

УДК 548.732

РЕНТГЕНОВСКАЯ ЛАУЭ ДИФРАКЦИЯ С УЧЕТОМ ВТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АМПЛИТУД В УРАВНЕНИЯХ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ

М.К. БАЛЯН*

Ереванский государственный университет, Армения

*e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 30 ноября 2012 г.)

Рассмотрена асимметричная Лауэ дифракция в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью. В уравнениях динамической дифракции учитываются вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции. С использованием соответствующей функции Грина получено общее выражение амплитуды дифрагированной волны в кристалле. Учтены как размеры источника по обоим направлениям, так и расстояние источник–кристалл и некогерентность падающего на кристалл излучения. На основе полученного выражения проанализированы когерентные характеристики поля в зависимости от размеров источника и ширины спектра падающего излучения. Приведены уравнения распространения зависящего от времени рентгеновского импульса в идеальном кристалле с сохранением вторых производных амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции.

1. Введение

В своем первоначальном варианте теория динамической дифракции рентгеновских волн была разработана для падающей плоской волны, в которой расстояние источник–кристалл (равное бесконечности) и расходимость пучка (равная нулю) были фиксированы [1,2]. Като развил теорию, учитывающую расходимость пучка в плоскости дифракции, когда источник расположен близко к кристаллу [3]. В этой теории расстояние источник–кристалл также было фиксированным параметром и считалось равным нулю. Это привело к пониманию нового типа маятниковых полос – маятниковых полос точечного источника, расположенного на поверхности кристалла. В дальнейшем была разработана теория сферической волны, учитывающая расходимость пучка в плоскости дифракции и расстояние источник–кристалл как параметры [4-6]. Была обнаружена фокусировка сферической волны внутри и вне кристалла в случае Лауэ. В работе [7] исследовалась динамическая симметричная Лауэ дифракция так называемой локально-плоской волны, когда кристалл находится в зоне Фраунгофера падающего излучения. В этом случае на выходной поверхности кристалла зависимость от координаты вдоль поверхности в плоскости дифракции

имеет такой же вид, как зависимость коэффициента отражения от параметра отклонения от точного условия Брэгга. Все эти теории можно рассматривать с одной общей точки зрения, используя уравнения динамической дифракции [8]. Уравнения двухволновой динамической дифракции рентгеновских пучков двумерны – в них входят производные амплитуд по координатам точки в плоскости дифракции. Однако, если не наложить ограничения на расходимость пучка перпендикулярно к плоскости дифракции, то необходимо дальнейшее развитие теории. Так, в [9], считая, что падающий пучок имеет значительную расходимость как в плоскости дифракции, так и в перпендикулярном направлении, с нахождением всех направлений на входной поверхности кристалла, удовлетворяющих точному условию Брэгга, и с помощью суммирования откликов плоскостных компонент была решена задача динамической дифракции в идеальном кристалле в симметричном случае Лауэ. В итоге оказалось, что каждый луч, удовлетворяющий точному условию Брэгга, выбирает свою плоскость дифракции, в которой происходит перенормировка глубины, с учетом координаты, перпендикулярной к стандартной плоскости дифракции. Такая же задача, но в случае Брэгга, была рассмотрена в [10].

При решении некоторого круга задач динамической дифракции возникает необходимость учитывать в этих уравнениях вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции (обычно координата y). Так, например, в работах [11,12], в связи с задачей двумерной фокусировки пучка с помощью кристалла, вектор смещения атомов которого из своих равновесных положений зависит от координаты y , обсуждался вопрос игнорирования вторых производных амплитуд по этой координате. В работе [13] вторые производные амплитуд сохранены при исследовании некомпланарной дифракции рентгеновского пучка в условиях зеркального отражения [14]. Зависимость амплитуд от y важна при исследовании фокусировки рентгеновского пучка с помощью кристалла с неплоским входным и выходным поверхностями. Такая фокусировка, без привлечения вторых производных, на основе плоскостной теории рассматривалась в [15,16]. Однако в [17] было представлено эйкональное приближение уравнений динамической дифракции, в которых сохранены вторые производные амплитуд. На основе такого эйконального приближения вопрос фокусировки рентгеновского пучка с помощью кристалла с неплоскими входным и выходным поверхностями в симметричном случае Лауэ рассматривался в [18]. В работе [19] найдена запаздывающая функция Грина уравнений динамической дифракции со вторыми производными амплитуд по y в идеальном кристалле. Решения для амплитуд внутри идеального кристалла представлены с помощью свертки амплитуд и функции Грина по поверхности кристалла. Такое представление дает возможность описать дифракцию внутри идеального кристалла как с плоской, так и с неплоской входной и выходной поверхностями для произвольного падающего пучка. Следует сказать, что здесь подразумевается существование одной несущей волны с расходимостью пучка

в обоих взаимоперпендикулярных плоскостях, что отличается от рассмотренной в [9,10] динамической дифракции широко расходящегося пучка.

В настоящей работе полученное в работе [19] представление решения будет применено для выявления влияния вторых производных амплитуд на лауэвскую дифракцию внутри идеального кристалла с плоской входной и выходной поверхностями, а также для оценок пространственной и временной когерентности пучков в рассматриваемом случае. Учитываются расходимость пучка как в плоскости дифракции, так и в перпендикулярном направлении, а также расстояние источник–кристалл. Если кристалл находится в зоне Фраунгофера падающего излучения, то реализуется случай локально-плоской падающей волны и можно исследовать коэффициент отражения в зависимости от координат x и y . В случае падающей сферической волны, когда кристалл находится в зоне Френеля падающего излучения, можно исследовать явление фокусировки сферической волны, учитывая также зависимость амплитуд от координаты y . Наконец, если кристалл расположен близко к источнику, когда реализуется случай Като, то можно считать, что источник расположен на поверхности кристалла и возможно исследовать влияние зависимости амплитуд от y на вид маятниковых полос. В конце статьи приводятся уравнения распространения зависящего от времени рентгеновского импульса в идеальном кристалле с сохранением вторых производных амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции.

2. Основные формулы

Рассмотрим асимметричную Лауэ дифракцию в идеальном кристалле с плоской входной и выходной поверхностями. Введем две системы координат. Одну из них – $OX'Y'Z'$, свяжем с отражающими плоскостями, а другую – $Oxyz$, с поверхностью кристалла (рис. 1a,b), причем ось OZ направлена вдоль отражающих плоскостей в глубь кристалла, а ось OX антипараллельна вектору дифракции. Ось Oy перпендикулярна плоскости дифракции (плоскость рисунка) по правилу правой системы координат. В идеальном кристалле, в условиях двухволновой динамической дифракции, амплитуды проходящей и дифрагированной волны E_0 , E_h , соответственно, при сохранении вторых производных амплитуд по координате y , согласно [19], можно представить в виде

$$E_{0,h}(\mathbf{r}) = 4ik \cos \theta \int_S G \frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial y'^2} dS_Z - 4k^2 \cos^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial Z'} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial Z'} \right) dS_Z + \\ + 4k^2 \sin^2 \theta \int_S \left(G \frac{\partial E_{0,h}}{\partial X'} - E_{0,h} \frac{\partial G}{\partial X'} \right) dS_X, \quad (1)$$

где $\mathbf{r}(X, y, Z)$ – радиус-вектор точки наблюдения, $\mathbf{r}'(X', y', Z')$ – радиус-вектор текущей точки поверхности кристалла в интегралах формулы (1), $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, λ – длина волны, θ – угол Брэгга, G – запаздывающая функция Грина, dS_X , dS_Z – компоненты элемента $d\mathbf{S}$ поверхности кристалла на соответст-

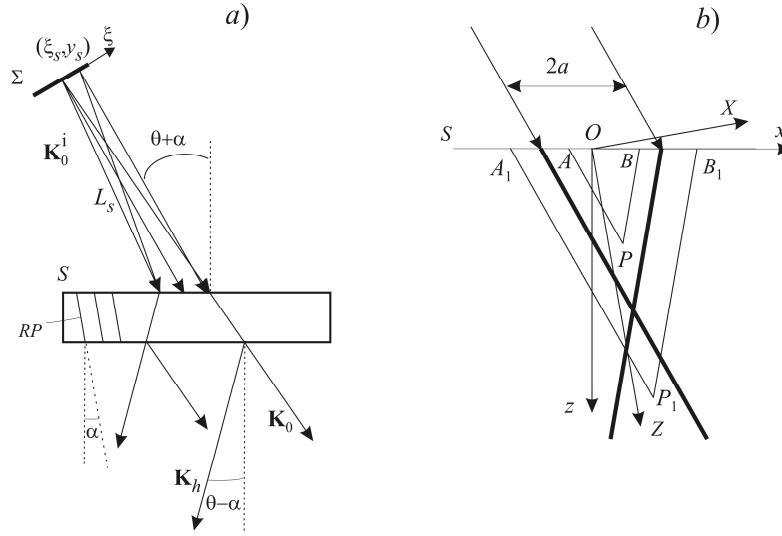


Рис.1. *a)* Общая схема дифракции. Σ – протяженный источник рентгеновских лучей, ось $O\xi$, (ξ_s, η_s) – координаты некоторой точки источника, \mathbf{K}_0^i , L_s – средний волновой вектор падающей волны и среднее расстояние источник – кристалл, показаны лучи, исходящие из точек источника $(0, \eta_s)$ и (ξ_s, η_s) , S – поверхность кристалла, RP – отражающие плоскости, пунктирами показаны перпендикуляры к поверхности кристалла и продолжение проекции отражающих плоскостей, показаны соответствующие углы, \mathbf{K}_0 , \mathbf{K}_h – волновые векторы прошедшей и дифрагированной волн; *b)* показаны координатные оси Ox , Oz и OX , OZ , ось Oy перпендикулярна к плоскости рисунка, $2a$ – ширина пучка (щели), жирными линиями показаны характеристики $Ztg\theta + X = \text{const}$, $Ztg\theta - X = \text{const}$, проходящие через края пучка, P , P_1 – точки наблюдения в областях выше и ниже точки пересечения этих характеристик, соответственно, AB , A_1B_1 – области поверхности кристалла, заключенные между пересечениями этой поверхности с характеристиками, проходящими через точки наблюдения P и P_1 , соответственно.

вующие оси координат, причем нормаль к $d\mathbf{S}$ направлена во внешнюю сторону объема кристалла. Запаздывающая функция Грина имеет вид

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{-i\pi/4}}{4\pi} \frac{1}{2k^2 \sin 2\theta} \sqrt{\frac{2\pi k \cos \theta}{Z - Z'}} e^{ik \frac{(y-y')^2 \cos \theta}{2(Z-Z')}} \times \quad (2)$$

$$\times J_0(\sigma \sqrt{(Z - Z')^2 \text{tg}^2 \theta - (X - X')^2}) H(Z - Z') H((Z - Z') \text{tg} \theta - |X - X'|),$$

где $H(x)$ – функция Хевисайда, равная 1 при $x > 0$ и 0 при $x < 0$, а $\sigma = k(\chi_h \chi_{-h})^{1/2}$, J_0 – функция Бесселя нулевого порядка. Из-за наличия функций Хевисайда в выражении функции Грина (2), фактически интегрирование в (1) проводится по участку AB поверхности S , находящейся между двумя пересечениями поверхности кристалла с плоскостями $Ztg\theta - X = Z'tg\theta - X'$ и $Ztg\theta + X = Z'tg\theta + X'$, проходящие через точку наблюдения (X, Z) (рис.1b). Координаты (X, Z) и (x, z) связаны друг с другом преобразованием поворота

$$\begin{aligned} X &= x \cos \alpha - z \sin \alpha, \\ Z &= x \sin \alpha + z \cos \alpha, \end{aligned} \quad (3)$$

где α – угол между отражающими плоскостями и нормалью к поверхности кристалла (рис.1). Мы будем рассматривать только дифрагированную волну. К обычным граничным условиям дифрагированной волны для случая Лауэ на входной поверхности кристалла ($z = 0$) [1,2] следует добавить граничное условие для второй производной по y

$$\partial E_h / \partial y = 0 \Rightarrow \partial^2 E_h / \partial y^2 = 0. \quad (4)$$

Будем считать, что источник излучает квазимонохроматическую волну с максимумом интенсивности для длины волны λ_m . Пусть источник имеет размеры, причем в плоскости дифракции координата произвольной точки источника пусть будет ξ_s (рис.1а) (ось $O\xi$ находится в плоскости источника и в плоскости дифракции), а в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении – y_s . Из каждой точки источника с координатами (ξ_s, y_s) излучается сферическая волна. Будем считать, что центральная точка источника $(0,0)$ находится на расстоянии L_s от кристалла, причем волновой вектор \mathbf{K}_0^i , направленный от точки $(0,0)$ источника перпендикулярно к источнику, будем считать несущим волновым вектором. Для различных длин волн длина \mathbf{K}_0^i различна: $|\mathbf{K}_0^i| = k = 2\pi/\lambda$, но направления всех \mathbf{K}_0^i для всех длин волн одинаковы. Нам необходимо разложить фазу падающей волны до четвертого порядка по $1/L_s$ включительно, так как в уравнениях динамической дифракции оставлены вторые производные амплитуд по y . Нетрудно видеть, что для источника с координатами (ξ_s, y_s) падающая волна будет иметь вид

$$E_0^i e^{i\Phi^i} e^{i\mathbf{K}_0^i \mathbf{r}'} / L_s, \quad (5)$$

причем

$$\Phi^i = k \frac{\left[(x' \gamma_0 - \xi_s)^2 + (y' - y_s)^2 \right]}{2L_s} - k \frac{x' \sin(\theta + \alpha)}{2} \frac{(y' - y_s)^2}{L_s^2} - k \frac{(y' - y_s)^4}{8L_s^3}. \quad (6)$$

Здесь $\gamma_0 = \cos(\theta + \alpha)$. Учитывая (5) и то, что внутри кристалла несущие волновые векторы прошедшей и дифрагированной волн выбраны так, что удовлетворяют точному условию Брэгга для данной длины волны, а также рефракцию, из непрерывности амплитуд находим амплитуду проходящей волны на входной поверхности:

$$E_0 = \frac{E_0^i}{L_s} e^{i\Phi^i} e^{ik\Delta\theta\gamma_0} \exp \left[-ik \frac{\chi_0 x' \gamma_h (1-b)}{2 \sin 2\theta} \right]. \quad (7)$$

Здесь $\gamma_h = \cos(\theta - \alpha)$, $b = \gamma_0/\gamma_h$ – фактор асимметричности, χ_0 – нулевая Фурье-компонента поляризуемости кристалла, $\Delta\theta(\lambda) = (K_{0x}^i - K_{0x})/k = \theta^i - \theta(\lambda)$ – отклонение от точного условия Брэгга для данной длины волны, а θ^i – угол скольжения относительно отражающих плоскостей для \mathbf{K}_0^i . Используя закон Брэгга, нетрудно видеть, что

$$\Delta\theta(\lambda) = \theta^i - \theta(\lambda_m) - \frac{\lambda - \lambda_m}{\lambda} \operatorname{tg}\theta = \Delta\theta(\lambda_m) - \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \operatorname{tg}\theta. \quad (8)$$

Теперь учтем, что $dS_Z = -dX'dy' = -\cos\alpha dx' dy'$, $dS_X = dZ'dy' = \sin\alpha dx' dy'$. Тогда, используя стандартные граничные условия для геометрии Лауэ и добавляя граничное условие (4), из формулы (1) приходим к выражению

$$E_h(\mathbf{r}) = 2ik\chi_h\gamma_0 \int_S k^2 G(\mathbf{r}; x', y') E_0(x', y') dx' dy'. \quad (9)$$

При интегрировании в (9) по y' учтем, что функция Грина, согласно (2), содержит быстро осциллирующую экспоненту, которая имеет стационарную точку $y'_{st} = y$. Разлагая остальные члены фазы около стационарной точки до линейных членов по $(y' - y_{st})$ включительно и проведя интегрирование в бесконечных пределах по y' , из (9) приходим к следующему представлению (здесь для определенности в аргументе амплитуды явно написаны координаты источника и длина волны):

$$E'_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\lambda) = A e^{i\Phi_0(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\lambda)} \int_{-l}^l J_0\left(\sigma\sqrt{\gamma_0\gamma_h}\sqrt{l^2 - x'^2} / \cos\theta\right) e^{i\Phi(x'; \xi_s, y_s, \Delta\lambda)} dx', \quad (10)$$

где $E'_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s) = E_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s) e^{ik\chi_0 Z / (2\cos\theta)}$, $l \equiv z \sin 2\theta / (2\gamma_0\gamma_h)$,

$$A = [ik\chi_h\gamma_0 / (2\sin 2\theta)] (E_0^i / L_s),$$

$$\begin{aligned} \Phi_0 = & kz\gamma_0 \left(\frac{\chi_0(1+b)}{4b\cos^2\theta} \left(1 + \frac{(1-b)^2}{4b\sin^2\theta} \right) - \frac{\Delta\theta(1-b^2)}{2b\sin 2\theta} \right) + k\gamma_0\Delta\theta x + \frac{k}{2L_s} \left(\gamma_0 x - \frac{z\gamma_h(1-b^2)}{2\sin 2\theta} - \xi_s \right)^2 + \\ & + \frac{k(y-y_s)^2}{2L_s} - \frac{k(y-y_s)^2}{2L_s^2} \left(x\sin(\theta+\alpha) + \frac{z\gamma_h(1+b)^2}{4\cos^2\theta} \right) - \frac{k(y-y_s)^4}{8L_s^3}, \end{aligned} \quad (11)$$

и

$$\Phi = \beta x' + kx'^2 \gamma_0^2 / (2L_s), \quad (12)$$

$$\beta = \frac{k\gamma_0}{2\sin 2\theta} \left(2\sin 2\theta\Delta\theta - \frac{\chi_0(1-b)}{b} \right) + \frac{k\gamma_0}{L_s} \left(x\gamma_0 - \frac{z\gamma_h(1-b^2)}{2\sin 2\theta} - \xi_s - \frac{\operatorname{tg}\theta(y-y_s)^2}{2L_s} \right). \quad (13)$$

Как видно из формулы (10), существенно новой по сравнению со стандартной теорией [2] является появление отклонения от условия Брэгга по координате y в выражении β формулы (13). Как и следовало ожидать, зависимость отклонения от условия Брэгга по координате y является квадратичной. Этот член и должен обуславливать нетривиальную зависимость амплитуды и пространственную когерентность пучка от координаты y .

3. Временная и пространственная когерентность

В литературе имеется много работ по вопросу о пространственной и временной когерентности в рентген-дифракционной оптике (см., например, [20-24]). Эта задача рассматривалась также в сравнительно недавно вышедших работах [7,25-31]. Основной подход заключается в том, что для исследования про-

пространственной когерентности протяженный источник делят на отдельные точечные источники и, суммируя результирующую интенсивность по координатам источников, рассматривают влияние размеров источника на дифракционную или же на интерференционную картину. Для исследования влияния временной когерентности либо получают уравнение распространения зависящего от времени рентгеновского импульса в кристалле, либо же падающий пучок разлагают в Фурье-спектр – на отдельные монохроматические составляющие, и после решения задачи для отдельной монохроматической компоненты суммируют результирующую интенсивность по длинам волн (или по частотам). В этой статье новым в этом вопросе является нетривиальная зависимость интенсивности от координаты y . Обсуждение пространственной и временной когерентности по формуле (10) проведем по аналогии с работой [7].

3.1. Влияние размеров источника: пространственная или поперечная когерентность

Зафиксируем длину волны и будем рассматривать интенсивность дифрагированной волны (т.е. квадрат модуля амплитуды, заданной формулой (10)) для данного точечного источника. Будем считать, что размеры источника по ξ меняются в пределах $(-a_h, a_h)$, а по y , в пределах $(-a_y, a_y)$. При возведении в квадрат модуля выражения (10) и интегрировании по координатам источника в выражении интенсивности появится взаимная интенсивность типа

$$I_h(x', x'') = \int_{-a_h}^{a_h} \int_{-a_y}^{a_y} |E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2 \exp \left[i \frac{k\gamma_0}{L_s} (x'' - x') \left(\xi_s + \operatorname{tg}\theta \frac{(y - y_s)^2}{2L_s} \right) \right] d\xi_s dy_s. \quad (14)$$

Если задать некоторое распределение интенсивности $|E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2$ по координатам источников (обычно гауссовское распределение, но можно использовать и равномерное распределение с функцией Хевисайда), то можно провести интегрирование в (14) и затем, интегрируя по x' и x'' , найти окончательное выражение для интенсивности. Тогда суммирование по координатам источников в конечном выражении интенсивности приведет к некоторой степени размазывания дифракционной картины до полного ее исчезновения в зависимости от размеров источника и точки наблюдения в кристалле. Но можно непосредственно из (14) оценить размеры источника, при котором получается неразмытая дифракционная картина. Сначала заметим, что при интегрировании по y_s можно член $\exp[ik\gamma_0(x'' - x')\operatorname{tg}\theta y_s^2/(2L_s^2)]$ считать медленным по сравнению с членом, линейным по y_s зависимостью в фазе, так как максимальное значение a_y обычно порядка 100 мкм, L_s можно считать порядка метра, а максимальное значение $(x'' - x')$ порядка $2L$. Оставляя в фазе главный член, линейный по y_s , взаимную интенсивность можно написать в виде

$$I_{hs}(x', x'') = \int_{-a_h}^{a_h} \int_{-a_y}^{a_y} |E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2 \exp \left[i \frac{k\gamma_0}{L_s} (x'' - x') \left(\xi_s - \operatorname{tg}\theta \frac{yy_s}{L_s} \right) \right] d\xi_s dy_s. \quad (15)$$

В экспериментах падающий пучок всегда имеет ограниченные размеры на входной поверхности кристалла. Обозначим размер пучка вдоль входной поверхности кристалла через $2a$. Тогда максимальное значение $x_{\max} = \max(x'' - x')$ будет равно, согласно (10), $\min(2l, 2a)$ (здесь мы не рассматриваем область полутени, где значение x_{\max} еще меньше). Обозначим также через $|y|_{\max}$ максимальное значение модуля координаты y точки наблюдения. Согласно (15), для получения четкой дифракционной картины достаточно, чтобы

$$\frac{k\gamma_0}{L_s} x_{\max} a_h < \pi, \quad k\gamma_0 x_{\max} \operatorname{tg}\theta \frac{|y|_{\max} a_y}{L_s^2} < \pi, \quad (16)$$

что на языке длин волн равносильно условиям

$$2a_h \gamma_0 x_{\max} < \lambda L_s, \quad 2a_y \gamma_0 \operatorname{tg}\theta x_{\max} |y|_{\max} < \lambda L_s^2. \quad (17)$$

Таким образом, из (17) следует, что для получения четкой дифракционной картины по всей ширине и высоте пучка достаточно, чтобы

$$x_{\max} < \min\left(\lambda L_s / (2a_h \gamma_0), \lambda L_s^2 / (2a_y \gamma_0 \operatorname{tg}\theta |y|_{\max})\right). \quad (18)$$

В области перевернутого треугольника Бормана с вершиной в точке пересечения характеристик, проходящих через края щели, открыт весь фронт волны и $x_{\max} = 2l$ (рис. 1b). В этом случае из (18) и из определения l (см. формулу (10)) следует

$$z < \min\left(\lambda L_s \gamma_h / (2a_h \sin 2\theta), \lambda L_s^2 \gamma_h / (2a_y \operatorname{tg}\theta |y|_{\max} \sin 2\theta)\right). \quad (19)$$

В области треугольника Бормана с вершиной в точке пересечения характеристик, проходящих через края щели, имеем $x_{\max} = 2a$. В этой области из (18) получаем условие

$$2a < \min\left(\lambda L_s / (2a_h \gamma_0), \lambda L_s^2 / (2a_y \gamma_0 \operatorname{tg}\theta |y|_{\max})\right). \quad (20)$$

В условиях реализуемости случая Като узкая щель подставляется близко к поверхности кристалла перед падающей на кристалл волной и тогда можно подобрать щель такого размера, чтобы по всей ширине и высоте пучка наблюдать дифракционную картину маятниковых полос гиперболической формы. В этом случае можно также не использовать узкой щели, так как при приближении источника к кристаллу область отражения на поверхности кристалла уменьшается и играет роль узкой щели. Для получения маятниковых полос плоской волны, кроме выполнения условия (18), необходимо также коллимировать пучок, в противном случае различные плосковолновые компоненты падающей волны будут интерферировать и невозможно получить плосковолновые интерференционные полосы с помощью клина с основанием в плоскости (x, z) , параллельной плоскости дифракции [32], или же с помощью клина с основанием в плоскости (y, z) , перпендикулярно к плоскости дифракции [26].

3.2. Влияние некогерентности источника: временная или продольная когерентность

Падающая волна обычно является квазимонохроматической. При суммировании интенсивности дифрагированной волны по длинам волн в выраже-

нии интенсивности появляется взаимная интенсивность типа

$$I_h(x', x'') = \int_{-\Delta\lambda_1}^{\Delta\lambda_1} |E_0^i(\xi_s, y_s, \Delta\lambda)|^2 \exp[ik\gamma_0 \text{tg}\theta(x'' - x')\Delta\lambda/\lambda] d\Delta\lambda. \quad (21)$$

Здесь $\Delta\lambda_1$ задает ширину спектра падающей волны. В (21) предполагается, что максимум спектра падающего излучения имеет место для длины волны λ_m и что для этой длины волны, не нарушая общности, можно считать, что $2\sin 2\theta \Delta\theta(\lambda_m) = -|\chi_{0r}|(1 - b)/b$. Опять получаем, что $x_{\max} = \max(x'' - x') = \min(2l, 2a)$. Поэтому из (21), как и в случае пространственной когерентности, получаем следующее достаточное условие в верхней области от точки пересечения характеристик, проходящих через края щели:

$$z < (\lambda^2 / 2\Delta\lambda_1) (\gamma_h / (\sin 2\theta \text{tg}\theta)), \quad (22)$$

и в нижней области

$$2a < (\lambda^2 / 2\Delta\lambda_1) (1 / (\gamma_0 \text{tg}\theta)). \quad (23)$$

Здесь $\lambda^2 / (2\Delta\lambda_1)$ является продольной длиной когерентности падающего на кристалл излучения.

3.3. Эффективные расстояние источника, ширина спектра и размеры источника

В контексте излагаемых вопросов не излишне исследовать также изменение существенных параметров задачи после асимметричной дифракции. Введем в рассмотрение координату ξ_0 перпендикулярно к падающему пучку и ξ_h – перпендикулярно к дифрагированному пучку в плоскости дифракции. Тогда на выходной поверхности имеем $x = \xi_0/\gamma_0 = \xi_h/\gamma_h$ и $\xi_0 = \xi_h b$. Выражая x через ξ_h и подставляя в выражение фазы дифрагированной волны (11), можно сделать следующие выводы. Отклонение от условия Брэгга $\Delta\theta$ центрального луча заменяется на $\Delta\theta b$. Следовательно, $\Delta\lambda/\lambda$ заменяется на $b\Delta\lambda/\lambda$. Кроме того, расстояние L_s источника в плоскости дифракции заменяется на эффективное расстояние L_s/b^2 , а размеры источника в плоскости дифракции ξ_s заменяются на ξ_s/b . Отсюда следует, что расходимость пучка ξ_s/L_s , обусловленная размером источника в плоскости дифракции, заменяется на $b\xi_s/L_s$. Таким образом, если $b < 1$, то в дифрагированной волне улучшается монохроматичность и коллимация пучка в плоскости дифракции. Изменение когерентных характеристик дифрагированного пучка на основе временных уравнений при его распространении в идеальном кристалле рассматривалось, например, в работах [22,23,27], в которых не учитывались вторые производные амплитуд по y .

3.4. Уравнение распространения рентгеновского импульса с учетом вторых производных амплитуд по y

В связи с вышеуказанным имеет смысл привести уравнения распространения рентгеновского импульса в условиях двухволновой динамической дифракции с сохранением вторых производных амплитуд по y :

$$\begin{aligned}
\partial^2 \tilde{E}_0 / \partial y^2 + 2ik_m \partial \tilde{E}_0 / \partial s_0 + 2ik_m \partial \tilde{E}_0 / \partial T + k_m^2 \chi_0 \tilde{E}_0 + k_m^2 C \chi_h \tilde{E}_h &= 0, \\
\partial^2 \tilde{E}_h / \partial y^2 + 2ik_m \partial \tilde{E}_h / \partial s_h + 2ik_m \partial \tilde{E}_h / \partial T + k_m^2 \chi_0 \tilde{E}_h + k_m^2 C \chi_h \tilde{E}_0 &= 0.
\end{aligned}
\tag{24}$$

Здесь \tilde{E}_0, \tilde{E}_h – зависящие от времени амплитуды рентгеновского импульса проходящей и дифрагированной волн, а s_0, s_h – координаты вдоль проходящей и дифрагированной волн, соответственно, C – поляризаационный фактор, $T = ct$, c – скорость света в вакууме, t – время, $k_m = 2\pi/\lambda_m$. Можно утверждать, что решение (10) является Фурье-образом по частотам решения уравнения (24) для дифрагированной волны. Точнее, имеет место следующая связь между решением (24) и амплитудой монохроматической компоненты:

$$\tilde{E}_h(\mathbf{r}, t; \xi_s, y_s) = \int_{-\infty}^{\infty} E'_h(\mathbf{r}; \xi_s, y_s, \Delta\omega) e^{i((\mathbf{K}_h - \mathbf{K}_{hm})\mathbf{r} - \Delta\omega t)} d\Delta\omega. \tag{25}$$

Эта связь следует из выделения в выражении электрического поля рентгеновского импульса средней частоты ω_m и среднего волнового вектора, соответствующих максимуму интенсивности в спектре падающего излучения. В соответствии с этим, $\Delta\omega = \omega - \omega_m$, ω – частота, \mathbf{K}_{hm} – волновой вектор дифрагированной волны, удовлетворяющий точному условию Брэгга для частоты ω_m , \mathbf{K}_h – волновой вектор дифрагированной волны, удовлетворяющий точному условию Брэгга для частоты ω . Если под E_h понимать (1) или (9), то для произвольного падающего пучка можно написать более общее выражение, чем (25):

$$\tilde{E}_h(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} E_h(\mathbf{r}, \Delta\omega) e^{ik\chi_0 Z / (2\cos\theta)} e^{i((\mathbf{K}_h - \mathbf{K}_{hm})\mathbf{r} - \Delta\omega t)} d\Delta\omega. \tag{26}$$

4. Заключение

Нами рассмотрена асимметричная Лауэ дифракция в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью. В уравнениях динамической дифракции учтены вторые производные амплитуд по направлению, перпендикулярному к плоскости дифракции. С использованием соответствующей запаздывающей функции Грина приведено общее выражение амплитуды дифрагированной волны в кристалле. Учтены как размеры источника по обоим направлениям, так и расстояние источник–кристалл и немонохроматичность падающего на кристалл излучения. Фаза падающей волны разлагается до членов $1/L_s^4$ включительно, что в конечном итоге приводит к нетривиальной зависимости амплитуды от координаты y , перпендикулярной к плоскости дифракции. Найденное выражение может быть использовано для анализа дифракционного поля в кристалле, когда кристалл находится как в зоне Фраунгофера падающего излучения, так и в зонах Френеля и в непосредственной близости от источника. На основе полученного выражения проанализированы когерентные характеристики поля в зависимости от размеров источника и ширины спектра падающего излучения.

Показано также, что при асимметричной дифракции расстояние источ-

ник–кристалл и размер источника в плоскости дифракции, а также ширина спектра, заменяются на соответствующие эффективные величины в зависимости от фактора асимметричности b . При $b < 1$ как коллимация пучка в плоскости дифракции, так и монохроматичность улучшаются по сравнению с соответствующими характеристиками падающего излучения. Приведены уравнения распространения зависящего от времени рентгеновского импульса в идеальном кристалле с сохранением вторых производных амплитуд по u .

Автор выражает благодарность сотруднику кафедры ФТТ ЕГУ К.Т. Аветяну за плодотворное обсуждение вопроса размеров лабораторных источников и сотруднику кафедры ФТТ ЕГУ Л.В.Левоняну за любезное предоставление списка ранних публикаций по вопросам когерентности в рентген-дифракционной оптике.

ЛИТЕРАТУРА

1. **З.Г.Пинскер**. Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.
2. **A.Authier**. Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford University Press, 2001.
3. **N.Kato**. Acta Cryst., **14**, 526 (1961).
4. **А.М.Афанасьев, В.Г.Кон**. ФТТ, **19**, 1775 (1977).
5. **Л.В.Левонян**. Письма в ЖТФ, **7**, 269 (1981).
6. **V.G.Kohn**. Phys. stat. sol. (b), **222**, 407 (2000).
7. **V.Mocella, Y.Epelboin, P.Guigay**. Acta Cryst., **A56**, 308 (2000).
8. **S.Takagi**. J. Phys. Soc. Japan, **26**, 1239 (1969).
9. **Л.В.Левонян**. Материалы научной конференции, посвященной 50-летию основания кафедры физики твердого тела ЕГУ, Ереван, 2007, с.4.
10. **К.Т.Габриелян**. Межвузовский сборник научных трудов, **1**, 19 (1992).
11. **К.Т.Габриелян, Ф.Н.Чуховский, Д.И.Пискунов**. ЖЭТФ, **96**, 834 (1989).
12. **L.V.Levonyan, M.K.Balyan**. Phys. stat. sol. (a), **140**, 247 (1993).
13. **М.К.Балян, Л.В.Левонян**. Изв. НАН Армении, Физика, **35**, 309 (2000).
14. **А.М.Афанас'ев, М.К.Melkonyan**. Acta Cryst., **A39**, 207 (1983).
15. **J.Hrady**. J. Synchrotron Rad., **5**, 1206 (1998).
16. **J.Hrady, J.Hoszowska, С.Мocuta, N.Artemiev, A.Freund**. J. Synchrotron Rad., **10**, 233 (2003).
17. **М.К.Балян**. Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 216 (2013).
18. **М.К.Балян**. Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 363 (2013).
19. **М.К.Балян**. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 62 (2014).
20. **С.Л.Азизян, П.А.Безирганян**. ЖТФ, **41**, 2186 (1971).
21. **В.Л.Инденбом**. Кристаллография, **21**, 479 (1976).
22. **Л.В.Левонян, К.Г.Труни**. Изв. АН Арм.ССР, Физика, **13**, 108 (1978).
23. **Л.В.Левонян, К.Г.Труни**. Изв. АН Арм.ССР, Физика, **14**, 253 (1979).
24. **V.Holy**. Phys. Stat. Sol. (b), **101**, 575 (1980).
25. **F.N.Chukhovskii, E.Forster**. Acta Cryst., **A51**, 668 (1995).
26. **К.Tamasaku, T.Ishikawa**. Acta Cryst., **A57**, 197 (2001).
27. **Н.Yamazaki, T.Ishikawa**. J. Appl. Cryst., **35**, 314 (2002).
28. **Н.Yamazaki, T.Ishikawa**. J. Appl. Cryst., **36**, 213 (2003).
29. **М.К.Балян**. Acta Cryst., **A66**, 660 (2010).
30. **V.A.Bushuev**. J. Synchrotron Rad., **15**, 495 (2008).
31. **V.G.Kohn**. J. Synchrotron Rad., **19**, 84 (2012).
32. **T.Ishikawa**. Acta Cryst., **A44**, 496 (1988).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԼԱՈՒԵ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԴԻՆԱՄԻԿ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ
ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐՈՒՄ ԱՄՊԼԻՏՈՒԴՆԵՐԻ ԵՐԿՐՈՐԴ ԿԱՐԳԻ
ԱԾԱՆՅՅԱԼՆԵՐԻ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Դիտարկված է ասիմետրկ Լաուե դիֆրակցիան հարթ մուտքի մակերևույթով իդեալական բյուրեղում: Դինամիկ դիֆրակցիայի հավասարումներում հաշվի են առնված ամպլիտուդների երկրորդ կարգի ածանցյալները դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ: Համապատասխան Գրինի ֆունկցիայի օգտագործմամբ բերված է դիֆրակցված ալիքի ամպլիտուդի ընդհանուր արտահայտությունը իդեալական բյուրեղում: Հաշվի են առնվում ինչպես աղբյուրի չափերը երկու ուղղություններով, այնպես էլ աղբյուր-բյուրեղ հեռավորությունը և բյուրեղի վրա ընկնող ճառագայթման ոչ մեներանգությունը: Ստացված արտահայտության հիման վրա վերլուծված են դաշտի կոհերենտ բնութագրերը կախված աղբյուրի չափերից և ընկնող ճառագայթման սպեկտրալ լայնությունից: Բերված են ժամանակից կախված ռենտգենյան իմպուլսի տարածման հավասարումները իդեալական բյուրեղում ըստ դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ ամպլիտուդների երկրորդ կարգի ածանցյալների հաշվառման:

X-RAY LAUE DIFFRACTION WITH ALLOWANCE FOR SECOND DERIVATIVES
OF AMPLITUDES IN DYNAMICAL DIFFRACTION EQUATIONS

M.K. BALYAN

Asymmetrical Laue diffraction in a perfect crystal with a plane entrance surface is considered. The second derivatives of amplitudes in the direction, perpendicular to diffraction plane in the dynamical diffraction equations are taken into account. Using the corresponding Green function a general form for the amplitude of diffracted wave in the crystal is derived. The sizes of the source in both directions as well as the source – crystal distance and non-monochromaticity of the radiation incident on the crystal are taken into account. On the basis of obtained expression the coherent properties of the field depending on the sizes of the source and on the width of the spectrum of the incident radiation are analyzed. Taking into account the second derivatives of amplitudes with respect to the direction, perpendicular to the diffraction plane, the time dependent propagation equations for an X-ray pulse in a perfect crystal, are given.