

ПОШУК НОВОГО ПІДХОДУ В ДИНАМІЧНІЙ ТЕОРІЇ ДИФРАКЦІЇ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ У ПРУЖНО-ЗІГНУТОМУ КРИСТАЛІ

На основі нового підходу розглянуто фізичний механізм міжгілкового розсіяння рентгенівських променів у пружно зігнутому кристалі.

The physical mechanism of X-ray interbranch scattering in elastically bending crystal is considered on the base of new approach.

Вступ

Проблема створення узагальненої динамічної теорії, яка описувала б дифракцію рентгенівських променів в кристалі з мікродефектами, а також з дальнодіючими полями деформації, виявилась однією із самих важких задач фізики взаємодії рентгенівського випромінювання з твердим тілом. Це пов'язано з тим, що результати, отримані в рамках підходу Такагі-Топена [1,2], основного підходу для дослідження динамічної дифракції рентгенівських променів в кристалах з дальнодіючими полями деформації (згин, дислокації і т.ін.), досить важко узагальнити на випадок реального кристала з мікродефектами. У цьому підході базисні рівняння були аналітично розв'язані лише для деяких часткових випадків, у тому числі і для випадку пружно зігнутого кристала з постійним градієнтом деформації [3]. Та одержані розв'язки досить складні, внаслідок чого подальше їх узагальнення на випадок реального кристала з локальними полями деформації представляє великі труднощі [4]. Іншим підходом до розв'язку цієї проблеми можна вважати новий формалізм динамічної теорії, запропонований Като (дивись посилання в [5]). У цьому підході, відомому як статистична теорія Като, постулювалось, що спостережувана інтенсивність визначається середнім по ансамблю, яке складається з когерентного і флукуаційного вкладу. На жаль, у даному підході інтегро-диференційні рівняння для амплітуд когерентного поля і диференційні рівняння для некогерентної частини інтенсивності вдається розв'язати тільки при малих змінах амплітуд хвильових полів на довжині екстинкції ξ_g (AGV наближення). Відзначимо, що таке ж

припущення фактично лежить в основі ейконального наближення Като [6], що використовується при розв'язку рівнянь Такагі-Топена. Спільність умов, при яких вдається отримати фізично прості результати, дозволяє вважати, що математичні труднощі, які виникають в обох цих підходах при достатньо сильних деформаціях, також мають спільну фізичну природу. Інакше кажучи, фізичні проблеми, що не були з'ясовані при безпосередньому розв'язку рівнянь Такагі-Топена, знову, в іншому вигляді, постали в статистичній теорії Като. В першу чергу, ці проблеми стосуються особливостей динамічного розсіяння рентгенівських променів у кристалах із достатньо великим ($B \geq 1\text{м}^{-1}$) градієнтом деформації. Очевидно, що альтернативний варіант подолання цих труднощів полягає в створенні нового підходу для опису динамічної дифракції рентгенівських променів у пружно зігнутому ідеальному кристалі. В цьому підході повинно бути знайдене нове фізичне розуміння процесів дифракції рентгенівських променів у пружно зігнутому ідеальному кристалі. Зрозуміло, що для його створення потрібно більш детальне дослідження цих процесів. Такі дослідження проведені в роботах [9-13], які коротко будуть викладені в наступних розділах даної роботи. Реально ці дослідження були підпорядковані меті, яка полягала в пошуку нового підходу до вивчення динамічної дифракції рентгенівських променів у пружно зігнутому ідеальному кристалі. Такий підхід міг би послужити основою для створення узагальненої динамічної теорії, яка в граничному випадку кристала з мікродефектами повинна приводити до добре відомих результатів [8].

Дисперсійне рівняння розсіяння рентгенівських променів у деформованому кристалі

Дисперсійний аналіз процесів динамічної дифракції рентгенівських променів у деформованому кристалі дуже актуальний для побудови узагальненої динамічної теорії. Оскільки в цій теорії необхідно також враховувати розсіяння рентгенівського випромінювання на мікродофектах, які зручно вивчити в оберненому просторі, тому, є сенс розглянути також в оберненому просторі процеси динамічної дифракції в деформованому кристалі.

Нехай хвильове поле $\vec{D}(\vec{r})$ описує розсіяння рентгенівських променів у такому кристалі. Тоді із рівнянь Максвелла отримується таке рівняння:

$$\Delta \vec{D}(\vec{r}) + k^2 \vec{D}(\vec{r}) + [\nabla, [\nabla(\chi(\vec{r})\vec{D}(\vec{r}))]] = 0, \quad (1)$$

де $k = \omega/c$ – модуль хвильового вектора рентгенівських променів у вакуумі, $\chi(\vec{r})$ – поляризованість кристала. Для хвиль σ -поляризації (випадок π -поляризації можна розглянути аналогічно) рівняння (1) можна представити у вигляді [9]:

$$-\{\Delta_r - k^2 \chi(\vec{r})\} D^\sigma(\vec{r}) = k^2 D^\sigma(\vec{r}). \quad (2)$$

Виходячи із (2), визначимо запізнювальну та випереджувальну функції Гріна $G_\pm^\sigma(\vec{r}, \vec{r}')$ за допомогою таких рівнянь:

$$[\Delta_r + k^2 \mp i\epsilon - k^2 \chi(\vec{r})] G_\pm^\sigma(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3)$$

В оберненому просторі, як впливає із (3), рівняння для $G^\sigma(\vec{p}, \vec{p}')$ має вигляд:

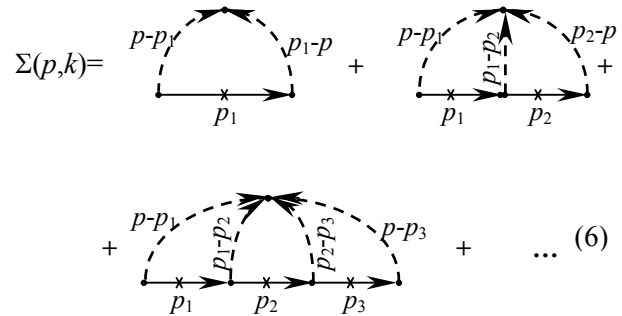
$$2\epsilon_p G^\sigma(\vec{p}, \vec{p}') - \sum_{\vec{p}_1} \chi_{\vec{p}-\vec{p}_1} G^\sigma(\vec{p}_1, \vec{p}') = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'}, \quad (4)$$

де $\epsilon_p = (p-k)/k$ – помилка збудження; $G^\sigma(\vec{p}, \vec{p}')$ – запізнювальна функція Гріна, діагональна частина якої дозволяє визначити дисперсійне рівняння розсіяння рентгенівських променів у деформованому кристалі. Необхідно відзначити, що для деформованого кристала одержання дисперсійного рівняння розсіяння зовсім не є тривіальною процедурою. Справа в тому, що при достатньо сильних деформаціях, коли застосування звичайної теорії збурень по полю зміщень $\vec{u}(\vec{r})$ виявляється неможливим, хвильове поле не можна розділити на сильну когерентну (брегівську) і слабкі некогерентні компоненти. Внаслідок чого для брегівських компонент, з урахуванням некогерентного фону, і некогерентних компонент стає неможливим отримати замкнені окремі дисперсійні співвідношення. Природним виходом із цієї

ситуації є застосування гріновського формалізму, який дозволяє одержати дисперсійне рівняння без розділення хвильового поля на сильні і слабкі компоненти. Саме такий підхід використовувався в роботі [9]. У цій роботі за допомогою діаграмної техніки було показано, що дисперсійне рівняння розсіяння має вигляд:

$$2\epsilon_{\vec{p}} = \Sigma(\vec{p}, \vec{k}), \quad (5)$$

де величина $\epsilon_{\vec{p}}$ перенормована так, що $\epsilon_p = [p - k(1 + \chi_0/2)]/k$. Праву частину в (5) можна представити у вигляді такого діаграмного ряду:



Тут стрілка \xrightarrow{p} відповідає функції Гріна рентгенівських променів у вакуумі $G_0(\vec{p}) = 1/(2\epsilon_p)$, пунктирна стрілка $\vec{p} - \vec{p}_1$ відповідає величині $\chi_{\vec{p}-\vec{p}_1}$. По всіх внутрішніх індексах, позначених символом \times і відмінних від \vec{p} , проводиться підсумовування. Із (6) безпосередньо видно, що $\Sigma(\vec{p}, \vec{k})$ можна вважати масовим оператором, оскільки в діаграмний ряд, зображений вище, входять тільки топологічно зв'язані діаграми. Діаграмний ряд для $\Sigma(\vec{p}, \vec{k})$ був одержаний у результаті підсумовування для функції $G^\sigma(\vec{p}, \vec{p}')$ нескінченного числа діаграм. Цей ряд визначає аналітично точний вигляд дисперсійного рівняння. Однак для подальших досліджень, враховуючи малість $\chi_{\vec{p}}$, досить залишити тільки перший член цього ряду, переписавши (5) у вигляді:

$$2\epsilon_{\vec{p}} = \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}} \chi_{\vec{p}-\vec{p}_1} \chi_{\vec{p}_1-\vec{p}} / (2\epsilon_{\vec{p}_1}). \quad (7)$$

Відзначимо, що використана в роботі діаграмна техніка оригінальна. Раніше, в оберненому просторі, гріновський формалізм був розроблений тільки для дослідження динамічної дифракції рентгенівських променів у ідеальному кристалі [7]. Загальний вигляд дисперсійного рівняння (5) не залежить від величини і конкретного виду деформації, (згину, дислокації і т.ін.).

Для пружно зігнутого кристала з постійним градієнтом деформації, при нормальному падінні у брегівському випадку, дисперсійне рівняння (7) можна перетворити до вигляду [10,11]:

$$16\delta_z = -\frac{c}{\gamma\xi_g^2} \left\{ \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\sqrt{2}\mu_i} [\sqrt{2}\mu_i \operatorname{sh}(\sqrt{2}\mu_i) \cos(\sqrt{2}\mu_i) + \operatorname{Re}U_2(-4e^{i\pi/4}\mu_i, 0) - \operatorname{Im}U_2(-4e^{i\pi/4}\mu_i, 0)] + 4\pi(C(\mu_1^2)S(\mu_2^2) - S(\mu_1^2)C(\mu_2^2)) \right\}, \quad (8)$$

де C, S – інтеграли Френеля, U_2 – функція Ломмеля двох змінних, $\mu_1 = \gamma - c\Delta$, $\mu_2 = c\Delta$, $\gamma = t(vg/2R)^{1/2}$, $c = 0,5(2R/vg)^{1/2}$, $\Delta = -2|\Delta| + \delta_z$, t – товщина кристала, \vec{g} – вектор оберненої ґратки, R – радіус кривизни кристала, v – коефіцієнт Пуасона, Δ_1 – розмір області повного внутрішнього відбивання в оберненому просторі. Дисперсійне рівняння (8) трансцендентне відносно величини δ_z , яка визначає добавку до величини k . Із рівняння (8), яке в загальному випадку розв'язується чисельно, випливає, що при слабких деформаціях, коли $c\Delta \gg 1$ і $\gamma \rightarrow 0$, для величини розщеплення $\Delta\delta_z = |\delta_z^1 - \delta_z^2|$ можна одержати такий вираз:

$$\Delta\delta_z = \Delta k_0 + \frac{|\Delta_1|\gamma}{2c\Delta k_0}, \quad (9)$$

де Δk_0 – розщеплення для ідеального кристалла. З ростом деформації, як видно із (9), величина $\Delta\delta_z$ зростає, що узгоджується із добре відомими результатами Като.

У випадку сильних деформацій, коли $c/\xi_g \gg 1$ і $\gamma \gg 1$, розв'язок (8) має вигляд: $\delta_z^1 \approx \gamma/c$, а $\delta_z^2 \approx c/(\xi_g^2 \gamma)$. Тут величина $\delta_z^1 \gg 1/\xi_g$, тоді як $\delta_z^2 < 1/\xi_g$. Із цих оцінок випливає, що при сильних деформаціях дифракція рентгенівських променів може припинитися, оскільки з'являються такі точки збудження дисперсійних мод, які знаходяться за межами двохвильової області. У цьому випадку також виникнуть сильні антифазні квазісиметричні осциляції фазової функції розподілу атомів. Це означає, що в сильнодеформованому кристалі будуть утворюватися області інтерференційного гасіння рентгенівського випромінювання. Внаслідок чого такий кристал буде розсіювати рентгенівські промені як ефективно "мозаїчний".

Когерентне розсіювання рентгенівських променів у сильно зігнутому кристалі

Один із недоліків існуючого підходу до розв'язку рівнянь Такаґі-Топена полягає у відсутності, при достатньо сильних деформаціях, фізично простого наближеного методу розв'язку цих рівнянь.

Якщо для слабдеформованого кристала такий метод був відомий (ейкональне наближення Като), то для випадку великих градієнтів деформації використовувалися відповідні асимптотики гіпергеометричних функцій. У роботі [12] ця задача була розв'язана для згину параболічного виду у випадку симетричної Лауе-дифракції рентгенівських променів, коли система рівнянь Такаґі-Топена має такий вигляд:

$$\begin{cases} \frac{dD_0(z)}{dz} = -\frac{i\pi}{\xi_g} D_g(z) \exp\left\{-\frac{i\alpha g z^2}{2R}\right\} - \frac{i\pi}{\xi_0} D_0(z), \\ \frac{dD_g(z)}{dz} = -\frac{i\pi}{\xi_g} D_0(z) \exp\left\{-\frac{i\alpha g z^2}{2R}\right\} - \frac{i\pi}{\xi_0} D_g(z), \end{cases} \quad (10)$$

де D_0, D_g – амплітуди заломленої і дифрагованої хвиль, відповідно, R – радіус кривизни кристала, α – константа, що описує пружно деформаційні властивості кристала. При достатньо великих градієнтах деформації ($B \geq 1\text{м}^{-1}$) для розв'язку (10) можна скористатися звичайною теорією збурень і шукати амплітуди D_0, D_g у вигляді ряду по малому параметру $R/(\alpha g \xi_g^2)$. Тоді у нульовому наближенні для амплітуди D_0 і в першому порядку для амплітуди D_g можна одержати такі вирази:

$$\begin{cases} D_0(z) = A_0 \exp\left\{-\frac{i\pi}{\xi_0} z\right\}, \\ D_g(z) = \frac{i\pi}{\xi_g} A_0 \exp\left\{-\frac{i\pi}{\xi_0} z\right\} \sqrt{\frac{\pi R}{\alpha g}} \Phi\left\{\frac{\alpha g}{2R} z^2\right\}, \end{cases} \quad (11)$$

де A_0 – амплітуда падаючої хвилі, Φ – комплексний інтеграл Френеля.

Цікаво також відзначити, що малий параметр $R/(\alpha g \xi_g^2)$ фактично є оберненим параметром до параметра ейкональної теорії Като, коли при слабких деформаціях використовується сингулярна теорія збурень.

Із (11) добре видно, що в сильно деформова-

ному кристалі область когерентності $z_{\text{ког}}(R) = \sqrt{2R/\alpha g}$. За межами цієї області ($z \geq z_{\text{ког}}(R)$) дифракція рентгенівських променів практично припиняється і відбувається рефракція хвиль, сформованих в області когерентності. Можна вважати, що в області когерентності ($z \leq z_{\text{ког}}(R)$) має місце кінематичний режим дифракції. Про це свідчить та обставина, що тут амплітуда дифрагованої хвилі змінюється приблизно по лінійному закону, досягаючи величини $D_g^{\text{ког}} \approx z_{\text{ког}}(R)/\xi_g$, де $z_{\text{ког}}(R) \ll \xi_g$; крім цього, приріст хвильового вектора $s_g(z) = g\Delta\theta(z)$, де $\Delta\theta(z) = \alpha z/R$, пов'язаний із величиною $z_{\text{ког}}(R)$ співвідношенням: $s_g(z_{\text{ког}}) \approx 1/z_{\text{ког}}(R)$. Як відомо, подібне співвідношення справедливе у випадку кінематичної дифракції рентгенівських променів в ідеальному кристалі, коли півширина кривої відбиття в імпульсному просторі обернено пропорційна розмірам кристала. Отже, сильний згин кристала дійсно приводить до зменшення області когерентності. Причому, в кінематичному випадку дифракцію рентгенівських променів у зігнутому кристалі ефективно можна розглядати як дифракцію в ідеальному тонкому кристалі, із заміною реальної товщини кристала t на ефективну $t_{\text{еф}} = z_{\text{ког}}(R)$.

Фізичний механізм міжгілкового розсіяння рентгенівських променів у пружно зігнутому кристалі

При розсіянні рентгенівських променів у сильно деформованому кристалі процеси міжгілкового обміну відіграють суттєву роль. У роботі [13] для згину параболічного виду в симетричному випадку Лауе за допомогою оригінальної процедури була одержана система диференціальних рівнянь із урахуванням міжгілкового розсіяння рентгенівських променів:

$$\begin{cases} \frac{dA_{0,g}(z)}{dz} = \mp \frac{B_{0,g}(z) \exp\left\{-2i \frac{\pi}{\xi_g} \int_0^z p(z) dz\right\}}{2p^2(z)(\omega + \sqrt{1 + \omega^2})} \frac{\varepsilon\pi}{\xi_g}, \\ \frac{dB_{0,g}(z)}{dz} = \mp \frac{A_{0,g}(z) \exp\left\{2i \frac{\pi}{\xi_g} \int_0^z p(z) dz\right\}}{2p^2(z)(\omega - \sqrt{1 + \omega^2})} \frac{\varepsilon\pi}{\xi_g}, \end{cases} \quad (12)$$

де $p(z) = \sqrt{(\varepsilon\pi z/\xi_g + \omega)^2 + 1}$, $\varepsilon = \alpha g \xi_g^2 / (2\pi^2 R)$, $\omega = s \xi_g$, \vec{s} – вектор відхилення g-го вузла обер-

неної ґратки від точного брегівського положення. Амплітуди $A_0(z)$, $B_0(z)$ для заломленої хвилі і $A_g(z)$, $B_g(z)$ для дифрагованої хвилі відповідають різним дисперсійним модам. Ці моди є розв'язками рівнянь Такаґі-Хові-Уелана в ейкональному наближенні, тому будемо надалі їх називати ейкональними модами. Необхідно мати на увазі, що вивчення процесів міжгілкового обміну в рамках ейкональної теорії Като [6] виявляється неможливим. Це викликано тим, що точність ейконального наближення не дозволяє враховувати експоненційно малі ефекти, до яких можуть приводити процеси міжгілкового розсіяння при достатньо слабких деформаціях. Тоді як при слабких, так і при достатньо сильних деформаціях, ці процеси можна досліджувати за допомогою системи диференціальних рівнянь (12). Аналіз цієї системи показує, що міжгілкове розсіяння можна розглядати як процес обміну енергіями між ейкональними модами, які відповідають різним гілкам дисперсійної поверхні. Відзначимо, що обчислені за допомогою асимптотик точного розв'язку, в наближенні "квазікласичності", амплітуди нових хвиль [3], що виникають внаслідок міжгілкового обміну, збігаються з відповідними амплітудами одержаними при $\varepsilon \ll 1$ із системи (12). Це підтверджує зроблений у роботі висновок про те, що міжгілкове розсіяння є результатом динамічної взаємодії ейкональних мод.

Безпосередньо із (11) випливає, що міжгілкове розсіяння ефективно в межах області $\Delta z \approx \xi_g/\varepsilon\pi$, яка визначає розміри області когерентності багатократного розсіяння рентгенівських променів. У випадку сильних деформацій, коли $\varepsilon \gg 1$ і має місце кінематичний режим дифракції, величина $\Delta z \ll z_{\text{ког}}(R)$, де $z_{\text{ког}}(R) = \sqrt{2R/\alpha g}$ – розмір області когерентності рентгенівських променів у сильно зігнутому кристалі (див.[12]). Через малий розмір Δz амплітуди дифрагованих хвиль, що беруть участь у міжгілковому обміні і формуються у межах Δz заломленою хвилею, будуть малі. Тому міжгілковим обміном дифрагованих хвиль можна знехтувати і вважати, що у сильно зігнутому кристалі міжгілкове розсіяння суттєве тільки для хвиль заломленого пучка.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Takagi S. Dynamical Theory of Diffraction Applicable to Crystals with any Kind of Small Distortion // Acta Crystallogr. - 1962. - **15**. - P.1311-1312.

2. *Taurin D.* Theorie Dynamique de la Diffraction des Rayons X par les Critaux Deformes // Bull. Soc. Fr. Mineral. Crystallogr. - 1964. - **87**. - P.469-511.
3. *Чуховский Ф.Н.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в упруго изогнутых кристаллах. I. Лауэ-дифракция (обзор) // Металлофизика. - 1980. - **2**, №3. - С.3-27.
4. *Поляков А.М., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.Н.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в неупорядоченных кристаллах // ЖЭТФ. - 1991. - **39**. - С.589-607.
5. *Kato N.* Statistical Theory of Dynamical Diffraction in Crystals // NATO ASI Series, Series B: Phys. - 1997. - **357**. - P.111.
6. *Kato N., Ando Y.* Contraction of Pendellosung Fringes in Distorted Crystals // J. Phys. Soc. Japan. - 1966. - **21**. - P.964-968.
7. *Ohtsuki Y., Yanagawa S.* Dynamical Theory of Diffraction. II. X-Ray Diffraction // J. Phys. Soc. Japan. - 1966. - **21**. - P.502-506.
8. *Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осинковский М.Е.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей. - К.: Наукова думка, 1988.
9. *Molodkin V.B., Shevchenko M.B.* Application of Diagram Techniques to the Dispersion Equation of X-Ray Scattering in Non-Ideal Monocrystals // Met. Phys. Adv. Tech. - 1996. - **15**. - P.921-928.
10. *Molodkin V.B., Shevchenko M.B.* Dispersion Equation for X-Ray Scattering by Elastically Bent Crystals // Met. Phys. Adv. Tech. - 1997. - **16**. - P.1285-1309.
11. *Molodkin V.B., Shevchenko M.B.* Dispersion Equation of Scattering for X-Ray by the non Ideal Crystal (The Case for Bent Crystal) // Abstr. 23rd Course X-Ray and Neutron Dynamical Diffraction, Erice, Italy. - 1996. - P.20-23.
12. *Молодкин В.Б., Шевченко М.Б., Побидайло О.В.* Когерентное рассеяние рентгеновских лучей в сильно изогнутом кристалле // Металлофизика и новейшие технологии. - 1999. - **21**, №4. - С.10-14.
13. *Молодкин В.Б., Шевченко М.Б., Побидайло О.В.* Физический механизм межветвевое рассеяния рентгеновских лучей в упруго изогнутом кристалле // Металлофизика и новейшие технологии. - 1999 (в друці).