УДК 548.732+548.734: 539.24+539.26/.27

ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ

А. В. Колпаков, И. Р. Прудников (кафедра физики твердого тела)

Проведено детальное исследование проблемы рентгеновской дифракции (РД) по Брэггу в одномерных сверхрешетках (СР). Дан обстоятельный обзор публикаций, посвященных этой проблеме. В рамках кинематического приближения получено общее решение задачи РД в легированных и композиционных СР с произвольным законом модуляции. Обсуждается влияние вида модулирующей функции на дифракционный спектр. Для решения задачи динамической РД введено понятие собственных решений уравнений Такаги. Это позволяло эффективно использовать при исследовании рассматриваемой проблемы методы теории возмущений и медленно меняющихся амплитуд и дать обстоятельный анализ полученных приближенных решений. На основе рекуррентных соотношений нового типа получено общее решение проблемы РД в СР и дано его обсуждение в различных приближениях. Приводится точное решение для модели динамической РД в СР с прямоугольной модуляцией. Установлена связь между результатами, полученными при помощи указанных методов, и результатами других авторов. Кратко обсуждается влияние поглощения.

Введение

Твердотельные сверхрешетки (СР) [1] из полупроводниковых материалов являются одним из наиболее важных и перспективных объектов современной микроэлектроники. Развитие теории рентгеновской дифракции (РД) в твердотельных СР необходимо как в теоретическом плане, так и в прикладном — для разработки методов неразрушающего контроля их строения.

До середины 70-х годов теория РД в СР развивалась в рамках кинематического приближения [2—18] на основе дискретного суммирования рассеянных каждым атомным периодом волн. При этом основное внимание было сосредоточено на выборе модулирующей функции, которая задает периодическое изменение параметра решетки кристалла в одном из направлений (в некоторых случаях с одновременной модуляцией его рассеивающей способности).

Модель гармонической (синусоидальной) модуляции периода решетки была введена в работах [2, 3]. В работах [4, 5] вычислен комплексный коэффициент отражения для случая одновременной модуляции периода решетки и электронной плотности по гармоническому закону. В работах [6-8] функция модуляции задавалась в более сложном виде, но сделанные при расчете приближения привели к результатам, аналогичным случаю гармонической модели [3-5]. Решение задачи РД на гармонических СР [2-5] послужило основой для анализа задач РД на других моделях СР. С целью интерпретации экспериментальных данных рассматривались квазипериодическая [9], двухфононная [10], треугольная [11], прямоугольная [11, 12] (в том числе прямоугольная с монотонно меняющейся амплитудой [13]) и трапециевидная [14] модели модуляции, а также наиболее общая модель, в которой функция модуляции задавалась в виде суммы бесконечного числа гармоник [15-17]. Наряду с РД в твердотельных СР исследовалась так-же РД на фононах или ультразвуковых СР [18]. Анализ экспериментальных дифракционных спектров в рамках кинематического приближения [10, 16, 17, 19] показал, что упомянутые выше простейшие моде-

ли модуляции только приблизительно описывают строение одномерных СР и подход, основанный на решении задач РД методом дискретного суммирования, в принципе не позволяет дать количественное описание особенностей дифракционного спектра. Детальное изучение структуры СР требует дальнейшего развития теории дифракции на основе более общего динамического подхода.

Основным современным методом исследования динамической РД является метод медленно меняющихся амплитуд поля (уравнения Такаги) [20]. Подобный подход применялся в работе [21], в которой впервые была поставлена и рассмотрена задача двухлучевой РД в СР. В [21] показано, что при условии $T \simeq \Lambda$ (T — период СР, Λ — толщина первичной экстинкции в случае РД по Брэггу или период маятникового решения в случае РД по Лауэ) имеет место явление параметрического резонанса в преобразовании волновых полей в кристалле.

Для современной микроэлектроники основной практический интерес представляет решение задачи динамической РД на СР в схеме Брэгга. поскольку эта схема используется в двукристальных спектрометрах при исследовании строения СР. С другой стороны, в настоящее время имеется ряд работ по динамической РД в СР, в которых преимущественно рассматривается случай дифракции по Лауэ [13, 21-29]. Детальный анализ задачи РД по Лауэ в СР, порожденной ультразвуко-вой волной в кристалле, содержится в работах [22-26]. В частности, в работах [22-24] проведено экспериментальное и теоретическое исследование РД на ультразвуковых сверхрешетках при условии параметрического резонанса [21], которое можно записать в виде $\lambda_s \simeq \Lambda$, где ультразвука (рентгеноакустический λ_s — длина волны резонанс). Близкая к рассмотренной в работах [22-26] проблема влияния ультразвука на дифракцию нейтронов изучена в работах [30, 31]. Полученные в работах [22-26] результаты могут быть использованы для создания новых методов исследования строения кристаллов и формирования рентгеновских полей заданной конфигурации.

Проблема динамической РД по Брэггу в СР представляет значительные математические трудности, и количество публикаций, посвященных этой проблеме, относительно невелико [13, 27—29, 32, 33].

В работах [13, 32] методом фазовых диаграмм проведено исследование решения уравнений Такаги для гармонической СР малой амплитуды и найдены положения и угловые ширины сателлитов первого [13, 32] и второго [13] порядков.

В работах [27, 28, 33] рассматривается задача РД на акустической СР. В [27, 28] методом теории возмущений получено решение возмущенной задачи для случая рентгеноакустического резонанса и определено значение волнового вектора ультразвука, отвечающее резонансному взаимодействию рентгеновских лучей с акустической СР. В [33] на основе формализма дисперсионных поверхностей в обратном пространстве исследована структура кривой дифракционного отражения и получены выражения, описывающие положения и угловые ширины сателлитов первого порядка.

Анализ задачи РД в СР с произвольным периодическим законом модуляции на основе рекуррентных соотношений нового типа [34] содержится в работе [29]. В этой работе получены точные аналитические выражения для комплексного коэффициента отражения и пропускания СР и исследована их структура в пределе $T \ll \Lambda$, когда рассеяние на каждом периоде СР описывается кинематической теорией.

Методы исследования проблемы РД по Брэггу в СР, используемые в перечисленных выше работах [13, 27-29, 32, 33], приводят к резуль-

татам настолько сложного вида, что их анализ оказывается практически невозможным. Это обстоятельство указывает на физическую неадекватность развитых в [13, 27—29, 32, 33] подходов структуре рассматриваемой задачи и заставляет думать, что необходимы поиски новых подходов. Исходя из этих соображений, в работах [35, 36] мы ввели понятие собственных решений уравнений Такаги, на основе которого развит новый подход к решению задачи динамической РД по Брэггу в СР.

§ 1. Теория кинематической дифракции

Рассмотрим задачу двухволновой РД по Брэггу на кристалле с модуляцией межплоскостного расстояния и электронной плотности вдоль оси z, направленной перпендикулярно его входной поверхности. Будем полагать, что вариации периода решетки b(z) (легированная СР) и фурье-компонент поляризуемости кристалла $\chi^{0, \pm g}(z)$ (композиционная СР) имеют следующий вид:

$$b(z) = b(1 + \varepsilon F(z)), \tag{1}$$

$$\chi^{0,\pm g}(z) = \chi^{0,\pm g} (1 + \delta F(z)), \tag{2}$$

где b и $\chi^{0,\pm g}$ период решетки и фурье-компоненты поляризуемости неискаженного кристалла, є и δ — амплитуды модуляции параметра решетки и электронной плотности, F(z) — периодическая функция модуляции с периодом T, где T — период СР.

Основным современным методом решения задач РД на СР с произвольным законом модуляции является метод медленно меняющихся амплитуд поля (уравнения Такаги). Система уравнений Такаги, описывающая дифракцию на кристалле с одномерным полем искажений, имеет вид [37]

$$\begin{pmatrix}
-i \frac{d\mathscr{D}^{g}}{dz} = \frac{\chi^{0}(z)k}{d\gamma^{0}} \mathscr{D}^{0} + \frac{\chi^{-g}(z)Pk}{2\gamma^{0}} \mathscr{D}^{g}, \\
i \frac{d\mathscr{D}^{g}}{dz} = \frac{\chi^{g}(z)Pk}{2|\gamma^{g}|} \mathscr{D}^{0} + \frac{(\chi^{0}(z)-\alpha)k}{2|\gamma^{g}|} \mathscr{D}^{g} - \frac{d}{dz} (\mathbf{gu}(z))\mathscr{D}^{g},
\end{cases}$$
(3)

где $k=2\pi/\lambda$ — волновой вектор падающего на кристалл излучения; $\gamma^0 = \sin(\vartheta_0 + \varphi), \ \gamma^g = \sin(\vartheta_0 - \varphi)$ — направляющие косинусы волновых векторов пропущенной (0) и рассеянной (g) волн; φ — угол между входной поверхностью кристалла и атомными плоскостями, находящимися в отражающем положении; P — поляризационный множитель; $\alpha = -2\sin 2\vartheta_0 \Delta \vartheta$ — аккомодация, пропорциональная отстройке $\Delta \vartheta = -\vartheta - \vartheta_0$ от неисправленного на преломление угла Брэгга ϑ_0 ; **g** — век-

тор обратной решетки;
$$\mathbf{u}(z) = \mathbf{n}b^{-1} \int_{0}^{z} (b(z') - b) dz' - функция смеще-$$

ния, характеризующая отклонение рассеивающих атомов от их положений в совершенном кристалле, где n — единичный вектор внутренней нормали к входной поверхности кристалла. Используя (1), запишем выражение для u(z) в виде

$$\mathbf{u}(z) = \operatorname{ne} \int_{0}^{z} F(z') dz'.$$
(4)

Из (4) следует, что если среднее по периоду *T* значение модулирующей функции $\mathscr{F}_{e} = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} F(z) dz$ равно нулю, то функция смещения $\mathbf{u}(z)$ является периодической функцией с периодом *T*. Систему уравне-

ний (3) необходимо дополнить граничными условиями

$$\mathcal{D}^{\mathbf{0}}(0) = 1; \quad \mathcal{D}^{\mathbf{g}}(l) = 0, \tag{5}$$

где *l* — толщина кристалла.

Исследуем решение системы уравнений (3) в кинематическом приближении теории дифракции. В кинематическом пределе в (3) формально полагаем $\chi^{-g}=0$ [38]. В таком случае, интегрируя систему уравнений (3) с учетом граничных условий (5), получаем следующее выражение для дифракционного поля на поверхности кристалла z=0:

$$\mathscr{D}^{g}(0) = \frac{i\gamma^{g}Fh}{2|\chi^{g}|} \int_{0}^{t} (1 + \delta F(z)) \exp\left\{\frac{ik\alpha_{B}}{2|\gamma^{g}|} z - ik_{s}x\mathcal{J}(z)\right\} dz,$$
(6a)

где

 $\alpha_B = 2\sin 2\vartheta_0 \Delta\vartheta + \chi^0 \left(1 + |\gamma^g| / \gamma^0\right) \tag{66}$

— брэгговская аккомодация [38]; $k_s = 2\pi/T$ — волновой вектор СР; $x = gn \frac{\epsilon}{k_s} - \frac{\chi^0 \delta k}{2k_s} \left(\frac{1}{|\gamma^{\mathcal{G}}|} + \frac{1}{\gamma^0} \right); \quad \mathcal{J}(z) = \int_{0}^{z} F(z') dz'.$ Функцию модуляции F(z) представим в виде $F(z) = \mathcal{F}_0 + \tilde{F}(z)$, где \mathcal{F}_0 — среднее по пе-

ции F(z) представим в виде $F(z) = \mathcal{F}_0 + \tilde{F}(z)$, где \mathcal{F}_0 — среднее по периоду СР T значение модулирующей функции F(z), $\tilde{F}(z) = F(z) - \mathcal{F}_0$. С учетом этого представления выражение для $\mathcal{J}(z)$ примет вид

$$\mathscr{J}(z) = \mathscr{F}_0 z + \widetilde{\mathscr{J}}(z), \tag{6B}$$

где $\tilde{\mathfrak{T}}(z) = \int_{0}^{z} \tilde{F(z')} dz'$ — периодическая функция с периодом *T*. Пе-

риодические функции F(z) и $\exp\{-ik_s x \widetilde{\mathscr{T}}(z)\}$, фигурирующие в (6а), разложим в ряд Фурье:

$$F(z) = \sum_{p=-M}^{M} \mathscr{F}_p \exp\{-ipk_s z\},\tag{7a}$$

$$\exp\left\{-ik_{s}x\widetilde{\mathcal{J}}(z)\right\} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Psi_{m} \exp\left\{-imk_{s}z\right\},\tag{76}$$

где M — число фурье-гармоник в разложении (7а), \mathscr{F}_p и Ψ_m — амплитуды фурье-гармоник функций F(z) и $\exp\{-ik_s x \widetilde{\mathcal{J}}(z)\}$:

$$\mathscr{F}_{p} = \frac{1}{T} \int_{0}^{1} F(z) \exp\left\{i\rho k_{s} z\right\} dz, \tag{7B}$$

$$\Psi_m = \frac{1}{T} \int_{9}^{T} \exp\left\{-ik_s x \widetilde{\mathcal{Y}}(z)\right\} \exp\left\{imk_s z\right\} dz.$$
(7r)

Подставляя (7а, б) в (6а) и проводя интегрирование по координате z, получаем следующее выражение для интенсивности рассеянного излучения на поверхности кристалла z=0:

$$|\mathcal{D}^{g}(0)|^{2} = \left(\frac{|\chi^{g}| Pkl}{2|\gamma^{g}|}\right)^{2} \left|\sum_{m=-\infty}^{\infty} A_{m} \exp\left\{i\frac{\varphi_{m}}{2}l\right\} \frac{\sin\left(\varphi_{m}l/2\right)}{\varphi_{m}l/2}\right|^{2},$$
(8a)

где

$$A_m = \Psi_m + \delta \sum_{p=-M}^{M} \mathscr{F}_p \Psi_{m-p}, \tag{86}$$

$$\varphi_m = \frac{k\alpha_B}{2|\gamma^{\mathcal{E}}|} - (m + x\mathcal{F}_0)k_s. \tag{8B}$$



Рис. 1. Расчетный спектр интенсивности *I* отраженното излучения от СР на основе $Al_xGa_{1-x}As$ (кинематическое приближение): толщина кристалла l=0,4 мкм; излучение Cu K_a; отражение (400); температурный фактор 0,95; период модуляции T=400Å; амплитуда модуляции $\varepsilon=0,0205$ (*a*); 0,0100 (*b*); 0,0060 (*b*); 0,0020 (*c*)

Анализ выражения (8а) показывает, что спектр отраженного излучения имеет сателлитную структуру (рис. 1). Угловое положение $\Delta \vartheta_m$ сателлита *m*-го порядка определяется из условия $\varphi_m=0$. При $\varphi_m=0$ из (8в) находим, что

$$\Delta \vartheta_m = (m + x \mathcal{F}_0) - \frac{\lambda |\gamma^g|}{T \sin 2\vartheta_0} - \frac{\chi^0 (1 + |\gamma^g| / \gamma^0)}{2 \sin 2\vartheta_0}.$$
(9)

Сателлиты с равными по модулю номерами расположены симметрично относительно главного максимума m=0. Наличие у функции модуляции F(z) среднего значения \mathcal{F}_0 приводит к смещению всех максимумов на величину, пропорциональную \mathcal{F}_0 . Расстояние между соседними сателлитами

$$\Delta \vartheta_{m+1} - \Delta \vartheta_m = \frac{\lambda |\gamma^g|}{T \sin 2\vartheta_0} \tag{10}$$

не зависит от m — спектр эквидистантен. Все максимумы имеют одинаковую форму и угловую ширину $\delta \vartheta$, которая определяется выражением

$$\delta \theta = \frac{2\lambda |\gamma^{g}|}{t \sin 2\theta_{0}}.$$
(11)

Интенсивность *m*-го сателлита пропорциональна величине $|A_m|^2$. Из (86) следует, что $|A_{-m}| \neq |A_m|$. Поэтому интенсивности сателлитов с равными по модулю номерами различны. В частном случае гармонической модуляции $F(z) = \cos(k_s z)$ из (86) с учетом (7в, г) получаем, что $A_m = J_m(x) (1 + m\delta/x)$, где $J_m(x)$ — функция Бесселя первого рода порядка *m*. Таким образом, конкретный вид модулирующей функции F(z), определяющий модель СР (гармоническая, треугольная, прямоугольная и т. д.), не влияет на положения сателлитов (9), расстояния между ними (10) и ширины максимумов (11), а влияет только на интенсивности сателлитов, пропорциональные величине $|A_m|^2$.

При учете модуляции только межплоскостного расстояния (8=0, ε≠0) из (9) находим, что положения всех максимумов сдвигаются на величину $\delta \vartheta' = \frac{\chi^0 \delta}{2 \sin 2 \vartheta_0} \left(1 + \frac{|\gamma^g|}{\gamma^0} \right) \mathscr{F}_0$ по сравнению с их положениями в случае δ, ε≠0. При этом форма максимумов, их ширины (11) и расстояния между максимумами (10) остаются неизменными. Из (8а, б) получаем, что при $\delta = 0$ интенсивность *m*-го сателлита, пропорциональна величине $||\Psi_m||^2$ где Ψ_m — амплитуда *m*-й фурье-гармоники (7г) (при $\delta = 0$ параметр $x = gn \varepsilon/k_s$). Анализ выражения (7г) при $\delta = 0$ показывает, что в пределе малой амплитуды модуляции | gne/k_s | «1 выполняется равенство $|\Psi_{-m}| = |\Psi_m|$ и интенсивности сателлитов с равными по модулю номерами равны. В случае достаточно большой амплитуды модуляции $|\mathbf{gn} \varepsilon/k_s| \ge 1$ равенство $|\Psi_{-m}| = |\Psi_m|$ имеет место лишь для некоторых частных моделей СР, например для гармонической СР. Если среднее по периоду Т значение модулирующей функции ${\mathscr F}_0=0,$ то из (4), (6в) и (7г) при $\delta=0$ следует, что Ψ_m является амплитудой *m*-й фурье-гармоники периодической функции $\exp{\{-igu(z)\}}$. Таким образом, при условии $\mathcal{F}_0=0, \ \delta=0$ спектр интенсивности рассеянного излучения, определяемый выражением (8а), представляет собой фурье-спектр функции $\exp\{-igu(z)\}$.

Эта функция описывает дополнительные (по сравнению с идеальным кристаллом) сдвиги фаз, которые приобретают поля в искаженном кристалле [37]. Для гармонической СР $\Psi_m = J_m(gn \epsilon/k_s)$.

Обратимся к вычислению интегральной интенсивности рассеянного излучения. Подставляя (6а) в выражение для интегральной интенсивности $I_{int} = \int_{0}^{\infty} |\mathcal{D}^{g}(0)|^{2} d\Delta \vartheta$ и проводя интегрирование по углу отстройки Дд, получаем

$$I_{int} = \frac{|\chi^{g}|^{2} P^{2} k l}{4 |\gamma^{g}| \sin 2\vartheta_{0}} (1 + 2\delta \mathcal{F}_{l} + \delta^{2} \mathcal{F}_{l}^{(2)}),$$
(12)

где
$$\mathcal{F}_l = \frac{1}{l} \int_0^l F(z) dz$$
 среднее по толщине кристалла l значение

модулирующей функции; $\mathcal{F}_{l}^{(2)} = \frac{1}{l} \int_{0}^{t} F^{2}(z) dz$ - среднее по толщине

кристалла значение квадрата модулирующей функции. Выражение (12) показывает, что величина lint зависит только от амплитуды модуляции электронной плотности δ и не зависит от амплитуды модуляции параметра решетки ε. При δ=0 выражение (12) совпадает с выражением для интегральной интенсивности в случае неискаженного кристалла толщины *l* [37].

Полученные в настоящем разделе результаты, касающиеся структуры дифракционного спектра от кинематического кристалла со СР, совпадают с известными результатами, полученными методом дискретного суммирования рассеянных на СР волн [39].

§ 2. Теория динамической дифракции

2.1. Представление собственных решений уравнений Такаги

Рассмотрим задачу динамической РД по Брэггу в легированной СР, т. е. будем полагать, что кристалл характеризуется модуляцией межплоскостного расстояния по закону (1), а модуляцией электронной плотности (2) можно пренебречь (8=0). Система уравнений Такаги имеет вид (3). Приведем систему уравнений (3) при $\delta = 0$ к более симметричному виду с помощью экспоненциального преобразования

$$\mathcal{Z}^{0}(z) = D^{0}(z) \exp\left\{-ik\left(\frac{\alpha_{B}}{4|\gamma^{g}|} - \frac{\chi^{0}}{2\gamma^{0}}\right)z\right\};$$

$$\mathcal{D}^{g}(z) = \left(\frac{\chi^{g}\gamma^{0}}{\chi^{-g}|\gamma^{g}|}\right)^{1/2} D^{g}(z) \exp\left\{-ik\left(\frac{\alpha_{B}}{4|\gamma^{g}|} - \frac{\chi^{0}}{2\gamma^{0}}\right)z\right\}.$$

где а_в — брэгговская аккомодация (66). Поля D^{0,g}(z) удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} -i \frac{dD^{0}}{dz} = \eta_{B} \Lambda^{-1} D^{0} + \Lambda^{-1} D^{g}, \\ i \frac{dD^{g}}{dz} = \Lambda^{-1} D^{0} + \eta_{B} \Lambda^{-1} D^{g} - \frac{d}{dz} (gu(z)) D^{g} \end{cases}$$
(13a)

с граничными условиями

$$D^{0}(0) = 1; \ D^{g}(l) = 0.$$
(136)

В (13а) введены следующие обозначения:

[1]

(2)

+(1)

0, a

$$\Lambda = \frac{2}{k} \left(\frac{\gamma^{0} |\gamma^{g}|}{P^{2} \chi^{g} \chi^{-g}} \right)^{1/2}; \ \eta_{B} = \frac{\alpha_{B}}{2 \left(P^{2} \chi^{g} \chi^{-g} |\gamma^{g}| / \gamma^{0} \right)^{1/2}}.$$
(14)

При отсутствии поглощения в кристалле параметры (14) являются действительными и имеют непосредственный физический смысл: Λ — толщина первичной экстинкции, η_{B} — нормированная угловая отстройка от неисправленного на преломление угла Брэгга ϑ_0 [38].

Исследуем сначала невозмущенную задачу u(z)=0. В отсутствие возмущения решение системы (13a) имеет вид

$$D^{g}(z) = \Phi_{1}(z) + \Phi_{2}(z),$$

$$D^{g}(z) = -\left(\eta_{B} - \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right) \Phi_{1}(z) - \left(\eta_{B} + \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right) \Phi_{2}(z),$$
(15a)

где $\Phi_{1,2}(z) = f_{1,2}^{(0)} \exp\left\{\pm i \sqrt{\eta_B^2 - 1} \Lambda^{-1} z\right\}$ (верхний знак относится к функции $\Phi_1(z)$, нижний — к функции $\Phi_2(z)$); $f_{1,2}^{(0)}$ — постоянные, определяемые из граничных условий (136):

$$f_{1,2}^{(0)} = \frac{i\left(\sqrt{\eta_B^2 - 1} \pm \eta_B}\right) \exp\left\{\mp il\Lambda^{-1}\sqrt{\eta_B^2 - 1}\right\}}{2\left(\eta_B \sin\left(l\Lambda^{-1}\sqrt{\eta_B^2 - 1}\right) + i\sqrt{\eta_B^2 - 1} \cos\left(l\Lambda^{-1}\sqrt{\eta_B^2 - 1}\right)\right)}$$
(155)

Верхние знаки в (15б) относятся к постоянной $f_1^{(0)}$, нижние — к постоянной $f_2^{(0)}$. Выражения (15а) показывают, что поля $D^{0,g}(z)$ представляют собой комбинацию двух волн (для σ - или π -поляризации),



Рис. 2. Дисперсионная поверхность при симметричной ($\gamma^0 = |\gamma^g|$) дифракции по Брэггу на идеальном кристалле ($\mathbf{u}(z)=0$): La и Lo — точки Лауэ и Лоренца соответственно; SS — входная поверхность кристалла; п — единичный вектор внутренней нормали к входной поверхности кристалла; mm — след отражающей атомной плоскости; а и β — ветви дисперсионной поверхности; $\mathbf{k}_{0,g,\alpha}^{(1)}$ и $\mathbf{k}_{0,g,\alpha}^{(2)}$ — волновые векторы волн в кристалле, которые относятся к центрам распространения A_1 и A_2 соответственно. Положения центров распространения A_1 , A_2 на дисперсионной поверхности отвечают направлению волнового вектора к, падающего на кристалл излучения [38]

летворяют функции $\Phi_{1,2}(z)$, подставим выражения (15а) в систему уравнений (13а) с u(z) = 0. В результате преобразований получаем [36]

$$\frac{d\Phi_1}{dz} = i \Lambda^{-1} \sqrt{\eta_B^2 - 1} \Phi_1,$$

$$\frac{d\Phi_2}{dz} = -i \Lambda^{-1} \sqrt{\eta_B^2 - 1} \Phi_2$$
(16)



La

с начальными условиями $\Phi_{1,2}(0) = f_{1,2}^{(0)}$. Из (16) следует, что в отсутствие возмущения уравнения Такаги (13а) сводятся к системе двух несвязанных уравнений для функций $\Phi_{1,2}(z)$. Каждое из уравнений в (16) описывает группу волн (поле), относящихся к одному из центров распространения $A_{1,2}$ в обратном пространстве (см. рис. 2). Функции $\Phi_{1,2}(z)$ будем называть собственными решениями уравнений Такаги, а функции $f_{1,2}^{(0)}$ — амплигудами собственных решений.

Проанализируем теперь возмущенную задачу $\mathbf{u}(z) \neq 0$. Будем считать, что в присутствии возмущения поля $D^{0,g}(z)$ имеют вид (15а), где собственные решения $\Phi_{1,2}(z)$ — неизвестные функции. Найдем уравнения, которым удовлетворяют собственные решения $\Phi_{1,2}(z)$. Подставляя выражения (15а) в систему (13а) с $\mathbf{u}(z) \neq 0$, после преобразований получаем [36]

$$\frac{d\Phi_{1}}{dz} = i\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1} \Phi_{1} - i\frac{d}{dz} (gu(z)) \{V_{1}\Phi_{1} + V_{2}\Phi_{2}\},\$$

$$\frac{d\Phi_{2}}{dz} = -i\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1} \Phi_{2} + i\frac{d}{dz} (gu(z)) \{V_{1}\Phi_{1} + V_{2}\Phi_{2}\},$$
(17a)

где

$$V_{1} = \frac{\eta_{B} - \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}}{2\sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}}, \quad V_{2} = \frac{\eta_{B} + \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}}{2\sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}}$$
(176)

— коэффициенты, зависящие от угловой отстройки *η*_в. Систему (17а) следует дополнить граничными условиями

$$\Phi_{1}(0) + \Phi_{2}(0) = 1,$$

$$\left(\eta_{B} - \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right) \Phi_{1}(l) + \left(\eta_{B_{l}} + \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right) \Phi_{2}(l) = 0.$$

Система уравнений (17а) является точной. Она эквивалентна исходной системе уравнений Такаги (13а) с $u(z) \neq 0$. Из (17а) следует, что наличие в кристалле возмущения u(z) приводит к взаимодействию центров распространения $A_{1,2}$ в обратном пространстве и перемешиванию волн, которые характеризуются этими центрами (см. рис. 2). Математически это выражается в том, что уравнения (17а) при $u(z) \neq 0$ связаны друг с другом. В отличие от дифракции по Лауэ [22, 23] при дифракции по Брэггу возмушение перемешивает волны, которые относятся к центрам распространения, расположенным на одной ветви дисперсионной поверхности — внутризонные переходы. Внутризонные переходы также имеют место при рассеянии рентгеновских лучей в схеме Брэгга на акустической СР — продольной ультразвуковой волне с волновым вектором $k_s [!n (n - единичный вектор внутренней нормали к входной поверхности кристалла) [33].$

Перейдем в (17а) к новым функциям $f_{1,2}(z)$ при помощи экспоненциального преобразования

$$\Phi_{1}(z) = f_{1}(z) \exp\left\{i \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1} \Lambda^{-1}z\right\};$$

$$\Phi_{2}(z) = f_{2}(z) \exp\left\{-i \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1} \Lambda^{-1}z\right\}.$$
(18)

Подставляя (18) в (17а), получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} \frac{df_{1}}{dz} = -i \frac{d}{dz} (\mathbf{gu}(z)) \left[V_{1}f_{1} + V_{2}f_{2} \exp\left\{ -i \cdot 2 \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1} \Lambda^{-1} z \right\} \right], \\ \frac{df_{2}}{dz} = i \frac{d}{dz} (\mathbf{gu}(z)) \left[V_{1}f_{1} \exp\left\{ i \cdot 2 \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1} \Lambda^{-1} z \right\} + V_{2}f_{2} \right]$$
(19a)

с граничными условиями

$$f_{1}(0) + f_{2}(0) = 1;$$

$$\left(\eta_{B} - \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right) f_{1}(l) \exp\left\{il \Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right\} + \left(\eta_{B} + \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right) f_{2}(l) \exp\left\{-il \Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}\right\} = 0.$$
(196)

Выражения (18) показывают, что амплитуды собственных решений $f_{1,2}(z)$, которые в отсутствие возмущения являются постоянными величинами (15б), зависят теперь от координаты z. Это означает, что возмущение модулирует амплитуды волн в кристалле. При u(z)=0 система (17а) переходит в систему (16).

В работе [36] система уравнений (17а) получена на основе строгой математической теории.

2.2. Теория возмущений

Решение системы уравнений (19а) с периодическим возмущением $\mathbf{u}(z) = \mathbf{u}(z+T)$ можно найти только при помощи приближенных методов. Будем искать решение этой системы уравнений при помощи метода теории возмущений (TB) [40]. Рассмотрим сначала наиболее простой случай гармонического закона модуляции $F(z) = \cos(k_s z)$ периода решетки b(z) (1). Тогда возмущение (4) $\mathbf{u}(z) = \mathbf{a} \sin(k_s z)$, где $\mathbf{a} = \mathbf{n} e/k_s$ амплитуда возмущения. Положим, что поглощением в кристалле можно пренебречь. Согласно методу TB считаем, что амплитуда возмущения **a** достаточно мала (точный критерий малости амплитуды будет установлен ниже). В таком случае решения возмущенной задачи $f_{1,2}(z)$ близки к решениям невозмущенной задачи (156). Соответственно ищем функции $f_{1,2}(z)$ в виде ряда

$$f_i(z) = f_i^{(0)} + f_i^{(1)} + f_i^{(2)} + \ldots = \sum_{s=0}^{\infty} f_i^{(s)}, \quad i = 1, 2,$$
(20)

в котором s-е слагаемое пропорционально s-й степени амплитуды возмущения. Ограничимся первым порядком ТВ. Подставляя ряды (20) с s=0, 1 в систему (19а) с $\mathbf{u}(z) = \mathbf{a} \sin(k_s z)$, приравнивая члены первого порядка малости по **a** и интегрируя систему уравнений для функций $f_{1,2}^{(1)}(z)$, получаем следующий результат [36]:

$$f_{1,2}^{(1)}(z) = \mp i\zeta V_{1,2} f_{1,2}^{(0)} \frac{\sin(k,z)}{k_s} \mp i\zeta V_{2,1} f_{2,1}^{(0)} \left[\exp\left\{ \pm i \frac{\Delta^-}{2} z \right\} \frac{\sin(\Delta^- z/2)}{\Delta^-} + \exp\left\{ \mp i \frac{\Delta^+}{2} z \right\} \frac{\sin(\Delta^+ z/2)}{\Delta^+} \right] + C_{1,2},$$
(21a)

где $C_{1,2}$ — постоянные, определяемые из граничных условий (196); $\zeta = = \operatorname{gak}_s$ — параметр, пропорциональный амплитуде возмущения а;

$$\Delta^{-} = k_{s} - 2\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}; \ \Delta^{+} = k_{s} + 2\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B}^{2} - 1}.$$
(216)

Верхние знаки в (21а) относятся к функции $f_1^{(1)}(z)$, нижние — к функции $f_2^{(1)}(z)$.

Выражения (21а), описывающие поправки $f_{1,2}^{(1)}(z)$ к невозмущенным амплитудам собственных решений (15б), имеют резонансный характер. Условие $\Delta^-=0$, или

$$2\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{B1}^2 - 1} = k_s, \tag{22}$$

определяет два значения угловой отстройки ± | η_{B1} |, отвечающих резонансу при данном значении волнового вектора возмущения ks. Равенство (22) перепишем в виде $2\omega_0 = k_s$, где $\omega_0 = \Lambda^{-1} \sqrt{\eta_{et}^2 - 1}$ — частота осцилляций вдоль оси г полей (15а) в невозмущенном кристалле $(\mathbf{u}(z)=0)$ при угловых отстройках $\pm |\eta_{B_1}|, |\eta_{B_1}| > 1$ [38]. Таким образом, из (22) следует, что эффективная (резонансная) модуляция полей в СР с волновым вектором k_s имеет место, когда период $T_0=2\pi/\omega_0$, характеризующий осцилляции вдоль оси z полей (15а) в невозмущенном кристалле, равен удвоенному периоду СР 2T: T₀=2T. Равенство (22) имеет физический смысл только в области угловых отстроек [η_в]>1, лежащей вне области полного отражения, поскольку при $|\eta_B| > 1$ поля (15а) в отсутствие возмущения (u(z) = 0) имеют вид осциллирующих вдоль оси г функций. Наряду с изложенной выше интерпретацией в прямом (координатном) пространстве условие (22) допускает также следующую интерпретацию в обратном пространстве. Величина $\Delta k = 2\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_R^2 - 1}$ представляет собой расстояние между центрами распространения А, и А2, лежащими на невозмущенной дисперсионной поверхности в обратном пространстве, с учетом угловой отстройки п_в (см. рис. 2). Равенство (22) означает, что расстояние между центрами распространения A_1 и A_2 равно волновому вектору возмущения k_s : $\Delta k = k_s$ и выражает закон сохранения квазиимпульса при рассеянии на СР с поглощением или испусканием статического фонона. Следовательно, случаю $\Delta k = k_s$ отвечает эффективное (резонансное) перемешивание волн, относящихся к разным центрам распространения в обратном пространстве. Условие (22) резонансного взаимодействия рентгеновских лучей с твердотельной СР находится в согласии с результатами работ [27, 28], в которых рассмотрена задача дифракции рентгеновских лучей на акустической СР и получено следующее выражение для волнового вектора ультразвука k_s, отвечающего рентгеноакустическому резонансу:

$$k_{s} = \frac{k}{2} \operatorname{Re} \left\{ \left(\frac{\gamma^{0}}{\mu^{0}} - \frac{\gamma^{g}}{\mu^{g}} \right) \left(\frac{\chi^{0}}{2\gamma^{0}} - \frac{\chi^{0} - \alpha}{2\gamma^{g}} \right) \pm \right. \\ \left. \pm \left(\frac{\gamma^{0}}{\mu^{0}} + \frac{\gamma^{g}}{\mu^{g}} \right) \left(\left[\frac{\chi^{0}}{2\gamma^{0}} - \frac{\chi^{0} - \alpha}{2\gamma^{g}} \right]^{2} + \frac{P^{2}\chi^{g}\chi^{-g}}{\gamma^{0}\gamma^{g}} \right)^{1/2} \right\},$$
(23)

тде α=-2sin2ϑ₀Δϑ; μ⁰, μ^g — косинусы углов между волновыми векторами k, k^g и волновым вектором ультразвука k_s. В частном случае РД по Брэггу на продольной ультразвуковой волне с волновым вектором k_s||n без учета фотоэлектрического поглощения выражение (23) приобретает вид $k_s = 2\Lambda^{-1} \sqrt{\eta_B^2 - 1}$ и совпадает с (22).

Равенство (22) будем называть условием параметрического резонанса первого порядка либо законом сохранения квазиимпульса при поглощении или испускания фонона. В общем случае условие параметрического резонанса произвольного *p*-го порядка, *p*=2, 3, ... (закон сохранения квазиимпульса при поглощении или испускании *p* фононов), имеет вид $2\Lambda^{-1}\sqrt{\eta_{Bp}^2 - 1} = pk_s$ и определяет угловые отстройки $\pm |\eta_{Bp}|$, при которых удвоенный период возмущения 2*T* кратен периоду осцилляций T_0 полей (15а) в невозмущенном кристалле ($\mathbf{u}(z)=0$): $2T=pT_0$ (расстояние между центрами распространения A_1 и A_2 (см. рис. 2) в обратном пространстве Δk кратно волновому вектору возмущения k_s : $\Delta k=pk_s$).

Параметр Δ^- (216) назовем расстройкой. В дальнейшем мы будем интересоваться зависимостью выражений (21а) от параметра $\eta_{B,}$ полагая k_s =const. В таком случае расстройка Δ^- является функцией угловой отстройки η_B . С учетом (21а) и (18) выражения (15а) для полей $D^{0,g}(z)$ в первом порядке ТВ имеют вид [36]

$$D^{0}(z) = (f_{1}^{(0)} + \mathcal{K}_{1}) \exp \{i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} + (f_{2}^{(0)} + \mathcal{K}_{2}) \exp \{-i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} + \frac{\zeta V_{1} f_{1}^{(0)}}{2} \exp \{i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \left(\left\{ \frac{1}{\Lambda^{*}} - \frac{1}{k_{s}} \right\} \exp \{i k_{s} z\} + \frac{\zeta V_{2} t_{2}^{(0)}}{2} \exp \{-i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \times \left(\left\{ \frac{1}{\Lambda^{*}} - \frac{1}{k_{s}} \right\} \exp \{-i k_{s} z\} \right) + \frac{\zeta V_{2} t_{2}^{(0)}}{2} \exp \{-i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \times \left(\left\{ \frac{1}{\Lambda^{*}} - \frac{1}{k_{s}} \right\} \exp \{-i k_{s} z\} + \left\{ \frac{1}{k_{s}} - \frac{1}{\Lambda^{-}} \right\} \exp \{i k_{s} z\} \right), \qquad (24)$$

$$D^{g}(z) = \mp (f_{1}^{(0)} + \mathcal{K}_{1}) \exp \{\mp \beta + i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \mp \left(f_{2}^{(0)} + \mathcal{K}_{2}) \exp \{\pm \beta - i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \mp \frac{\zeta V_{1} f_{1}^{(0)}}{2} \exp \{i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \times \left(\left\{ \frac{\exp \{\pm \beta\}}{\Lambda^{*}} - \frac{\exp \{\mp \beta\}}{k_{s}} \right\} \exp \{i k_{s} z\} + \left\{ \frac{\exp \{\pm \beta\}}{k_{s}} - \frac{\exp \{\pm \beta\}}{\Lambda^{-}} \right\} \exp \{-i k_{s} z\} \right) \mp \left\{ \frac{\xi V_{2} f_{2}^{(0)}}{2} \exp \{-i \operatorname{sh} \beta \cdot \Lambda^{-1} z\} \left(\left\{ \frac{\exp \{\pm \beta\}}{\Lambda^{+}} - \frac{\exp \{\pm \beta\}}{k_{s}} \right\} \exp \{-i k_{s} z\} \right) \mp \left\{ \frac{\exp \{\pm \beta\}}{k_{s}} - \frac{\exp \{\pm \beta\}}{\Lambda^{-}} \right\} \exp \{i k_{s} z\} \right), \qquad + \left\{ \frac{\exp \{\pm \beta\}}{k_{s}} - \frac{\exp \{\mp \beta\}}{\Lambda^{-}} \right\} \exp \{i k_{s} z\} \right),$$

где $\mathscr{K}_{1,2}$ — постоянные, определяемые из граничных условий поля (136), sh $\beta = \sqrt{\eta_B^2 - 1}$. При $|\eta_B| > 1$ параметр β изменяется в пределах $\beta \equiv]0; + \infty$ [. Верхние знаки в (24) относятся к области $\eta_B > 1$, нижние знаки — к области $\eta_B < -1$. Первые два слагаемых в (24) описывают волны нулевого приближения с добавками $\pm \Lambda^{-1}$ sh β к z-проекциям волновых векторов k и k^g. В отсутствие возмущения ($\zeta = 0$) поля $D^{0,g}(z)$ представляют собой комбинацию указанных волн. Следующие слагаемые в (24) появляются вследствие наличия возмущения в кристалле и описывают рассеянные на СР волны с комбинационными добавками Λ^{-1} sh $\beta \pm k_s; -\Lambda^{-1}$ sh $\beta \pm k_s$ к z-проекциям волновых векторов k и k^g (пространственные гармоники полей). Амплитуды этих волн пропорциональны амплитуде возмущения a. Таким образом, в первом порядке TB каждое из полей $D^{0,g}(z)$ для каждой из поляризаций является суммой шести волн и в кристалле распространяются двенадцать

различных волн. Как следует из (24), когда расстройка $\Delta \rightarrow 0$ (окрестность угла, удовлетворяющего условию параметрического резонанса первого порядка (22)), амплитуды пространственных гармоник полей $D^{0,g}(z)$ с добавками $\Lambda^{-1} \sh \beta - k_s$; $-\Lambda^{-1} \sh \beta + k_s$ к z-компонентам волновых векторов k и k^g эффективно возрастают. В окрестности резонанса первого порядка возмущение наиболее эффективно перемешивает именно эти волны.

Обобщим приведенные выше результаты на случай, когда модулирующая функция F(z) в (1) является периодической функцией общего вида и ее можно представить в виде ряда Фурье (7а). В первом порядке ТВ в области $|\eta_B| > 1$ каждое из полей $D^{0,g}(z)$ для каждой из поляризаций представляет собой сумму, состоящую из 2(2M+1) волн, где M — число фурье-гармоник в представлении (7а) [36]: две волны нулевого приближения с добавками $\pm \Lambda^{-1}$ sh β к z-компонентам волновых векторов k, k^g и 4M волн — пространственных гармоник с комбинационными добавками $\pm (\Lambda^{-1} \sinh \beta) + mk_s$; $m = \pm 1, \ldots, \pm M$ к z-компонентам волновых векторов k и k^g. Волны, характеризующиеся добавками вида — Λ^{-1} sh $\beta + pk_s$; Λ^{-1} sh β — pk_s ; $p=1, \ldots, M$, имеют амплитуды, которые содержат резонансные знаменатели ($2\Lambda^{-1}$ sh β — pk_s) и возрастают в соответствующей окрестности угла, отвечающего условию параметрического резонанса p-го порядка $2\Lambda^{-1}$ sh β = pk_s .

Рассмотрим критерий применимости ТВ. Функции (21а) являются малыми поправками к решениям невозмущенной задачи (15б) при условии $|f_{1,2}^{(1)}(z)| \ll |f_{1,2}^{(0)}|$. Выражения (21а) показывают, что неравенства $|f_{1,2}^{(1)}(z)| \ll |f_{1,2}^{(0)}|$ выполняются для кристаллов произвольной толщины *l*, если расстройка Δ^- достаточно велика:

$$\frac{\zeta V_{1,2}}{\Delta^{-}} \bigg| \ll 1.$$
⁽²⁵⁾

Из (25) следует, что первое приближение ТВ справедливо в области углов, достаточно далекой от области параметрического резонанса первого порядка (22). Вблизи резонанса, когда $\Delta^- \rightarrow 0$, условие (25) нарушается и выражения (21а) справедливы только для кристаллов малой

толщины *l*. При $\Delta^- \to 0^{\circ}$ имеем из (21а) $|f_{1,2}^{(1)}(z)| \simeq \left| \zeta V_{2,1} f_{2,1}^{(0)} - \frac{\sin(\Delta^- z/2)}{\Delta^-} \right| = |\zeta V_{2,1} f_{2,1}^{(0)} - \frac{\sin(\Delta^- z/2)}{\Delta^-} |z|$

$$= \left| \frac{\xi V_{2,1} I_{2,1} I}{2} \right|$$
 и критерий применимости ТВ приобретает вид
$$\left| \frac{\xi V_{2,1} I}{2} \right| \ll 1.$$
(26)

При нарушении условий (25), (26) неравенства $|f_{1,2}^{(1)}(z)| \ll |f_{1,2}^{(0)}|$ не выполняются и ряды ТВ (20) сходятся плохо.

Возмущение модулирует наряду с амплитудами также волновые векторы распространяющихся в кристалле волн. При определении амплитуд волн в возмущенном кристалле мы использовали представление (18) для собственных решений $\Phi_{1,2}(z)$ и искали решение системы уравнений (19а) по ТВ. Для определения возмущенных волновых векторов представим собственные решения $\Phi_{1,2}(z)$ в виде

$$\Phi_1(z) = \exp\{ik_z z\} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Phi_{1n} \exp\{ink_s z\};$$

$$\Phi_2(z) = \exp\left\{ik_z z\right\} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Phi_{2n} \exp\left\{ink_s z\right\},\tag{27}$$

где $\Phi_{1,2n}$ — не зависящие от координаты z амплитуды пространственных фурье-гармоник собственных решений, k_z — добавка к z-проекциям волновых векторов **k**, \mathbf{k}^g при наличии возмущения в кристалле. В работе [36] показано, что в результате подстановки разложений (27) в (17а) получается бесконечная алгебраическая система уравнений, в которой неизвестными являются величины k_z и $\Phi_{1,2n}$. Исследование этой системы методом ТВ приводит к следующим выражениям для добавок к z-компонентам волновых векторов в случае гармонического возмущения $\mathbf{u}(z) = \mathbf{a} \sin(k_s z)$ [36]:

$$k_{z1} = \Lambda^{-1} \operatorname{sh} \beta + k_z^{(2)}; \ k_{z2} = -(\Lambda^{-1} \operatorname{sh} \beta + k_z^{(2)}),$$
(28)

где $\pm \Lambda^{-1} \sh \beta$ — добавки к *г*-компонентам волновых векторов **k**, **k**^g в отсутствие возмущения — нулевое приближение TB; $k_z^{(2)} = \frac{(ga)^2 k_s^2}{4\Lambda \sh \beta} (k_s^2 - \frac{(ga)^2 k_s^2}{4\Lambda \sh \beta})$

 $-4\Lambda^{-2} \operatorname{sh}^2 \beta)^{-1}$ — поправка к волновым векторам во втором порядке ТВ. Поправка первого порядка в случае периодического возмущения $\mathbf{u}(z) = -\mathbf{u}(z+T)$ равна нулю. Ряды (28) расходятся в окрестности параметрического резонанса первого порядка (22), поэтому выражения (28) справедливы только вдали от резонанса. С учетом (28) выражения (24) для полей $D^{0,g}(z)$ в первом порядке ТВ для амплитуд и втором порядке ТВ для волновых векторов представляют собой комбинацию шести волн (для каждой из поляризаций) с добавками $\pm (\Lambda^{-1} \operatorname{sh} \beta + k_z^{(2)}) \pm k_s$; $-(\Lambda^{-1} \operatorname{sh} \beta + k_z^{(2)}) \pm k_s$ к *z*-компонентам волновых векторов **k**, \mathbf{k}^g .

2.3. Метод медленно меняющихся амплитуд

В разделе 2.2 было установлено, что в случае кристалла произвольной толщины l метод ТВ применим в области углов (25), достаточно далекой от области параметрического резонанса первого порядка (22). Вблизи резонанса будем искать решение системы (19а) при помощи приближенного метода медленно меняющихся амплитуд [41]. Рассмотрим сначала случай гармонического возмущения $\mathbf{u}(z) = \mathbf{a} \sin(k_s z)$. Согласно этому методу полагаем, что амплитуды $f_{1,2}(z)$ являются медленно меняющимися с координатой z функциями по сравнению с $\exp\left\{i\sqrt{\eta_B^2-1}\Lambda^{-1}z\right\}$ и $\exp\left\{-i\sqrt{\eta_B^2-1}\Lambda^{-1}z\right\}$ соответственно (см. (18)). Условия медленности изменения амплитуд $f_{1,2}(z)$, полученные в [36], имеют вид

$$|\mathbf{gaV}_{1,2}| \ll 1, \tag{29}$$

(30)

где коэффициенты $V_{1,2}$ определяются выражениями (176). Если неравенство (29) выполнено, то вблизи резонанса, когда расстройка Δ^- мала:

$$|\Delta^{-}| \ll k_{\rm s},$$

в системе (19а) можно пренебречь быстроосциллирующими с координатой z членами $\sim \cos(k_s z)$; $\sim \exp\{\pm i\Delta^+ z\}$ и оставить только медленно меняющиеся члены $\sim \exp\{\pm i\Delta^- z\}$ (величины Δ^\pm определяются фор-

мулами (21б)). Решение укороченной системы уравнений (19а), в которой оставлены только медленно меняющиеся члены, не представляет трудности. В работе [36] показано, что после подстановки решений укороченной системы (19а) в выражения (15а) для полей $D^{0,g}(z)$ последние приобретают вид

$$D^{0}(z) = \mathcal{A}G_{1}^{0}(z) \exp\left\{\left(\varkappa - i \frac{k_{s}}{2}\right)z\right\} + \mathscr{B}G_{2}^{0}(z) \exp\left\{\left(i \frac{k_{s}}{2} - \varkappa\right)z\right\},$$

$$D^{g}(z) = \mathcal{A}G_{1}^{g}(z) \exp\left\{\left(\varkappa - i \frac{k_{s}}{2}\right)z\right\} + \mathscr{B}G_{2}^{g}(z) \exp\left\{\left(i \frac{k_{s}}{2} - \varkappa\right)z\right\},$$
(31a)

где

$$G_1^0(z) = \exp\{ik_s z\} \mp \exp\{\mp\beta - i\gamma\}; \quad G_2^0(z) = 1 \mp \exp\{\pm\beta + i\gamma - ik_s z\};$$
(316)

$$G_1^g(z) = \exp\{-i\gamma\} \mp \exp\{\mp\beta + ik_s z\}; \ G_2^g(z) = \exp\{i\gamma - ik_s z\} \mp \exp\{\mp\beta\}$$

— периодические функции с периодом гармонического возмущения T; *А* и *Я* — постоянные, определяемые из граничных условий поля (136);

$$\varkappa = \left(\Omega^2 - \left(\frac{\Delta^2}{2}\right)^2\right)^{1/2}; \ \frac{\Delta^2}{2\Omega} = \cos\gamma, \ 0 < \gamma < \pi; \ \Omega = \frac{|\mathbf{g}\mathbf{a}| \ k_s}{4 \ \mathrm{sh} \ \beta} > 0.$$
(31B)

Напомним, что sh $\beta = \sqrt{\eta_B^2 - 1}$, где $\eta_B - \mu$ ормированная угловая отстройка (14). Верхние знаки в (316) отвечают области $\eta_B > 1$, нижние знаки — области $\eta_B < -1$. Решения (31а) записаны в форме, данной Флоке [42]. Выражения (31а) справедливы в случае выполнения условий (29) и (30). Условие (29) накладывает ограничение на амплитуду возмущения а. Неравенство (30) означает, что решения (31а) верны лишь в малой окрестности углов, удовлетворяющих условию параметрического резонанса первого порядка (22).

Особенностью решений (31a) является то, что в области расстроек в окрестности резонанса ($\Delta^-=0$)

$$-2\Omega < \Delta^- < 2\Omega$$

(32)

величина κ в (31а) является действительной. Вне интервала (32) в области расстроек $|\Delta^-|>2\Omega$ величина κ чисто мнимая. Это означает, что области (32) отвечает запрещенная зона (зона непропускания), в пределах которой поля (31а) имеют экспоненциально изменяющиеся с координатой z амплитуды. При нумерации запрещенных зон, расположенных в области значений нормированных угловых отстроек $\eta_B>1$, мы будем использовать положительные индексы, а при нумерации запрещенных зон, расположенных в области $\eta_B<-1$, — отрицательные.

Поскольку решения (31а) справедливы в узкой угловой области (30) вблизи точки $\Delta^-=0$, то в выражении для параметра Ω (31в) можно положить sh $\beta = k_s \Lambda/2$. В таком случае из (31а, в) следует, что границы запрещенных зон с номерами $m = \pm 1$ определяются из условия $|\Delta^-| = |ga|/\Lambda$, а угловые ширины этих зон $\delta \vartheta_{\pm 1}$ одинаковы и описываются выражением

$$\delta \vartheta_{\pm 1} = \delta \vartheta_B \cdot \frac{1}{2} |\mathbf{g}\mathbf{a}| \cdot \left(1 + \left(\frac{T}{\pi\Lambda}\right)^2\right)^{-1/2},\tag{33}$$

где $\delta \vartheta_B = \left(\frac{|\gamma^g|}{\gamma^0}\right)^{1/2} \frac{2|P||\chi^g|}{\sin(2\vartheta_0)}$ — угловая ширина области полного отражения. Выражение (33) показывает, что угловые ширины запре-

щенных зон прямо пропорциональны амплитуде возмущения а. Из (31a, в) получаем, что интерференционный коэффициент ослабления излучения $\mu_{\pm 1}$ внутри запрещенных зон с номерами $m=\pm 1$ имеет вид

$$\mu_{\pm 1} = \frac{|\mathbf{g}\mathbf{a}|}{2\Lambda} \left(1 - \left(\frac{\Delta^{-}\Lambda}{\mathbf{g}\mathbf{a}}\right)^2\right)^{1/2}.$$
(34)

Интерференционный коэффициент ослабления $\mu_{\pm 1}$ достигает максимума в центре зон ($\Delta^-=0$) и обращается в нуль на границах зон ($|\Delta^-|= = |ga|/\Lambda$) (рис. 3). Толщина первичной экстинкции в центре зон

$$\Lambda_{\pm 1} = \frac{2\Lambda}{|ga|} \tag{35}$$



2

Рис. 3. Зависимость интерференционного коэффициента ослабления $\mu_{\pm 1}$ (34) от параметра Δ^- (216)

обратно пропорциональна амплитуде возмущения а. Выражение (35) находится в согласии с результатами работ [27, 28], в которых рассмотрена задача резонансного взаимодействия поля рентгеновских квантов с акустической СР. В частном случае продольной ультразвуковой волны с волновым вектором $k_s || n$ полученное в [27, 28] выражение для толщины первичной экстинкции совпадает с (35). При анализе решений (31а) мы не рассматриваем точки $|\Delta^-| = |ga|/\Lambda$, соответствующие границам зон, так как в этих точках вид решения будет качественно иной.

Учет вблизи резонанса лишь медленно меняющихся членов $\sim \exp\{\pm i\Delta^{-}z\}$ в уравнениях (19а) эквивалентен тому, что из всей совокупности рассеянных на СР волн учитываются только волны, которые в нулевом порядке ТВ характеризуются добавками $\pm \Lambda^{-1}$ sh β ; Λ^{-1} sh $\beta - k_{s}$; $-\Lambda^{-1}$ sh $\beta + k_{s}$

к z-проекциям волновых векторов k и kg. Настоящее допущение оправданно, поскольку при малой амплитуде возмущения а (29) в окрестности угла, удовлетворяющего условию параметрического резонанса первого порядка (22) (закону сохранения квазиимпульса), амплитуды указанных волн велики по сравнению с амплитудами других пространственных гармоник полей $D^{0,g}(z)$ (см. выражения (24)). Взаимодействне рассматриваемых волн вблизи угла, отвечающего закону сохранения квазиимпульса (22), приводит к взаимному интерференционному гашению полей $D^{0}(z)$ и $D^{g}(z)$ и образованию запрещенной зоны ||43|. В результате дополнительного учета других пространственных гармоник полей $D^{0,g}(z)$ (быстроосциллирующих $\sim \exp{\{\pm i\Delta^+z\}},$ членов $\sim \cos(k_s z)$ в уравнениях (19а)) появляются слагаемые третьего и следующих порядков малости по амплитуде возмущения а в выражениях (33) — (35). Вдали от резонанса, в области расстроек (25), решения (31а) переходят в решения (24), полученные по ТВ [36].

Схема расщепления дисперсионной поверхности в окрестности запрещенной зоны с номером m=-1, построенная на основе анализа решения (31а), представлена на рис. 4. В нулевом порядке ТВ сечение возмущенной дисперсионной поверхности в плоскости рассеяния представляет собой совокупность невозмущенных дисперсионных кривых (гипербол), сдвинутых друг относительно друга на векторы $(pk_s)n$, $p = \pm 1, \pm 2, \ldots$ [43]. Возмущение приводит к расщеплению невозмущенных дисперсионных кривых в окрестности точек их пересечений и образованию запрещенных зон.

Запрещенным зонам с номерами $m = \pm 1$ отвечают максимумы отраженного излучения на поверхности кристалла z=0 — сателлиты соответствующих порядков. Из (32) следует, что угловые положения сателлитов с номерами $m=\pm 1$ определяются из условия параметрического резонанса перво-

Рис. 4. Расщепление дисперсионной поверхности в окрестности запрещенной зоны с номером m = =--1: тонкими сплошными линиями показаны ветвь а (см. рис. 3) невозмущенной дисперсионной поверхности и ветви а+ и а-, которые получаются в результате сдвига ветви α на векторы k_s n น -(ksn) соответственно; точкой B₁ (B₂) отмечено пересечение ветвей а и a_- (а и a_+), расстояние между точками B_1 и B_2 равно k_s ; толстыми сплошными линиями показана дисперсионная поверхность в присутствии возмущения, точками $P_{1,2}$, $P'_{1,2}$ отмечены новые центры распространения. В определенной области углов нормаль п не пересекает ни одну из ветвей возмущенной дисперсионной поверхности — запрещенная зона с *m*=→1. Схема расщепления βветви невозмущенной дисперсионной поверхности (рис. 3) строится аналогично



го порядка (22) (закона сохранения квазиимпульса) и имеют следующий вид:

$$\Delta \vartheta_{\pm 1} = \pm \frac{\lambda |\gamma^g|}{T \sin 2\vartheta_0} \left(1 + \left(\frac{T}{\pi \Lambda}\right)^2 \right)^{1/2} - \frac{\chi^0 \left(1 \pm |\gamma^g|/\gamma^0\right)}{2 \sin 2\vartheta_0}.$$
 (36)

Из (36) получаем, что в случае $T \ll \Lambda$ положения сателлитов описываются кинематической формулой (9) при $\mathcal{F}_0=0$, в случае $T \gg \Lambda$ сателлиты прижимаются к границам области полного отражения. Угловая ширина сателлитов с $m=\pm 1$ определяется угловой шириной $\delta \vartheta_{\pm 1}$ (33) соответствующей запрещенной зоны Из (33) находим вто

$$\delta \vartheta_{\pm 1} \simeq \delta \vartheta_B \frac{|g_a|}{2}$$
 при $T \ll \Lambda$ и $\delta \vartheta_{\pm 1} \cong \delta \vartheta_B \frac{|g_a|}{2} \left(\frac{\pi \Lambda}{T}\right)$ при $T \gg \Lambda$.

Выражения (33), (36) согласуются с результатами работ [32, 33]. В работе [32] методом фазовых диаграмм анализируется решение уравнений Такаги для гармонических СР двух типов с периодами $T \ll \ll \Lambda$ и $T \simeq \Lambda$. Найденные в [32] для случая СР с периодом $T \simeq \Lambda$ положения сателлитов совпадают с (36). В работе [33] рассмотрена задача рассеяния рентгеновских лучей на акустической СР и на основе формализма дисперсионных поверхностей в обратном пространстве получены выражения, описывающие положения сателлитов с $m=\pm 1$ и угловые ширины соответствующих запрещенных зон. При условии, что акустическая СР представляет собой продольную ультразвуковую волну (волновой вектор ультразвука k_s||n) малой амплитуды a, указанные выражения совпадают с (36) и (33).

Обобщим полученные выше результаты на случай, когда модулирующая функция F(z) в выражении (1) является периодической функцией общего вида (7а) [36]. Будем полагать, что среднее по периоду модуляции T значение модулирующей функции $\mathcal{F}_0=0$. Положение запрещенной зоны (сателлита *m*-го порядка) $\Delta \vartheta_m$ определяется условием параметрического резонанса |m|-го порядка $2\Lambda^{-1}$ sh $\beta = |m|k_s, m = \pm 1, \pm 2, \ldots$ (законом сохранения квазиимпульса при поглощении или испускании |m| фононов):

$$\Delta \vartheta_m = m \, \frac{\lambda \, |\gamma^g|}{T \sin 2\vartheta_0} \left(1 + \left(\frac{T}{\pi \Lambda m} \right)^2 \right)^{1/2} - \frac{\chi^0 \left(1 + |\gamma^g| / \gamma^0 \right)}{2 \sin 2\vartheta_0}. \tag{37}$$

Угловая ширина зоны с номером т

$$\delta \vartheta_m = \delta \vartheta_B |gnu_m| \left(1 + \left(\frac{T}{\pi \Lambda m} \right)^2 \right)^{-1/2}$$
(38)

прямо пропорциональна амплитуде u_m *m*-й фурье-гармоники возмущения $\mathbf{u}(z)$ (4), $|u_m| = \varepsilon |\mathcal{F}_m| / |m| k_s$, где \mathcal{F}_m — амплитуда *m*-й фурье-гармоники модулирующей функции F(z) (7а). Интерференционный коэффициент ослабления излучения в *m*-й зоне имеет вид

$$\mu_m = \frac{|\mathbf{gn}u_m|}{\Lambda} \left(1 - \left(\frac{\Delta_m^- \Lambda}{2\mathbf{gn} |u_m|} \right)^2 \right)^{1/2}.$$
(39)

где $\Delta_m^- = |m| k_s - 2\Lambda^{-1} \operatorname{sh} \beta$. Интерференционный коэффициент ослаблення μ_m достигает максимума в центре *m*-й зоны ($\Delta_m^- = 0$) и обращается в нуль на границах зоны ($|\Delta_m^-| = 2 |\operatorname{gnu}_m|/\Lambda$). Зависимость коэффициента μ_m от параметра $\Delta^- m$ аналогична кривой, показанной на рис. 3. Толщина первичной экстинкции в центре *m*-й зоны

$$\Delta_m = \frac{\Lambda}{|\mathsf{gn}\boldsymbol{u}_m|} \tag{40}$$

обратно пропорциональна амплитуде $u_m m$ -й фурье-гармоники возмущения. Запрещенные зоны с одинаковыми по модулю номерами характеризуются одинаковой величиной Λ_m . Выражения (38)—(40) показывают, что угловая ширина $\delta \vartheta_m$, интерференционный коэффициент ослабления μ_m и толщина первичной экстинкции Λ_m зависят только от амплитуды фурье-гармоники с номером *m*. Вкладом остальных фурьегармоник при условии малой амплитуды возмущения $\mathbf{u}(z)$ можно пренебречь [36].

Рассмотрим связь формулы (40) с выражением для толщины первичной экстинкции, полученным в работе [29] на основе метода рекуррентных соотношений нового типа. В [29] установлено, что толщина первичной экстинкции, отвечающая сателлиту *m*-го порядка, $\Lambda_m = -\Lambda/|M_m|$, где M_m — величина, которую авторы назвали структурным фактором периода СР, $|M_m| < 1$. В случае модуляции только межплоскостного расстояния в кристалле (легированная СР) структурный фактор

$$|M_m| = \left| \frac{1}{T} \int_{0}^{T} \exp\left\{ i \mathbf{g} \mathbf{u}(z) \right\} \exp\left\{ -ik_s mz \right\} dz \right|$$

представляет собой модуль амплитуды m-й фурье-гармоники функции $\exp\{igu(z)\}$. В пределе малой амплитуды возмущения u(z) структурный фактор приобретает вид

$$M_m |\simeq \left|\frac{1}{T}\int_0^T g\mathbf{u}(z) \exp\left\{-ik_s mz\right\} dz\right|, |m| \ge 1,$$

и полученное в [29] выражение для толщины первичной экстинкции $\Lambda_m \simeq \frac{\Lambda}{|gnu_m|}$ совпадает с (40).

Зависимости углового положения сателлита *m*-го порядка $\Delta \vartheta_m$ (*m*>1) от периода СР *T* в динамической теории (37) и в кинематической теории (9) при $\mathcal{F}_0=0$ представлены на рис. 5. Рисунок показы-



Рис. 5. Зависимость углового положения сателлита *m*-го порядка $\Delta \vartheta_m$ $(m \ge 1)$ от периода СР *T*: кривая 1 — положение сателлита в динамической теории (37); кривая 2 — положение сателлита в кинематической теории (9) при $\mathscr{F}_0 = 0$;

$$\delta_1 = \left(\frac{|\gamma^g|}{\gamma^0}\right)^{1/2} \frac{|P| |\chi^g|}{\sin 2\vartheta_0} -$$

угловая полуширина области полного отражения; величина

$$\delta_{\mathbf{2}} = \frac{|\chi^{0}|}{2\sin 2\vartheta_{0}} \left(1 + \frac{|\gamma^{g}|}{\gamma^{0}}\right)$$

характеризует сдвиг сателлитов, обусловленный эффектом преломления

Рис. 6. Зависимость углового положения сателлита $\Delta \vartheta_m$ от номера сателлита m ($m \ge 1$): кривая 1 — положение сателлита в динамической теории (37); кривая 2 — положение сателлита в кинематической теории .(9) при $\mathcal{F}_0=0$;

$$\Delta_{1} = \frac{\lambda |\gamma^{g}|}{T \sin 2\theta_{0}} \left(\left(1 + \left(\frac{T}{\pi\Lambda}\right)^{2}\right)^{1/2} - 1 \right)$$
$$\Delta_{2} = \frac{\lambda |\gamma^{g}|}{T \sin 2\theta_{0}} + \frac{|\chi^{0}| (1 + |\gamma^{g}| / \gamma^{0})}{2 \sin 2\theta_{0}}$$

вает, что в динамической теории при большой величине периода СР $(T \gg \pi \Lambda | m|)$ сателлит прижимается к границе области полного отражения. В кинематической теории при возрастании периода T сателлит стремится к положению, отвечающему центру области полного отражения в динамической теории. При малой величине периода СР $(T \ll \Lambda)$ положения сателлитов, полученные в рамках указанных теорий, совпадают.

Из (37) следует, что если отношение T/Λ имеет произвольное значение, то в динамической теории кинематической формулой (9) при $\mathscr{F}_0=0$ описываются положения только тех сателлитов, которые имеют порядок $|m| \gg T/\pi\Lambda$ (рис. 6).

Сателлиты с одинаковыми по модулю номерами *m* имеют одинаковую угловую ширину $\delta \vartheta_m$ (38), которая уменьшается с ростом |m|. В пределе $T \ll \Lambda$ угловая ширина *m*-го сателлита $\delta \vartheta_m \simeq |gnu_m| \delta \vartheta_B$ определяется амплитудой *m*-й фурье-гармоники возмущения u_m .

Для гармонической СР $\mathbf{u}(z) = \mathbf{a} \sin(k_s z)$ из (38)—(40) формально следует, что сателлиты с номерами |m| > 1 отсутствуют. Это объясняется тем, что в случае гармонической модуляции при |m| > 1 члены первого порядка по амплитуде возмущения **a** в выражениях (38)—(40) равны нулю и для нахождения характеристик запрещенных зон с |m| > 1 следует определить члены следующих порядков по **a**.

Необходимо подчеркнуть, что положения сателлитов (37) отвечают нулевому порядку ТВ. В высших порядках ТВ волновые векторы рассеянных на СР волн (28) зависят от амплитуды возмущения а. Это обстоятельство приводит к тому, что условие параметрического резонанса |m|-го порядка (закон сохранения квазиимпульса) выполняется при других (по сравнению с нулевым порядком ТВ) угловых отстройках $\Delta \vartheta_m$ и в выражении (37) появляются поправки, пропорциональные степеням амплитуды возмущения **u**(z).

Таким образом, анализ результатов, полученных на основе метода медленно меняющихся амплитуд, позволяет раскрыть физический механизм возникновения сателлитов: в случае РД по Брэггу в СР в окрестности угла, отвечающего условию параметрического резонанса |m|-го порядка (закону сохранения квазиимпульса при поглощении или испускании |m| фононов), образуется запрещенная зона, которой отвечает дифракционный максимум — сателлит соответствующего порядка.

§ 3. Метод рекуррентных соотношений

Рассмотрим решение задачи двухлучевой РД по Брэггу в СР на основе рекуррентных соотношений нового типа [34]. Полученное на основе этих соотношений выражение для комплексного коэффициента отражения (ККО) r_N от кристалла, состоящего из N одинаковых по характеристикам слоев, имеет вид [29, 37]

$$r_N = \left(\frac{r}{\bar{r}}\right)^{1/2} \frac{\sin\left(N\varphi\right)}{\sin\left(N\varphi\right)\xi + \sqrt{1 - \xi^2}\cos\left(N\varphi\right)},\tag{41a}$$

$$\xi = \frac{1 - t\bar{t} + r\bar{r}}{2(r\bar{r})^{1/2}}, \quad v = \frac{1 + t\bar{t} - r\bar{r}}{2(t\bar{t})^{1/2}}, \quad v = \cos\varphi,$$
(416)

$$1 - v^2 = \frac{r\bar{r}}{t\bar{t}} (1 - \xi^2) = \sin^2 \varphi, \tag{41B}$$

тде r — ККО отдельным слоем; t — комплексный коэффициент пропускания (ККП) отдельным слоем; \bar{r} , \bar{t} — ККО и ККП отдельным слоем при отражении от его нижней границы с вектором (—g). Полагаем, что каждый слой имеет толщину T, где T — период СР. Выражения (41a, б, в) представляют собой точное решение задачи РД по Брэггу в СР.

Исследуем структуру формул (41а, б, в) в рамках кинематического приближения. В кинематическом пределе выражения (41а, б, в) имеют следующий вид [36]:

$$r_N = \left(\frac{r}{\bar{r}}\right)^{1/2} \frac{\exp\left(iN\varphi\right)\sin\left(N\varphi\right)}{i\xi},\tag{42a}$$

$$\xi = \frac{1 - t\bar{t}}{2(r\bar{r})^{1/2}}, \quad v = \frac{1 + t\bar{t}}{2(t\bar{t})^{1/2}}, \quad v = \cos\varphi.$$
(426)

Используем выражения (42а, б) для решения задачи РД по Брэггу в асимметричной геометрии на кристалле с модуляцией межплоскостного расстояния по закону (1) (легированная СР). В кинематическом приближении парциальные ККП и ККО, полученные в результате решения уравнений Такаги, имеют вид [37]

$$t = \overline{t} = \exp\left\{\frac{i\alpha_B kT}{4|\gamma^g|}\right\},$$

$$r = \frac{iP\chi^{g_k}}{2|\gamma^g|} \int_0^T \exp\left\{\frac{-ik\alpha_B}{2|\gamma^g|} z - igu(z)\right\} dz,$$

$$\overline{r} = \frac{iP\chi^{-g_k}}{2\gamma^0} \int_0^T \exp\left\{\frac{-ik\alpha_B}{2|\gamma^g|} (T - z) + igu(z)\right\} dz,$$
(43)

где **u** (z) = **u** (z + T) — периодическая функция смещения (4) (полагаем для простоты, что $\mathcal{F}_0 = \frac{1}{T} \int_0^T F(z) dz = 0$), α_B — брэгговская аккомодация (66).

Подставляя (43) в (426), получаем

$$\xi = -\frac{\Lambda}{T} \sin\left(\frac{\alpha_B kT}{4|\gamma^g|}\right) |\Psi|^{-1};$$
(44a)

$$v = \cos\left(\frac{\alpha_B^{kT}}{4|\gamma^g|}\right), \quad \varphi = \frac{\alpha_B^{kT}}{4|\gamma^g|}, \quad (446)$$

$$\Psi = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} \exp\left\{\frac{-ik\alpha_{B}}{2|\gamma^{g}|} z - igu(z)\right\} dz.$$
(44B)

В свою очередь, подставляя параметры (44а, б, в) в (42а), для интенсивности $|r_N|^2$ рассеянного излучения на поверхности кристалла z = 0 имеем

$$|r_N|^2 = \left(\frac{P|\chi^g|k}{|\gamma^g|}\right)^2 \left|\sum_{m=-\infty}^{\infty} \Psi_m \frac{\sin\left(NT\alpha_B k/(4|\gamma^g|)\right)}{(k\alpha_B/(2|\gamma^g|) - mk_s)}\right|^2,\tag{45a}$$

где Ψ_m — амплитуда *m*-й фурье-гармоники функции exp {—*i*gu(z)}:

$$\Psi_m = \frac{1}{T} \int_0^T \exp\{-igu(z)\} \exp\{imk_s z\} dz, \ m = 0, \ \pm 1, \ \dots$$
 (456)

Выражение (45а) совпадает с выражением (8а) при $\delta=0, \mathcal{F}_0=0$, которое получено путем прямого решения уравнений Такаги.

Рассмотрим задачу динамической РД на СР. Пусть величина периода СР удовлетворяет условию $T \ll \Lambda$, которое означает, что рассеяние на каждом парциальном слое толщины T можно рассматривать в кинематическом приближении. В таком случае при анализе точного решения (41a) воспользуемся приближенными выражениями для параметров ξ и v. В качестве приближенного выражения для ξ будем использовать формулу (44a), а параметр v вычислим по формуле (41в). Подставляя (43) и (44a) в (41в), получаем для v^2

$$v^{2} = 1 + \frac{T^{2}}{\Lambda^{2}} |\Psi|^{2} (1 - \xi^{2}) = \cos^{2} \left(\frac{\alpha_{B} kT}{4 |\gamma^{g}|} \right) + \frac{T^{2}}{\Lambda^{2}} |\Psi|^{2}.$$
(46)

Из (46) следует, что если $\xi^2 < 1$, то $v^2 > 1$ и наоборот, когда $\xi^2 > 1$, то $v^2 < 1$. Так как, согласно (416), $v = \cos \varphi$, то в тех областях, где |v| > 1, параметр φ следует заменить на *i*т, где τ — действительная величина. С учетом этого обстоятельства в области $\xi^2 < 1$ формула (41a) приобретает вид

$$r_N = \left(\frac{r}{\bar{r}}\right)^{1/2} \frac{\operatorname{sh}(N\tau)}{\operatorname{sh}(N\tau)\,\xi - i\,\sqrt{1 - \xi^2}\operatorname{ch}(N\tau)} \,. \tag{47}$$

Таким образом, областям угловых отстроек, определяемых неравенством $\xi^2 < 1$, отвечают запрещенные зоны, в пределах которых поля внутри кристалла описываются гиперболическими функциями. Границы зон определяются из условия $|\xi|=1$. Угловая ширина *m*-й зоны

$$\delta \vartheta_m = \delta \vartheta_B | \Psi_m |; \quad m = 0, \pm 1, \dots,$$
(48)

где $\delta \vartheta_B$ — ширина области полного отражения, Ψ_m — амплитуда *m*-й фурье-гармоники (45б). Максимум интенсивности отраженного излучения на поверхности кристалла z=0 (сателлит *m*-го порядка) достигается при $\xi=0$. Условие $\xi=0$ определяет угловую отстройку $\Delta \vartheta_m$, отвечающую центру *m*-й запрещенной зоны:

$$\Delta \vartheta_m = m \frac{\lambda |\gamma^g|}{T \sin 2\vartheta_0} - \frac{\chi^0 \left(1 + |\gamma^g| / \gamma^0\right)}{2 \sin 2\vartheta_0}.$$
(49)

Интерференционный коэффициент ослабления излучения внутри *m*-й зоны

$$\mu_m = \frac{|\Psi_m|}{\Lambda} \left(1 - \xi^2\right)^{1/2} \tag{50}$$

достигает максимума в центре зоны ($\xi=0$) и обращается в нуль на границах зоны ($|\xi|=1$). Выражение для толщины первичной экстинкции в центре *m*-й зоны ($\xi=0$) имеет вид

$$\Lambda_m = \frac{\Lambda}{|\Psi_m|}.$$
(51)

Из (49) следует, что в рассматриваемом нами случае $T \ll \Lambda$ положения запрещенных зон (сателлитов) описываются кинематической форму-

лой (9) при $\mathscr{F}_0=0$. С ростом модуля номера зоны |m| ее угловая ширина (48) уменьшается прямо пропорционально модулю амплитуды *m*-й фурье-гармоники $|\Psi_m|$. Выражение (48) показывает, что если выполняется условие $|\Psi_{-m}| = |\Psi_m|$, то угловые ширины запрещенных зон с равными по модулю номерами равны. Для гармонической СР $u(z) = a \sin(k_s z)$ из (456) находим, что $\Psi_m = J_m(ga)$, где $J_m(ga)$ функция Бесселя первого рода порядка *m* [42]. Так как $|J_{-m}(ga)| =$ $= |J_m(ga)|$ [42], то в случае гармонической модуляции ширины запрещенных зон с одинаковым |m| равны. Согласно равенству Парсеваля [42] амплитуды фурье-гармоник Ψ_m удовлетворяют условию

 $\sum_{m=-\infty} |\Psi_m|^2 = 1.$ Следовательно, величина $|\Psi_m| < 1$ и из (51) следует, что для любого номера *m* выполняется неравенство $\Lambda_m > \Lambda$. С ростом величины |m| толщина первичной экстинкции (51) увеличивается обратно пропорционально модулю амплитуды *m*-й фурье-гармоники $|\Psi_m|$. Выражения (49) и (51) согласуются с результатами, приведенными в [29].

С учетом введенных обозначений (50), (51) аргумент гиперболических функций в (47) принимает вид $N\tau = NT\mu_m = (l/\Lambda_m)\sqrt{1-\xi^2}$, где l=NT — толщина кристалла. В таком случае из (47) получаем следующее выражение для интенсивности сателлита *m*-го порядка:

 $|r_N|^2|_{\xi=0} = \frac{\gamma^0}{|\gamma^g|} th^2 (l/\Lambda_m)$. Зависимость интенсивности сателлита *m*-го порядка от параметра l/Λ_m при симметричном отражении ($\gamma^0 = |\gamma^g|$) представлена на рис. 7. Рисунок показывает, что при $l \ll \Lambda_m$ зависи-



Рис. 7. Зависимость интенсивности сателлита *m*-го порядка от параметра l/Λ_m при симметричном отражении ($\gamma^0 = |\gamma^g|$)



Рис. 8. Прямоугольный закон изменения периода решетки b

мость пропорциональна l^2 , т. е. носит кинематический характер. При $l \gg \Lambda_m$ интенсивность сателлита стремится к единице — полное отражение. Если выполняется условие $\Lambda_{-m} = \Lambda_m$, то интенсивности сателлитов с равными по модулю номерами равны. Из (51) находим, что условие $\Lambda_{-m} = \Lambda_m$ выполняется, когда $|\Psi_{-m}| = |\Psi_m|$. Для гармонической СР $\Psi_m = J_m$ (ga) и, следовательно, сателлиты с равными по модулю номерами имеют одинаковую интенсивность.

При совместном выполнении условий $T \ll \Lambda$ и $|ga| \ll 1$ (а — амплитуда возмущения u(z)) выражения (48) — (51) совпадают с аналогичными выражениями (37) — (40), которые получены при помощи метода медленно меняющихся амплитуд.

В рамках модели кинематического рассеяния на каждом периоде СР Т «Л рассмотрим задачу динамической РД в СР с параллельной

модуляцией межплоскостного расстояния (1) и электронной плотности (2) (композиционная СР). Для простоты положим, что функция модуляции F(z) в (1), (2) имеет вид $F(z) = \cos(k_s z)$. В [36] показано, что учет вариации электронной плотности приводит к следующим результатам. Угловая ширина *m*-й запрещенной зоны описывается выражением

$$\delta \vartheta_m = \delta \vartheta_B [J_m(x) (1 + m\delta/x)], \tag{52}$$

где $x = ga - \frac{k\chi^0\delta}{2k_s} \left(\frac{1}{\gamma^0} + \frac{1}{|\gamma^g|}\right)$. Максимум отраженного излучения на поверхности кристалла z=0 (сателлит *m*-го порядка) достигается

при угловой отстройке $\Delta \vartheta_m$, отвечающей центру *m*-й запрещенной зоны:

$$\Delta \vartheta_m = m \frac{\lambda |\gamma^g|}{T \sin 2\vartheta_\theta} - \frac{\chi^0 \left(1 + |\gamma^g| / \gamma^0\right)}{2 \sin 2\vartheta_\theta}.$$
(53)

Интерференционный коэффициент ослабления излучения внутри *m*-й зоны

$$\mu_m = \frac{|J_m(x)|(1+m\delta/x)|}{\Lambda} (1-\xi^2)^{1/2}.$$
(54)

Толщина первичной экстинкции в центре *m*-й зоны

$$\Lambda_m = \frac{\Lambda}{|J_m(x)|(1+m\delta/x)|}.$$
(55)

Сопоставляя формулы (53) и (49), можно видеть, что положения сателлитов (53) не изменяются по сравнению с их положениями (49), отвечающими модуляции только межплоскостного расстояния. Выражение (52) показывает, что в отличие от случая гармонической модуляции только межплоскостного расстояния при одновременной модуляции межплоскостного расстояния и электронной плотности по гармоническому закону запрещенные зоны с равными по модулю номерами имеют различные угловые ширины. Согласно (55), $\Lambda_{-m} \neq \Lambda_m$ и, следовательно, интенсивности сателлитов с равными по модулю номерами также различны. При $\delta=0$ выражения (52)—(55) совпадают с выражениями (48)—(51), в которых для гармонической СР $\Psi_m = I_m(ga)$.

Рассмотрим задачу динамической РД по Брэггу в симметричной геометрин на кристалле с прямоугольным изменением периода решетки b вдоль оси z, направленной перпендикулярно его входной поверхности. В рамках модели прямоугольной модуляции периода решетки полагаем, что кристалл состоит из N слоев толщины T. Каждый слой толщины T в свою очередь состоит из двух слоев с толщинами l_1 и l_2 , которые имеют разные постоянные решетки b_1 и b_2 вдоль вектора дифракции g (рис. 8). Параметр $T=l_1+l_2$ представляет собой период СР. Будем считать, что параметры l_1 , b_1 характеризуют верхний слой, составляющий период СР, а параметры l_2 , b_2 — нижний слой. Задача динамической РД в такой СР имеет точное аналитическое решение на основе рекуррентных соотношений нового типа. Анализ этого решения позволяет сделать ряд общих выводов о положениях запрещенных зон (сателлитов).

Обратимся к выражениям (41а, б, в). Фигурирующие в формулах (416, в) парциальные ККП и ККО имеют вид [37]

$$\begin{split} \tilde{t} &= t_2 t_1 \left(1 - \bar{r_1} r_2 \right)^{-1}, \quad \tilde{t} = \bar{t_1} \bar{t_2} \left(1 - \bar{r_1} r_2 \right)^{-1}, \\ r &= r_1 + \bar{t_1} \bar{t_1} r_2 \left(1 - \bar{r_1} r_2 \right)^{-1}, \quad \bar{r} = \bar{r_2} + t_2 \bar{t_2} \bar{r_1} \left(1 - \bar{r_1} r_2 \right)^{-1} \end{split}$$

где $r_{1,2}$ — ККО первого и второго слоев, составляющих период СР, $t_{1,2}$ — ККП этих слоев, $\bar{r}_{1,2}$ и $\bar{t}_{1,2}$ — ККО и ККП первого и второго слоев соответственно при рассеянии с вектором (—g). В работе [36] на основе метода с использованием уравнений Такаги получены выражения для коэффициентов $t_{1,2}$; $r_{1,2}$; $\bar{t}_{1,2}$; $\bar{r}_{1,2}$ и показано, что с учетом этих выражений параметры (416) приобретают вид

$$\begin{aligned} \nu &= (\eta_{B1}^2 - 1)^{-1/2} (\eta_{B2}^2 - 1)^{-1/2} \left\{ \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 (1 - \eta_{B1} \eta_{B2}) + \right. \\ &+ \cos \varphi_2 \cos \varphi_1 \sqrt{\eta_{B1}^2 - 1} \sqrt{\eta_{B2}^2 - 1} \right\}, \end{aligned} \tag{56} \\ \xi &= - \left(\sqrt{\eta_{B1}^2 - 1} \eta_{B2} \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 + \sqrt{\eta_{B2}^2 - 1} \eta_{B1} \cos \varphi_2 \sin \varphi_1 \right) \times \\ &\times \left\{ \sin^2 \varphi_1 \sin^2 \varphi_2 (\eta_{B1} - \eta_{B2})^2 + \right. \\ &+ \left(\sqrt{\eta_{B1}^2 - 1} \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 + \sqrt{\eta_{B2}^2 - 1} \cos \varphi_2 \sin \varphi_1 \right)^2 \right\}^{-1/2}, \end{aligned}$$

где $\varphi_{1,2} = \Lambda_{1,2}^{-1} \sqrt{\eta_{B1,2}^2 - 1} l_{1,2}$; $\Lambda_{1,2}$ — толщины первичной экстинкции первого и второго слоев, составляющих период СР; $\eta_{B1,2}$ — нормированные угловые отстройки, характеризующие первый и второй слои соответственно. Параметры Λ и η_B определяются выражениями (14). При выводе (56) полагалось, что фурье-компоненты поляризуемости первого и второго слоев, составляющих период СР, равны $\chi_{1,2}^g = \chi^g$; $\chi_{1,2}^{-g} = \chi^{-g}$; $\chi_{1,2}^0 = \chi^0$. Из (56) следует, что параметры ξ и ν при любых значениях нормированных угловых отстроек $\eta_{B1,2}$ являются действительными величинами: Im $\nu = \text{Im} \xi = 0$.

Обратимся к формуле (41в) и рассмотрим комбинацию $r\bar{r}/(t\bar{t})$. В [36] установлено, что эта комбинация описывается следующим выражением:

$$\frac{rr}{t\bar{t}} = -(\eta_{B1}^2 - 1)^{-1} (\eta_{B2}^2 - 1)^{-1} ((\eta_{B1} - \eta_{B2})^2 \sin^2 \varphi_1 \sin^2 \varphi_2 + (\sqrt{\eta_{B1}^2 - 1} \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 + \sqrt{\eta_{B2}^2 - 1} \cos \varphi_2 \sin \varphi_1)^2).$$
(57)

Выражение (57) при любых значениях угловых отстроек $\eta_{B1,2}$ является действительным и отрицательным. С учетом этого обстоятельства формулу (41в) перепишем в виде

$$v^2 = 1 + \left| \frac{rr}{t\bar{t}} \right| (1 - \xi^2).$$
(58)

Из (58) следует, что если $\xi^2 < 1$, то $v^2 > 1$ и наоборот, когда $\xi^2 > 1$, то $v^2 < 1$. Таким образом, областям угловых отстроек, которые определяются неравенством $\xi^2 < 1$, отвечают запрещенные зоны, в пределах которых поля внутри кристалла описываются гиперболическими функциями (см. (47)). Максимумы интенсивности отраженного излучения на поверхности кристалла z=0 (сателлиты) достигаются при угловых отстройках, которые отвечают минимальному значению величины ξ (центры запрещенных зон). Пусть оба слоя, составляющие период СР, близки по характеристикам: $b_1 \simeq b_2 = b$; $\Lambda_1 \simeq \Lambda_2 = \Lambda$; $\eta_{B1} \simeq \eta_{B2} = \eta_B$ В таком случае из (56) следует, что минимальное значение парамет-ра ξ , равное нулю, достигается при $2\Lambda^{-1}\sqrt{\eta_B^2 - 1} = |m|k_s$; $k_s = 2\pi/T$, $m = \pm 1$, Из условия $2\Lambda^{-1}\sqrt{\eta_B^2 - 1} = |m|k_s$ находим угловое положение сателлита *m*-го порядка:

$$\Delta \vartheta_m = m \, \frac{\lambda}{2T \cos \vartheta_0} \left(1 + \left(\frac{T}{\pi \Delta m} \right)^2 \right)^{1/2} - \frac{\chi^3}{\sin 2\vartheta_0}. \tag{59}$$

Выражение (59) совпадает с аналогичным выражением (37), которое получено при помощи метода медленно меняющихся амплитуд (в случае симметричного брэгговского отражения $|\gamma^g| = \gamma^0 = \sin \vartheta_0$). Положения сателлитов, полученные в рамках различных методов, совпадают.

Заключение

Как показано в настоящей работе, переход к собственным решениям уравнений Такаги позволяет в отсутствие возмущения расцепить эти уравнения, что дает возможность исследовать возмущенную задачу при помощи различных приближенных методов. На основе указанного подхода нами детально проанализирована структура полей в СР с периодическим законом модуляции общего вида и раскрыт физический механизм возникновения дифракционных максимумов — сателлитов. В работе установлено, что сателлит - это запрещенная зона (зона непропускания), которая образуется в окрестности угла, отвечающего условию параметрического резонанса соответствующего порядка (закону сохранения квазиимпульса при испускании или поглощении фононов). Таким образом, условие параметрического резонанса определяет угловые отстройки, при которых взаимодействие волн в возмущенном кристалле носит эффективный (резонансный) характер. Всю шкалу угловых отстроек можно разбить на множество интервалов двух типов: первый тип — это области, лежащие вне запрещенных зон (вдали от резонансов) и второй тип - это области, соответствующие запрещенным зонам (окрестности резонансов). В настоящей работе решение уравнений Такаги для областей первого типа проводилось методом ТВ, а для областей второго типа — методом медленно меняющихся амплитуд. Эти методы являются приближенными и справедливы при условии малости амплитуды возмущения.

Для решения задачи РД по Брэггу в СР с произвольной амплитудой модуляции в работе использовались рекуррентные соотношения нового типа. В рамках этого подхода нами проанализирована структура полей в кристалле с одновременной модуляцией межплоскостного расстояния и электронной плотности.

Общие решения, полученные при помощи методов медленно меняющихся амплитуд и рекуррентных соотношений нового типа, могут быть исследованы с учетом фотоэлектрического поглощения. Это приближает рассматриваемую модель СР к реальной ситуации. Анализ выражений (39), (50) для коэффициента ослабления внутри запрещенной зоны с номером т в пределе слабого поглощения приводит к следующим результатам: для не слишком больших [m] и не слишком близко от границ зоны поглощение определяется в основном интерференционными эффектами и описывается действительной частью выражений (40), (51); вне запрещенной зоны поглощение определяется величиной коэффициента поглощения, который представляет собой мнимую часть выражений (39), (50). Особенностью угловой зависимости коэффициента поглощения в СР является то, что он достигает минимума вблизи границы каждой запрещенной зоны. Минимальное значение коэффициента поглощения вблизи границы зоны с номером т меньше коэффициента поглощения при соответствующем значении угловой отстройки в идеальном кристалле, а также зависит от амплитуды возмущения u(z) и увеличивается с ростом модуля номера зоны [m]. В частности, детальное исследование угловой зависимости коэффициента поглощения вблизи границы запрешенной зоны с номером m=+1 показывает, что выражение, определяющее минимальное значение этого коэффициента, зависит от параметра $T/\text{Re}\,\Lambda$ и достигает минимума при некотором значении этого отношения. В этом случае влияние поглощения на интенсивность сателлита первого порядка незначительно, т. е. максимальна интегральная интенсивность указанного сателлита.

Таким образом, приведенный выше анализ показывает, что подход с использованием собственных решений уравнений Такаги является физически адекватным проблеме динамической РД в СР и позволяет достаточно далеко продвинуться в описании как отражательных свойств СР, так и структуры полей в них.

ЛИТЕРАТУРА

ЛИТЕРАТУРА
[1] Шик А. Я. // ФТП. 1974. № 10. С. 1841. [2] Dehlinger U. // Z. Kristallogr. 1927. 65. Р. 615. [3] Косhendörfer А. // Z. Kristallogr. 1939. 101. Р. 149.
[4] Daniel V., Lipson H. // Proc. Roy. Soc. 1944. А 182. Р. 378. [5] Daniel V., Lipson H. // Proc. Roy. Soc. 1943. A181. Р. 368. [6] Hargreaves M. E. // Acta Cryst. 1951. 4. Р. 301. [7] Biedermann E. // Acta Cryst. 1960. 13. Р. 650. [8] Korekawa M. Theorie der Satellitenrellexe: Habilitationsschrift der Liddwig-Maximilian-Universität. München. 1967. [9] Fontaine D. // Metailurg. Soc. Conf. N.-Y. Gordon & Breach. 1966. V. 36. [10] Segmüller Armin, Blakeslee A. E. // J. Appl. Cryst. 1973.
6. P. 19. [11] Böhm H. // Acta Cryst. 1975. A31. Р. 622. [12] Sebo P., Synecek V. // Czech. J. Phys. 1969. B19. P. 983. [13] Хапачев Ю. П., Колпаков А. В., Куз-нецов Г. Ф., Кузьмин Р. Η. // Кристаллография. 1979. 24. С. 430. [14] Кояпаков А. В., Хапачев Ю. П. // Тез. 7-го Всесоюз. совеш. по рентгенографни минерального сырья. Львов, 1977. Ч. 1. С. 47. [15] Fleming R. M. et al. // J. Appl. Phys. 1980. 51. Р. 357. [16] Палатиик Л. С., Козьма А. А., Михайлов И. Ф., Маслов В. Н. // Кристаллография. 1978. 23. С. 570. [17] Ранати с L. S. // Thin Solid Films. 1980. 66. Р. 3. [18] Lemke H et al. // Phys. Stat. Sol. 1977. 10. Р. 1. [20] Такад S. (J. J. Phys. Soc. Japan. 1969. 26. Р. 1239. [21] Колпаков А. В., Хапачев Ю. П. // Кристаллография. 1973. 18. С. 474. [22] Энтин И. Р. // Письма в ЖЭТФ. 1977. 26. С. 392. [23] Энтин И. Р. // ЖЭТФ. 1979. 77. C. 214. [24] Епtin I. R. // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. 132. Р. 355. [25] Entin I. R. // Phys. Stat. Sol. (b). 1988. 147. Р. 459. [27] Поликарпов И. В., Скадоров В. В. // Весші АН БССР. Сер. фіз.мат. наук. 1985. 741. Р. 212. [30] Иолин Е. М., Унтин И. Р. // ЖЭТФ. 1983. 85. С. 1692. [31] Иолин Е. М., Райтман Э. А., Кузвалдин Б. В., Залачев Ю. (b). 1987. 143. Р. 11. [29] Vardanayan D. M., Manoukyan H. M., Ретозуал Н. М. // Асtа Cryst. 1985. А41. Р. 212. [30] Иолин Е. М., Энтин И. Р. // ЖЭТФ. 1983. ция рентиеновских лучей в кристаллах с одномерным изменением периода решетки. М., 1988. [38] Колпаков А. В. Динамическая дифракция рентгеновских лучей. М., 1989. [39] Иверонова В. И., Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентге-новских лучей. Изд. 2-е. М., 1978. [40] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Кванто-вая механика. М., 1989. [41] Мигулин В. В., Медведев В. И., Мустель Е. Р., Парыгин В. Н. Основы теории колебаний. М., 1988. [42] Маделунг Э. Мате-матический аппарат физики. М., 1961. [43] Элаши Ч. // ТИИЭР. 1976. 64, № 12. C. 22.

> Поступила в редакцию 13.12.90