

УДК 548.73

КОН В. Г.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ СФЕРИЧЕСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Проведено конкретное количественное исследование эффекта дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны идеальным плоским кристаллом. Рассмотрены как случай сильнопоглощающего кристалла, когда реализуется эффект Бормана, так и случай слабого поглощения, а также промежуточный случай. Обсуждаются методы численного счета с помощью ЭВМ, удобные для численного решения данной задачи. Методы, развитые в работе, пригодны для расчета дифракционной картины от двух и более кристаллов.

В [1] предсказан эффект дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны идеальным кристаллом в форме плоскопараллельной пластины. Дифракционная картина в общем случае описывается интегралом от сложной и быстроосциллирующей функции, и ее конкретный анализ невозможен без применения численных методов. В [1] рассмотрен только наиболее важный и вместе с тем самый простой для анализа случай толстого сильнопоглощающего кристалла в условиях, когда реализуется эффект Бормана. Этот случай хорош тем, что, с одной стороны, в нем эффект проявляется в наиболее чистом виде, а с другой — он допускает применение аналитических методов.

Однако, как показал анализ, фокусировка происходит на довольно большом расстоянии между источником и детектором, которое, кроме того, прямо пропорционально толщине кристалла. Поэтому, естественно, возникает необходимость в поиске наиболее оптимальных условий для эксперимента, а также в более детальном исследовании этого эффекта в общем случае с помощью численного расчета полученного в [1] интеграла на ЭВМ. Этому вопросу посвящена настоящая работа.

В первом разделе выписаны исходные формулы и дан метод численного расчета. Так как подынтегральная функция сильно осциллирует, то применение стандартных методов численного интегрирования, например формулы Симпсона, приведет к неоправданно большим затратам машинного времени. Идея метода, предложенного в данной работе, состоит в аппроксимации полиномом не подынтегральной функции в целом, а ее модуля и фазы по отдельности. Заметим, что этот метод может быть с успехом использован для решения других аналогичных задач, в частности для расчета двухблочных и трехблочных интерферометров [2].

Поскольку в реальных экспериментальных условиях (см., например, [3, 4]) используется немонахроматическое в пределах естественной ширины линии излучение, то для экспериментального наблюдения эффекта фокусировки необходимо выбирать такие условия, в которых немонахроматичность не приводит к его расстройке. Роль немонахроматичности подробно исследовалась в [5], где было показано, что наиболее удобным для наблюдения является дифрагированный пучок, причем в симметричном случае расстояние от источника до кристалла должно быть равно расстоянию от кристалла до детектора. Поэтому в настоящей работе мы ограничились анализом только этой ситуации.

Во втором разделе обсуждаются результаты численных расчетов для трех конкретных случаев с сильным, умеренным и слабым поглощением.

Исходные формулы и метод численного счета

Пусть расходящаяся сферическая волна от точечного источника падает на кристаллическую пластинку толщиной t , помещенную относительно направления источник — кристалл s_0 под брэгговским углом, а интенсивность прямого и дифрагированного пучков регистрируется на экране (фотоплёнке), расположенном перпендикулярно s_0 на расстоянии L от источника. Расстояние источник — выходная поверхность кристалла обозначим через L_1 и выберем ось x на экране в плоскости рассеяния, т. е. в плоскости векторов s_0 и s_h в сторону вектора дифрагированной волны s_h .

При этом зависимость интенсивности рентгеновых лучей в дифрагированном пучке I_R от x определяется формулами (9) — (11), (15) — (17) работы [1]. Ниже мы ограничимся только симметричным случаем, когда векторы s_0 и s_h образуют равные углы с поверхностью кристалла. Кроме того, будем предполагать, что кристалл состоит из атомов одного сорта. В этом случае дифракционная картина описывается интегралом, который удобно записать в виде

$$I_R(x) = \frac{1}{2L_h} \sum_s G_s \left| \sum_j \int dy F_{sj}(y) e^{i\varphi_{sj}(x,y)} \right|^2, \quad (1)$$

где

$$F_{sj}(y) = \mp \frac{1}{2\sqrt{1+y^2}} \exp \left(-\frac{\mu_0 t}{2\gamma_0} \left[1 \pm \frac{|\chi_{ih}| C_s}{\chi_{i0}} \frac{1}{\sqrt{1+y^2}} \right] \right),$$

$$\varphi_{sj}(x, y) = 2\pi G_s \left[K_s t (py \mp \sqrt{1+y^2}) - \frac{1}{2} L_h y^2 \right]. \quad (2)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$G_s = \frac{|\chi_{rh}|^2 C_s^2}{\lambda \sin^2 2\theta_B}, \quad K_s = \frac{\sin^2 2\theta_B}{2\gamma_0 |\chi_{rh}| C_s}, \quad \gamma_0 = \cos \theta_B,$$

$$p = \frac{x}{x_m}, \quad x_m = t \frac{\operatorname{tg} 2\theta_B}{2\gamma_0}, \quad L_h = L_1 + \frac{L - L_1}{\cos 2\theta_B}. \quad (3)$$

Величины $\chi_{0,h}$ есть нулевая и h -я фурье-компоненты комплексной поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$, h — вектор обратной решетки (с множителем 2π), удовлетворяющий условию Брэгга, θ_B — угол Брэгга, λ и μ_0 — длина волны и нормальный коэффициент поглощения рентгеновых лучей. Индекс s принимает два значения π и σ в соответствии с двумя состояниями поляризации, C_s — поляризационный множитель, равный единице для σ -поляризации и $\cos 2\theta_B$ — для π -поляризации. Координата x отсчитывается от середины отрезка, являющегося проекцией основания дельты Бормана на плоскость экрана (HH_1 на рисунке в [1]), а $2x_m$ — длина этого отрезка. Индекс j принимает два значения в соответствии с двумя знаками в формулах (2). Поле, соответствующее верхнему знаку, мы будем называть для краткости полем A -типа, а нижнему знаку — B -полем. Легко видеть из (2), что в точке $y=0$ B -поле слабо поглощается, а A -поле быстро затухает с ростом толщины кристалла, когда $\mu_0 t \gg 1$.

Чтобы понять характер трудностей, возникающих при расчете интеграла (1), рассмотрим случай слабопоглощающего кристалла, когда $\mu_0 t \ll 1$. В этом случае функция $F(y)$ максимальна в точке $y=0$, а при больших $|y|$ убывает как $1/|y|$, т. е. очень слабо. Ограничим область интегрирования в (1) условием $|y| < 50$ и подсчитаем область изменения фазы φ на этом интервале для характерных экспериментальных условий $\lambda = 1 \text{ \AA}$,

$|\chi_{rh}|=10^{-5}$, $\theta_B=30^\circ$, $L_h=2$ м, $t=100$ мкм. Простой расчет дает, что φ растет в этом случае от $-18\ 000$ при $y=-50$ до ± 80 при $y=0$ и снова убывает до $-18\ 000$ при $y=50$. Следовательно, $\exp(i\varphi)$ весьма сильно осциллирует и неудобна для применения стандартных методов численного интегрирования, предполагающих гладкость подынтегральной функции.

В задачах подобного типа для получения качественных результатов обычно используют метод стационарной фазы, согласно которому главный вклад в интеграл дает область интегрирования вблизи точки, в которой $d\varphi/dy=0$. Применимость этого метода ограничена, во-первых, условием $d^2\varphi/dy^2 \neq 0$ в стационарной точке, а во-вторых, в случае существования нескольких стационарных точек условием, чтобы они не лежали слишком близко друг к другу. Кроме того, в методе стационарной фазы обычно бывает трудно оценить степень точности результата, и его применимость, по нашему мнению, может быть оправдана лишь в том случае, когда с его помощью удается получить результат в простой аналитической форме.

Однако нас будет интересовать как раз такая ситуация, когда эти условия не выполняются, и поэтому анализ стационарных точек, хотя и полезный для качественного рассмотрения, нельзя считать решением задачи. Действительно, условие $d\varphi/dy=0$ приводит к уравнению

$$p \mp \frac{y}{\sqrt{1+y^2}} - qy = 0, \quad (4)$$

где

$$q = \frac{L_h}{K_s t}. \quad (4.a)$$

Рассмотрим сначала случай, когда $q=0$, что соответствует теории Като. Легко видеть, что в этом случае при $|p| < 1$ существует только одна стационарная точка $y = \pm p/\sqrt{1-p^2}$, в которой $d^2\varphi/dy^2 \neq 0$. Таким образом, указанные выше условия выполняются. Если же $|p| > 1$, то стационарная точка отсутствует, и, как известно из точного решения, в этой области интеграл равен нулю.

Но, как следует из определения параметра q , условие $q \ll 1$ выполняется только для достаточно толстых кристаллов при малом расстоянии между источником и детектором. Если же расстояние не мало, либо кристалл достаточно тонкий, то необходимо учитывать член, пропорциональный q . В этом случае стационарная точка существует при любом значении p , однако получить для нее простое аналитическое выражение уже невозможно. Кроме того, легко заметить из (4), что, например, при $p=0$, т. е. в максимуме интенсивности, в случае B -поля и $q < 1$ существуют три стационарные точки, близкие между собой, если разность $1-q \ll 1$. При $q=1$ эти точки слипаются, и при этом одновременно с первой производной от φ равны нулю также вторая и третья производные.

В данной работе для проведения численных расчетов с контролируемой точностью был использован метод, идея которого состоит в следующем. Разобьем область интегрирования на достаточно малые отрезки и рассмотрим интеграл по какому-либо отрезку (A, B) . Предположим, что модуль $F(y)$ и фазу $\varphi(y)$ подынтегральной функции с достаточной точностью можно аппроксимировать на этом отрезке линейными функциями

$$\tilde{F}(y) = F_0 + F_1 t, \quad \tilde{\varphi}(y) = \varphi_0 + \gamma t, \quad (5)$$

где

$$F_0 = \frac{1}{2}[F(B) + F(A)], \quad F_1 = \frac{1}{2}[F(B) - F(A)], \quad (6)$$

$$\varphi_0 = \frac{1}{2}[\varphi(B) + \varphi(A)],$$

$$\gamma = \frac{1}{2}[\varphi(B) - \varphi(A)], \quad t = \frac{1}{h} \left(y - \frac{A+B}{2} \right), \quad h = \frac{B-A}{2}.$$

Так как интеграл от функций (5) вычисляется явно, то в результате получаем для искомого интеграла аппроксимацию

$$\int_A^B dy F(y) \exp[i\varphi(y)] \approx h \exp[i\varphi_0 F_0 Y_0 + iF_1 Y_1], \quad (7)$$

где

$$Y_0 = \int_{-1}^1 dt \exp(i\gamma t) = 2 \sin \gamma / \gamma, \quad (8)$$

$$Y_1 = -i \int_{-1}^1 dt t \exp(i\gamma t) = \frac{2}{\gamma} [\sin \gamma / \gamma - \cos \gamma].$$

Заметим, что формула (7) может быть сколь угодно точной при достаточно малой величине отрезка h . Действительно, в то время как интеграл в пределе $h \rightarrow 0$ пропорционален h , отбрасываемые члены пропорциональны h^3 и гораздо быстрее стремятся к нулю. Преимущество формулы (7) состоит в том, что она явным образом учитывает сколь угодно быстрое (но линейное!) изменение фазы на отрезке через параметр $\gamma \sim \varphi_0' h$, где φ_0' — первая производная от фазы в середине отрезка. При $\gamma \rightarrow 0$ формула (7) переходит в обычную формулу трапеций.

Можно без труда учесть квадратичное изменение функции $F(y)$, т. е. член $F_0'' h^2 t^2 / 2$, однако это разумно лишь в том случае, когда мала квадратичная поправка у функции $\varphi(y)$. Если же F и φ меняются примерно одинаково, то, задавшись некоторой относительной погрешностью $\varepsilon \ll 1$, интервал $2h$ следует выбирать таким, чтобы выполнялось условие

$$|\varphi_0''| \frac{h^2}{2} \leq \varepsilon, \quad h \leq \sqrt{\frac{2\varepsilon}{|\varphi_0''|}}. \quad (9)$$

Не усложняя существенно алгоритм, можно также учесть линейную по φ_0'' поправку. В ряде случаев это смягчает условие (9) на выбор величины отрезков.

Прежде чем перейти к обсуждению результатов расчетов, остановимся на одной модификации изложенного выше метода. Запишем $F(y)$ в виде $\exp(\ln F(y))$ и рассмотрим интеграл

$$I = \int_A^B dy \exp[z(y)], \quad z(y) = \ln F(y) + i\varphi(y), \quad (10)$$

где

$$z(y) = \ln F(y) + i\varphi(y). \quad (10, a)$$

Разлагая здесь комплексную функцию $z(y)$ в ряд Тейлора в средней точке отрезка и сохраняя только линейный член, легко получаем аппроксимацию

$$I = (B-A) \frac{\exp[z(B)] - \exp[z(A)]}{z(B) - z(A)}. \quad (11)$$

Формула (11) весьма проста и удобна для программирования, однако ее реализация на ЭВМ приводит к большим вычислительным затратам по сравнению с формулой (7) из-за необходимости вычислять лишние элементарные функции.

Заметим, что в интеграле (10) можно точно учесть квадратичное изменение $z(y)$. В этом случае результат выражается через функцию ошибок

комплексного аргумента. Учет квадратичных членов позволяет увеличить длину отрезков и тем самым уменьшить их число, однако сложный характер аппроксимации и связанные с этим вычислительные затраты сводят на нет это преимущество.

Представление (10) оказывается весьма полезным при вычислении интегралов по двумерной области. Задача такого типа возникает при анализе многоволновой дифракции сферической рентгеновской волны [5]. В этом случае удобен следующий алгоритм. Разобьем всю плоскость на треугольники и рассмотрим интеграл по треугольнику с вершинами в точках A , B , C . Разлагая функцию $z(x, y)$ внутри треугольника в ряд Тейлора по двум переменным и сохраняя только линейные члены, можно получить следующую аппроксимацию:

$$\iint_{\Delta} dx dy \exp[z(x, y)] \approx 2S \left[\frac{\exp(z_A)}{(z_B - z_A)(z_C - z_A)} + \frac{\exp(z_B)}{(z_A - z_B)(z_C - z_B)} + \frac{\exp(z_C)}{(z_A - z_C)(z_B - z_C)} \right], \quad (12)$$

где S — площадь треугольника, z_A, z_B, z_C — значения функции z в точках A, B, C . Интересным свойством формулы (12) является то, что она не зависит от формы треугольника.

Конкретные примеры

Для количественного анализа эффекта фокусировки были выбраны три конкретных примера, различающихся между собой длиной волны рентгеновых лучей и степенью их поглощения в кристалле. Результаты расчетов показаны на рис. 1–3. Расстояние источник — кристалл — пленка L_h во всех случаях равно 2 м , что соответствует схеме эксперимента в [3, 4]. Такое расстояние необходимо, чтобы наблюдать фокусировку на достаточно толстых кристаллах. Так как рассматривается симметричный случай, то для предотвращения размывания картины вследствие немонохроматичности необходимо, чтобы кристалл находился на равном расстоянии между источником и фотопленкой.

Строго говоря, фокусировку в чистом виде следует смотреть при фиксированной толщине кристалла, меняя величину параметра L_h . Однако на практике более удобно фиксировать геометрию прибора и исследовать дифракционную картину в зависимости от толщины кристалла t . Если вырезать кристалл в форме клина с углом в плоскости, перпендикулярной плоскости рассеяния, то на одной пленке можно получить двумерную картину распределения интенсивности $I_R(x, t)$. Заметим, что в этом случае интегральная по x интенсивность с ростом t будет убывать, если кристалл поглощающий.

Значения координаты x на рисунках соответствуют такой ориентации фотопленки, при которой она перпендикулярна направлению источник — кристалл. В действительности это не обязательно. Можно, например, поместить пленку перпендикулярно направлению дифрагированных лучей, что приведет к сужению картины в $\cos 2\theta_B$ раз. Однако для сравнения с поперечными размерами фокуса рентгеновской трубки удобнее выбранная ориентация. При этом для получения реальной картины необходимо усреднить рассчитанное распределение интенсивности для точечного источника по ширине фокуса рентгеновской трубки либо по величине щели, ограничивающей падающий пучок.

На рис. 1 представлено распределение $I_R(x, t)$ для следующей экспериментальной ситуации: кристалл германия, $\text{Cr } K_{\alpha}$ -излучение ($\lambda = 2,29 \text{ \AA}$) и (220)-отражение. Этот случай характеризуется большим значением угла Брэгга $\theta_B = 34^{\circ}56'$ и сильным поглощением $\mu_0 t = 10,5$ при $t = 100 \text{ мкм}$ [6]. Поэтому при расчете принималось во внимание только (B, σ) -поле. Как

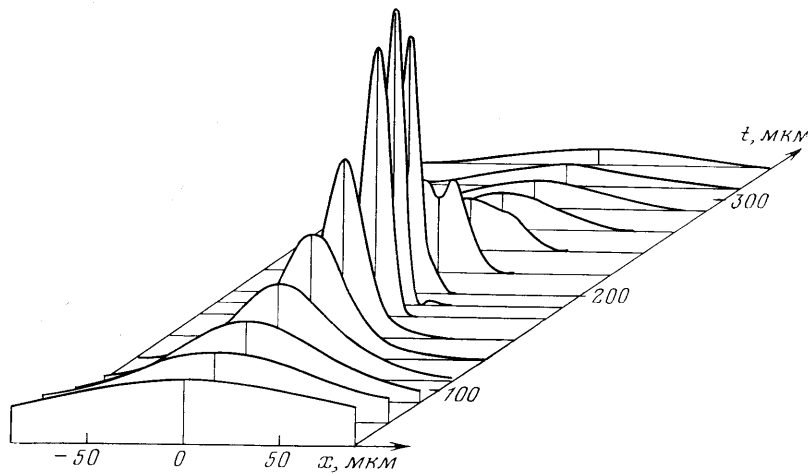


Рис. 1. Интенсивность дифрагированного пучка $I_R(x)$ для кристаллов различной толщины t

Расстояние источник — кристалл — пленка равно 2 м, кристалл германия, $\text{Cu } K_\alpha$ -излучение, (220)-отражение

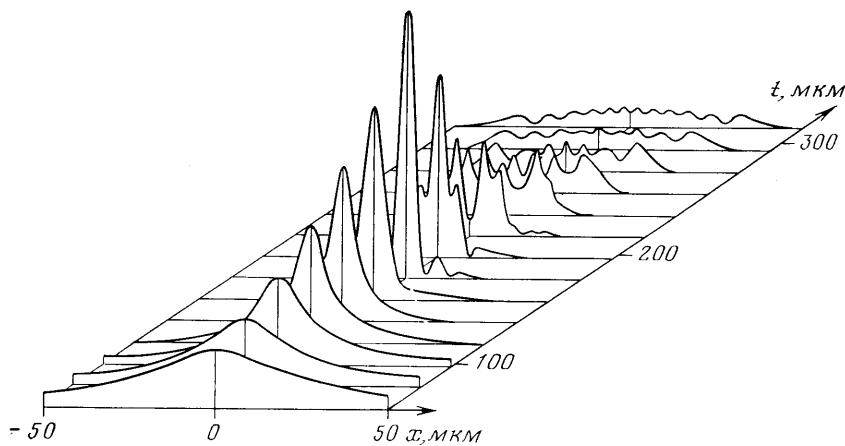


Рис. 2. Интенсивность дифрагированного пучка $I_R(x)$ для кристаллов различной толщины t

Расстояние источник — кристалл — пленка равно 2 м, кристалл германия, $\text{Cu } K_\alpha$ -излучение, (220)-отражение

видно из рис. 1, распределение $I_R(x)$ при всех t примерно похоже на гауссовское, что соответствует результатам [1].

Однако есть и небольшие отличия. Так, максимум интенсивности приходится на $t=190 \mu\text{m}$, что соответствует $q=0,935$. При еще меньших значениях q максимум в точке $x=0$ сменяется локальным минимумом. Качественно такое поведение легко объяснить поведением фазы вблизи точки $y=0$ в интеграле. Как уже отмечалось, при q , слегка меньших единицы, возникают три близкие стационарные точки. Пока разность фаз между ними невелика, вклады от них складываются, что приводит к некоторому увеличению интеграла. С уменьшением q расстояние между этими точками увеличивается и их вклады оказываются в противофазе, что приводит к локальному минимуму. Вследствие сильного поглощения вклады от боковых стационарных точек малы и потому минимум неглубокий. При дальнейшем уменьшении q боковым стационарным точкам соответствуют малые значения $F(y)$ и они не дают вклада. В этом случае параметр

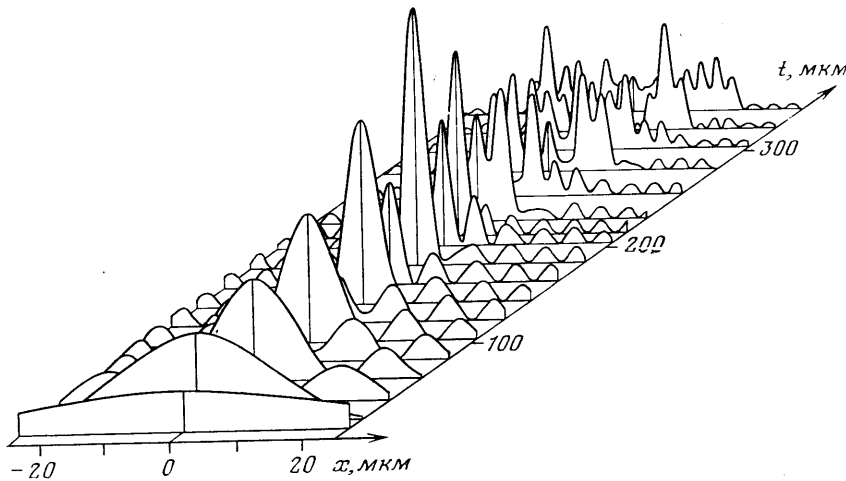


Рис. 3. Интенсивность дифрагированного пучка $I_R(x)$ для кристаллов различной толщины t

Расстояние источник — кристалл — пленка равно 2 м, кристалл кремния, $\text{Mo } K_\alpha$ -излучение, (111)-отражение

$x_m = 1,67t$. При $t = 190$ мкм ширина пика равна ~ 15 мкм, в то время как проекция основания дельты Бормана $2x_m = 636$ мкм. Таким образом, сжатие волнового фронта весьма велико.

На рис. 2 представлены результаты расчетов для тех же условий, но для $\text{Cu } K_\alpha$ -линии ($\lambda = 1,54 \text{ \AA}$). Этот случай отличается не столь сильным поглощением $\mu_0 t = 3,54$ при $t = 100$ мкм. Кроме того, угол Брэгга $\theta_B = 22^\circ 39'$. Поэтому при расчете принимались во внимание (B, σ) - и (B, π) -поля. Как видно из рис. 2, в этом случае также имеет место хорошая фокусировка, а тенденции, которые лишь намечались на рис. 1, получают свое дальнейшее развитие. Так, максимум приходится на толщину $t = 176$ мкм, которой соответствует $q = 0,892$. Локальный минимум при $t = 214$ мкм становится более глубоким, а в целом картина в той части, которой соответствует $q < 1$, становится более сложной. Отношение $x_m/t = 0,547$. Отношение ширины пика в максимуме к $2x_m$ равно 0,034.

Рис. 3 представляет пример непоглощающего кристалла и соответствует следующим условиям: кристалл кремния, $\text{Mo } K_\alpha$ -излучение ($\lambda = 0,709 \text{ \AA}$) и (111)-отражение. В этом случае $\mu_0 t = 0,139$ при $t = 100$ мкм, $\theta_B = 6^\circ 30'$, $x_m/t = 0,116$. Вообще говоря, в этом случае следует учитывать все четыре поля, но так как угол Брэгга очень мал, то оба состояния поляризации дают примерно равные вклады и расчет проводился только для σ -поляризации. Наличие двух когерентных полей и их интерференция сильно усложняют дифракционную картину в этом случае. Хотя для A -поля нет фокусировки и его интенсивность много меньше интенсивности B -поля, но интерференционный член значителен и приводит к заметным осцилляциям суммарной интенсивности с ростом толщины кристалла при $x = 0$. Осцилляции хорошо проявляются со стороны $q \geq 1$, когда оба поля имеют только одну стационарную точку в интеграле. Интересно, что период осцилляций такой же, как и в теории Като [7]. Это объясняется тем, что разность фаз между стационарными точками (т. е. $y = 0$) для A и B полей равна, согласно (2), $\Delta\phi = 4\pi G K t$ и не зависит от L_n .

Однако, в отличие от теории Като, средняя по периоду осцилляций интенсивность на линии $x = 0$ увеличивается с ростом толщины кристалла, достигает максимума при $t = 184$ мкм, а затем снова убывает. В максимуме $q = 0,705$, т. е. еще меньше, чем во втором случае. Другим важным отличием от теории Като является то, что волновой фронт не укладывается в дельту Бормана при малых t . При $t \rightarrow 0$ интенсивность отраженных волн

также стремится к нулю, что является физически правильным результатом. Действительно, кристалл нулевой толщины не может рассеивать, а тонкий кристалл «видит» сферическую волну в каждом участке своей поверхности как почти плоскую, угол падения которой меняется при движении вдоль поверхности кристалла. Как было показано в [1], дифракционная картина при этом воспроизводит угловую зависимость интенсивности плосковолновой динамической теории.

Литература

1. А. М. Афанасьев, В. Г. Кон. Физика тв. тела, **19**, 1775, 1977.
2. S. Tanemura, A. R. Lang. Z. Naturforsch., **a28**, 668, 1973.
3. T. C. Huang, M. H. Tillinger, B. Post. Z. Naturforsch., **a28**, 600, 1973.
4. С. А. Кшевецкий, И. П. Михайлюк. Кристаллография, **21**, 381, 1976.
5. В. Г. Кон. Физика тв. тела, **19**, 3567, 1977.
6. G. Hildebrandt, J. D. Stephenson, H. Wagenfeld. Z. Naturforsch., **a28**, 588, 1973.
7. N. Kato. J. Appl. Phys., **39**, 2225, 1968.

Поступила в редакцию
3.III.1978
