УДК 548.73

ФОРМУЛИРОВКА ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ НА ОСНОВЕ РЕКУРРЕНТНЫХ СООТНОШЕНИЙ

А. В. Колпаков, Ю. Н. Беляев

(кафедра физики твердого тела)

Впервые метод рекуррентных соотношений в теории дифракции рентгеновских лучей применил Дарвин [1], который решил задачу о двухлучевой динамической брэгговской дифракции в совершенном полубесконечном кристалле. Рекуррентные соотношения Дарвина устанавливают связь между амплитудами проходящих и отраженных волн от некоторой i-й атомной плоскости и соседних $(i-1)$-й и $(i+1)$-й атомных плоскостей (подробнее см. [2]).

При построении теории брэгговской дифракции в многослойных кристаллах [3] (эпитаксиальные пленки, сверхрешетки и др.) на основе метода характеристической матрицы нами были получены рекуррентные соотношения для амплитудных коэффициентов отражения R_N^g и пропускания T_N^g нового типа [5]:

$$R_N^g = \frac{r_{11}^g(1-r_1^{-g}R_{N-1}^g)+R_{N-1}^g t_1^g t_1^{-g}}{1-r_1^{-g}R_{N-1}^g}, \quad T_N^g = \frac{t_1^g T_{N-1}^g}{1-r_1^{-g}R_{N-1}^g}. \qquad (1a, б)$$

Они позволяют найти R_N^g и T_N^g для N-слойного кристалла, если известны амплитудные коэффициенты отражения и пропускания каждого слоя в отдельности. Для этого (1) следует последовательно применить к вычислению R_{N-1}^g, R_{N-2}^g и т. д. Мы положим соотношения типа (1) в основу формулировки динамической теории дифракции рентгеновских лучей для произвольных случаев Брэгга и Лауэ и получим точные выражения для R_N^g и T_N^g, из которых в качестве приближения для случая Брэгга следуют результаты Дарвина. Метод Дарвина является приближенным вариантом метода характеристической матрицы (общее изложение его см. в [4]). Как показано в [5], метод характеристической матрицы позволяет рассмотреть более широкий круг дифракционных задач.

Рассмотрим кристалл, состоящий из N одинаковых моноатомных слоев, параллельных поверхности кристалла и отстоящих друг от друга на расстояние a. Явный вид коэффициентов отражения и прохождения $r_i^{g,-g}=\rho, \bar{\rho}, t_i^{g,-g}=\tau, \bar{\tau}$ $(i=1, 2, ..., N)$ приведен, например, в [6].

1. Брэгговское отражение. Если разложить (1) в ряд по $|\rho\bar{R}_{N-1}^g| \ll 1$, то рассеяние на кристалле можно представить как рассеяние на двухслойной структуре из 1 и $N-1$ слоев (рис. 1). Множитель $\tau\bar{\tau}$ в R_N^g учитывает фазовый сдвиг волны, отраженной нижним слоем за счет двукратного прохождения через верхний слой; n-й член разложения в (1) представляет собой n-кратное перерассеяние излучения между слоями.

Из (1a) непосредственным вычислением легко получить следующие выражения для R_N^g при $N=0, 1, 2, ...$:

$$R_0^g = 0;\ R_1^g = \rho;\ R_2^g = \frac{2b\rho}{2b - \sqrt{\tau\bar{\tau}}};\ R_3^g = \frac{(4b^2-1)\rho}{(4b^2-1) - \sqrt{\tau\bar{\tau}}\,2b} \text{ и т. д.}$$

где $b = (1 + \tau\bar{\tau} - \rho\bar{\rho})/2\sqrt{\tau\bar{\tau}}$.

Введем многочлены $U_N(b)$ степени $N-1$ относительно b, которые согласно предыдущему определены следующим образом:

$$U_0(b) = 0; \quad U_1(b) = 1; \quad U_N(b) = 2bU_{N-1}(b) - U_{N-2}(b). \tag{2}$$

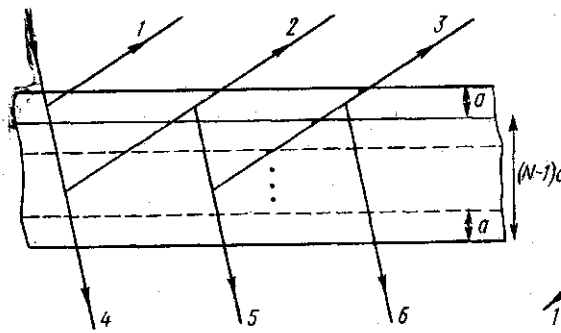

Рис. 1. Дифракция по Брэггу. Амплитуды дифрагированных волн: *1* — ρ; *2* — $\tau R_{N-1}^g\bar{\tau}$; *3* — $\tau R_{N-1}^g\bar{\rho}R_{N-1}^g\bar{\tau}$, ... Амплитуды прошедших волн: *4* — τT_{N-1}^g; *5* — $\tau R_{N-1}^g\bar{\rho}T_{N-1}^g$; *6* — $\tau R_{N-1}^g \times \bar{\rho}R_{N-1}^g\bar{\rho}T_{N-1}^g$, ...

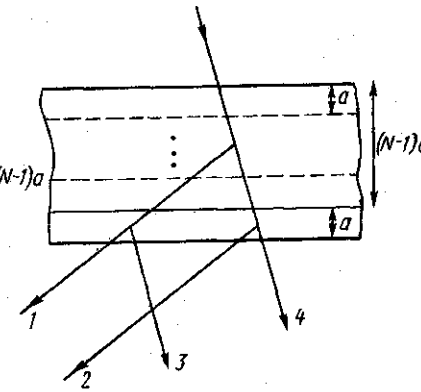

Рис. 2. Дифракция по Лауэ. Амплитуды дифрагированных волн: *1* — $R_{N-1}^g\bar{\tau}$, *2* — $T_{N-1}^g\rho$,... Амплитуды прошедших волн: *3* — $R_{N-1}^g\bar{\rho}$, *4* — $T_{N-1}^g\tau$,...

Эти многочлены являются полиномами Чебышева второго рода:

$$U_N(b) = (1-b^2)^{-1/2}\sin\left[(N+1)\arccos b\right]. \tag{3}$$

Нетрудно показать, что R_N^g и T_N^g имеют вид

$$R_N^g = \frac{U_N(b)\rho}{U_N(b) - \sqrt{\tau\bar{\tau}}\,U_{N-1}(b)},\quad T_N^g = \frac{\sqrt{\tau\bar{\tau}}}{U_N(b) - \sqrt{\tau\bar{\tau}}\,U_{N-1}(b)}. \tag{4}$$

Чтобы получить явную зависимость R_N^g и T_N^g от угла рассеяния, следует подставить явные выражения для величин ρ, $\bar{\rho}$, τ, $\bar{\tau}$ в (4). При этом, делая преобразования в (4) с точностью до членов второго порядка малости по фурье-компонентам поляризуемости среды и отклонению от точного угла Брэгга, получим известный результат теории Дарвина [2] для брэгговской дифракции на кристалле толщиной Na.

На основе рекуррентных соотношений (1) можно сразу получить точный результат для коэффициента отражения от полубесконечного кристалла R_∞^g, исходя из того, что добавление одного или нескольких слоев к полубесконечному кристаллу оставляет его полубесконечным и, следовательно, не меняет коэффициента отражения R_∞^g. Переходя к пределу в (1*a*) при $N \to \infty$, получаем квадратное уравнение относительно R_∞^g, решая которое, находим выражение для коэффициента отражения от полубесконечного кристалла:

$$R_\infty^g = \left(\frac{\rho}{\bar\rho}\right)^{1/2} (y \pm \sqrt{y^2-1}),\ y = \frac{1-\tau\bar\tau+\rho\bar\rho}{2\sqrt{\rho\bar\rho}},$$

где знак минус берется при $y<-1$ и знак плюс — при $y\geqslant-1$. В противоположность иногда высказываемому мнению [2] в области полного отражения, где $|y|<1$, решение для R_∞^g однозначно даже для среды без поглощения. Однозначное решение можно получить и на основе уравнений Такаги [5], не прибегая, как это обычно делается, к введению малого затухания [6]. Поскольку для полубесконечного кристалла обычные граничные условия не годятся, следует потребовать, чтобы $|R_\infty^g|^2 \leqslant 1$ во всем интервале углов, а при $|y|<1$ R_∞^g экспоненциально затухает, так как источников поля на бесконечности нет.

2. Лауэвское отражение. Рассмотрим кристалл из двух слоев, причем верхний в свою очередь состоит из N—1 слоев, подобных нижнему (см. рис. 2). Рекуррентные соотношения для R_N^g и T_N^g удобно записать и решать в матричном виде:

$$(R_N^g, T_N^g) = (R_{N-1}^g, T_{N-1}^g)\begin{pmatrix}\bar\tau & \bar\rho\\ \rho & \tau\end{pmatrix} = (\rho, \tau)\begin{pmatrix}\bar\tau & \bar\rho\\ \rho & \tau\end{pmatrix}^{N-1} =$$

$$= a^{N-1}(\rho, \tau)\begin{pmatrix}\frac{\bar\tau}{a}U_{N-2}(b) - U_{N-3}(b) & \frac{\bar\rho}{a}U_{N-2}(b)\\ \frac{\rho}{a}U_{N-2}(b) & \frac{\tau}{a}U_{N-2}(b) - U_{N-3}(b)\end{pmatrix}, \qquad (5)$$

где $a=(\tau\bar\tau-\rho\bar\rho)^{1/2}$; аргументом полиномов $U_N(b)$ теперь является $b=(\tau+\bar\tau)/(2a)$. С учетом рекуррентной формулы (2) для полиномов $U_N(b)$ получаем выражения для коэффициентов отражения R_N^g и пропускания T_N^g:

$$R_N^g = a^{N-1}\rho U_{N-1}(b),\ T_N^g = a^{N-1}\tau U_{N-1}(b) - a^N U_{N-2}(b). \qquad (6)$$

Использование точного результата (6) предполагает и использование точных значений ρ, $\bar\rho$, τ, $\bar\tau$. Обычно используемые выражения для ρ, $\bar\rho$, τ, $\bar\tau$ (см. [2, 6]) получены в рамках первого борновского приближения [4] и, следовательно, не предполагают точного выполнения закона сохранения интенсивности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Darwin C. G. Phil. Mag., 1914, 27, p. 315, 675. [2] Иверонова В. И., Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: Изд-во МГУ, 1978. [3] Belyaev Yu. N., Kolpakov A. V. Phys. Stat. Sol. (a), 1983, 76, p. 641. [4] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970, с. 92. [5] Колпаков А. В., Беляев Ю. Н. Деп. ВИНИТИ, № 3334-81. М.: 1981. [6] Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982.

Поступила в редакцию
29.08.84