

---

## ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

---

УДК 548.73

# МЕТОД ТРАЕКТОРИЙ В ТЕОРИИ ЛАУЭ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛЕ. II. ЭФФЕКТ ПОЛНОГО ОТРАЖЕНИЯ ПРИ ИЗГИБНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

© 2008 г. В. Г. Кон

Российский научный центр “Курчатовский институт”, Москва

E-mail: kohnvict@yahoo.ru

Поступила в редакцию 06.06.2007 г.

Методом траекторий анализируется эффект полного отражения (переброски) сферической рентгеновской волны в случае Лауэ дифракции в кристалле с изгибной деформацией. Дано качественное аналитическое описание, а также выполнено численное моделирование пространственной структуры отраженного пучка для большого и малого расстояний между источником сферической волны и кристаллом. Наглядно показан механизм, с помощью которого деформированный кристалл во много раз более эффективно отражает рентгеновский пучок по сравнению с совершенным кристаллом. Показано также, что метод траекторий исключительно удобен для описания эффекта полного отражения.

PACS: 61.10.Nz

### ВВЕДЕНИЕ

Как известно, толстая монокристаллическая пластинка плохо рассеивает рентгеновское излучение. Причиной является то, что кристалл однороден, если усреднить его электронную плотность по периоду кристаллической решетки, а следовательно, он рассеивает только вперед. А если не усреднять, то дополнительно происходит рассеяние на двойной угол Брэгга при определенной ориентации кристалла, причем последнее ограничено очень узкой угловой областью, ширина которой определяется параметром дифракции  $\chi_{rh} \sim 10^{-5}$ , т.е. фурье-компонентой поляризуемости на векторе обратной решетки. Известно также, что интегральная интенсивность брэгговского отражения возрастает, если кристалл содержит дефекты или его решетка деформирована. По этой причине изучение деформированных кристаллов интересно не только для диагностики их структуры, но и как способ усилить их отражающую способность. В [1] дана общая формулировка метода траекторий в теории дифракции рентгеновских лучей в геометрии Лауэ, когда отраженный пучок выходит из противоположной грани кристалла. Метод позволяет достаточно просто изучать дифракцию сферической волны в кристалле с медленно меняющейся деформацией.

В данной работе метод траекторий применяется для детального изучения эффекта полного отражения в случае дифракции по Лауэ в кристалле с изгибной деформацией. Этот эффект впервые наблюдался в [2] и был назван эффектом переброски пучка из направления прохождения в на-

правление отражения. Речь идет о том, что интегральная интенсивность пучка с конечной шириной, например ограниченного целью, возрастает и достигает максимального значения с ростом величины деформации специального вида. Одновременно интенсивность проходящего пучка стремится к нулю, что и позволяет считать отражение полным. Изучению эффекта переброски посвящено много экспериментальных и теоретических работ. Краткий обзор можно найти в [3].

Однако метод траекторий не использовался, но он позволяет дать простое качественное описание эффекта и приводит к резкому сокращению времени расчетов при численном моделировании. Аналитический анализ представлен в следующем разделе. Суть эффекта состоит в том, что вблизи входной поверхности кристалла условия дифракции не выполняются и лучи сначала распространяются в направлении падающего пучка. Изменяющаяся деформация кристалла приводит к тому, что на определенной глубине условие Брэгга все же выполняется и лучи эффективно отражаются. Затем условие Брэгга снова нарушается, и лучи далее распространяются в направлении отражения, пока не достигнут границы кристалла. Независимо от того, под каким углом луч входит в кристалл, он все равно выходит в направлении отражения. Его стартоное направление влияет только на глубину кристалла, где произойдет отражение. С другой стороны, совершенный кристалл сразу отклоняет лучи уже на входной поверхности, и далее они своего направления не меняют, так как условие Брэгга по всей глубине кристалла неизменно. По-

этому отражаются только те лучи, которые входят в кристалл сразу в правильном направлении.

Численные расчеты выполнены для двух предельных случаев большого (40 м) и малого (50 см) расстояний между источником сферической волны и кристаллом. В первом случае пространственная структура отраженного пучка почти воспроизводит кривую угловой зависимости отражения при дифракции плоской волны. Второй случай близок к задаче о дифракции сферической волны в постановке Като [4, 5], когда источник помещен на поверхности кристалла. В обоих случаях с ростом деформации пучок ограниченной ширины полностью отражается, хотя и с определенными потерями интенсивности на поглощение в кристалле.

### АНАЛИТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Общая формулировка метода траекторий дана в [1], являющейся первой частью данной работы. Ниже ссылки на формулы первой части даны с указанием римской цифры I перед номером. Основными положениями теории являются следующие. Изучаются переменные скалярные амплитуды электрического поля проходящей  $E_0(x, z)$  и дифрагированной  $E_h(x, z)$  волн в кристалле, соответствующие одному из двух возможных состояний поляризации. Оси координат  $x$  и  $z$  вводятся в плоскости рассеяния продольно и перпендикулярно поверхности кристалла, ось  $x$  направлена в сторону падающего пучка, координата  $z$  равна нулю на входной поверхности кристалла. Эти амплитуды в деформированном кристалле удовлетворяют уравнениям Такаги (I,2) с переменным параметром отклонения от условия Брэгга.

Рассматривается случай, когда деформация слабо меняется на расстоянии порядка длины экстинкции. При этом решения уравнений ищутся в виде двух независимых блоховских волн в эйкональном приближении, т.е. амплитуды каждой блоховской волны имеют вид  $E_0 = BE_0'' \exp(i\Phi)$ ,  $E_h = BFE_h'' \exp(i\Phi)$ . Здесь  $B = \exp(ic_0[s_0 + s_h])$ ,  $c_0 = K\chi_0/2$ ,  $K = 2\pi/\lambda$ , где  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения,  $\chi_0$  – средняя комплексная поляризуемость кристалла, равная ее нулевой компоненте Фурье. Косоугольные координаты  $s_0$  и  $s_h$  вдоль направлений пучков связаны с декартовыми координатами  $x$  и  $z$  следующими соотношениями  $x = s_0 \sin \theta_0 - s_h \sin \theta_h$ ,  $z = s_0 \cos \theta_0 + s_h \cos \theta_h$ , где  $\theta_0$  и  $\theta_h$  – углы между векторами падающей и дифрагированной волн и внутренней нормалью к поверхности кристалла. Очевидно, что  $\theta_0 + \theta_h = 2\theta_B$ , где  $\theta_B$  – угол Брэгга. В симметричном случае дифракции  $\theta_0 = \theta_h = \theta_B$ . Множитель  $F = \exp(-i\mathbf{h}[\mathbf{u}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_0])$ , где  $\mathbf{h}$  – вектор дифракции, функция  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  описывает поле смещений атомов вследствие деформа-

ции, а  $\mathbf{u}_0$  учитывает выбор начала отсчета в элементарной ячейке кристалла (подробности в [1]).

В результате подстановки вида решения получаем два уравнения: одно для фазы  $\Phi$  (I,6) и одно для амплитуды  $E_0''$  (I,17). Отношение амплитуд  $R = E_h''/E_0''$  полностью определяется фазой  $\Phi$ . Уравнение для фазы  $\Phi$  решается методом траекторий. Траектории связывают каждую точку на входной поверхности с каждой точкой на выходной поверхности. Начальное значение для амплитуды  $E_0''$  в каждой точке на входной поверхности кристалла находится из разложения амплитуды падающей волны на две блоховские волны с учетом выполнения локального условия Брэгга.

Что же касается самого уравнения, то оно решается на траектории аналитически. При этом амплитуды полей в конце траектории связаны с амплитудой падающей волны  $E_{0i}''$  в начале траектории формулами (I,24) которые ниже выписаны в явном виде

$$\begin{aligned} E_{0k}'' &= \frac{1}{2} E_{0i}'' (1 + V_0^{(k)})^{1/2} (1 + V_M^{(k)})^{1/2}, \\ E_{hk}'' &= \pm \frac{1}{2} E_{0i}'' (1 + V_0^{(k)})^{1/2} (1 - V_M^{(k)})^{1/2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь индекс  $k = 1, 2$  нумерует блоховские волны с различным преломлением и поглощением. Первая волна ( $k = 1$ ) сильно поглощается, а вторая ( $k = 2$ ) слабо поглощается. Параметр

$$V^{(k)} = \frac{dX}{dZ} = \pm \frac{y}{(1 + y^2)^{1/2}} \quad (2)$$

имеет смысл скорости отклонения траектории от оси  $Z$ . Верхний знак соответствует первой волне. Этот же параметр определяет направление потока энергии в кристалле, поскольку поток энергии в каждой блоховской волне течет по траекториям. Координаты  $X = s_0 - s_h$ , и  $Z = s_0 + s_h$  отсчитываются противоположно и перпендикулярно вектору дифракции. В симметричном случае дифракции их связь с координатами  $x$  и  $z$ , введенными выше, имеет простой вид:  $x = X \sin \theta_B$ ,  $z = Z \cos \theta_B$ .

Параметр  $y$  играет ключевую роль в теории, так как он соответствует безразмерному локальному параметру отклонения от условия Брэгга. Индексы 0 и  $M$  у скорости в формуле (1) означают, что значения взяты в начале и в конце траектории, т.е. на входной и выходной поверхностях кристалла. Уравнение для параметра  $y$  учитывает деформации решетки в объеме кристалла. Его можно записать в симметричном виде

$$\frac{dy}{dZ} = \frac{1}{2c} \frac{\partial^2}{\partial s_0 \partial s_h} (\mathbf{h} \mathbf{u}(\mathbf{r})). \quad (3)$$

Здесь  $c = KC|\chi_{rh}|/2$ , где  $C$  – поляризационный множитель, равный 1 для  $\sigma$ -поляризации и  $\cos(2\theta_B)$  для  $\pi$ -поляризации,  $\chi_{rh}$  – компонента Фурье на векторе дифракции от реальной части поляризуемости кристалла. Функция в правой части уравнения берется на вычисляемой траектории.

Уравнение (3) решается с учетом граничного условия (I,18), которое запишем в более развернутом виде

$$y_0 = \frac{1}{c} \left( \frac{\partial \Phi_0}{\partial X} \right)_{X_0} + \frac{\sin(2\theta_B)}{c} \Delta\theta + \frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial s_h} (\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r})). \quad (4)$$

Здесь все переменные величины берутся в начале траектории, то есть в точке  $X_0$  на входной поверхности кристалла ( $Z = 0$ ), угол  $\Delta\theta$  учитывает возможный поворот кристалла относительно оптической оси, фаза  $\Phi_0$  относится к падающей на кристалл волне и является начальным значением для фазы  $\Phi$ , введенной выше.

Уравнения (3) и (4) показывают, что дифракция рентгеновской волны зависит только от компоненты вектора смещения атомов вдоль вектора дифракции. В симметричном случае такой компонентой является компонента  $u_x$ . В данной статье рассмотрим изгибную деформацию, т.е. будем считать, что  $u_x$  зависит только от  $z$ . В этом случае имеет место эффект полного отражения плоской волны в широкой угловой области. Соответственно реализуется и полное отражение сферической волны в широкой части ее фронта около брэгговского направления.

Метод траекторий позволяет очень просто объяснить эффект полного отражения при упругом изгибе атомных плоскостей кристалла на качественном уровне. Наиболее простая деформация такого типа возникает при нагревании боковой грани кристалла со стороны отраженного пучка ([3] и ссылка в ней). Можно показать, что в этом случае на некотором расстоянии от боковой грани деформация приближенно описывается как изгиб атомных плоскостей по параболическому закону

$$u_x = -\frac{(z - t/2)^2}{2R}, \quad (5)$$

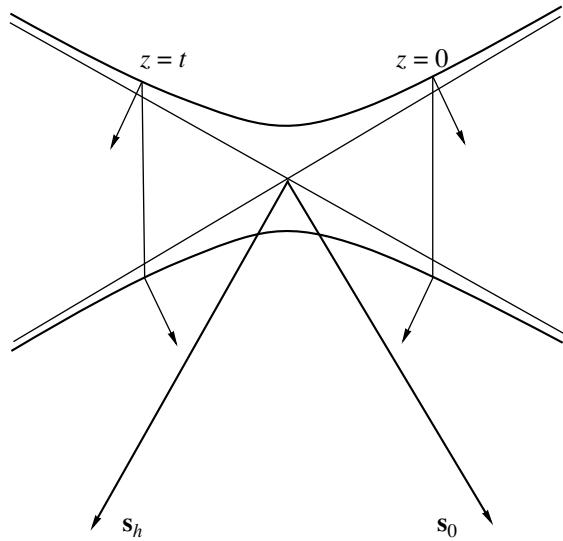
где  $t$  – толщина кристалла,  $R$  – радиус изгиба. В этой формуле линейный по  $x$  член, приводящий к изменению межплоскостного расстояния, не учитывается, так как он легко компенсируется выбором угла Брэгга. Формула записана таким образом, что смещение отсчитывается от его значения на середине толщины кристалла. Постоянный член в смещении эквивалентен сдвигу кристалла как целого и тоже не выписан. На верхней и нижней гранях смещение минимально, поскольку эти грани более холодные по сравнению с объемом из-за контакта с воздухом.

Пусть оптическая ось для падающего излучения выбрана таким образом, что условие Брэгга выполняется на середине толщины образца. Рассмотрим простой случай, когда на кристалл падает плоская волна вдоль оптической оси. Тогда в формуле (4) отличны от нуля только второй и третий члены, и для начального значения параметра отклонения от условия Брэгга получаем  $y_0 = y_c - Dt$ , где  $y_c = (\sin 2\theta_B/c)\Delta\theta$ ,  $D = \sin 2\theta_B/(2C|\chi_{rh}|R)$ . Дальнейшая эволюция этого параметра определяется уравнением (3), в котором правая часть равна константе, что позволяет сразу выписать решение в виде  $y(z) = y_0 + 2Dz = y_c + 2D(z - t/2)$ . Для вычисления амплитуд нам важно знать лишь значение в конце траектории, т.е.  $y_M = y(t) = y_c + Dt$ . Таким образом, параметр  $y$  на разных гранях кристалла имеет разные знаки, если  $|y_c| < Dt$ . Так как скорость отклонения траектории не зависит от  $x$ , то все траектории внутри пучка параллельны друг другу, как в плоской волне, но изогнуты по некоторому закону. При точном брэгговском положении кристалла и большом радиусе кривизны  $R$ , когда  $|y| \ll 1$ , траектории описываются формулой  $x \approx x_0 \pm D \operatorname{tg} \theta_B z (z - t)$ , т.е. близки к параболам. Однако с уменьшением  $R$  параболический участок на траектории будет иметь место только на некоторой глубине в кристалле, а до и после него траектории будут параллельны направлениям падающего и отраженного пучков соответственно для второй блоховской волны и наоборот – для первой волны.

Легко также вычислить амплитуды полей согласно (1). Наиболее простой вид они имеют для брэгговского положения кристалла  $y_c = 0$ , а именно:

$$E''_{0k} = \frac{1}{2} E''_{0i} (1 - a^2)^{1/2}, \quad E''_{hk} = \pm \frac{1}{2} E''_{0i} (1 \mp a), \quad (6)$$

где  $a = Dt/(1 + (Dt)^2)^{-1/2}$ . Из формулы следует, что в отсутствие деформации амплитуды обоих полей равны по модулю. Однако с ростом деформации это равенство нарушается. При этом амплитуда проходящей волны уменьшается для каждой из блоховских волн одинаковым образом, а модуль амплитуды отраженной волны для первой блоховской волны уменьшается еще быстрее, но для второй, т.е. слабопоглощаемой волны, наоборот, увеличивается. С ростом деформации, когда  $Dt > 1$  наступает насыщение, при котором интенсивность падающего пучка стремится к нулю на выходе из кристалла, а интенсивность отраженного пучка приближается к максимуму, определяемому с учетом потери на поглощение. Интересно, что для слабых деформаций эффект относительно слабо зависит от поглощения, так как отражается именно слабопоглощаемая блоховская волна. Такое же поведение имеют амплитуды и при угловом отклонении кристалла из брэгговского



**Рис. 1.** Схема дисперсионной поверхности с направлениями векторов потока энергии по нормали к ней в точке возбуждения.

положения, если только это отклонение удовлетворяет условию  $|y_c| < Dt$ . С ростом деформации угловой диапазон полного отражения увеличивается, а область в кристалле, где происходит поворот траекторий, уменьшается.

Таким образом, формула (6) описывает все наблюдаемые особенности эффекта переброски пучка в направление отражения: такие, как линейный рост интегральной интенсивности при малых деформациях и насыщение при больших деформациях. Последнее имеет место, если только в эксперименте ограничен угловой диапазон падающего излучения. Так как возбуждается только одна блоховская волна, то интерференционные осцилляции как на толщинной, так и на угловой зависимости отражения исчезают.

Полезно обсудить также качественное описание эффекта переброски с использованием понятия дисперсионной поверхности [4, 5] и вектора потока энергии в каждой блоховской волне  $S = s_0(E''_0)^2 + s_h(E''_h)^2$ , где  $s_0$  и  $s_h$  – единичные векторы вдоль направлений проходящего и дифрагированного пучков. Согласно теореме Като [6] поток энергии всегда направлен перпендикулярно к локальной дисперсионной поверхности в точке возбуждения. В свою очередь, точка возбуждения на входной поверхности определяется отклонением волнового вектора падающей волны от точного брэгговского положения для локальной области кристалла с учетом деформаций. Рассмотренный выше случай иллюстрируется на рис. 1.

Пусть сначала кристалл находится в точном брэгговском положении. Тогда из-за деформации на входной поверхности ( $z = 0$ ) точка возбуждения

находится справа. При этом направление потока энергии (нормали к дисперсионной поверхности) для верхней зоны, соответствующей второй (слабопоглощаемой) волне, почти совпадает с падающей волной. Естественно, что именно эта зона возбуждается наиболее сильно, в то время как нижняя зона почти не возбуждается. В условиях медленно меняющейся с ростом  $z$  деформации, как было отмечено выше, волны, соответствующие разным зонам, почти независимы, поэтому достаточно рассматривать каждую из них в отдельности. Если нижняя зона не возбуждается, то не имеет смысла анализировать ее поведение. Что касается верхней зоны, то по мере прохождения излучения в глубь кристалла локальное условие Брэгга медленно меняется, что приводит к движению точки возбуждения вдоль дисперсионной поверхности справа налево. Наконец, на выходной поверхности ( $z = t$ ) точка возбуждения перемещается в левую область, где направление потока энергии уже совпадает с направлением отраженной волны. На выходе из кристалла поток энергии надо разложить на проекции по направлениям падающей и отраженной волн. Очевидно, что коэффициент разложения для отраженной волны будет намного превышать таковой для падающей волны. Если же кристалл повернут на определенный угол, то точки возбуждения на входе и выходе сместятся, но общую картину это не изменит, пока поворот кристалла не выводит начальную и конечную точки возбуждения из своих сторон.

Еще более простая интерпретация эффекта переброски следует из рассмотрения траекторий лучей в кристалле, как уже обсуждалось выше. В [1] было показано, что направление потока энергии совпадает с касательной к траектории. Для слабопоглощаемой волны траектории сначала почти параллельны падающему пучку. Затем они изгибаются в сторону отраженного пучка на такой глубине, где выполняется условие динамической дифракции. На выходе из кристалла они почти параллельны отраженному пучку. Для сильнопоглощаемой волны все наоборот, но ее амплитуда мала.

Очевидно, если нагревать кристалл с противоположной стороны, то весь анализ остается в силе. Только отражение пучка будет происходить через сильнопоглощаемую волну и, следовательно, будет больше поглощаться при слабой деформации. Аналогичный эффект будет возникать и при деформировании кристалла ультразвуком, создающим подходящую деформацию, например при использовании пьезоэлектрического кристалла кварца.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Метод траекторий не только позволяет описать картину эффекта полного отражения на качественном уровне, но и дает сравнительно простой способ численного моделирования наиболее сложного случая дифракции сферической волны в деформированном кристалле при любых расстояниях от источника до кристалла. При этом значительный выигрыш во времени достигается не только по сравнению с прямым решением уравнений Такаги [7], но и по сравнению с использованием ВКБ приближения [8, 9]. Для численных расчетов использовалась программа, описание которой дано в [1].

Расчеты выполнены для кристалла Si толщиной  $t = 500$  мкм в условиях 220 дифракции  $\text{Mo}K_{\alpha}$ -излучения ( $E = 17.48$  кэВ). Рассмотрены два случая: большого (40 м) и малого (50 см) расстояний от точечного источника до кристалла. Параметры дифракции были вычислены по программе [10] и равны  $\mu_0 = K\chi_{i0} = 1.435 \text{ см}^{-1}$ ,  $K\chi_h = (-169.9 + 1.39i) \text{ см}^{-1}$ . Угол Брэгга  $\theta_B = 10.64^\circ$ .

Результаты расчета для первого случая представлены на рис. 2. Интенсивность отраженной волны показана относительно интенсивности падающей волны перед кристаллом. Траектории рассмотрены в конечной области фронта волны с шириной 1.6384 мм, что эквивалентно ситуации, в которой на пути пучка перед кристаллом установлена щель с такой шириной. На рис. 2а показана пространственная структура отраженного пучка сразу за кристаллом в случае отсутствия деформации. Толщина фокусировки сферической волны [1] для расстояния 40 м от источника равна 1.144 мм, что вдвое превышает толщину кристалла. Поэтому траектории не пересекаются, но все же слегка и неоднородно меняют свое направление. Соответственно пространственная структура отраженного пучка показывает экстинкционные биения, как и на кривой угловой зависимости отражения плоской волны, т.е. осцилляции обусловлены интерференцией двух блоховских волн с изменяющейся разностью фаз между ними. Тем не менее для первой волны ширина отраженного пучка слегка больше ширины щели (траектории расходятся), а для второй, наоборот, слегка меньше (траектории сходятся). Соответственно осцилляции видны в более узкой области, где существуют обе волны.

При радиусе кривизны деформации  $R = 36$  м в центральной части фронта волны отражение растет, в то время как амплитуда осцилляций уменьшается (рис. 2б). Так как отражает слабопоглощаемая блоховская волна, то коэффициент отражения больше, чем при нормальном поглощении с фактором  $\exp(-\mu_0 t / \cos \theta_B) = 0.482$  из-за эффекта Бормана. Асимметрия осцилляций связана с конечным расстоянием до источника сферической

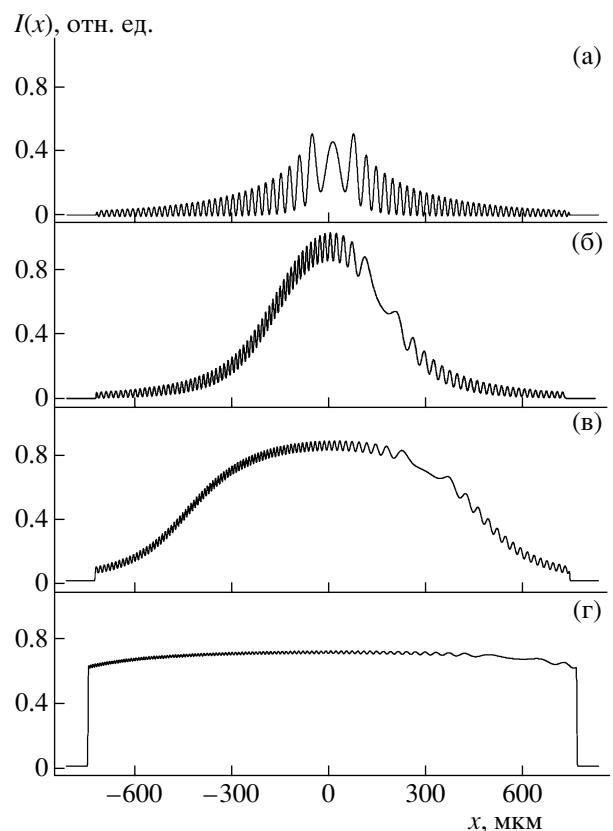
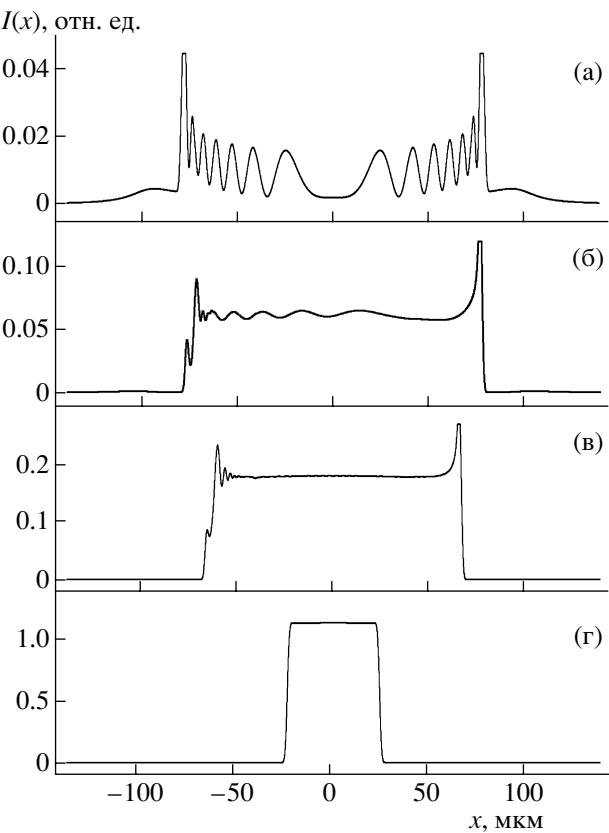


Рис. 2. Пространственная структура отраженного пучка при дифракции сферической волны от точечного источника, расположенного на расстоянии 40 м от кристалла с изгибной деформацией: а – нет изгиба, б – радиус изгиба атомных плоскостей  $R = 36$  м, в –  $R = 18$  м, г –  $R = 9$  м.

волны. Для чисто угловой зависимости картина аналогичная, но симметричная [11]. Хорошо видно, что интенсивность первой блоховской волны (на краях) почти равна нулю, в то время как амплитуда осцилляций еще имеет заметную величину. Это общее свойство интерференционных эффектов.

На рис. 2в радиус кривизны  $R = 18$  м. Теперь более широкая часть фронта отражает максимально, хотя само максимальное значение меньше. Это связано с тем, что динамическая область отражения в кристалле сокращается и потеря на поглощение увеличиваются за счет тех частей, где никакого отражения нет. На рис. 2г радиус  $R = 9$  м. Практически весь пучок отражает максимально, но максимальное значение стало еще меньше. Кроме того, из-за отражения только второй блоховской волны, отраженный пучок несколько меньше по ширине, чем падающий. При дальнейшем уменьшении радиуса кривизны деформации почти ничего не происходит, за исключением того, что амплитуда осцилляций стремится к нулю, а максимальное значение – к величине



**Рис. 3.** Пространственная структура отраженного пучка при дифракции сферической волны от точечного источника, расположенного на расстоянии 50 см от кристалла с изгибной деформацией: а – нет изгиба, б – радиус изгиба атомных плоскостей  $R = 18$  м, в –  $R = 6$  м, г –  $R = 2$  м.

0.482. С другой стороны, если бы щель отсутствовала, то ширина фронта максимального отражения продолжала бы расти. Таким образом, деформированный при изгибе кристалл является исключительно хорошим отражателем в случае Лауз дифракции.

На рис. 3 представлены результаты расчетов для случая, когда источник сферической волны находится на малом расстоянии (50 см) от кристалла. В этом случае толщина фокусировки равна 14.3 мкм, что намного меньше, чем толщина кристалла. Этот случай более близок к известному случаю дифракции сферической волны по Като [4, 5], когда источник считается помещенным на входную поверхность кристалла. В данном случае все же источник формально засвечивает всю входную поверхность, хотя область поверхности, в которой лучи попадают в условия динамической дифракции, невелика. Ее размер легко оценить как размер области рис. 2, уменьшенный в 80 раз, т.е. 15 мкм.

В расчете рассматривались траектории в области размером 104.8 мкм, то есть можно считать, что перед кристаллом была поставлена щель та-

кой ширины. В большинстве случаев это совершенно не влияет на результаты. На рис. 3 показано хорошо известное распределение интенсивности для кристалла без деформации. Заметное отражение происходит в кристалле внутри области, называемой палаткой Бормана [4], ограниченной пиками, возникающими при повороте траекторий и их сгущении (каустик). Как было показано в [1], метод траекторий слегка завышает высоту этих пиков, поэтому на рисунке высота пиков была скорректирована в сторону уменьшения. В середине пучка средняя интенсивность в 100 раз меньше падающей. Одной из причин такого уменьшения является то, что область размером 15 мкм растягивается в область с размером 160 мкм, причем неравномерно.

При радиусе кривизны  $R = 18$  м, как и в случае с большим расстоянием, деформация приводит к увеличению отражения и уменьшению осцилляций, т.е. отражение все более проходит только через вторую (слабопоглощаемую) блоховскую волну (рис. 3б). Ширина пучка уменьшается. Это связано с тем, что для данной волны в кристалле без деформации траектории пересекаются (фокусируются) и потом снова расходятся. Деформация как бы выправляет нормальный ход траекторий, что приводит к увеличению глубины фокусировки и становится менее резкой. Соответственно траектории не успевают разбежаться так сильно, как в отсутствие деформации.

На рис. 3в радиус кривизны деформации  $R = 6$  м. Как следует из расчета, описанные выше тенденции усиливаются, то есть отражение увеличивается, осцилляции пропадают, а пучок сужается. Наличие каустик означает, что щель не влияет на размер пучка. На рис. 3г радиус кривизны  $R = 2$  м. Только в этом случае очень сильной деформации отражение однородно на ширине пучка, а сам размер пучка пропорционален ширине входной щели. Это означает, что деформация на начальном этапе “выпрямляет” все рассматриваемые траектории во второй волне по направлению падающего пучка, а затем загибает их в сторону отражения. Однако разные лучи попадают в область динамического отражения на разных глубинах в кристалле. Поэтому отраженный пучок эффективно сужается. При более сильной деформации он снова слегка увеличивается в размерах, а затем наступает насыщение. Однако столь сильные деформации практически трудно достижимы.

Таким образом, метод траекторий оказывается весьма эффективным при описании эффекта полного отражения в случае Лауз дифракции в кристалле с изгибной деформацией. Он позволяет не только качественно, но и количественно описать все тонкие особенности эффекта и, в то же время резко сокращает время расчетов на компьютере. Хотя все расчеты были проведены

только для случая изгиба плоскостей по параболе, аналогичные результаты можно получить и в случае ультразвукового возбуждения кристалла, когда на толщине кристалла укладывается половина длины волны ультразвука.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 05-02-16702, 06-02-08117-офи, 07-02-00067а, НШ-6869.2006.2).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кон В.Г. // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 4. С. 625.
2. Мкртчан А.Р., Навасардян М.А., Мирзоян В.К. // Письма в ЖТФ. 1982. Т. 8. С. 677.
3. Navasardyan M.A. // J. Appl. Cryst. 2001. V. 34. P. 763.
4. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука. 1982. 390 с.
5. Autier A. Dynamical Theory of x-ray Diffraction. New York: Oxford University Press, 2001. 661 р.
6. Kato N. // Acta. Cryst. 1958. V. 11. P. 885.
7. Габриелян Р.Г., Асланян А.А. // Изв. АН. Арм. ССР. Физика. 1986. Т. 21. С. 337.
8. Мкртчан А.Р., Габриелян Р.Г., Унанян А.Г., Бегларян Ф.Г. // Изв. АН. Арм. ССР. Физика. 1986. Т. 21. С. 313.
9. Тихонова Е.А. // Металлофизика. 1981. Т. 3. С. 18.
10. Кон В.Г. // Кристаллография. 2006. Т. 51. № 6. С. 1001.
11. Kohn V.G. // Phys. Status Solidi B. 2002. V. 231. P. 132.