УДК 548.732

О ЗАДАЧЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В СХЕМЕ БРЭГГА НА КРИСТАЛЛЕ, В КОТОРОМ ВОЗБУЖДЕНА УЛЬТРАЗВУКОВАЯ ВОЛНА

И. Р. Прудников

(кафедра физики твердого тела)

Рассмотрена задача динамической и рентгеновской дифракции по Брэггу на кристалле, в котором возбуждена ультразвуковая волна. С использованием четырехволнового приближения получено аналитическое решение этой задачи для случая рентгеноакустического резонанса ($k_s \simeq \Delta\mathscr{K}_0$, где k_s — волновой вектор ультразвука, $\Delta\mathscr{K}_0$ — минимальное расщепление двухволновой дисперсионной поверхности при дифракции на идеальном кристалле). На основе полученного решения исследована зависимость структуры кривой дифракционного отражения от амплитуды ультразвука.

Введение

В настоящее время имеется целый ряд работ (см., напр., [1, 2], а также монографию [3]), посвященных теоретическому и экспериментальному изучению динамической дифракции рентгеновских лучей (РЛ) в условиях рентгеноакустического резонанса (резонанс имеет место, когда $k_s \simeq \Delta\mathscr{K}_0$, где k_s — волновой вектор возбужденной в кристалле ультразвуковой (УЗ) волны, $\Delta\mathscr{K}_0$ — минимальное расщепление двухволновой дисперсионной поверхности, отвечающей дифракции на идеальном кристалле). При этом в подавляющем числе упомянутых работ рассматривается дифракция РЛ в схеме Лауэ [1—3]. Согласно [1, 2], резонанс связан с межзонным рассеянием РЛ, когда перемешиваются блоховские волны, которые относятся к центрам распространения, расположенным на разных ветвях дисперсионной поверхности. При определенной геометрии возбуждения УЗ-волны (поперечная УЗ-волна с волновым вектором $\mathbf{k}_s$, направленным параллельно отражающим атомным плоскостям) межзонные переходы имеют место также и в случае дифракции по Брэггу [4]. Однако резонансное рассеяние РЛ в схеме Брэгга исследовалось лишь в работах [4, 5] и изучено недостаточно полно. Так, в [4] проведено численное моделирование кривых дифракционного отражения для малой амплитуды УЗ-волны. В работе [5] методом теории возмущений получены аналитические выражения для амплитуд блоховских волн в кристалле, искаженном УЗ-волной.

В настоящей статье на основе подхода с использованием четырехволнового приближения [6] получено аналитическое решение задачи динамической рентгеновской дифракции по Брэггу в условиях рентгеноакустического резонанса и исследована зависимость углового распределения интенсивности рассеянного излучения от амплитуды УЗ-волны.

Вычисление интенсивности отраженного излучения

Рассмотрим задачу динамической рентгеновской дифракции по Брэггу в симметричной геометрии на кристалле с УЗ-полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{a}_0 \sin(\omega_s t) \sin(\mathbf{k}_s, \mathbf{r})$, где ω_s — частота УЗ-колебаний, a_0 — амплитуда стоячей УЗ-волны. Поскольку при дифракции РЛ выполняется условие квазистатичности $v_s \ll v$ (v_s и v — скорости звука и электромагнитной волны соответственно), то при расчетах можно заменить УЗ-поле статическим полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})=\mathbf{a}\sin(\mathbf{k}_s\mathbf{r})$ [2]. Будем считать, что образец, в котором возбуждены УЗ-колебания, представляет собой плоскопараллельную пластину толщиной l. Систему уравнений для медленно меняющихся амплитуд блоховских волн в кристалле получим при помощи стандартного метода [5]. Представим поляризуемость $\chi(\mathbf{r})$ в виде ряда Фурье, а поле в кристалле $\vec{\mathscr{D}}(\mathbf{r})$ в виде разложения по блоховским волнам:

$$\chi(\mathbf{r})=\sum_{G,m}\chi_m^G\exp\{i\,\mathbf{G}_m\mathbf{r}\},\quad \vec{\mathscr{D}}(\mathbf{r})=\sum_{G,m}\vec{\mathscr{D}}_m^G(z)\ \exp\{i\mathbf{k}_m^G\mathbf{r}\},$$

где $m=0,\pm1,\ldots,\ \mathbf{G}_m=\mathbf{G}+m\mathbf{k}_s$ — векторы обратной решетки искаженного кристалла; $\mathbf{G}$ — векторы обратной решетки неискаженного кристалла; $\mathbf{k}_m^G=\mathbf{k}^0+\mathbf{G}_m$ — волновые векторы рассеянных волн; $k^0=2\pi/\lambda$ — волновой вектор падающей на кристалл плоской волны, λ — длина волны излучения; $\chi_m^G=\chi^G(-1)^m\mathrm{J}_m(\mathbf{Ga})$, χ^G — фурье-компоненты поляризуемости идеального кристалла, $\mathrm{J}_m(\mathbf{Ga})$ — функция Бесселя порядка m; $\vec{\mathscr{D}}_m^G(z)$ — амплитуды волн, образовавшихся в результате дифракции с испусканием ($m<0$) или поглощением ($m>0$) $|m|$ акустических фононов; $\vec{\mathscr{D}}_0^G(z)$ — амплитуды волн, отраженных от атомных плоскостей идеального кристалла; $\vec{\mathscr{D}}_0^0(z)$ — амплитуда преломленной волны; $\vec{\mathscr{D}}_m^0(z)$ — амплитуды волн, образовавшихся в результате динамического перерассеяния дифрагированных волн [7]. Будем полагать, что а) в отсутствие УЗ-колебаний ($\mathbf{a}=0$) имеет место двухволновое рассеяние (в разложении для $\vec{\mathscr{D}}(\mathbf{r})$ индекс $G=0,\mathbf{g}$, где $\mathbf{g}$ — вектор дифракции) и б) падающая на кристалл волна характеризуется σ-поляризацией.

Подставим указанные разложения в волновое уравнение и учтем, что амплитуды $\vec{\mathscr{D}}_m^{0,g}(z)$ являются медленно меняющимися функциями по сравнению с $\exp\{i\mathbf{k}_m^{g,0}\mathbf{r}\}$. Тогда для интересующего нас случая ($\mathbf{k}_s\perp\mathbf{g}$, $\mathbf{a}\|\mathbf{g}$ — поперечная УЗ-волна, распространяющаяся параллельно входной поверхности образца) получаем систему уравнений

$$\begin{aligned}
-i\,\frac{d\mathscr{D}_m^0}{dz}&=\frac{k^0}{2\sin\vartheta_0}\left(\chi^0-\frac{2mk_s\cos\vartheta_0}{k^0}\right)\mathscr{D}_m^0+\sum_{p=-\infty}^{\infty}\frac{\chi_{m-p}^{-g}k^0}{2\sin\vartheta_0}\mathscr{D}_p^g,\\
i\,\frac{d\mathscr{D}_m^g}{dz}&=\frac{k^0}{2\sin\vartheta_0}\left(\chi^0-\alpha-\frac{2mk_s\cos\vartheta_0}{k^0}\right)\mathscr{D}_m^g+\sum_{p=-\infty}^{\infty}\frac{\chi_{m-p}^{g}k^0}{2\sin\vartheta_0}\mathscr{D}_p^0,
\end{aligned}\tag{1}$$

где $m=0,\pm1,\ldots$; ϑ_0 — не исправленный на преломление угол Брэгга; $\alpha=-2\sin(2\vartheta_0)\Delta\vartheta$; $\Delta\vartheta=\vartheta-\vartheta_0$ — отстройка; $\chi^0\equiv\chi_0^0$; ось z лежит в плоскости рассеяния и направлена перпендикулярно входной поверхности ($z=0$) в глубь кристалла.

Решение системы (1) не вызывает трудности, когда $k_s\gg\Delta\mathscr{K}_0$, где $\Delta\mathscr{K}_0=k^0|\chi^g|/\cos\vartheta_0$ (высокочастотное акустическое возмущение). При этом в окрестности угла [4]

$$\Delta\vartheta_m=\frac{mk_s}{2k^0\sin\vartheta_0}+\frac{|\chi^0|}{\sin2\vartheta_0},\tag{2}$$

определяющего положение сателлита с номером m, в (1) можно учитывать только амплитуды $\mathscr{D}_0^0$ и $\mathscr{D}_m^g$ (двухволновое приближение для сателлитов [6, 7]). В резонансном случае, когда $k_s \simeq \Delta\mathscr{K}_0$, дифракционная задача становится многоволновой [2, 7]. Для исследования этой задачи в [2, 5] был использован метод теории возмущений (малый параметр — амплитуда УЗ) и было показано, что в первом порядке теории возмущений отличны от нуля амплитуды $\mathscr{D}_{\pm1}^0$, $\mathscr{D}_{\pm1}^g$ (рассеяние с поглощением или испусканием одного фонона). Таким образом, в [2, 5] получено решение многоволновой задачи в шестиволновом приближении, а именно учитывались две волны нулевого приближения с амплитудами $\mathscr{D}_0^{0,g}$ и четыре волны первого приближения с амплитудами $\mathscr{D}_{\pm1}^0$, $\mathscr{D}_{\pm1}^g$.

При использовании теории возмущений накладывается ограничение на величину амплитуды УЗ-волны a, поскольку в случае достаточно больших значений a поправки, найденные по теории возмущений, становятся большими и итерационные ряды сходятся плохо [8]. Более общим методом решения (1), который не связан в явном виде с требованием малости амплитуды УЗ, является четырехволновое приближение. Этот подход использовался в [6] для изучения дифракции РЛ на УЗ-волне в схеме Лауэ. В рамках четырехволнового приближения в [6] учитывались четыре волны с амплитудами $\mathscr{D}_0^{0,g}$, $\mathscr{D}_{\pm1}^{0,g}$ и было показано, что система уравнений для этих амплитуд имеет точное аналитическое решение.

Рассмотрим случай резонансного рассеяния РЛ ($k_s \geqslant \Delta\mathscr{K}_0$) и используем при исследовании (1) четырехволновое приближение. В области $\Delta\vartheta > |\chi^0|/\sin 2\vartheta_0$ будем учитывать амплитуды $\mathscr{D}_0^{0,g}$, $\mathscr{D}_{+1}^{0,g}$, а в области $\Delta\vartheta < |\chi^0|/\sin 2\vartheta_0$ — амплитуды $\mathscr{D}_0^{0,g}$, $\mathscr{D}_{-1}^{0,g}$ ($\Delta\vartheta = |\chi^0|/\sin 2\vartheta_9$ — угол Брэгга, исправленный на преломление). Учет именно этих амплитуд можно объяснить следующим образом. Из (2) следует, что в резонансном случае сателлиты с номерами $m = \pm 1$ расположены вблизи границ основного рефлекса

$$\left(\Delta\vartheta_{+1} \geqslant \frac{|\chi^g|}{\sin 2\vartheta_0} + \frac{|\chi^0|}{\sin 2\vartheta_0},\ \Delta\vartheta_{-1} \leqslant - \frac{|\chi^g|}{\sin 2\vartheta_0} + \frac{|\chi^0|}{\sin 2\vartheta_0}\right);$$

т. е. имеет место перекрывание максимумов. Поэтому при $\Delta\vartheta > |\chi^0|/\sin 2\vartheta_0$ необходимо принимать во внимание волны, отвечающие основному рефлексу (амплитуды $\mathscr{D}_0^{0,g}$), волны, отвечающие первому максимуму (амплитуда $\mathscr{D}_1^g$), и волну, которая появляется в результате динамического перерассеяния дифрагированной волны (амплитуда $\mathscr{D}_1^0$). По аналогичной причине в области $\Delta\vartheta < |\chi^0|/\sin 2\vartheta_0$ будем учитывать амплитуды $\mathscr{D}_0^{0,g}$, $\mathscr{D}_{-1}^{0,g}$. Рассмотрим сначала область $\Delta\vartheta > |\chi^0|/\sin 2\vartheta_0$. Приведем (1) к более симметричному виду при помощи преобразования $\mathscr{D}_0^{0,g}(z) = D_0^{0,g}(z)\exp\{i\varphi z\}$, $\mathscr{D}_1^{0,g}(z) = D_1^{0,g}(z)\exp\{i\varphi z\}$, где $\varphi = k^0\alpha/(4\sin\vartheta_0)$. Поля $D_0^{0,g}(z)$, $D_1^{0,g}(z)$ удовлетворяют уравнениям (для простоты будем считать, что $\chi^{-g} = \chi^g$):

$$\begin{aligned} i\frac{dD_0^{0,g}}{dz} &= \mp A_0 D_0^{0,g} \mp B D_0^{g,0} - C D_1^{g,0}, \\ i\frac{dD_1^{0,g}}{dz} &= \mp A_1 D_1^{0,g} \mp B D_1^{g,0} + C D_0^{g,0}, \end{aligned} \tag{3}$$

где $A_0 = k^0(2\chi^0 - \alpha)/(4\sin\vartheta_0)$, $A_1 = k^0\left(2\chi^0 - \alpha - 4\frac{k_s}{k_0}\cos\vartheta_0\right) \Big/ (4\sin\vartheta_0)$,

$B=\chi_0^g k^0/(2\sin\vartheta_0)$, $C=\chi_1^g k^0/(2\sin\vartheta_0)$. Решение системы линейных дифференциальных уравнений (3) проводится стандартным методом [9]. Характеристическое уравнение, отвечающее (3), является биквадратным:

$$\lambda^4-2\lambda^2(C^2+\delta-\Delta_+^2)+(C^2-\Delta_+^2+\delta_-^2)(C^2-\Delta_+^2+\delta_+^2)=0, \tag{4}$$

где $\Delta_+=A_0-(k_s\operatorname{ctg}\vartheta_0/2)$, $\delta_\pm=B\pm(k_s\operatorname{ctg}\vartheta_0/2)$, $\delta=B^2-(k_s\operatorname{ctg}\vartheta_0/2)^2$. Из (4) находим собственные значения:

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2}&=\pm\left(C^2-\Delta_+^2+\delta+\sqrt{\Delta_+^2-C^2}\,k_s\operatorname{ctg}\vartheta_0\right)^{\frac{1}{2}},\\ \lambda_{3,4}&=\pm\left(C^2-\Delta_+^2+\delta-\sqrt{\Delta_+^2-C^2}\,k_s\operatorname{ctg}\vartheta_0\right)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{5}$$

Общее решение системы (3) имеет вид

$$\widehat{D}(z)=\sum_{n=1}^{4}\beta_n\widehat{d}_n e^{\lambda_n z},$$

где $\widehat{D}(z)=\begin{pmatrix}D_0^0(z)\\ D_0^g(z)\\ D_1^0(z)\\ D_1^g(z)\end{pmatrix}$ — матрица-столбец амплитуд; $\hat{d}_n$ — собственный вектор, соответствующий собственному значению λ_n; β_n — постоянные, определяемые из граничных условий. Пусть рассматриваемый кристалл является толстым ($\mu l\gg1$, где μ — линейный коэффициент поглощения). Тогда в разложении для $\hat{D}(z)$ следует оставить члены с $n=2,4$, которые описывают волны, затухающие на бесконечности. Постоянные $\beta_{2,4}$ определяются из граничных условий $D_0{}^0(0)=1$, $D^0{}_1(0)=0$. В таком случае амплитуды рассеянных волн при $z=0$ определяются выражениями

$$\begin{aligned}D_0^g(0)&=\{2R/(BQ)\}\{\xi-R+i\lambda_2\}\{\xi+R+i\lambda_4\},\\ D_1^g(0)&=\{-C/Q\}\{2R+i(\lambda_4-\lambda_2)\},\end{aligned} \tag{6}$$

где $Q=\Delta_+(2R+i(\lambda_4-\lambda_2))-R(2\xi+i(\lambda_4+\lambda_2))$, $R=\sqrt{\Delta_+^2-C^2}$, $\xi=k_s\operatorname{ctg}\vartheta_0/2$.

Решение системы уравнений для амплитуд $D_0^{0,g}$, $D_{-1}^{0,g}$ в области $\Delta\vartheta<$ $<|\chi^0|/\sin2\vartheta_0$ совпадает с решением системы (3), если в последнем сделать замены $k_s\to(-k_s)$, $\chi_1^g\to(-\chi_1^g)$. Строго говоря, амплитуды $D(z)$, полученные при $\Delta\vartheta>|\chi^0|/\sin2\vartheta_0$ и при $\Delta\vartheta<|\chi^0|/\sin2\vartheta_0$, необходимо «сшить» друг с другом в точке $\Delta\vartheta=|\chi^0|/\sin2\vartheta_0$. Однако в рассматриваемой нами области значений параметров задачи ($k_s\simeq\Delta\mathscr{K}_0$, $|\mathbf{g}\mathbf{a}|\leqslant1$) значения этих амплитуд в точке $\Delta\vartheta=|\chi^0|/\sin2\vartheta_0$ одинаковы.

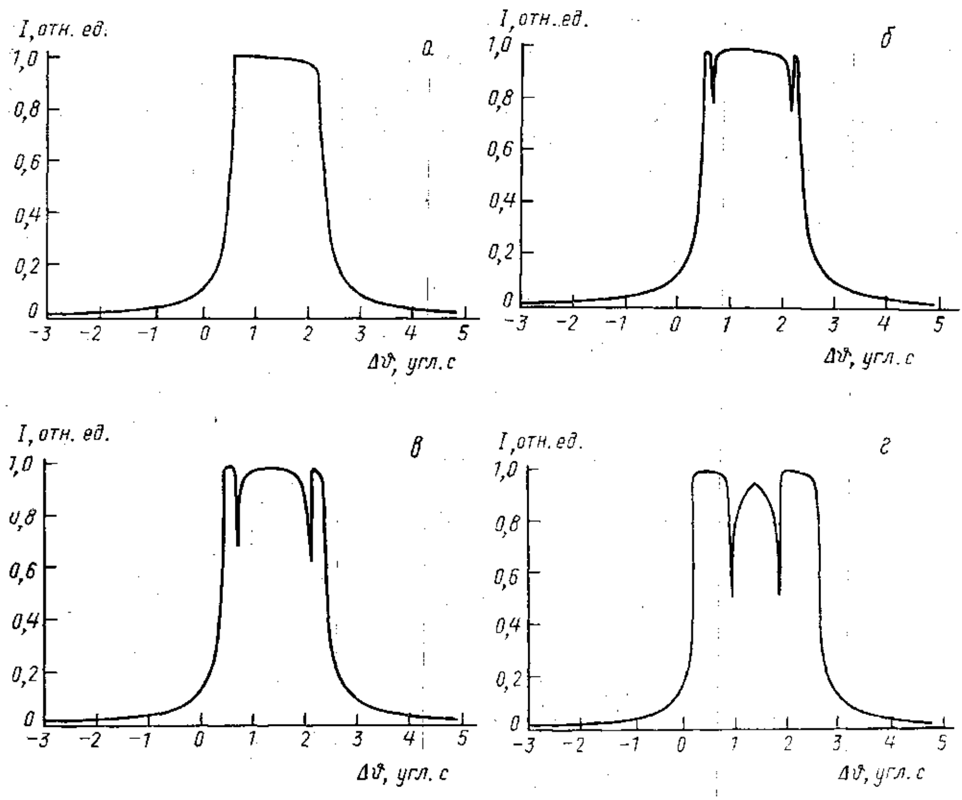
Сформулируем условие, при выполнении которого в (1) можно отбросить члены с $|m|>1$, т. е. пренебречь сателлитами высоких порядков. Поскольку угловая ширина $\delta\vartheta_m$ рефлекса с $|m|\gg1$ равна $\delta\vartheta_m=$ $=\delta\vartheta_B\cdot|J_m(\mathbf{g}a)|$ [4, 6] ($\delta\vartheta_B=2|\chi^g|/\sin2\vartheta_0$ — ширина области полного отражения для неискаженного кристалла), то при выполнении критерия $|J_m(\mathbf{ga})|\ll|J_1(\mathbf{ga})|$ максимумы с $|m|>1$ являются чрезвычайно узкими и их можно не рассматривать.

Проанализируем различные предельные случаи. Из (6) следует, что при $a=0$ (неискаженный кристалл)

$$D^g_{\pm 1}(0)=0,\ D^g_0(0)=-(\eta_0 \mp i\sqrt{1-\eta_0^2}),$$

где η_0 — нормированная угловая отстройка [10]. Последнее выражение для $D^g_0(0)$ совпадает с известным выражением теории рассеяния РЛ на идеальных кристаллах [10]. В случае, когда $k_s \gg \Delta\mathscr{K}_0$ (двухволновое приближение), из (6) находим, что $D^g_1(0) \approx -C/(\Delta_+ \pm \pm\sqrt{\Delta_+^2 - C^2})$, $D^g_{-1}(0) \approx C/(\Delta_- \pm \sqrt{\Delta_-^2 - C^2})$, где знаки выбираются в соответствии с общим правилом, сформулированным в [10], $\Delta_- = A_0 + + (k_s \operatorname{ctg} \vartheta_0/2)$. Таким образом, если пренебречь фотоэлектрическим поглощением, то при $k_s \gg \Delta\mathscr{K}_0$ в угловых областях, отвечающих сателлитам ($|\Delta_\pm| \leqslant |C|$), имеет место полное отражение энергии падающей на кристалл волны. Этот результат согласуется с заключениями, приведенными в [4, 8].

Проанализируем зависимость интенсивности отраженного излучения при резонансном рассеянии ($k_s = \Delta\mathscr{K}_0$) от амплитуды УЗ a. Интенсивность отраженного излучения, усредненная в направлении, параллельном входной поверхности $z=0$, имеет вид $I = |D^g_0(0)|^2 + |D^g_1(0)|^2 + + |D^g_{-1}(0)|^2$. На рисунке приведены рассчитанные на основе формул (6) угловые распределения интенсивности I. Использованные при расчетах данные по дифракционному эксперименту взяты из работы [4]. Согласно рисунку, при возбуждении в кристалле УЗ-волны с волновым век-



Кривые дифракционного отражения в резонансном случае: отражение (220) монокристалла Si; излучение AgK_α; σ-поляризация; длина УЗ-волны $\lambda_s=46{,}8$ мкм; амплитуда УЗ-волны $a=0$ — идеальный кристалл (*а*); $a=0{,}05$ Å (*б*); 0,1 Å (*в*); 0,3 Å (*г*).

тором, отвечающим условию резонанса, на кривой дифракционного отражения появляются минимумы, причем глубина указанных минимумов возрастает с увеличением амплитуды УЗ. Это связано с тем, что в соответствии с (5) угловая ширина основного рефлекса в четырехволновом приближении описывается выражением

$$\delta\vartheta_0 = (k^0 \cos\vartheta_0)^{-1} \cdot \left| \left\{ k_s \operatorname{ctg}\vartheta_0 - 2\sqrt{C^2 + \left(\frac{k_s \operatorname{ctg}\vartheta_0}{2} - |B|\right)^2} \right\} \right|, \tag{7}$$

где $(k_s \operatorname{ctg}\vartheta_0) \geqslant 2|B|$, и уменьшается при увеличении амплитуды a от значения $a=0$ до некоторого значения a_1, определяемого условием $\delta\vartheta_0=0$. Напротив, угловые ширины сателлитов первого порядка [4] $(\delta\vartheta_{\pm1} = \delta\vartheta_B \cdot |J_1(\mathbf{g}a)|)$ и их интенсивности при указанном увеличении амплитуды возрастают. Следовательно, рисунок иллюстрирует «появление» сателлитов на фоне гаснущего основного рефлекса.

Рассмотрим изменение ширины основного рефлекса $\delta\vartheta_0$ в зависимости от амплитуды УЗ в случае резонанса $(k_s=\Delta\mathscr{K}_0)$ и при двухволновом рассеянии $(k_s \gg \Delta\mathscr{K}_0)$. Если $k_s \gg \Delta\mathscr{K}_0$, то из (7) имеем формулу $\delta\vartheta_0 \approx \delta\vartheta_B \cdot |J_0(\mathbf{g}a)|$, которая совпадает с выражением, полученным в [6 ,7]. Когда $k_s=\Delta\mathscr{K}_0$, выражение (7) приобретает вид $\delta\vartheta_0 = \delta\vartheta_B |\{1 - \sqrt{(J_1(\mathbf{g}a))^2 + (J_0(\mathbf{g}a) - 1)^2}\}|$. Для малых значений амплитуды УЗ $\delta\vartheta_0 = \delta\vartheta_B(1-(\mathbf{g}a)^2/4)$ при $k_s \gg \Delta\mathscr{K}_0$ и $\delta\vartheta_0=\delta\vartheta_B(1-|\mathbf{g}a|/2)$ при $k_s=\Delta\mathscr{K}_0$. Таким образом, в случае резонанса ширина нулевого рефлекса гораздо быстрее уменьшается с ростом амплитуды УЗ, чем при двухволновом рассеянии.

В заключение отметим, что приведенные на рисунке кривые качания имеют угловую полуширину, равную $\sim 2''$. Тем не менее они могут быть исследованы экспериментально. Например, в работе [7] кривые дифракционного отражения в условиях резонанса измерены с угловым разрешением $\sim 0{,}1''$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Энтин И. Р.//Письма в ЖЭТФ. 1977. **26**, № 5. С. 392.
2. Энтин И. Р.//ЖЭТФ. 1979. **77**, № 1(7). С. 214.
3. Даценко Л. И., Молодкин В. Б., Осиновский М. Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. Киев, 1988.
4. Ассур К. П., Энтин И. Р.//ФТТ. 1982. **24**. С. 2122.
5. Polikarpov I. V., Skadorov V. V.//Phys. Stat. Sol. (b). 1987. **143**. P. 11.
6. Носик В. Л.//Кристаллография. 1991. **36**, № 5. С. 1082.
7. Энтин И. Р. Динамические эффекты в акустооптике рентгеновских лучей и тепловых нейтронов: Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Черноголовка, 1986.
8. Колпаков А. В., Прудников И. Р. Дифракция рентгеновских лучей в сверхрешетках. М., 1992.
9. Тихонов А. Н., Васильева А. Б., Свешников А. Г. Дифференциальные уравнения. М., 1985.
10. Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика. М., 1982.

Поступила в редакцию
19.07.95