

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КРИСТАЛООПТИЧНИХ ЕФЕКТІВ ПРИ ШЕСТИХВИЛЬОВІЙ ДИФРАКЦІЇ СФЕРИЧНОЇ Х-ХВИЛІ

На базі динамічної теорії шестихвильової $(220, 242, 044, \bar{2}24, \bar{2}02)$ дифракції сферичної Х-хвилі проаналізовані одержані раніше експериментальні дані з підсилення аномального проходження та поширення блохівської хвилі в кристалі вздовж напрямку падаючого пучка (ефект Умено). Використаний метод чисельного моделювання топограм пучка. Показано, що для повної відповідності теоретичних топограм експериментальним у схемі з великою відстанню джерело-плівка необхідно враховувати немонохроматичність випромінювання в межах природної ширини спектральної лінії. Отримано повну відповідність між теорією та експериментом. Спостерігати ефект підсилення аномального проходження у шестихвильовому випадку можна у дуже товстих кристалах ($\mu_0 t > 100$).

Previous experimental results on anomalous transmission enhancement and Bloch-wave propagation along the direction of beam incidence (Umeno effect) are analyzed using the dynamical theory of six-beam $(220, 242, 044, \bar{2}24, \bar{2}02)$ diffraction of a spherical-wave. Computer simulation of beam topographs shows that to obtain good fit between the simulated and the experimental topographs for large source-to-film distances, nonmonochromaticity of the X-ray radiation within the natural line width must be taken into account. The enhancement of anomalous transmission in the six-beam case can only be observed in very thick ($\mu_0 t > 100$) crystals.

Вступ

Хоч перші дослідження багатихвильової дифракції Х-променів у досконалих кристалах були виконані ще в 30-х роках минулого століття, до цих пір це явище відноситься до недостатньо вивчених. При цьому найцікавішим виявився випадок шестихвильової $(220, 242, 044, \bar{2}24, \bar{2}02)$ дифракції у кристалах структури алмазу (германій, кремній). У працях [1,2] показано, що при названій шестихвильовій дифракції плоских хвиль у кристалах германія дуже зменшується їх коефіцієнт поглинання, коли точно виконані всі умови Брега. Розрахунок показав, що мінімальний коефіцієнт поглинання у шестихвильовому випадку $\mu_{\min}^{(6)} \leq 0,001 \mu_0$, де μ_0 – нормальний (однотичинний) лінійний коефіцієнт поглинання. Та на топограмах аномального проходження жодного збільшення інтенсивності у шестихвильовій області порівняно з двохвильовими областями не спостерігалось [3-5]. В той же час на топограмах трихвильового випадку $(111, \bar{1}11)$ ефект підсилення аномального проходження спостерігається доволі чітко [6].

Експерименти проводилися в однокристалній схемі з використанням розбіжного випромінювання від мікрофокусної Х-променевої трубки. Дифракційні пучки реєструвалися на фотоплівку (рис. 1).

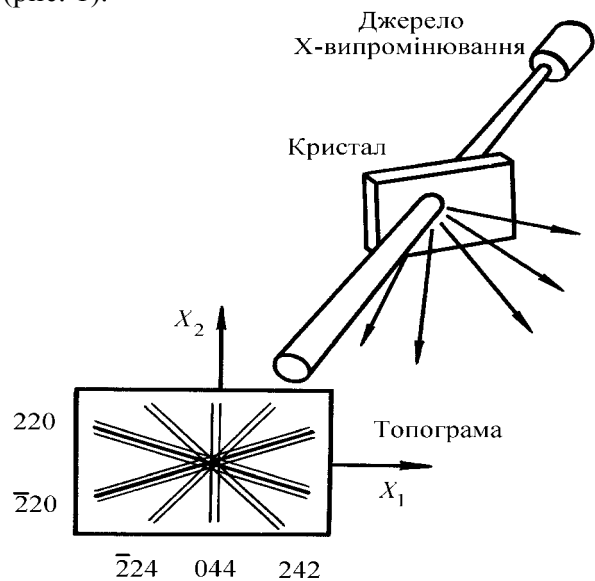


Рис. 1. Схема експерименту для дослідження багатихвильової дифракції Х-променів. На топограмі прямого пучка показані осі координат і структура двохвильових смуг аномального проходження.

У більшості робіт відстань джерело–плівка L була досить велика (2 м і більше). Експериментальні топограми прямого пучка детально порівнювалися з картою кутової залежності коефіцієнта проходження плоскої хвилі, одержаної при малих відхилення пучка від точного напрямку багатохвильової дифракції. Збіг теорії з експериментом у трихвильовому випадку був достатньо добрим. У шестихвильовому випадку [7,8] експериментальні топограми якісно відрізнялися від теоретично розрахованих (рис. 2). Більше того, експериментально встановлено [8], що розподіл інтенсивності на шестихвильовій топограмі прямого пучка нетривіально залежить від товщини кристала t при $L=2$ м. В інтервалі $0,2 < t < 0,4$ мм шестихвильова область яскравіша від двохвильових смуг аномального проходження (рис. 2а). Однак, чим більша товщина кристала, тим цей ефект менш помітний. При $t > 0,6$ мм він не спостерігається зовсім, тобто шестихвильова інтенсивність менша від подвоєної двохвильової (рис. 2б). Це суперечить теорії дифракції плоских хвиль, згідно якої, чим більша товщина кристала, тим більша відносна яскравість шестихвильової області.

Принципово іншу форму шестихвильової області на топограмі спостерігав Умено [3,4]. Він використав таку ж схему експерименту при $L=1-10$ см. Ефект підсилення аномального проходження не спостерігався, та Умено виявив цікаву деталь у вигляді дуги, з'єднуючої двохвильові смуги аномального проходження 220 і $\bar{2}02$ з одної

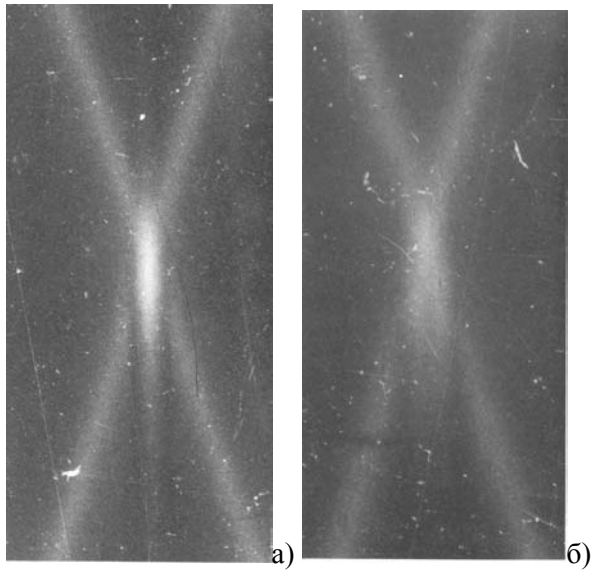


Рис. 2. Експериментальні топограми [8] прямого шестихвильового пучка для $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання, Ge, $L=2$ м. Розміри фокуса X-трубки 40 ± 20 мкм. $t=300$ мкм (а) і 500 мкм (б). Збільшення $\times 7$.

сторони від їх перетину. Оптимальними для спостереження ефекту Умено в наших експериментах методом Косселя на проходження є значення $t \sim 0,5-0,6$ мм (Ge, $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $L=1-3$ мм, експозиція 7 год на "Мир-3" з діаметром фокусної плями $\sim 1-3$ мкм). При цих товщинах дуга вже відділена від трихвильової плями і не зруйнована дефектами, вплив яких збільшується при зростанні t . Праворуч від перетину двохвильових смуг ми спостерігали слабкі дуги, розмиті вздовж осі симетрії топограм. Відстань від них до перетину ліній (220) і $(\bar{2}02)$ становила $\sim 0,5-0,6$ мм, що узгоджується з розрахунковим значенням 0,6 мм.

При збільшенні експозиції до 20 год. стає виразною ще одна характерна особливість розрахункових топограм – неспівпадання перетину смуг (220) і $(\bar{2}02)$ з перетином смуг (242) і $(\bar{2}24)$. На карті кутової залежності коефіцієнта проходження такої дуги нема [9]. Якісне пояснення одержаних Умено результатів запропоноване ним [10] на основі теореми Като [11]. Та для детальнішого опису експерименту, як зазначено Умено [10], необхідно було розвинути багатохвильову теорію дифракції сферичної X-хвилі, аналогічну теорії Като [12,13] для двохвильової дифракції.

Така теорія у загальному вигляді, тобто з урахуванням відстані джерело–плівка L , була розвинута Коном [14]. Розподіл інтенсивності на топограмі, згідно цієї теорії, описується двовимірним інтегралом від швидкоосцилюючої не аналітичної функції, тому чисельні розрахунки є самостійною складною задачею. Для чисельного моделювання топограм у [9] розроблений зручний алгоритм на основі методу стаціонарної фази. При цьому розрахунковий час на ЕОМ лиш незначно перевищує час розрахунку карти кутової залежності коефіцієнта проходження, але результат суттєво залежить від L і від кривизни дисперсійної поверхні.

Представлена робота є продовженням роботи [9]. У ній результати чисельного моделювання зазначених кристалооптичних ефектів, як ефект підсилення аномального проходження та ефект Умено, одержані за допомогою раніше розробленої ЕОМ-програми. Показано також, що для збігу результатів розрахунку топограм прямого пучка при великих значеннях L з експериментом необхідно врахувати немонохроматичність характеристичного X-випромінювання. Метод чисельного моделювання топограм виявився зручним не тільки для пояснення вже отриманих експериментальних результатів, але й для прогнозу-

вання параметрів експерименту, необхідних для спостереження шуканих ефектів. Зокрема, виявилось, що ефект Умено і ефект аномального проходження тісно пов'язані між собою, а спостерігати підсилення аномального проходження можна лише за умови $\mu_0 t > 100$.

Теорія

Зручно представити падаючу на кристал сферичну хвилю у вигляді суперпозиції плоских хвиль, використовуючи таку інтегральну форму [12]

$$\frac{\exp(iKr)}{ir} = \int \frac{d\vec{q}}{2\pi} \frac{\exp\left(i\vec{q}\vec{r} + i\vec{k}_0\vec{r}\left(1 - q^2/K^2\right)^{1/2}\right)}{\left(K^2 - q^2\right)^{1/2}}, \quad (1)$$

де \vec{k}_0 - хвильовий вектор, величина якого $K = \omega/c = 2\pi/\lambda$. Напрямок \vec{k}_0 задовольняє всім умовам Брега шестихвильової дифракції. Лінійне відхилення від цих умов в оберненому просторі задається вектором $\vec{q} = Kg\vec{\theta}$, де $g = 0,4848 \cdot 10^{-5}$ рад/с – розмірний множник, $\vec{\theta} = \theta_1\vec{e}_1 + \theta_2\vec{e}_2$ – вектор відповідного кутового відхилення, \vec{e}_1 і \vec{e}_2 – одиничні вектори осей x_1 і x_2 на площині, перпендикулярній \vec{k}_0 (рис. 1). Ми цікавимося тільки значеннями \vec{q} , для яких $q \ll K$, тому (1) – це фактично сума плоских хвиль з хвильовим вектором $\vec{K}_0(\vec{q}) \approx \vec{k}_0 \left(\frac{1 - q^2}{2K^2} \right) + \vec{q}$.

Провівши розрахунок шестихвильової дифракції плоскої хвилі у досконалому кристалі за відомою процедурою [15] та враховуючи набігання фази на шляху від джерела до кристала і від кристала до плівки, замість (1) одержуємо для амплітуди прямої хвилі

$$D_0^{ss'} \approx \int \left(\frac{d\vec{q}}{2\pi K} \right) \sum_j f_j^{ss'}(\vec{q}, t) \exp(i\phi_j(\vec{q}, \vec{x}, t, L)), \quad (2)$$

де $\vec{x} = x_1\vec{e}_1 + x_2\vec{e}_2$ – радіус-вектор точки на площині плівки, розміщеної перпендикулярно до \vec{k}_0 , j – номер вітки дисперсійної поверхні, s, s' – індекси π -, σ -поляризації падаючої і розсіяних плоских хвиль. Формули для амплітуди $f_j^{ss'}(\vec{q}, t)$ й фази $\phi_j(\vec{q}, \vec{x}, t, L)$ наведені у [9, 14]. Фаза ϕ_j у звичайних умовах ($L \sim 1$ м, $t \sim 100$ мкм) змінюється

у широких межах, тому експоненційна функція у (2) швидко осцилює.

Для розрахунку інтеграла (2) Кон і Тонейн [9] використали метод стаціонарної фази. За цим методом остаточні вирази для інтенсивності на топограмі прямого пучка в умовах шестихвильової дифракції можна записати у вигляді

$$I_0(\vec{x}, t, L) = \sum_{j=1}^{12} \sum_{i=1}^{i_m} I_{0j}^{PW}(\vec{q}_{ij}, t) D_{1j}^{-2}(\vec{q}_{ij}) D_{2j}^{-2}(\vec{q}_{ij}). \quad (3)$$

Тут $I_{0j}^{PW} = R_{0j} \exp(-\mu_j t)$ – залежний від t і вектора \vec{q} вклад в інтенсивність прямого пучка від j -ї вітки дисперсійної поверхні, який описує кутову залежність у теорії дифракції плоских хвиль, R_{0j} – ступінь збудження, μ_j – коефіцієнт поглинання для j -ї вітки дисперсійної поверхні. Множники $D_{mj}^{-2} \approx \left| L - C_m^{(j)}(\vec{q}) \right|^{-1}$, причому параметри $C_m^{(j)}(\vec{q})$ залежать від кривизни листів дисперсійної поверхні в точці \vec{q} .

Замість інтегрування по \vec{q} у (3) стоїть підсумовування по окремих векторах \vec{q}_{ij} . Останні залежать від \vec{x} , t , L і форми листів дисперсійної поверхні. Компоненти q_{kij} вектора \vec{q}_{ij} знаходяться з рівняння

$$x_k = q_k \frac{L}{K} + K \left(\frac{\partial \delta^{(j)}(\vec{q})}{\partial q_k} \right) t, \quad (4)$$

де $\delta^{(j)}(\vec{q})$ – дисперсійна поправка. Хвильовий вектор падаючої хвилі у кристалі

$$\vec{K}_0^{cr}(\vec{q}) = \vec{k}_0 + \vec{q} - K\delta^{(j)}(\vec{q})\vec{n}_0, \quad (5)$$

де \vec{n}_0 – одиничний вектор нормалі до вхідної поверхні, $\vec{k}_0\vec{n}_0 > 0$. Індекс i в (3) нумерує розв'язки рівняння (4) для кожного значення j ; i_m – кількість таких розв'язків. Залежність $\delta^{(j)}$ від \vec{q} задає форму листів дисперсійної поверхні.

Перший доданок у (4) описує систему променів, вздовж яких рухається потік енергії сферичної хвилі у вакуумі. Другий доданок описує розсіяння променів, тобто зміну напрямку потоку енергії в кристалі. Як уперше відзначено Афанасьєвим і Коном [16], обидва доданки в (4) зрівнянні за величиною, коли $t/L \sim |\chi_0|$, де $|\chi_0|$ – нульова Фур'є-компонента поляризації кристала. При $t/L \ll |\chi_0|$ на топограмі реалізується карта кутової залежності

дифракції плоских хвиль. У протилежному випадку $t/L \gg |\chi_0|$ набігання фази у вакуумі не істотне, і теорія у двохвильовому випадку переходить у теорію Като [12, 13]. Повністю метод розрахунку описаний у [9].

Ефект Умено

Чисельне моделювання ефекту Умено проводилось в умовах $t/L \gg |\chi_0|$. При цьому відстань джерело–плівка L і товщина кристала t змінювалися у широких межах. Були розглянуті як випадок відносно сильного поглинання X -променів у кристалі ($\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання, Ge), так і випадок слабого поглинання ($\text{MoK}_{\alpha 1}$, Si). Поверхня кристала орієнтована паралельно площині векторів оберненої ґратки (симетрична дифракції Лауе).

На всіх розрахункових топограмах цієї серії поблизу перетину двохвильових смуг аномального проходження 220 і $\bar{2}02$ проявилася дуга, що сполучає ці смуги з тієї сторони, куди переміщується зображення при зростанні довжини хвилі випромінювання. Отже, ефект, виявлений Умено експериментально, повністю відповідає динамічній теорії шестихвильової дифракції сферичної хвилі. Як і очікувалось, відстань між дугою і точкою перетину двохвильових смуг зростає прямо пропорційно t і не залежить від L при $t/L \gg |\chi_0|$. Дві з одержаних топограм наведені на рис. 3. Геометричні умови рис. 3а близькі до реалізованих в експерименті Умено. Теоретичні топограми багатші деталями контрасту, ніж експериментальні. Вони мають тонку структуру в місцях перетину дуги з двохвильовими лініями.

Аналіз показав, що фізична природа ефекту Умено полягає в особливій структурі верхніх листів дисперсійної поверхні. Ці листи ближче за інших до точки Лауе [15] і відповідають мінімальним коефіцієнтам поглинання. На рис. 4 (внизу) показано переріз дисперсійної поверхні площиною розсіяння рефлексу (044), в якій $x_2=0$ (рис. 3). Зображені лиш останні 6 віток дисперсійної поверхні, оскільки решта не істотні. На цьому ж рисунку (вгорі) показана кутова залежність коефіцієнтів поглинання μ_j і ступенів збудження R_{0j} для цих же віток. Останні визначаються з граничних умов і є коефіцієнтами розкладу падаючої плоскої хвилі по системі шестихвильових блохівських хвиль кристала.

На рис. 4 очевидно, що в інтервалі значень кутового відхилення $\theta_1=q_1/K$ від -5° до -2° для 11 та 12-ї віток дисперсійної поверхні коефіцієнти

поглинання μ_j ще мають малі значення, ступені збудження R_{0j} вже великі, а вітки дисперсійної поверхні майже перпендикулярні \vec{k}_0 . Отже, випромінювання у цьому кутовому інтервалі практично все переноситься 11 та 12 вітками дисперсійної поверхні з дуже слабким поглинання. При цьому напрямок потоку енергії (променя) майже паралельний напрямкові падаючої хвилі \vec{k}_0 , як впливає з теореми Като [11]. Тобто багатохвильова дифракція сильно проявляє себе у поглинанні, але майже не змінює траєкторії променів. Зауважимо, що до такого ж висновку прийшов Умено [10], який у явному вигляді використав теорему Като. Та він не міг врахувати вплив кривизни листів дисперсійної поверхні на інтенсивність, описаний у формулі (3) множниками D_{mj}^{-2} .

У даній праці теорема Като явно не використовується. Замість неї для знаходження траєкторії променів використовується формула (4). Покажемо, що ця формула у кристалі ($L=0$) еквівалентна теоремі Като. Для цього використаємо тривимірний ортонормований базис

$$B = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{s}_0 = \vec{k}_0 / K\}$$

як у прямому, так і в оберненому просторах, і запишемо $\vec{K}_0^{cr} = \vec{k}_0 - \vec{r}_{DS}$. Вектор \vec{r}_{DS} описує форму дисперсійної поверхні. Згідно (5) $\vec{r}_{DS} = K\delta^{(j)}\vec{n}_0 - \vec{q}$. У базисі B він має вигляд $\vec{r}_{DS} = x\vec{e}_1 + y\vec{e}_2 + z\vec{s}_0$. Зв'язок нових і старих координат задається такими виразами:

$$\begin{aligned} x &= Kn_{01}\delta^{(j)} - q_1, & y &= Kn_{02}\delta^{(j)} - q_2, \\ z &= Kn_{03}\delta^{(j)}, \end{aligned} \tag{6}$$

$$q_1 = -x + \frac{zn_{01}}{n_{03}}, \quad q_2 = -y + \frac{zn_{02}}{n_{03}}, \quad K\delta^{(j)} = \frac{z}{n_{03}},$$

де n_{0i} – компоненти вектора \vec{n}_0 у базисі B . Будемо описувати дисперсійну поверхню функцією $z(x,y)$. Тоді вектор нормалі до дисперсійної поверхні у базисі B , нормований на z -компоненту, має вигляд

$$\vec{N}_{DS} = \left(\frac{-dz}{dx}, \frac{-dz}{dy}, 1 \right). \text{ З іншого боку, згідно (6)}$$

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dx} &= \frac{n_{03}d_1}{1 + n_{01}d_1 + n_{02}d_2}, \\ \frac{dz}{dy} &= \frac{n_{03}d_2}{1 + n_{01}d_1 + n_{02}d_2}, \end{aligned} \tag{7}$$

де $d_i = -K(d\delta/dq_i)$, $i=1,2$.

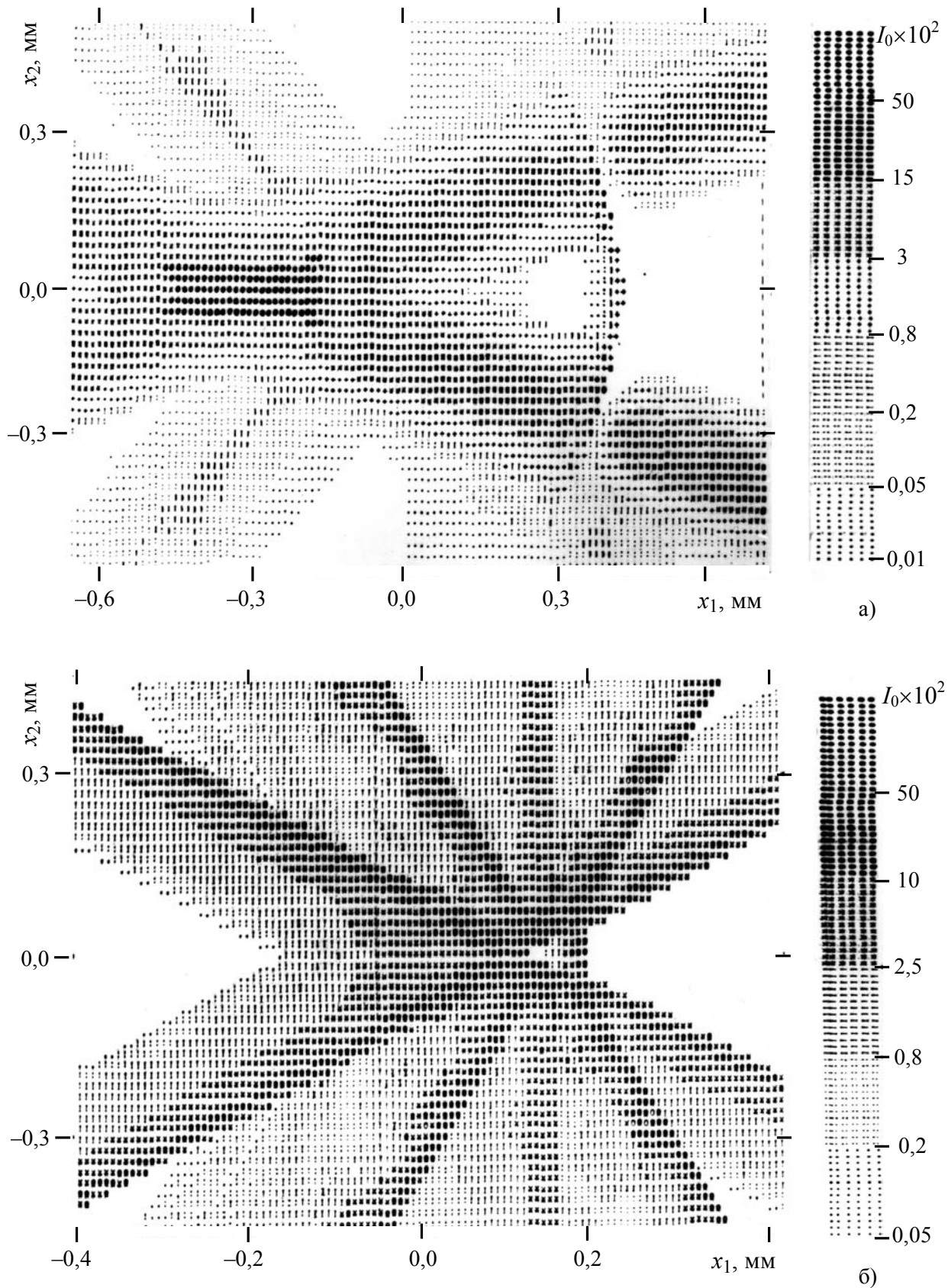


Рис. 3. Топограми прямого шестихвильового пучка, одержані чисельним моделюванням для випадків: Ge, $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $L=6$ см, $t=470$ мкм (а) та Si, $\text{MoK}_{\alpha 1}$, $L=50$ см, $t=400$ мкм (б).

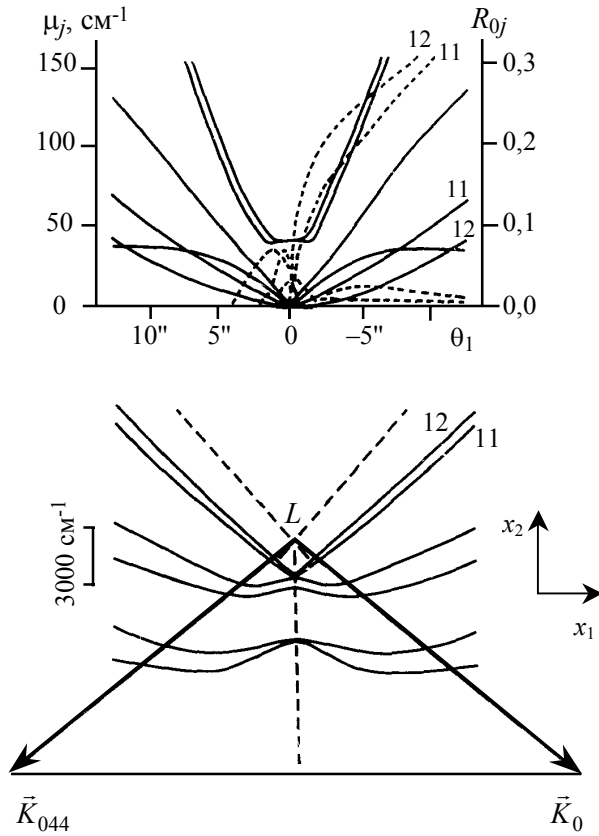


Рис. 4. Перетин дисперсійної поверхні площиною розсіяння рефлексу 044 (\vec{e}_1, \vec{s}_0) (внизу), коефіцієнти поглинання μ_j і ступені збудження блохівських хвиль R_{0j} для останніх шести віток дисперсійної поверхні.

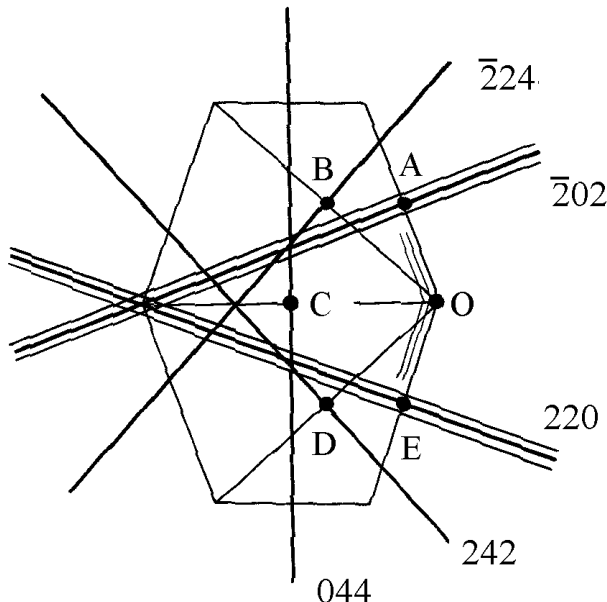


Рис. 5. Схема, що пояснює розміщення дуги Умено і двохвильових смуг аномального проходження на топограмі. Правильний шестикутник стиснутий по горизонталі у $\cos\theta_0$ раз. Куту $\theta_0=50,34^\circ$ відповідає рис. 3а.

Помістимо джерело і початок координат на вхідну поверхню кристала, далі знайдемо координати точки \vec{r}_p на вихідній поверхні. Дві координати визначаються з (4), а третя – з умови $(\vec{r}_p, \vec{n}_0) = t$. Легко безпосередньо перевірити, після підстановки (4) $L=0$, що

$$\vec{r}_p = \vec{N}_{DS}t(1 + n_{01}d_1 + n_{02}d_2)/n_{03}. \quad (8)$$

Отже, формула (4) доводить розповсюдження променів у кристалі по нормалі до дисперсійної поверхні. Аналогічним чином, використовуючи формулу (29) з праці [9], легко довести й саму теорему Като про те, що вектор Пойнтинга для випромінювання, відповідного окремій вітці дисперсійної поверхні, паралельний \vec{N}_{DS} .

Розглянемо одержані топограми детальніше. На картах кутової залежності коефіцієнта проходження, що відповідають топограмам при $L=\infty$ (див. рис. 4 з [9]), всі двохвильові смуги розташовані по-різному відносно початку координат. Така особливість пов'язана з різною природою формування двохвильових смуг і шестихвильової області. Справді, шестихвильова область утворюється у результаті розсіяння плоских хвиль із (1), для яких $q \leq 3|\chi_0|$. Цій області значень q при малих значеннях L відповідають промені, що приходять практично в одну точку на вхідній поверхні. Перетворюючись у кристалі в блохівські хвилі, вони вже мають довільні напрямки всередині піраміди, утвореної напрямками падаючого і дифрагованих пучків (див. рис. 2 в [9]). У результаті на топограмі прямого пучка виникає зображення, вміщене всередині стиснутого по вісі x_1 правильного шестикутника. Розміри шестикутника зменшуються при його проектуванні з вихідної поверхні кристала на площину топограми, тобто при множенні на $\cos\theta_0$, де $\theta_0=50,34^\circ$ – кут Брега для відбивання (044). На рис. 5 показана ця область для тих же умов, що й на рис. 3. Дузі Умено відповідає межа цієї області поблизу точки O .

Двохвильові смуги перпендикулярні відповідним векторам оберненої ґратки, що з'єднують точку O з вершинами шестикутника і ділять їх навпіл у точках A, B, C, D, E . Ці смуги утворюються за рахунок доданка у (4), в якому малі значення L компенсуються великими, але задовольняючими умову двохвильової дифракції, значеннями q . Нахил смуг, природно, не залежить від L . При довільному значенні t вони повинні пройти через точки A, B, C, D, E . Врахувавши ці міркування, легко оцінити відстань від точки

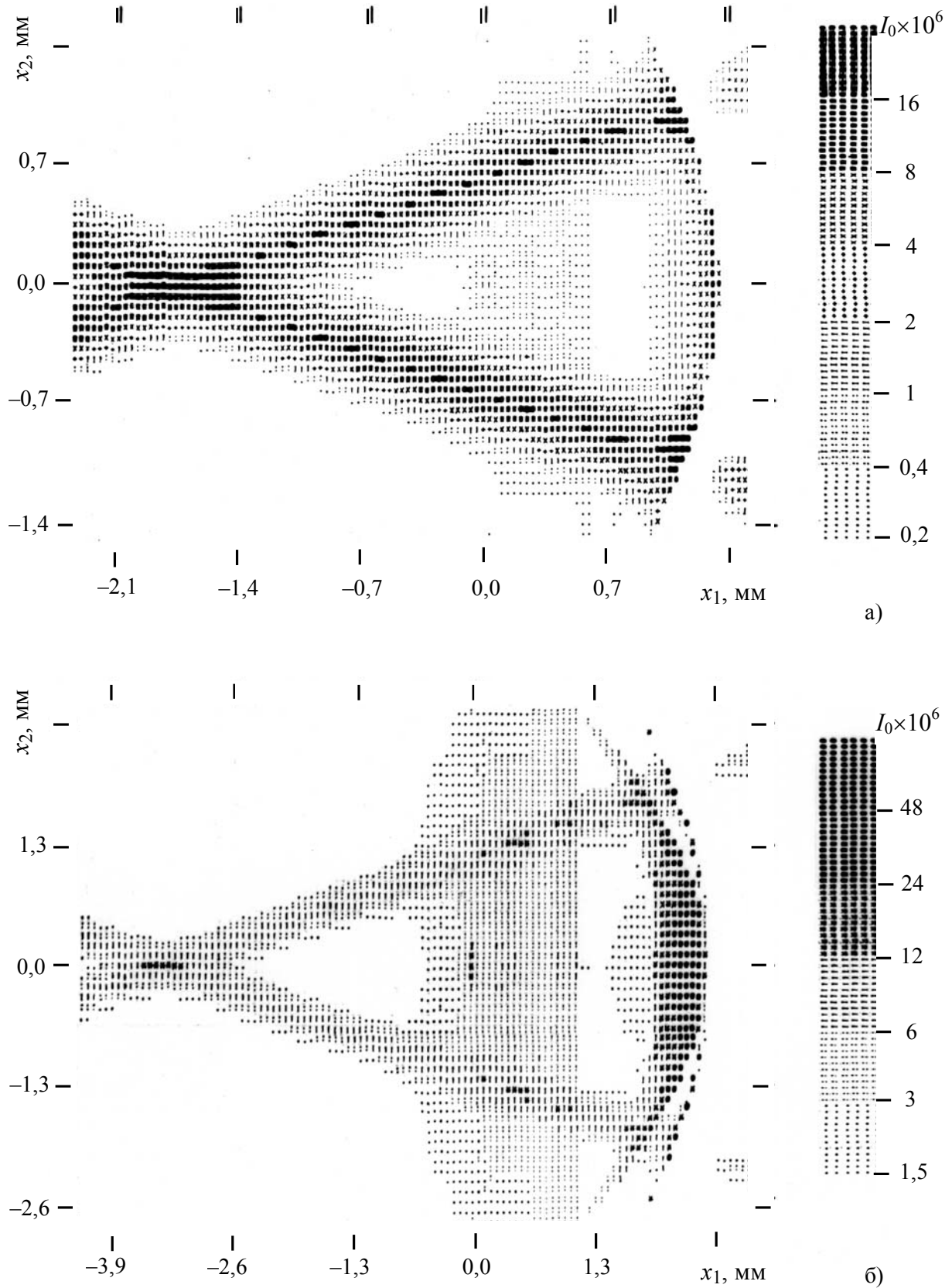


Рис. 6. Топограми прямого шестихвильового пучка, одержані чисельним моделюванням у випадку Ge, $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $L=2$ м, $t=2$ мм (а) і 4 мм (б).

перетину найсильніших двохвильових смуг 220 і $\bar{2}02$ до дуги $D = 0,25t \sin \theta_0 \left(1 + \frac{3}{\cos^2 \theta_0} \right)$. За-

уважимо, що зміщення двохвильових смуг від початку координат помітне тільки при малих значеннях L . Із збільшенням L товщина двохвильових смуг значно переважає товщину кристала t і викривлення траєкторії променів у кристалі стає несуттєвим.

За таких міркувань зрозуміло, що шестихвильовій області на двохвильових смугах відповідає не їх перетин між собою, як можна було б очікувати з геометричних міркувань, а область їх перетину з дугою. Саме на цих ділянках топограм відбувається найцікавіша зміна інтенсивності, що має дисперсійний характер. При русі вздовж смуги від початку координат у бік дуги інтенсивність спочатку дещо зростає, а потім різко зменшується ("*Aufhellung*"). Це пов'язано з характером зміни форми листів двохвильової дисперсійної поверхні при переході через шестихвильову область (див. рис. 98 в [15]). Річ у тім, що двохвильові вітки дисперсійної поверхні по різні сторони від шестихвильової області відповідають різним віткам шестихвильової дисперсійної поверхні. Що стосується перетину двохвильових смуг, то підсилення інтенсивності в ньому пов'язано з їх накладанням, а також додатковим внеском частини віток шестихвильової дисперсійної поверхні, особливо у випадку слабо поглинаючих кристалів.

Нам здається, що особливість на топограмах прямого пучка у вигляді дуги, виявлена Умено, є доволі цікавим кристалооптичним ефектом як з погляду фундаментальної фізики, так і для практичного застосування. Ймовірно, ця деталь на топограмі буде найчутливіша до досконалості кристала в усьому його об'ємі, зокрема, до його згину. Ефект має місце не лише у сильно поглинаючих, але й у слабо поглинаючих кристалах (при $\mu_0 t > 1$), що добре видно на рис. 3б. Відмітимо деяку стійкість ефекту, яка полягає в тому, що наявність на будь-якій вітці дисперсійної поверхні ділянок, майже перпендикулярних \bar{k}_0 , автоматично приводить до їх значного збудження, тобто відповідна блохівська хвиля переносить майже все випромінювання. Виникнення таких ділянок на верхніх листах дисперсійної поверхні властиве не тільки шестихвильовій дифракції.

На топограмі трихвильового випадку, одержаній нами методом чисельного моделювання, нехтуючи відбиванням 242, $\bar{2}24$ і 044, також

проявилася дуга. Очевидно, ефект має бути виражений яскравіше у восьмихвильовому та дванадцятихвильовому випадках. Ймовірно, головною причиною є великий кут у 120° між векторами оберненої ґратки 220 і $\bar{2}02$.

Підсилення ефекту аномального проходження X-променів

Як уже зазначалося, до цих пір ефект підсилення аномального проходження X-променів в умовах шестихвильової дифракції експериментально не виявлений. Що стосується роботи Чжана на цю тему [17], то її результати недостатньо переконливі. Теорія шестихвильової дифракції сферичної хвилі і аналіз форми листів шестихвильової дисперсійної поверхні дозволяють дати цьому факту розумне пояснення.

Дійсно, найбільший ступінь збудження у поєднанні з малими коефіцієнтами поглинання мають 11 і 12 листи дисперсійної поверхні у кутовій області $-0,5^\circ \leq \theta_1 \leq 0, |\theta_2| \leq 0,3^\circ$, де ці листи майже плоскі. Тому у випадку товстих поглинаючих кристалів замість (3) маємо:

$$I_0(\bar{x}, t, L) \sim \sum_{j=1}^{12} \sum_{i=1}^{i_m} I_{0j}^{PW}(\bar{q}_{ij}, t) \cdot [C(\bar{q}_{ij}) \cdot tL]^{-1}. \quad (9)$$

При цьому максимум інтенсивності відповідає центральній частині дуги Умено.

Двохвильові смуги на топограмі описуються, фактично, тим же виразом (9), оскільки двохвильові листи дисперсійної поверхні плоскі у перетині вздовж смуги. Обмежимося розглядом віток шестихвильової ($j=12$) і двохвильової ($j'=14$) дисперсійних поверхонь з мінімальними коефіцієнтами поглинання $\mu_m^{(6)}$ і $\mu_m^{(2)}$. Тоді відношення шестихвильової інтенсивності до двохвильової приблизно дорівнює

$$\frac{I_0^{(6)}}{I_0^{(2)}} = \frac{R_0^{(6)} C^{(2)}}{R_0^{(2)} C^{(6)}} \exp\left\{(\mu_m^{(2)} - \mu_m^{(6)}) \cdot t\right\}. \quad (10)$$

Для спрощення запису індекс j тут пропущений. Чисельні розрахунки показали, що $C^{(6)} \gg C^{(2)}$, $R_0^{(6)} \ll R_0^{(2)}$, тому множник перед експонентою у (10) набагато менший від одиниці.

Отже, для підсилення аномального проходження однієї умови $\mu_m^{(6)} \ll \mu_m^{(2)}$ недостатньо. Цей ефект можна спостерігати лиш на кристалах товщиною $t > t_0$, де

$$t_0 = \left(\mu_m^{(2)} - \mu_m^{(6)}\right)^{-1} \ln \left(\frac{C^{(6)} R_0^{(2)}}{C^{(2)} R_0^{(6)}} \right). \quad (11)$$

Для перевірки таких міркувань ми провели чисельне моделювання топограм за умов: $L=2$ м, $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання та кристал Ge, товщина якого змінювалась у широких межах від 0,3 до 6 мм. На рис. 6 показані дві топограми з цієї серії. Окрім дуги, утвореної 11 і 12 вітками дисперсійної поверхні, на топограмах проявилася область у вигляді вертикальної смуги, сформована 9 і 10 вітками, яким також відповідають відносно малі коефіцієнти поглинання (рис. 4). Порівнюючи рис. 6а і рис. 6б, необхідно звернути увагу на відмінність масштабів інтенсивності. Та при порівнянні інтенсивностей дуг відносно двоххвильових смуг видно: для $t=2$ мм підсилення аномального проходження ще не спостерігається, однак для $t=4$ мм ефект уже має місце. При цьому з ростом t відбувається ослаблення та потоншення двоххвильових смуг і водночас розширення дуги. Локальна інтенсивність у центрі дуги, хоч і дуже мала, але з ростом t практично не зменшується, оскільки навіть для кристалів великої товщини значення $\mu_m^{(6)}t \ll 1$.

Були обчислені залежності $I_0(x_1)$ на лінії симетрії топограми $x_2=0$. Один максимум на цій залежності відповідає дузі Умено, другий – перетину двоххвильових смуг. Їх відношення монотонно зростає з ростом t і дорівнює одиниці при $t=3$ мм, що відповідає $\mu_0 t \sim 100$. Оцінка за формулою (11) приводить до того ж результату.

Проведений аналіз дозволяє зробити висновок, що експериментальні результати [8,18], інтерпретовані як ефект підсилення аномального проходження (рис. 2), потребують акуратнішого теоретичного розгляду. Зокрема, необхідно врахувати немонохроматичність характеристичного $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання.

Врахування немонохроматичності випромінювання і порівняння з експериментом

Всі наведені вище розрахункові топограми відповідають строго монохроматичному Х-випромінюванню. Однак в експериментах з використанням Х-променевої трубки немонохроматичність випромінювання становить досить помітну величину $\Delta\lambda/\lambda \sim 2 \cdot 10^{-4}$. В.Кон показав [14], що при зміні довжини хвилі λ в певних межах уся дифракційна картина у прямому пучку зміщується як ціле у напрямку, що з'єднує зображення для $K_{\alpha 1}$ - і $K_{\alpha 2}$ -ліній спектра Х-променів. Цей напрямок відповідає вісі x_1 на рис. 3 і рис. 6. Величина зміщення дорівнює $x_{\omega} = L \cdot \text{tg}\theta_0 \cdot \Delta\lambda/\lambda$. Для наведених на рис. 2 топограм (Ge, $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $L=2$ м) середне

зміщення дорівнює $\bar{x}_{\omega} \sim 500$ мкм. З іншого боку, відстань D між дугою Умено й центром перетину двоххвильових смуг також дорівнює 500 мкм при $t=300$ мкм і $L \sim 0$. З ростом L параметр D і розміри шестихвильової області зменшуються через ефект фокусування [9]. Отже, наведені оцінки показують, що немонохроматичність випромінювання повинна сильно усереднити експериментальні топограми у напрямку вісі x_1 .

Дійсно, Михайлюк і ін. [8] спостерігали сильно видовжену шестихвильову смугу при товщинах кристала $100 \leq t \leq 400$ мкм (див. рис. 2). Смуга орієнтована у вказаному напрямку. Розподіл інтенсивності вздовж смуги асиметричний відносно центра спектральної лінії λ_m . При $t > 500$ мкм частина смуги, що відповідає $\lambda > \lambda_m$, роздвоюється, утворюючи характерну "бороду". "Борода" облямована областями дуже малої інтенсивності ("Aufhellung"), які відділяють її від двоххвильових смуг аномального походження.

Щоб перевірити відповідність теорії експерименту, ми провели усереднення топограм по координаті x_1 при фіксованому значенні x_2 , обчисливши згортку

$$\bar{I}_0(x_1, x_2) = \int dx_1 F(x'_1 - x_1) \cdot I_0(x'_1, x_2). \quad (12)$$

Функція $F(x)$ описує розподіл інтенсивності в спектральній лінії. Вона апроксимується функцією Лоренца. Та для спрощення розрахунків ми використали її грубу апроксимацію трикутною функцією

$$F(x) = \begin{cases} (1 - |x|/\bar{x}_{\omega})/\bar{x}_{\omega}, & |x| \leq \bar{x}_{\omega}, \\ 0, & |x| > \bar{x}_{\omega}. \end{cases} \quad (13)$$

Результати розрахунку для Ge, $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $L=2$ м, $t=300$ мкм і 500 мкм показані на рис. 7. На цих топограмах виявляються такі характерні риси експериментальних топограм, як видовженість шестихвильової області, асиметричний розподіл інтенсивності в ній, "борода" при $t=500$ мкм, "Aufhellung". Отже, теоретичні топограми, одержані чисельним моделюванням шестихвильової дифракції сферичної Х-хвилі, достатньо добре співпадають з експериментальними топограмами [8,18]. Особливості експериментальних топограм великою мірою пов'язані з немонохроматичністю випромінювання. Дуги Умено на них не має, але чітко фіксуються області "Aufhellung", які також є ефектами шестихвильової дифракції сферичної Х-хвилі. Це ще раз підтверджує справедливості теорії багатихвильової дифракції сферичної Х-хвилі, розвинутої у працях [14] і [9].

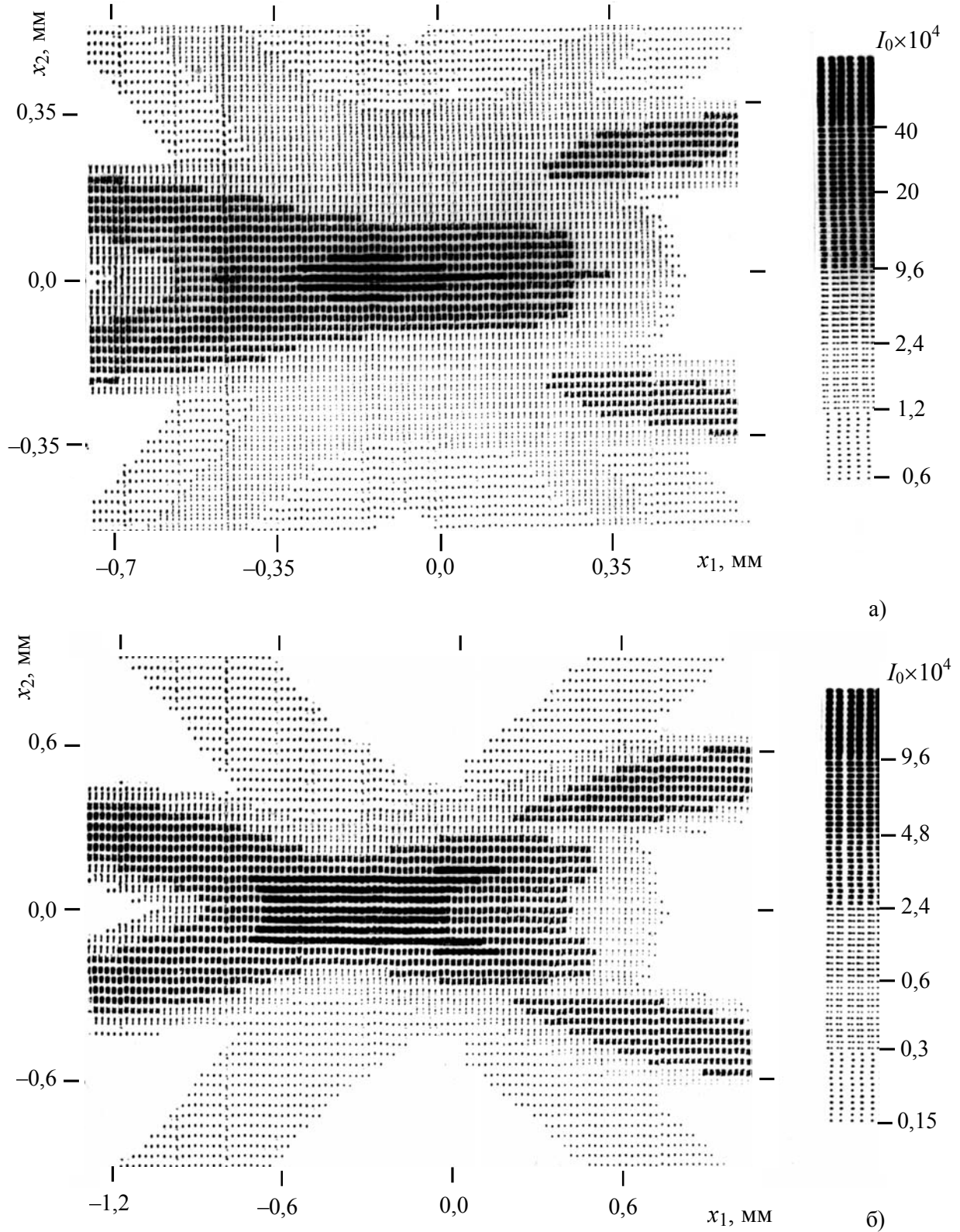


Рис. 7. Топограми прямого шестихвильового пучка, одержані чисельним моделюванням для тих же умов, що й на рис. 2, з урахуванням немонохроматичності падаючого на кристал $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання. $t=300$ мкм (а) і 500 мкм (б).

Автори вважають своїм обов'язком подякувати Михайлюку І.П. та Кону В.Г. за допомогу.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Joko T., Fukuhara A.* Simultaneous diffraction and Borrmann effect // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1967. – **22**, No.2. – P.297-604.
2. *Afanasev A.M., Kohn V.G.* Symmetrical cases of simultaneous X-ray diffraction and the Borrmann effect. 1. The analysis of photoelectric absorption // *Acta Cryst.* – 1977. – **A33**, No.1. – P.178-184.
3. *Umeno M.* A multiple reflection effect anomalous transmission in germanium // *Phys. Status Solidi A.* – 1970. – **2**, No.3 – P.K203-K205.
4. *Umeno M.* An effect of simultaneous reflection on anomalous transmission patterns of germanium // *Phys. Status Solidi A.* – 1972. – **11**, No.2. – P.501-511.
5. *Huang T.C., Tillinger M.H., Post B.* 6-beam Borrmann diffraction // *Z. Naturf.* – 1973. – **28a**, No.5. – S.600-603.
6. *Borrmann G., Hartwig W.* Die Absorption der Röntgenstrahlen im Dreistrahlfall der Interferenz // *Z. Kristallogr.* – 1965. – **121**, No.6. – S.401-409.
7. *Кон В.Г.* К теории многоволновой дифракции рентгеновских лучей. Угловая зависимость аномального прохождения в шестиволновом случае // *ФТТ.* – 1976. – **18**, №9. – С.2538-2545.
8. *Михайлюк І.П., Кшевецький С.А., Остапович М.В., Козьмик В.Д.* Шестиволновая дифракция рентгеновских лучей // *Кристаллография.* – 1978. – **23**, №2. – С.403-405.
9. *Kohn V.G. Toneyan A.H.* On the theory of six-beam X-ray spherical - Wave diffraction // *Acta Cryst.* – 1986. – **A42**. – P.441-449.
10. *Umeno M.* Six-beam anomalous transmission of Ge crystals. Anomalous transmission pattern // *Phys. Status Solidi A.* – 1976. – **37**, No.2. – P.561-570.
11. *Kato N.* The flow of X-rays and material waves in ideally perfect single crystals // *Acta Cryst.* – 1958. – **11**, No.12. – P.885-887.
12. *Kato N.* A theoretical study of pendellösung fringes. Part II. Detailed discussion based upon a spherical-wave theory // *Acta Cryst.* – 1961. – **14**, No.6. – P.627-636.
13. *Kato N.* Spherical-wave theory of dynamical X-ray diffraction for absorbing perfect crystals. I. The crystal wave fields // *J. Appl. Phys.* – 1968. – **39**, No.5. – P.2225-2230.
14. *Кон В.Г.* Динамическая теория дифракции сферической волны в случае многоволнового рассеяния // *ФТТ.* – 1997. – **19**, №12. – С.3567-3574.
15. *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика. - М.: Наука, 1982.
16. *Афанасьев А.М., Кон В.Г.* Динамическая теория дифракции сферической рентгеновской волны. Общий формализм // *ФТТ.* – 1977. – **19**, №6. – С.1775-1783.
17. *Chang S.-L.* Coherent interaction of multiple diffracted X-rays in crystals // *Z. Naturforsch.* – 1982. – **A37**, №5. – S.501-504.
18. *Кшевецький С.А., Михайлюк І.П.* Усиление аномального прохождения рентгеновских лучей при шестиволновой дифракции // *Кристаллография.* – 1976. – **21**, №2. – С.381-382.
19. *Kohn V., Kozmyk V., Mikhailyuk I., Fedoruk V.* Computer simulation of crystal optics effects under the Six-ray spherical-wave diffraction // *Вісник БПУ. Фізика* – 2003. – Вип.2. – С.3-26.