm{ch}\,\frac{\xi}{2\gamma_H}(z - z_0)}{\eta\,\mathrm{sh}\,\frac{\xi}{2\gamma_H}z_0 + \xi\,\mathrm{ch}\,\frac{\xi}{2\gamma_H}z_0}\,e^{-\left(\frac{\eta}{2\gamma_H} + \frac{a_{22}}{\gamma_H}\right)z},$$

$$E_2(z) = E_0 \frac{2a_{21} \operatorname{sh} \frac{\xi}{2\gamma_H}(z_0 - z)}{\eta \operatorname{sh} \frac{\xi}{2\gamma_H} z_0 + \xi \operatorname{ch} \frac{\xi}{2\gamma_H} Z_0} e^{-\left(\frac{\eta}{2\gamma_H} + \frac{a_{22}}{\gamma_H}\right)z}, \tag{13}$$

где

$$\eta = a_{11}\frac{\gamma_H}{\gamma_0} - a_{22}, \quad \xi = \sqrt{\eta^2 + 4\frac{\gamma_H}{\gamma_0} a_{12}a_{21}}.$$

Выражения (13) совместно с (8) полностью определяют направления распространения и величины волновых полей в каждой точке кристалла.

Для полубесконечного кристалла из (13) получаем

$$E_2(z) = E_0 \frac{2a_{21} e^{-\frac{\xi}{2\gamma_H}z}}{\eta + \xi} e^{-\left(\frac{\eta}{2\gamma_H} + \frac{a_{22}}{\gamma_H}\right)z}.$$

Отсюда находим коэффициент отражения:

$$R = \left| \frac{2a_{21}}{\eta + \sqrt{\eta^2 - 4\left|\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right| a_{12}a_{21}}} \right|^2, \tag{14}$$

где в случае отражения $\gamma_H/\gamma_0 < 0$. Если коэффициенты a_{12}, a_{21} — чисто мнимые величины, то, как видно из (14), в области $\eta^2 < 4|\gamma_H/\gamma_0| a_{12}a_{21}$ имеет место полное отражение энергии: $R = 1$. Середина области полного отражения расположена при $\eta = 0$. Используя это условие, с помощью (13) и (8) находим, что середина области полного отражения отличается от неисправленного угла Брэгга на величину

$$\Delta\theta_0 = -\frac{a_{11}}{2\sin 2\theta_0}\left(1 + |\gamma_H/\gamma_0|\right).$$

Дифракционное прохождение

Выпишем полную систему граничных условий для этого случая:

$$E_1(0) = E_0, \quad \gamma_0 \left.\frac{\partial E_1}{\partial z}\right|_{z=0} = -a_{11}E_0,$$

$$E_2(0) = 0, \quad \gamma_H \left.\frac{\partial E_2}{\partial z}\right|_{z=0} = -a_{21}E_0.$$

Используя эти граничные условия, из (12) находим

$$E_1(z) = E_0\left(\operatorname{ch}\frac{\xi}{2\gamma_H}z - \frac{\eta}{\xi}\operatorname{sh}\frac{\xi}{2\gamma_H}z\right) e^{\left(\frac{\eta}{2\gamma_H} - \frac{a_{22}}{\gamma_H}\right)z}, \tag{15'}$$

$$E_2(z) = E_0 \frac{\gamma_0}{\gamma_H} \frac{\eta^2 - \xi^2}{2a_{12}\xi} \operatorname{sh}\frac{\xi}{2\gamma_H} z\, e^{\left(\frac{\eta}{2\gamma_H} - \frac{a_{22}}{\gamma_H}\right)z}. \tag{15''}$$

Выражения (15) и (8) также позволяют определить направление распространения и величину волновых полей в каждой точке кристалла.

Так как в задаче дифракционного прохождения величина $\gamma_H/\gamma_0 > 0$, то анализ выражения (15″) показывает, что коэффициент пропускания

$$T(z) = \frac{2|a_{21}|^2}{\eta^2 + 4\left|\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right| a_{12}a_{21}} \left(1 - \cos\frac{\xi}{\gamma_H}z\right) \tag{16}$$

испытывает колебания, амплитуда которых, однако, не уменьшается с глубиной, если только $\mathrm{Re}\, a_{ij}=0$. При этом наибольшее значение $T=\frac{1}{2}(\gamma_0/\gamma_H)$ достигается при $\eta=0$. Из этого условия, а также из (15) и (8) находим, что максимум пропускания смещен на величину $\Delta\theta_0=(a_{11}/2\sin 2\theta_0)\times(1-\gamma_H/\gamma_0)$ от неисправленного угла Брэгга. В частности, если отражающие плоскости перпендикулярны к поверхности кристалла ($\varphi=\pi/2$), то $|\gamma_H/\gamma_0|=1$. Откуда следует, что отраженный луч распространяется точно в направлении, определяемом уравнением Вульфа—Брэгга.

В силу закона сохранения энергии интенсивность проходящего луча дополняется к интенсивности отраженного, определяемой выражением (16).

Проведенный анализ показывает, что решение задач о дифракции плоских волн на кристаллических пластинах, основанное на моделях нелокального взаимодействия, полностью совпадает с известными результатами работ [4—7].

В заключение отметим некоторые особенности при дифракции мёссбауэровского γ-излучения на ядрах с низколежащими резонансами [10—11].

Ядерный рассеивающий фактор в отсутствие сверхтонкого взаимодействия не зависит от угла дифракции. Поэтому при ядерном резонансном рассеянии ширина области полного отражения (в симметричном случае) зависит от угла дифракции как $\sin^{-1} 2\theta_0$ и не является монотонной функцией порядка отражения. При $\theta_0=45°$ ширина области полного отражения минимальна, при больших углах она снова увеличивается. То же самое и в задаче дифракционного прохождения. Нижний предел области полного отражения совпадает с неисправленным углом Брэгга θ_0 (для перпендикулярной поляризации).

Другая особенность состоит в том, что ядерный рассеивающий фактор f_r по величине существенно больше атомного фактора f_a. Например, при рассеянии на ядрах Fe^{57} и на атоме железа отношение $f_r/f_a(0)\approx 50$ [10].

Отсюда угловые ширины дифракционных лучей (а также поправка к углу Брэгга) очень велики и значительно превышают соответствующие величины при дифракции рентгеновских лучей на атомах.

Автор благодарит проф. В. И. Иверонову за полезное обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колпаков А. В. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 1, 1970.
2. Гинзбург В. Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. М., «Наука», 1967.
3. Бломберген Н. Нелинейная оптика. М., «Мир», 1966.
4. Darwin C. G. Phil. Mag., **27**, 315, 675, 1914.
5. Ewald P. P. Ann. d. Phys., **49**, 117, 1916.
6. Ewald P. P. Ann. d. Phys., **54**, 519, 1917.
7. Laue M. Ann. d. Phys., **23**, 705, 1935.
8. Takagi S. Acta Gryst., **15**, 1311, 1962.
9. Хирш П., Хови А и др. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М., «Мир», 1968.
10. Кузьмин Р. Н., Колпаков А. В. Сб. «Аппаратура и методы рентгеновского анализа», вып. 1. Л., 1967.
11. Trammel G. Phys. Rev., **126**, Nr. 2, 1065, 1962.

Поступила в редакцию
19.11 1969 г.

Кафедра
физики твердого тела