Доклады Академии наук СССР
1978. Том 238, № 1

УДК 534.26 *ФИЗИКА*

Ф. Н. ЧУХОВСКИЙ, К. Т. ГАБРИЕЛЯН, П. В. ПЕТРАШЕНЬ

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИНАМИЧЕСКОЙ БРЭГГОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В УПРУГОИЗОГНУТОМ ТОЛСТОМ КРИСТАЛЛЕ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 8 VII 1977)

1. Динамическая дифракция рентгеновских лучей (р.л.) в геометрии Брэгга имеет ряд практически важных преимуществ по сравнению с лауэ-дифракцией. Главными из них являются большая светосила (~ 1) при одновременно высокой степени монохроматичности и коллимации «рабочих» пучков р.л. в современных рентгено-оптических устройствах ([1]). Между тем теория динамической дифракции Брэгга р.л. развита только для совершенных кристаллов ([2]) и сталкивается со значительными затруднениями в упругодеформированных кристаллах (см., например, ([3–5])). Трудность в построении теории связана с явлением экстинкции — полного отражения р.л. в областях кристалла, локально удовлетворяющих точному условию Брэгга. С другой стороны, развитие в последнее время экспериментальных работ по дифракции Брэгга р.л. для исследования приповерхностной структуры кристаллов ([6], [7]), а также принципиальная возможность использования изогнутых кристалл-монохроматоров и коллиматоров в рентгеновской интерферометрии и топографии высокого разрешения ([8]) делает весьма актуальной разработку теории динамической брэгг-дифракции р.л. в деформированных кристаллах.

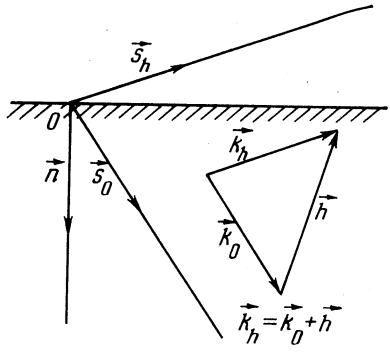

Рис. 1. Геометрия дифракции Брэгга рентгеновских лучей. s_0Os_h — косоугольная система координат в плоскости рассеяния с единичными векторами: $\vec{s}_0$ — вдоль направления падающей $\vec{k}_0$ и $\vec{s}_h$ — вдоль дифрагированной $\vec{k}_h$ волн; $\vec{n}$ — единичная внутренняя нормаль к поверхности кристалла, $\vec{h}$ — вектор дифракции

В данном сообщении рассматривается динамическая брэгг-дифракция р.л. в толстом кристалле с полем упругих смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, являющихся квадратичной функцией координат (упругоизогнутый кристалл (у.и.к.)). Получено точное решение смешанной краевой задачи дифракции, удобное для практического анализа, и исследованы общие свойства распространения волнового поля в таком кристалле с учетом явления экстинкции р.л.

2. Распространение брэгговски рассеянной волны $\mathscr{E}_h(\mathbf{r})=\exp(i\mathbf{qr})\cdot E_h(\mathbf{r})$ в у.и.к. описывается волновым уравнением в плоскости рассеяния s_0Os_h (рис. 1) ([5], [9–12])

$$\frac{\partial^2 E_h}{\partial s_0 \partial s_h}+i\frac{\partial}{\partial s_0}(\mathbf{hu})\frac{\partial E_h}{\partial s_h}+\sigma^2 E_h=0, \quad \sigma^2=\sigma_h\sigma_{-h}, \tag{1}$$

с краевыми условиями

$$\frac{\partial E_h}{\partial s_h}\Big|_{s_0=s_h}=i\sigma_h\exp(-i\mathbf{hu}-i\mathbf{qr})\mathscr{E}_0^{(in)}\Big|_{s_0=s_h},\quad E_h\Big|_{s_0-s_h=\infty}=0 \tag{2}$$

в приближении полубесконечного кристалла (практически реализуемый случай толстого поглощающего кристалла, $\mu_0 t\gg 1$, где μ_0 — обычный коэффициент поглощения р.л., t — толщина кристалла).

В (1), (2) проекция поля смещений $\mathbf{u}$ на вектор дифракции $\mathbf{h}$ является квадратичной функцией координат

$$(\mathbf{hu})=As_0^2+Bs_0s_h+Cs_h^2, \tag{3}$$

$\mathscr{E}_0^{(in)}(s_h)$ — заданное распределение падающей на кристалл волны. Функция $\mathbf{qr}$ имеет вид

$$\mathbf{qr}=\sigma_0 s_0+(\sigma_0\gamma_0/|\gamma_h|-\mathscr{K}\alpha/2|\gamma_h|)s_h,\quad \gamma_{0,h}=\cos(\mathbf{s}_{0,h}\mathbf{n}). \tag{4}$$

Нетрудно показать (см., например, ([12])), что «диагональные» члены As_0^2, Cs_h^2 в правой части (3) приводят к соответствующим экспоненциальным факторам в общем решении задачи (1)—(3). Поэтому без потери общности будем считать $A=C=0$.

Отметим, что существенное отличие постановки задачи брэгг-дифракции р.л. (1)—(3) от соответствующей задачи лауэ-дифракции, решенной в ([9–11], [12]), заключается в краевых условиях: в последнем случае граничные значения функции E_h и ее производной $\partial E_h/\partial s_h$ задаются на одной и той же поверхности входа излучения в кристалл $s_0=s_h$.

3. Решение задачи (1)—(3) полностью определяется в квадратурах с помощью функции Грина (функции точечного источника) G_{h0}:

$$G_{h0}(s_0,\ s_h;\ s_0',\ s_h')=\exp[-iBs_h(s_0-s_0')]G(s_0-s_0';\ s_h-s_h')\Theta(s_0-s_0')\Theta(s_h-s_h'), \tag{5}$$

где функция G удовлетворяет трансляционно-инвариантному уравнению

$$\frac{\partial^2 G}{\partial\xi_0\partial\xi_h}-iB\xi_0\frac{\partial G}{\partial\xi_0}+(\sigma^2-iB)G=0,\qquad \xi_{0,h}=s_{0,h}-s_{0,h}' \tag{6}$$

с краевыми условиями смешанного типа:

а) на характеристике

$$G|_{\xi_h=0}=1; \tag{7}$$

б) на поверхности кристалла

$$(\partial G/\partial\xi_h-iB\xi_0 G)|_{\xi_0=\xi_h}=0. \tag{8}$$

Таким образом задача (1)—(3) сводится к нахождению функции Грина (5) смешанной краевой задачи (6)—(8).

4. Будем искать решение G в виде интеграла Лапласа

$$G(\xi_0;\xi_h)=\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty}dp\,g(p)\exp(p\xi_h)(p-iB\xi_0)^{-1-\delta},\quad \delta=\frac{i\sigma^2}{B}, \tag{9}$$

где $g(p)$ — искомая функция. Используя интегральное представление Ханкеля ([13])

$$(p-iB\xi_0)^{-1-\delta}=\frac{\exp[i\pi(1+\delta)]}{2i\sin[\pi(1+\delta)]\Gamma(1+\delta)}\int\limits_{\infty}^{+0}dt\,t^{\delta}\exp(-pt+iB\xi_0 t) \tag{10}$$

и подставляя (9) в (8), с учетом (7), а также теоремы о лаплас-трансформанте свертки двух функций, после непосредственных вычислений нахо-

дим функцию Грина G в виде

$$G(\xi_0;\xi_h)=\exp[-i^1/_4B(\xi_0^2-\xi_h^2)](i/B)^{1/2}\times \tag{11}$$
$$\times\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty}dp\exp\left[p\xi_h+\frac{p}{2}(\xi_0-\xi_h)\right]\frac{D_{-1-\delta}[(i/B)^{1/2}(p-iB(\xi_0-\xi_h))]}{D_{-\delta}[(i/B)^{1/2}p]},$$

где $D_\nu(z)$ — функция параболического цилиндра (функция Вебера).

Покажем теперь, что структура полученного нами решения для функции Грина отражает физически тот факт, что движение волнового пакета (11) носит волноводный характер как следствие экстинкции р.л. в условиях полного внутреннего отражения. Рассмотрение этого вопроса аналогично исследованию предельной динамической задачи колебаний внутренней части сферы ([14]).

Для определенности будем считать $B>0$. Используя известное функциональное соотношение, связывающее функции $D_\nu(z)$, $D_\nu(-z)$ и $D_{-1-\nu}(-iz)$, легко видеть, что на линии интегрирования в (11) при достаточно больших $\operatorname{Re}p$ подынтегральное выражение можно разложить в функциональный степенной ряд по $|D_{-1+\delta}(-iz_2)/D_{-\delta}(-z_2)|<1$. При этом (11) принимает вид

$$G(\xi_0;\xi_h)=\exp\left[-i\frac{B}{4}(\xi_0^2-\xi_h^2)\right]\left(\frac{i}{B}\right)^{1/2}\frac{1}{2\pi i}\left\{\int\limits_{\gamma-i\infty}^{\gamma+iB(\xi_0-\xi_h)}dp\times\right.$$
$$\times\exp\left[p\xi_h+\frac{p}{2}(\xi_0-\xi_h)\right]\frac{D_{-1-\delta}(z_1)}{D_{-\delta}(z_2)}-$$
$$-\sum_{n=1}^{\infty}\left[-i\frac{(2\pi)^{1/2}}{\Gamma(\delta)}\right]^{n-1}\exp\left[i\frac{\pi\delta}{2}(n-1)\right]\times$$
$$\times\int\limits_{\gamma+iB(\xi_0-\xi_h)}^{\gamma+i\infty}dp\exp\left[p\xi_h+\frac{p}{2}(\xi_0-\xi_h)\right]\frac{D_{-1-\delta}(-z_1)}{D_{-\delta}(-z_2)}\left[\frac{D_{-1+\delta}(-iz_2)}{D_{-\delta}(-z_2)}\right]^{n-1}\times$$
$$\left.\times\left[1+\frac{(2\pi)^{1/2}}{\Gamma(1+\delta)}\exp\left[i\pi\left(1+\frac{\delta}{2}\right)\right]\frac{D_\delta(-iz_1)}{D_{-1-\delta}(-z_1)}\right]\right\}; \tag{12}$$
$$z_1=(i/B)^{1/2}(p-iB(\xi_0-\xi_h)),\qquad z_2=(i/B)^{1/2}p.$$

Существенно, что в правой части (12) мы имеем на конечных расстояниях в кристалле конечное число слагаемых. В самом деле, пользуясь стандартными асимптотиками D_ν-функций, запишем интеграл, отвечающий n-му члену суммы:

$$\int\limits_{\gamma+iB(\xi_0-\xi_h)}^{\gamma+i\infty}dp\exp\left[p\xi_h+\frac{p}{2}(\xi_0-\xi_h)\right]\frac{z_2^{n(2\delta-1)-\delta+1}}{z_1^{1+\delta}}\exp\left[\frac{(2n-1)z_1^2}{4}-\frac{z_1^2}{4}\right]\times$$
$$\times\left[1+\frac{(2\pi)^{1/2}}{\Gamma(1+\delta)}\exp(i\pi\delta)z_1^{1+2\delta}\exp\left(\frac{z_1^2}{2}\right)\right]. \tag{13}$$

Из (13) сразу следует, что для конечных ξ_h слагаемые суммы в (12), начиная с

$$n=2+[\xi_h/(\xi_0-\xi_h)], \tag{14}$$

равны нулю. Оставшиеся слагаемые описывают волны, распространяющиеся вдоль волноводов и претерпевшие кратные отражения 1-, 2-, ..., $(n-1)$-го порядка соответственно.

5. Дальнейшее исследование решения (11), подтверждающее общий вывод о волноводном характере распространения волнового поля в у.и.к.

можно провести на основе квазиклассической асимптотики функции Грина, используя метод Дарвина ([15]) для построения нестандартных асимптотик функций Вебера. При этом необходимо учитывать, что $D_\nu(z)$ имеют разрывные асимптотики в зависимости от значения $\arg z$ (явление Стокса). Приведем результат построения асимптотического представления функции Грина, равномерного по параметру изгиба B:

$$G(\xi_0;\xi_h)=\exp[-i^1/_4B(\xi_0^2-\xi_h^2)]\sigma^{-1/2}\times$$

$$\times\frac{1}{2\pi i}\sum_{n=0}^{\infty}[\varepsilon(-\delta;\arg z_2)]^n\exp[-n(2\delta-1)\ln(2\delta^{1/2})]\times$$

$$\times\int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty}dp\exp\left[p\xi_h+\frac{p}{2}(\xi_0-\xi_h)\right]\left(\frac{z_2^2+4\delta}{z_1^2+4\delta}\right)^{1/4}\times$$

$$\times\left\{\frac{\exp[\ln(2\delta^{1/2})+\Phi_n^-(z_1,z_2)]}{[z_1+(z_1^2+4\delta)^{1/2}]^{1/2}[z_2+(z_2^2+4\delta)^{1/2}]^{n+1/2}}+\right.$$

$$\left.+\varepsilon(-1-\delta;\arg z_1)\frac{\exp[-2\delta\ln(2\delta^{1/2})+\Phi_n^+(z_1,z_2)]}{[z_1+(z_1^2+4\delta)^{1/2}]^{-1/2}[z_2+(z_2^2+4\delta)^{1/2}]^{n+1/2}}\right\},\qquad(15)$$

$$[\varepsilon(-\delta;\ \arg z_2)]^0=1,$$

где фазы имеют вид

$$\Phi_n^\pm(z_1,\ z_2)=\pm{}^1/_4z_1(z_1^2+4\delta)^{1/2}\pm\delta\ln[z_1+(z_1^2+4\delta)^{1/2}]+$$
$$+(2n+1)[{}^1/_4z_2(z_2^2+4\delta)^{1/2}+\delta\ln[z_2+(z_2^2+4\delta)^{1/2}]],\qquad(16)$$

разрывные коэффициенты ($\nu=-\delta$, $\nu=-1-\delta$)

$$\varepsilon(\nu;\arg z)=\begin{cases}0 \text{ при } |\arg z|<\pi/4,\\ \exp[i\cdot\pi(\nu+1)] \text{ при } \pi/4<\arg z<5\pi/4,\\ \exp[-i\cdot\pi(\nu+1)] \text{ при } -5\pi/4<\arg z<-\pi/4.\end{cases}\qquad(17)$$

Интегрирование в (15) проводится по пространственным гармоникам $\operatorname{Im}p$. Для вычисления (15) применим метод стационарной фазы. Точки стационарной фазы, отвечающие n-му члену суммы в правой части (15), определяются из обычных условий

$$\partial\Phi_n^-/\partial p=0,\quad \partial\Phi_n^+/\partial p=0.\qquad(18)$$

Формулы (18) при фиксированном $\operatorname{Im}p$ представляют собой уравнения потока энергии р.л. в у.и.к. Анализ явного вида этих траекторий показывает, что, в то время как гармоники $B\cdot\operatorname{Im}p<0$ экспоненциально затухают в глубь кристалла, гармоники $B\cdot\operatorname{Im}p>0$ распространяются по волноводам, претерпевая полное отражение на глубине $z_*=(\operatorname{Im}p-2|\sigma|)/B$.

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
5 VII 1977

ЛИТЕРАТУРА

[1] *K. Nakayama, H. Hashizume et al.*, Zs. Naturforsch., B. 28a, 632 (1973). [2] *З. Г. Пинскер*, Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах, М., «Наука», 1974. [3] *U. Bonse*, Zs. Phys., B. 177, 385 (1964). [4] *U. Bonse, W. Graeff*, Zs. Naturforsch., B. 28a, 558 (1973). [5] *П. В. Петрашень*, ФТТ, т. 15, 3131 (1973). [6] *В. Е. Батурин, М. В. Ковальчук и др.*, Кристаллография, т. 22, 144 (1977). [7] *A. Fukuhara, Y. Takano*, Acta crystallogr., v. A33, 137 (1977). [8] *K. Kohra*, Multiple Crystal Arrangement. Intern. Summer School on X-ray Dinamical Theory and Topography, August 18–26, 1975, Limoges, France, 1975. [9] *П. В. Петрашень, Ф. Н. Чуховский*, ЖЭТФ, т. 69, 477 (1975). [10] *Ф. Н. Чуховский, П. В. Петрашень*, ДАН, т. 222, 599 (1975); т. 228, 1087 (1976). [11] *П. В. Петрашень, Ф. Н. Чуховский*, Кристаллография, т. 21, 283 (1976). [12] *F. N. Chukhovskii, P. V. Petrashen*, Acta crystallogr., v. A33, 311 (1977). [13] Higher Transcendental Functions, v. 1, N. Y., 1953. [14] *В. И. Смирнов*, Курс высшей математики, т. 4, М., ГИФМЛ, 1958, стр. 795. [15] *Дж. Ч. П. Миллер*, Таблицы функций Вебера (функций параболического цилиндра), М., 1968.