

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ СФЕРИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ. ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ

А. М. Афанасьев, В. Г. Кон

Развита теория дифракционного изображения, возникающего при прохождении сферической рентгеновской волны через кристалл в форме пластинки. Новым по сравнению с ранее существующей теорией Като [1, 2] является учет дополнительной фазы в Фурье-образе сферической волны, описывающей зависимость от расстояния между источником и пленкой L . Предсказан эффект дифракционной фокусировки слабопоглощающегося поля толстым кристаллом при достаточно большом L . Рассмотрены предельные случаи очень большого и малого L и сформулированы критерии применимости предельных формул.

Как известно, элементарным источником излучения рентгеновских трубок является атом, излучающий расходящуюся сферическую волну. Излучение разных атомов некогерентно, поэтому наиболее естественный путь расчета дифракционной картины, возникающей при прохождении излучения через идеальный кристалл, состоит в следующем: сначала рассчитывается дифракционная картина для точечного источника (ДКТИ), т. е. распределение интенсивности рентгеновских лучей в плоскости экрана (фотопленки), а затем проводится усреднение этой картины по координатам всех источников. Так как излучение монохроматично, то необходимо также усреднить результат по спектру. В том случае, когда размеры фокуса рентгеновской трубки много больше размеров ДКТИ, последняя сильно размывается, и в центре получается равномерно засвеченная область, интенсивность в которой фактически равна интегральной по площади интенсивности от точечного источника.

Если же размеры фокуса меньше или сравнимы с размером ДКТИ, либо фронт падающего излучения ограничен узкой щелью, то дифракционная картина становится более сложной. С другой стороны, эксперимент, реализующий такую ситуацию, легко осуществим. В связи с этим возникает проблема теоретического анализа дифракции сферической рентгеновской волны. Этому вопросу была посвящена серия работ Като [1, 2]. В теории Като дифракционная картина не зависит от расстояний от источника до кристалла и от кристалла до пленки. Как показывает анализ, эта теория справедлива только в случае, когда эти расстояния весьма малы, например, если на входную поверхность кристаллической пластинки наложена узкая щель, а фотопленка находится сразу за кристаллом.

Возможна, однако, и другая схема эксперимента, когда расстояние от источника до пленки велико по сравнению с размерами кристалла. Более того, такая схема эксперимента была уже предложена Хуангом и Постом [3] и широко используется в ряде лабораторий для наблюдения многоволновой дифракции (см., например, [4-8]). В этом случае теория Като неприменима и требуется специальный анализ. В настоящей работе проводится теоретический анализ двухволновой ДКТИ в зависимости от расстояния источник—пленка. Оказывается, что характер ДКТИ весьма сильно зависит от этого расстояния. Если кристалл поглощающий,

то излучение, прошедшее через кристалл вследствие эффекта Бормана, фокусируется на пленке на определенном расстоянии, причем это расстояние, естественно, зависит от свойств кристалла.

Вывод общих формул, описывающих ДКТИ, дан в разделе 1. Мы используем вслед за Като метод Фурье-преобразования. Возможен также и другой подход: использование функции Грина для пространственно-неоднородной задачи дифракции рентгеновских лучей в кристалле [9]. При этом, однако, необходимо дополнительно решать задачу о распространении рентгеновских лучей за кристаллом.

В разделе 2 рассмотрены предельные случаи большого и малого расстояния источник—пленка, причем особое внимание уделяется выводу условий применимости полученных формул. В третьем разделе обсуждается явление дифракционной фокусировки.

1. Вывод общих формул

Поместим начало декартовой системы координат в точке источника. Пусть s_0 — единичный вектор, соответствующий точному брэгговскому направлению для кристалла. В полупространстве $(rs_0) > 0$ сферическая волна с частотой ω имеет следующее интегральное представление

$$\frac{\exp(ixr)}{r} = 2\pi i \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{\exp[i\mathbf{q}r + is_0 r \sqrt{x^2 - q^2}]}{\sqrt{x^2 - q^2}}, \quad (1)$$

где $x = \omega/c$, c — скорость света, а \mathbf{q} — вектор в плоскости, перпендикулярной s_0 . Нас будут интересовать лишь малые \mathbf{q} , для которых выполняется неравенство $(q/x) \ll 1$. При этом квадратный корень в знаменателе можно заменить на x , а в показателе экспоненты разложить в ряд, сохраняя лишь квадратичные по q/x члены. Следует также учесть поляризацию вектора электрического поля. Пренебрегая зависимостью от \mathbf{q} в векторах поляризации, выберем их в плоскости, перпендикулярной s_0 . В результате для вектора электрического поля падающей сферической волны имеем

$$\mathbf{E}^{(in)}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi i}{x} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}_0(\mathbf{q})r} \sum_s a_s \mathbf{e}_{0s}, \quad (2)$$

где

$$\mathbf{k}_0(\mathbf{q}) = \left(x - \frac{q^2}{2x}\right) \mathbf{s}_0 + \mathbf{q}; \quad s = \pi, \sigma. \quad (3)$$

Пусть кристалл имеет форму плоскопараллельной пластины толщиной t и ориентирован таким образом, что единичный вектор в направлении дифрагированной волны $\mathbf{s}_h = \mathbf{s}_0 + \mathbf{h}/x$, где \mathbf{h} — вектор обратной решетки с множителем 2π , составляет острый угол с вектором нормали к входной поверхности кристалла \mathbf{n}_0 (дифракция по Лауэ). В этом случае за кристаллом вектор электрического поля сферической волны имеет следующий вид

$$\mathbf{E}^{(out)}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_h(\mathbf{r}), \quad (4)$$

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \sum_s a_s \mathbf{e}_{0s} \frac{2\pi i}{x} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}_0(\mathbf{q})r} T_s(\mathbf{q}, t), \quad (5)$$

$$\mathbf{E}_h(\mathbf{r}) = \sum_s a_s \mathbf{e}_{hs} \frac{2\pi i}{x} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^0} e^{i\mathbf{k}_h(\mathbf{q})r - i\psi(\mathbf{q})} R_s(\mathbf{q}, t). \quad (6)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_h(\mathbf{q}) &= \mathbf{k}_0(\mathbf{q}) + \mathbf{h} - \alpha(\mathbf{q}) \mathbf{n}_0/2, \\ \psi(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \alpha(\mathbf{q}) \gamma_0 L_1 - (\mathbf{n}_0 \mathbf{h}) (\gamma_0 L_1 - t), \end{aligned} \quad (7)$$

$\gamma_0 = (\mathbf{s}_0 \mathbf{n}_0)$, L_1 — расстояние от источника до выходной поверхности по лучу \mathbf{s}_0 .

Появление фазы $\psi(\mathbf{q})$ связано с тем, что вектор \mathbf{h} «включается» только на входной поверхности кристалла, и, так как начало координат выбрано в точке источника, то следует вычесть часть фазы, соответствующую рас-

стоянию от источника до входной поверхности. Аналогично добавочный вектор $\alpha(\mathbf{q}) \mathbf{n}_0/2$ появляется на выходной поверхности из условия, чтобы (6) было решением уравнения Максвелла в вакууме, для чего необходимо, чтобы выполнялось условие $k_h^2(\mathbf{q}) = \kappa^2$. Отсюда для $\alpha(\mathbf{q})$ с точностью до членов порядка $(q/\kappa)^2$ включительно получаем выражение

$$\left. \begin{aligned} \alpha(\mathbf{q}) &= \alpha_1(\mathbf{q}) + \alpha_2(\mathbf{q}), \quad \alpha_1(\mathbf{q}) = \frac{2s_h \mathbf{q}}{\gamma_h}, \quad \gamma_h = (s_h \mathbf{n}_0), \\ \alpha_2(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\kappa \gamma_h} \left[q^2 (1 - s_0 s_h) + \alpha_1(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{4} \alpha_1(\mathbf{q}) - (\mathbf{q} \mathbf{n}_0) \right) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Величины $T_s(\mathbf{q}, t)$ и $R_s(\mathbf{q}, t)$ представляют собой амплитуды прохождения и отражения плоской волны с волновым вектором $\kappa \mathbf{s}_0 + \mathbf{q}$, хорошо известные из обычной плосковолновой динамической теории дифракции рентгеновских лучей (см., например, [9]).

$$T_s = \sum_j \frac{1}{(1 + \xi_{sj}^2)} e^{i \xi_{sj} t/2}, \quad R_s = -\sqrt{\frac{\gamma_0 \chi_h}{\gamma_h \chi_0}} \sum_j \frac{\xi_{sj}}{(1 + \xi_{sj}^2)} e^{i \xi_{sj} t/2}, \quad (9)$$

где

$$\xi_{sj} = \frac{\kappa \chi_0}{\gamma_0} - \frac{\kappa \sqrt{\chi_h \chi_0} C_s}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} \xi_{sj}, \quad \xi_{sj} = y_s \pm \sqrt{y_s^2 + 1}, \quad (10)$$

$$y_s = \frac{\alpha_1 + \kappa \chi_0 \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right)}{2\kappa \sqrt{\chi_h \chi_0} C_s (\gamma_0 \gamma_h)^{-1/2}}. \quad (11)$$

Здесь индекс j принимает два значения в соответствии с двумя знаками перед корнем в формуле для ξ , величины χ_0, χ_h есть нулевая и h -я Фурье-компоненты комплексной поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$, поляризационный множитель C_s равен единице для σ -поляризации и $\cos 2\theta_B$ для π -поляризации; α_1 есть линейная по \mathbf{q} часть величины $\alpha(\mathbf{q})$, определенной в (8). Это соответствует обычному линейному по \mathbf{q} приближению динамической теории и оправдано тем, что толщина кристалла, доступная рентгеновским лучам, мала и фазой $(q^2/\kappa)t$ можно пренебречь.

Выберем ось Z вдоль вектора \mathbf{s}_0 , а ось X в плоскости векторов \mathbf{s}_0 и \mathbf{s}_h (плоскости рассеяния) в сторону вектора \mathbf{s}_h . Для простоты будем предполагать, что вектор \mathbf{n}_0 также лежит в этой плоскости. Это всегда можно сделать простым поворотом кристалла. Нас будет интересовать дифракционная картина, т. е. распределение интенсивности в плоскости экрана. Поместим экран перпендикулярно оси Z на расстоянии $L = L_1 + L_2$ от источника. Как следует из (8)–(11), величины T и R не зависят от q_y , и интегрирование по этой переменной проводится с помощью табличного интеграла.

$$\int \frac{dq_y}{2\pi} e^{iq_y y - i \frac{L}{2\kappa} q_y^2} = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi i L}} e^{i \frac{\kappa}{2L} y^2}. \quad (12)$$

С учетом (3) и (12) легко получаем для интенсивности в прямом пучке следующее выражение

$$I_T(x) = |E_0|^2 = \frac{\kappa g^2}{4\pi L} \sum_s \left| \int d\theta \exp \left(i\kappa g \left[x\theta - \frac{1}{2} g L \theta^2 \right] \right) T_s(\theta, t) \right|^2. \quad (13)$$

Здесь мы учли, что падающее излучение неполяризовано, и ввели угол θ в секундах, определенный соотношением $q_x = \kappa g \theta$; $g = 0.4848 \cdot 10^{-5}$ рад./с — переводной множитель.

Аналогичное выражение получается для интенсивности дифрагированных волн после подстановки (8) и (3) в (7)

$$I_R(x) = |E_h|^2 = \frac{\kappa g^2}{4\pi L_h} \sum_s \left| \int d\theta \exp \left(i\kappa g \left[\beta(x - x_0)\theta - \frac{1}{2} g \tilde{L}_h \theta^2 \right] \right) R_s(\theta, t) \right|^2. \quad (14)$$

Здесь

$$\left. \begin{aligned} L_h &= L_1 + \frac{L_2}{\cos 2\theta_B}, \quad \bar{L}_h = L_h + x_0 \frac{\sin(\varphi_h - \varphi_0)}{\gamma_h^2}, \\ x_0 &= L_2 \operatorname{tg} 2\theta_B, \quad \beta = \frac{\gamma_0}{\gamma_h} \cos 2\theta_B, \quad \gamma_{0,h} = \cos \varphi_{0,h}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Физический смысл величин (15) легко виден из рис. 1. Так $x_0 = OH$ — координата, определяющая положение области отражения; $L_h = SKH$ — путь, который проходит луч, претерпевающий дифракционное отражение.

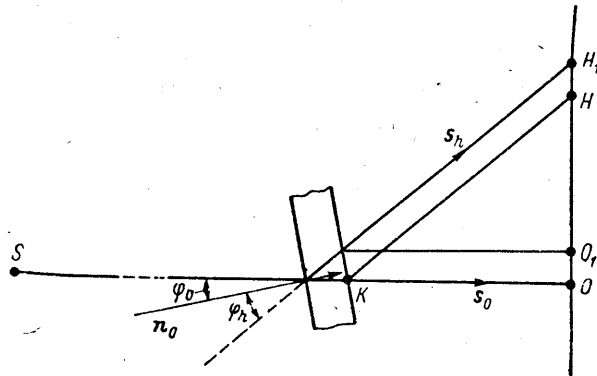


Рис. 1. Иллюстрация хода лучей в рассматриваемой схеме эксперимента.
S — источник, K — кристалл, линия OH — экран (фотопленка).

Конкретный характер зависимости величин T и R от θ определяется формулами (9)—(11), причем для y_s имеем

$$y_s = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_{1s}}, \quad \theta_0 = \frac{\chi_0 (\gamma_0 - \gamma_h)}{2g \gamma_0 \sin 2\theta_B}, \quad \theta_{1s} = \frac{\sqrt{\chi_h \chi_L}}{g} \frac{C_s}{\sin 2\theta_B} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}}. \quad (16)$$

Важной характеристикой дифракционной картины является интегральная по x интенсивность. Интегрирование формул (13) и (14) проводится элементарно. В результате получаем

$$\left. \begin{aligned} I_T^{int} &= \int dx I_T(x) = \frac{g}{2L} \sum_s \int d\theta |T_s(\theta, t)|^2, \\ I_R^{int} &= \int dx I_R(x) = \frac{g}{2\beta L_h} \sum_s \int d\theta |R_s(\theta, t)|^2. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Как видно из (17), интегральные коэффициенты прохождения и отражения для сферической волны пропорциональны интегральным по углам падения коэффициентам плосковолновой теории. Отметим, что формула (17) определяет также интенсивность в центральной части картины в случае широкого источника, когда размеры фокуса рентгеновской трубки больше размеров дифракционной картины от точечного источника. Она широко используется при расчете двухкристалльных и трехкристалльных приборов [9].

2. Анализ предельных случаев

Рассмотрим предельные случаи. Пусть расстояние L весьма велико, а толщина кристалла t мала. Считая T_s гладкой функцией по сравнению с быстро осциллирующей экспонентой, интеграл в (13) можно вычислить методом стационарной фазы. В результате имеем

$$I_T(x) = \frac{1}{2L^2} \sum_s \left| T_s\left(\frac{x}{gL}, t\right) \right|^2. \quad (18)$$

Таким образом, в этом предельном случае дифракционная картина воспроизводит угловую зависимость коэффициента прохождения плоскостной динамической теории. Этот физически очевидный результат был положен в основу метода экспериментальной проверки выводов динамической теории многоволновой дифракции в приближении падающей плоской волны, предложенного в работе [3].

Следует, однако, оценить область применимости формулы (18). Обозначим интервал углов, на котором функция $T(\theta)$ существенно меняется через θ_T . Определим теперь угол θ_w , на котором фаза в экспоненте формулы (13) отличается на единицу от значения в стационарной точке. Необходимо, чтобы этот угол был много меньше θ_T . Простой расчет дает результат

$$\theta_w = \frac{1}{\pi g} \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa L}} \ll \theta_T, \quad L \gg \frac{\lambda}{(\pi g \theta_T)^2}, \quad (19)$$

где λ — длина волны рентгеновского излучения. При оценке величины θ_T следует учесть, что главный вклад в скорость изменения T также дает осциллирующая экспонента. Определим θ_T из условия, чтобы фаза в (9) отличалась на единицу от своего значения при $\theta = \theta_0$. Подставляя это значение в (18), получаем условие

$$L \gg \frac{l^2}{\lambda}, \quad l \ll \sqrt{\lambda L}, \quad l = t \frac{\sin 2\theta_B}{\gamma_h}. \quad (20)$$

Поскольку в реальном эксперименте предельное расстояние источник—пленка ограничено двумя-тремя метрами, то условие (20) определяет толщину кристалла, меньше которой справедливо приближение (18). Полагая $\lambda = 10^{-8}$ см, $L = 10^2$ см, имеем $l \ll 1$ мкм. Таким образом, в реальном эксперименте формула (18) справедлива только для весьма тонких кристаллов.

Для дифрагированного пучка метод стационарной фазы дает следующий результат

$$I_R(x) = \frac{1}{2L_h \bar{L}_h} \sum_s \left| R_s \left(\frac{\beta(x-x_0)}{g \bar{L}_h}, t \right) \right|^2. \quad (21)$$

Критерий применимости этой формулы выводится аналогично предыдущему и отличается от (20) заменой L на \bar{L}_h .

Другой предельный случай известен как «приближение сферической волны» Като [1, 2]. Пусть L настолько мало, что можно пренебречь квадратичным по θ членом в фазе подынтегральной функции в (13) и (14). В этом случае интегралы выражаются через функции Бесселя нулевого и первого порядков. Приведем здесь более простой, чем в (2), вывод этих выражений сразу для комплексного случая. Рассмотрим интеграл в (14). Замечая, что переменная θ зависит от ξ_1 и ξ_2 симметрично, сделаем в первом члене суммы по j в (9) замену θ на ξ_1 , а во втором — на ξ_2 . С учетом соотношения

$$d\theta = \frac{\theta_1}{2} \frac{1 + \xi^2}{\xi^2} d\xi \quad (22)$$

выражение для $I_R(x)$ преобразуется к виду

$$I_R(x) = \frac{\pi}{4L_h} \frac{\kappa |\chi_h|^2}{\sin^2 2\theta_B} \exp\left(-\mu_0 t \frac{x_1 \gamma_0 + x_2 \gamma_h}{\gamma_0 \gamma_h l_h}\right) \sum_s C_s^2 |A_R^{(s)}(x)|^2, \quad (23)$$

$$A_R^{(s)}(x) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_1 + \gamma_2} \frac{d\xi}{\xi} \exp\left[-iQ_h^{(s)}\left(x_2 \xi + x_1 \frac{1}{\xi}\right)\right]. \quad (24)$$

Здесь

$$Q_h^{(s)} = \frac{\kappa g \beta}{2} \theta_{1s}, \quad x_1 = x - x_0, \quad x_2 = x_0 + l_h - x, \quad (25)$$

$$l_h = \frac{l}{\beta} = t \frac{\operatorname{tg} 2\theta_B}{\gamma_0}, \quad \mu_0 = \kappa \chi_{i0}.$$

Геометрический смысл величин l и l_h поясняет рис. 1. Отрезок OO_1 есть l , а отрезок HH_1 есть l_h . Контур $\gamma_1 + \gamma_2$ показан на рис. 2, причем γ_1 есть путь, который проходит переменная ξ_1 при изменении θ от $-\infty$ до ∞ , а γ_2 — аналогичный путь для ξ_2 .

Анализ интеграла A_R проводится с помощью интегрального представления функции Ханкеля $H_0^{(1)}(z)$ [10] и формулы

$$\mathcal{J}_0(z) = \frac{1}{2} [H_0^{(1)}(z) - H_0^{(1)}(-z)] = \frac{1}{2} [H_0^{(1)}(z) + H_0^{(2)}(z)]. \quad (26)$$

В результате

$$A_R^{(s)}(x) = \mathcal{J}_0(2Q_k^{(s)} \sqrt{x_1 x_2}) \frac{\text{sign}(x_1) + \text{sign}(x_2)}{2}. \quad (27)$$

Интеграл в (13) вычисляется аналогично. Заметим лишь, что так как функция T не убывает на бесконечности, то интеграл расходится в точке

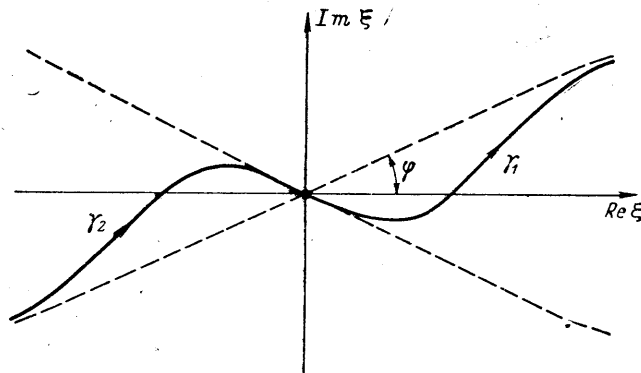


Рис. 2. Контур интегрирования в формуле (24).

$$\varphi = -0.5 \arg(\chi_h \chi_{\bar{h}}).$$

$x=0$. В действительности эта расходимость лишена физического смысла и устраняется благодаря квадратичным по θ членам в фазе. Строгое вычисление интеграла в (13) приводит к слагаемому, пропорциональному $\delta(x)$, которое по указанным выше соображениям можно опустить. В результате

$$I_T(x) = \frac{\pi}{4L} \frac{\chi_h \chi_{\bar{h}}}{\sin^2 2\theta_B} \frac{\gamma_h}{\gamma_0} \exp\left(-\mu_0 t \frac{x\gamma_0 + x_2 \gamma_h}{\gamma_0 \gamma_h l}\right) \sum_s C_s^2 |A_T^{(s)}(x)|^2, \quad (28)$$

$$A_T^{(s)} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{x_2}{x}} \mathcal{J}_1(2Q^{(s)} \sqrt{x x_2}) \frac{\text{sign}(x) + \text{sign}(x_2)}{2},$$

где $x_2 = l - x$, $Q^{(s)} = 0.5 \chi g \theta_{1s}$.

Оценим область применимости приведенных выше формул. Предположим, что функция R в формуле (14) существенно отличается от нуля в области $|\theta| < \theta_m$. Формулы (23), (27) будут приближенно справедливы в том случае, если квадратичная по θ часть фазы будет меньше π на этом интервале. Отсюда имеем

$$\frac{1}{2} \chi g^2 \tilde{L}_h \theta_m^2 < \pi, \quad \tilde{L}_h < \frac{\lambda}{(g\theta_m)^2}. \quad (29)$$

Так, для $\lambda = 10^{-8}$ см, $\theta_m \sim 10^{11}$ получаем, что \tilde{L}_h должно быть меньше 4 см. Оценка применимости формулы (28) получается из (29) заменой \tilde{L}_h на L . Отметим, что в случае толстого поглощающего кристалла не затухает только слабопоглощающееся поле, причем в узком интервале углов, ширина которого уменьшается с ростом толщины кристалла. В этом случае предел применимости формул (23), (27) и (30) увеличивается. В случае прозрачного кристалла при расстоянии источник—кристалл около 40 см поправки от квадратичного по θ члена в фазе могут заметно изменить картину.

3. Дифракционная фокусировка слабопоглощающегося поля

Если расстояние источник—пленка находится в интервале от половины до трех метров, то оба предельных случая, рассмотренные выше, не годятся для описания дифракционной картины. В этом случае в формулах (13), (14) необходимо учитывать фазу функции T и R наравне с фазой Фурье-образа сферической волны. Принимая во внимание (9)—(11), запишем формулу (13) в виде

$$I_T(x) = \frac{\kappa g^2}{4\pi L} \sum_s \left| \int d\theta \exp [i\varphi_{sj}(x, \theta) - f_{sj}(\theta)] \right|^2, \quad (30)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{sj}(x, \theta) &= \kappa g \left[x\theta - \frac{1}{2} gL\theta^2 \right] + \frac{1}{2} t\varepsilon'_{sj}(\theta), \\ f_{sj}(\theta) &= \frac{1}{2} t\varepsilon''_{sj}(\theta) + \ln [1 + \xi_{sj}^2(\theta)], \quad \varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

Подынтегральная функция в (30) сильно осциллирует, и, кроме того, показатель экспоненты представляет из себя сложную функцию. Поэтому конкретный количественный анализ интеграла в общем случае представляет из себя довольно сложную задачу и будет проведен в отдельной работе. Здесь мы ограничимся качественным рассмотрением эффекта дифракционной фокусировки слабопоглощающегося поля.

Рассмотрим случай достаточно толстого поглощающего кристалла ($\mu_0 t \gg 1$). В этом случае для сильнопоглощающегося поля с $j=1$ интеграл в (30) близок к нулю, а для слабопоглощающегося поля с $j=2$ подынтегральная функция отлична от нуля в конечном интервале углов θ , причем главный вклад в интеграл дает область вблизи точки минимума функции $f(\theta)$, которая при больших t практически равна первому члену формулы (31). В линейном по малому отношению $\chi_i/|\chi_r|$ приближении функция $\varepsilon''(\theta)$ имеет вид

$$\varepsilon''_{sj}(\theta) = \frac{\chi_{i0}}{\gamma_0} + \frac{\xi_{sj}}{1 + \xi_{sj}^2} \left[2 \frac{\chi_{ih} C_s}{\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}} - \chi_{i0} \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h} \right) \xi_{sj} \right], \quad (32)$$

а ξ и $\varepsilon'(\theta)$ определяются формулами (10), (16), в которых надо заменить χ_0 на $-\chi_{r0}$ и $\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$ на $|\chi_{rh}|$. Дифференцируя (32) получаем после несложных преобразований для точки минимума θ_M следующее выражение

$$\theta_M = \frac{(\gamma_h - \gamma_0)}{2g\gamma_0 \sin 2\theta_B} \left[|\chi_{r0}| - |\chi_{rh}| \frac{\chi_{i0}}{|\chi_{ih}|} \right] = \theta_0 - \theta_2. \quad (33)$$

Приближенное значение интеграла в этом случае можно получить, если разложить функции f и φ в ряд Тейлора в точке θ_M и оставить только члены до $(\theta - \theta_M)^2$ включительно. Полученный интеграл вычисляется с помощью формулы (12). С учетом (10), (16), (31)—(33) и после несложных расчетов получаем

$$I_T(x) = \frac{g}{2L} \sum_s \frac{e^{-2f_s(\theta_M)}}{|A_s|} \exp \left[-\frac{(x - x_{ms})^2}{D_s^2} \right], \quad (34)$$

где

$$\left. \begin{aligned} x_{ms} &= \frac{l}{2} \left(1 + \frac{\theta_2}{\sqrt{\theta_2^2 + \theta_{1s}^2}} \right) + gL\theta_M, \\ A_s &= \frac{l}{2} \frac{\theta_{1s}^2}{(\theta_{1s}^2 + \theta_2^2)^{3/2}} \left(1 + i \left| \frac{\chi_{ih}}{\chi_{rh}} \right| \right) - gL, \quad D_s^2 = \frac{|A_s|^2}{\kappa g A_s''}. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

При выводе (34) мы пренебрегли производными от логарифма в f , что оправдано при больших t .

Как следует из (34), кривая коэффициента прохождения имеет в этом случае гауссовский вид с максимумом в точке x_m , причем полуширина кривой и значение в максимуме сильно зависят от L . Наиболее узкий и высокий пик получается, согласно (35), при

$$L = L_{0s} = \frac{l}{2g\theta_{1s}} \left(1 + \frac{\theta_0^2}{\theta_{1s}^2}\right)^{-3/2}. \quad (36)$$

На этом расстоянии действительная часть A обращается в нуль, и модуль A определяется только мнимой частью. На других расстояниях модуль A равен приблизительно действительной части, которая в $|\chi_{rh}/\chi_{ih}|$ раз больше мнимой. В таком же отношении находятся значения в максимуме кривой вблизи и вдали от фокальной линии, если отвлечься от множителя $g/2L$, который сокращается при делении на интегральную интенсивность (17).

Таким образом, сильнопоглощающий идеальный кристалл играет роль собирающей линзы для слабопоглощающегося поля, причем зависимость вектора электрического поля от x в области пространства вблизи фокуса близка к плосковолновой. Действительно, квадратичный по x член в фазе интеграла (30) пропорционален A' и вместе с A' обращается в нуль на фокальной линии.

Заметим, что этот эффект может быть использован для спектроскопии рентгеновского излучения. Зависимость от частоты входит в теорию через направление s_0 . Если зафиксировать ось Z системы координат как направление s_0 для некоторой частоты ω_0 , то дифракционная картина для частоты ω , не сильно отличающейся от ω_0 , будет просто сдвинута из начала координат как целое, причем координата центра картины будет равна

$$x_m(\omega) = x_m(\omega_0) + \frac{(\omega - \omega_0)}{\omega_0} \operatorname{tg} \theta_B L. \quad (37)$$

При большом угле рассеяния, когда $\operatorname{tg} \theta_B > 1$, можно получить хорошее разрешение.

Принимая во внимание (16), (20) и (33), выразим L_0 через физические параметры

$$L_{0s} = K_s t, \quad K_s = \frac{\sin^2 2\theta_B}{2|\chi_{rh}| C_s} \frac{\gamma_0^{1/2}}{\gamma_h^{3/2}} \left(1 + \frac{(\gamma_0 - \gamma_h)^2}{4\gamma_0 \gamma_h C_s^2} \frac{\chi_{i0}^2}{|\chi_{ih}|^2}\right)^{-3/2}.$$

Так, например, для кристалла Ge, SrK_α -излучения ($\lambda = 2.29 \text{ \AA}$) и (220) рефлекса имеем в симметричном случае ($\gamma_0 = \gamma_h = \cos \theta_B$) и для σ -поляризации $K = 1.13 \cdot 10^4$. При толщине кристалла $t = 100 \text{ мкм}$ фокальная линия находится на расстоянии $L_0 = 1.13 \text{ м}$ от источника и в то же время $\mu_0 t = 10.5$ по данным [11]. Для π -поляризованного излучения L_0 уже в 2.9 раз больше за счет поляризационного множителя в знаменателе, поэтому излучение в фокусе практически плоскополяризовано. Анализ эффекта в отраженном пучке проводится полностью аналогично. В результате

$$I_R(x) = \frac{g}{2\beta L_h} \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \sum_s \frac{e^{-2f_{hs}(\theta_M)}}{|A_{hs}|} \exp \left[-\frac{(x - x_{hs} - x_0)^2}{D_{hs}^2} \right], \quad (38)$$

где

$$f_{hs} = f_s - \frac{1}{2} \ln(\xi_s^2), \quad D_{hs}^2 = \frac{|A_h|^2}{\kappa g^3 A_h''},$$

а формулы для x_h и A_h получаются из (35) заменой l на l_h и L на \tilde{L}_h/β . Фокальная плоскость определяется из соотношения $\tilde{L}_h = Kt$.

Экспериментально эффект дифракционной фокусировки можно наблюдать именно в отраженном пучке. В симметричном случае $\gamma_0 = \gamma_h$ при условии, что расстояние от источника до кристалла равно расстоянию от кристалла до пленки, происходит фокусировка полихроматического излучения, т. е. максимумы отражения для излучений с разными длинами

волн накладываются друг на друга, и дифракционная картина проявляется в чистом виде.

Отметим в заключение, что фокусировка, хотя и в меньшей степени, будет происходить и тогда, когда условие $\mu_0 t \gg 1$ выполняется не очень хорошо. В этом случае дифракционная картина будет более сложной и не описывается формулами (34), (38). Однако формула (36) для фокусного расстояния остается в силе и в этом случае, поскольку она отражает общую природу эффекта — сокращение квадратичных по θ членов в фазе Фурье-компоненты поля. Другими словами, фокусное расстояние равно радиусу кривизны дисперсионной поверхности вблизи точки Лауэ.

Л и т е р а т у р а

- [1] N. Kato. Acta cryst., 14, 526, 627, 1961.
- [2] N. Kato. J. Appl. Phys., 39, 2225, 2231, 1968.
- [3] T. C. Huang, B. Post. Acta Cryst., A29, 35, 1973.
- [4] S. Balter, R. Fieldman, B. Post. Phys. Rev. Lett., 27, 307, 1971.
- [5] R. Feldman, B. Post. Phys. St. Sol. (a), 12, 273, 1972.
- [6] T. C. Huang, M. H. Tillinger, B. Post. Zs. Naturforsch., 28a, 600, 1973.
- [7] С. А. Кшевецкий, И. П. Михайлюк. Кристаллогр., 21, 381, 1976.
- [8] В. Д. Козьмик, М. Л. Кшевецкая, С. А. Кшевецкий, И. П. Михайлюк, М. В. Остапович. Кристаллогр., 21, 38, 1976.
- [9] Э. Г. Пинскер. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. «Наука», М., 1974.
- [10] Г. Ватсон. Теория бесселевых функций, т. I, с. 198. ИЛ, М., 1949.
- [11] G. Hildebrandt, J. D. Stephenson, H. Wagenfeld. Zs. Naturforsch., 28a, 588, 1973.

Поступило в Редакцию
3 февраля 1977 г.