

**ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА УГОЛ БРЭГГА  $\pi/2$  (ОБРАТНОЕ РАССЕЙАНИЕ) С УЧЕТОМ МНОГОВОЛНОВЫХ ЭФФЕКТОВ***В. Г. Кohn\*, И. В. Кон, Э. А. Манькин**Российский научный центр «Курчатовский Институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 января 1999 г.

Теоретически исследована энергетическая зависимость обратного рассеяния при динамической дифракции рентгеновских лучей на угол Брэгга  $\pi/2$  (дифракция назад) в совершенных кристаллах кубической симметрии (кремний). В этом случае строго обратное рассеяние реализуется лишь в условиях многоволновой дифракции. Детально изучены особенности влияния многоволновой дифракции на эффект обратного рассеяния в энергетическом диапазоне вблизи энергии ядерного резонансного излучения 14.41 кэВ для ядер  $^{57}\text{Fe}$ , а именно, шестиволновой случай, включающий рефлекс (1,9,9) в кремнии (энергия 14.57 кэВ), который может быть исследован экспериментально с высоким энергетическим разрешением (1 мэВ) при использовании синхротронного излучения и монохроматора, разработанного для ядерного резонансного поглощения. Показано, что коэффициент строго обратного отражения в условиях многоволновой дифракции имеет несколько максимумов на кривой зависимости от энергии со значением в максимуме меньше половины в отличие от двухволновой дифракции, когда имеет место один максимум со значением близким к единице.

PACS: 61.10Dp; 61.10Nz; 76.80+u

**1. ВВЕДЕНИЕ**

Обратное рассеяние рентгеновских лучей при дифракции на совершенных кристаллах с углом Брэгга  $\pi/2$  (дифракция назад), как известно, существует лишь в очень узком энергетическом диапазоне с относительной шириной меньше  $10^{-6}$ , но обладает относительно слабой чувствительностью к угловой расходимости пучка (не более  $10^{-3}$  рад). Так как построение дисперсионной поверхности, введенной в теорию Эвальдом [1], в данном случае невозможно, то первоначально казалось, что для анализа обратного рассеяния необходимо использовать обобщенное решение уравнений Максвелла без линеаризации дисперсионной поправки к волновому вектору [2, 3]. В действительности теория остается линеаризованной с высокой точностью и в терминах параметра отклонения от условия Брэгга ничем не отличается от дифракции на угол Брэгга меньший  $\pi/2$  [4].

В экспериментальных исследованиях обратного рассеяния [5–7] использовалось слабое угловое отклонение пучка от направления, соответствующего строго обратному рассеянию, поскольку иначе невозможно пропустить падающий пучок через непрозрачный детектор. Одновременно это позволяло исключить многоволновые эффекты и

\*E-mail: kohn@kurm.polyn.kiae.su

использовать теорию двухволновой дифракции для описания измеренных кривых энергетической (температурной) и угловой зависимостей коэффициента отражения. Для монохроматизации пучка использовалось дополнительное обратное рассеяние и одновременно вычислялась свертка двух теоретических кривых отражения при сравнении с экспериментом. В работе [7] получено хорошее согласие экспериментальной температурной кривой с теоретическим расчетом.

Тем не менее эффект строго обратного рассеяния (дифракция назад) представляется значительно большим интерес в связи с возможностью использовать его для создания рентгеновского аналога известного интерферометра Фабри—Перо (см., например, статью [8] и ссылки в ней). В этом случае необходима весьма высокая монохроматизация излучения для обеспечения большой длины продольной (временной) когерентности. Нужная степень монохроматизации с запасом реализуется при использовании «мессбауэровского монохроматора», т. е. ядерного резонансного рассеяния импульсов синхротронного излучения (СИ) в сочетании с техникой временного окна, когда детектор с высоким временным разрешением, порядка наносекунды, позволяет выделить только задержанное ядрами рассеянное излучение. Последнее имеет энергетическую ширину порядка ширины возбужденного состояния ядер  $\Gamma$ . До сих пор достаточно широко используется лишь ядерный переход  $^{57}\text{Fe}$  с энергией  $E = 14.413$  кэВ и шириной  $\Gamma = 4.66 \cdot 10^{-6}$  мэВ. Для измерения строго обратного рассеяния необходимо дополнительно использовать прозрачный детектор и большое расстояние кристалл—детектор. При этом падающий (первичный) импульс СИ также отсекается с помощью временного окна.

Как раз такая техника измерений была впервые предложена и успешно реализована недавно [9]. Для исключения многоволновых эффектов в работе [9] были использованы кристаллы сапфира  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , не обладающие достаточным совершенством кристаллической решетки. По этой причине, несмотря на высокую угловую коллимацию и весьма высокую монохроматичность падающего пучка, экспериментальные кривые слегка отличаются от результатов расчета, основанного на динамической теории для совершенных кристаллов.

До сих пор только кристаллы кремния обладают достаточно совершенной структурой. При этом несколько рефлексов соответствуют энергии, близкой к  $E = 14.413$  кэВ. Это (3,5,11) с  $E = 14.210$  кэВ, (0,4,12) с  $E = 14.437$  кэВ, (1,9,9) с  $E = 14.572$  кэВ. Во всех случаях обратное рассеяние реализуется в условиях многоволновой дифракции. Указанные рефлексы были измерены недавно в работе [10] при комнатной температуре. На этот раз использовался рентгеновский монохроматор с разрешением порядка 1 мэВ. Монохроматоры такого типа в последние годы широко используются на мессбауэровских станциях источников СИ третьего поколения (ESRF во Франции, APS в США, SPring-8 в Японии), в экспериментах по неупругому ядерному резонансному поглощению (последние результаты на эту тему и ссылки см. в [11, 12]) и разработаны как раз для энергии  $E = 14.4$  кэВ с возможностью сканирования по энергии в небольших пределах.

Более того, использование пиков обратного рассеяния на кремнии как эталонных меток на шкале энергии такого монохроматора позволяет измерить энергию самого ядерного перехода с более высокой по сравнению с другими методами точностью. Как раз такая задача решалась в работе [10]. Для этого, в частности, необходимо знать, каким образом многоволновые эффекты влияют на форму пика обратного рассеяния. Таким образом, исследование строго обратного рассеяния с учетом многоволновых эф-

флюксов, помимо чисто физического интереса, имеет также и прикладное значение. Рефлексы (3,5,11) и (0,4,12) соответствуют 24-волновой дифракции. Они будут изучены позднее. Настоящая работа посвящена анализу обратного рассеяния с учетом многоволновых эффектов на примере рефлекса (1,9,9) в кремнии, который соответствует 6-волновой дифракции. Динамическая теория дифракции плоских волн в матричной форме и схема компьютерных расчетов приведены в следующем разделе. Геометрия рассеяния и результаты численных расчетов представлены в разд. 3. В разд. 4 дается качественный анализ влияния многоволновых поправок на двухволновую дифракцию в тех областях параметров, когда они могут рассматриваться как возмущение. Это позволяет частично объяснить полученные результаты численного расчета.

## 2. МАТРИЧНАЯ ФОРМА ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ ПЛОСКИХ ВОЛН

Теория строится для плоской монохроматической волны с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{K}_0$ . Реальное излучение всегда может быть представлено суперпозицией плоских волн, причем мы предполагаем, что различные частоты и направления волновых векторов некогерентны. Таким образом, необходимо вычислить интенсивность обратно рассеянного излучения для плоской монохроматической волны и затем усреднить результат по конечным угловому и частотному (энергетическому) интервалам, соответствующим результатам конкретного эксперимента. При выполнении условий многоволновой дифракции на кристалле в форме плоскопараллельной пластины с внутренней нормалью  $\mathbf{n}$  к входной поверхности кристалла падающей плоской волне электрического поля излучения

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{K}_0\mathbf{r} - i\omega t) \quad (1)$$

соответствует суперпозиция укороченных блоховских волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \lambda_j \sum_m \mathbf{E}_{mj} \exp(i\mathbf{k}_{mj}\mathbf{r} - i\omega t), \quad \mathbf{k}_{mj} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}_m + \varepsilon_j \mathbf{n}, \quad (2)$$

в которой присутствуют только векторы обратной решетки кристалла  $\mathbf{h}_m$ , удовлетворяющие условию Брэгга  $(\mathbf{K}_0 + \mathbf{h}_m)^2 \approx K_0^2$  с заданной точностью порядка амплитуды  $\chi_m$  дифракционного рассеяния из одной волны в другую. Индекс  $j$  указывает номер возможного решения, а параметр  $\lambda_j$  — степень возбуждения данного решения в кристалле при заданной падающей волне. Он находится из граничных условий.

При подстановке решений в форме (2) в уравнение Максвелла для амплитуды электрического поля делаются следующие приближения с точностью порядка  $\chi_0 \approx 10^{-6}$ .

1) Электрическое поле считается поперечным:

$$\mathbf{E}_{mj} = \sum_s E_{msj} \mathbf{e}_{ms}, \quad (3)$$

где  $s = \pi, \sigma$  — индекс поляризации, а единичные векторы  $\mathbf{e}_{ms}$  определяют направление поляризации в пучке  $m$  в плоскости, перпендикулярной единичному вектору  $\mathbf{s}_m$ , параллельному  $\mathbf{K}_0 + \mathbf{h}_m$ .

2) Учитывается только первая степень дисперсионной поправки  $\varepsilon$  в уравнениях, что соответствует приближению обобщенной геометрической оптики в малоугловом случае.

3) Проводится усреднение уравнения по элементарной ячейке кристалла с целью исключить из расчетов быстрые переменные с длиной изменения порядка длины волны рентгеновских лучей.

4) Учитывается только дипольное взаимодействие электромагнитной волны со средой (точность этого приближения меньше, чем предыдущих, но во всех случаях, кроме эффекта аномального прохождения, оно достаточно).

Указанные приближения позволяют записать уравнения отдельно для каждой из скалярных амплитуд  $E_{msj}$  в следующей форме (более подробно см. в [1, 13]):

$$\left(\frac{\gamma_m}{K}\varepsilon + \alpha_m\right) E_{ms} = \sum_{m',s'} g_{mm'}^{ss'} E_{m's'}, \quad (4)$$

где  $K = \omega/c$  — волновое число,  $c$  — скорость света,

$$\gamma_m = (\mathbf{s}_m \mathbf{n}), \quad g_{mm'}^{ss'} = \chi_{m-m'}(\mathbf{e}_{ms} \mathbf{e}_{m's'}), \quad \alpha_m = [(\mathbf{K}_0 + \mathbf{h}_m)^2 - \mathbf{K}_0^2] / K^2, \quad (5)$$

$\chi_{m-m'}$  — компонента Фурье поляризуемости кристалла на векторе обратной решетки  $\mathbf{h}_m - \mathbf{h}_{m'}$ .

Для описания схемы расчетов в матричной форме удобно объединить два индекса  $m, s$  в один, для которого мы сохраним то же обозначение  $m$ . Индекс  $m$ , таким образом, пробегает значения  $0\pi, 0\sigma, 1\pi, 1\sigma, \dots, (n-1)\pi, (n-1)\sigma$  в  $n$ -волновом случае. Переходя к новым амплитудам,  $B_{mj} = \gamma_m^{1/2} E_{mj}$ , систему уравнений (4) можно переписать в форме, характерной для многих динамических систем (электроны, фононы и т. д.), т. е. как задачу на собственные значения

$$\varepsilon B_m = \sum_{m'} G_{mm'} B_{m'} \quad (6)$$

для кинематической матрицы рассеяния

$$G_{mm'} = H_{mm'} - A_m \delta_{mm'} = K(\gamma_m \gamma_{m'})^{-1/2} (g_{mm'} - \alpha_m \delta_{mm'}), \quad (7)$$

где  $\delta_{mm'}$  — символ Кронекера равный нулю при  $m \neq m'$  и единице при  $m = m'$ .

Матрица  $G_{mm'}$  имеет ранг  $2n$ . Соответственно существуют  $2n$  различных собственных решений задачи (6), которые различаются индексом  $j$ . В отличие от других динамических систем матрица  $G_{mm'}$  является неэрмитовой, поскольку матрица  $g_{mm'}$  в общем случае, с учетом поглощения рентгеновских лучей, неэрмитова. Однако части матрицы  $g_{mm'}$ , описывающие рассеяние и поглощение по отдельности, эрмитовы. Тем не менее матрица  $G_{mm'}$  все равно неэрмитова даже для непоглощающего кристалла, если среди параметров  $\gamma_m$  есть такие, которые имеют отрицательные значения. В случае дифракции назад это всегда имеет место. Поэтому собственные значения задачи  $\varepsilon$ , т. е. дисперсионные поправки к волновым векторам, оказываются комплексными даже для непоглощающего кристалла. Более того, некоторые из них имеют отрицательную мнимую часть, что соответствует возрастанию блоховской волны при движении в глубь кристалла. Это, в свою очередь, создает проблему при решении граничной задачи численными методами на компьютере.

Общее решение граничной задачи в форме, устойчивой по отношению к возрастающим блоховским волнам, дано в работах [14, 15]. Ниже мы кратко сформулируем использованный метод решения. Для этого упорядочим в матрице собственных векторов

$B_{mj}$  индекс  $m$  по убыванию параметра  $\gamma_m$ , а индекс  $j$  — по убыванию мнимой части собственных значений  $\varepsilon_j''$ . Если число лауэ-пучков, соответствующих прохождению излучения через пластину кристалла, для которых  $\gamma_m > 0$ , равно  $n_L$ , то число значений индекса  $m$ , соответствующих этим волнам, и число решений с положительной мнимой частью собственных значений,  $\varepsilon_j'' > 0$ , равно одному и тому же числу  $2n_L$ . Обозначим совокупность таких значений индексов  $m$  и  $j$  одним индексом  $L$ , а совокупность остальных значений одним индексом  $B$ . Это позволяет разделить полную матрицу собственных векторов  $B_{mj}$ , полученную в результате численного решения задачи (6), на четыре подматрицы,  $B_{LL}$ ,  $B_{LB}$ ,  $B_{BL}$  и  $B_{BB}$ , из которых диагональные матрицы  $B_{LL}$  и  $B_{BB}$  являются строго квадратными, а недиагональные — в общем случае прямоугольными. Совокупность амплитуд отражения плоских волн лауэ-типа ( $\gamma_m > 0$ ) в плоские волны брэгг-типа ( $\gamma_m < 0$ ) описывается блоком  $M_{BL}$  полной динамической матрицы рассеяния.

В данной работе мы будем анализировать коэффициент обратного отражения в приближении толстого поглощающего кристалла, когда возрастающими блоховскими волнами можно полностью пренебречь. При этом интересующий нас блок динамической матрицы рассеяния описывается простым выражением

$$M_{BL} = B_{BL}(B_{LL})^{-1}. \quad (8)$$

Если падающая плоская волна имеет индекс 0 и поляризована в состоянии  $s$  (что соответствует СИ), а обратно рассеянная волна имеет индекс  $k = n - 1$  и ее состояние поляризации не анализируется, то измеряемый в эксперименте коэффициент отражения описывается выражением

$$R_{k0}^{(s)} = \sum_{s'} |M_{ks',0s}|^2. \quad (9)$$

Параметрами задачи являются компоненты вектора  $\mathbf{q} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}_k/2$ , описывающие малые отклонения волнового вектора падающей волны от направления, соответствующего строго обратному рассеянию  $\mathbf{K}_0^{(0)} = -\mathbf{h}_k/2$ . Вектор  $\mathbf{q}$  удобно представить в форме

$$\mathbf{q} = K(\theta_1 \mathbf{e}_{0\pi} + \theta_2 \mathbf{e}_{0\sigma} + \theta_\omega \mathbf{s}_0), \quad (10)$$

где параметры  $\theta_1$  и  $\theta_2$  описывают угловые отклонения падающего пучка, а  $\theta_\omega = (\omega - \omega_c)/\omega_c$  описывает искомую спектральную линию обратного отражения, критическая частота равна  $\omega_c = c|\mathbf{h}_k|/2$ , критическая длины волны  $\lambda_c = 2d_k$ , где  $d_k$  есть межплоскостное расстояние для обратно рассеивающих атомных плоскостей, критическая энергия фотонов (в кэВ) равна  $E_c = 12.4/\lambda_c$ , где  $\lambda_c$  измеряется в ангстремах. С учетом (10) параметры отклонения от условий Брэгга в линейном по  $\mathbf{q}$  приближении равны

$$\alpha_m = 2(\mathbf{h}_m \mathbf{q})/K^2 = 2K^{-1}[(\mathbf{h}_m \mathbf{e}_{0\pi})\theta_1 + (\mathbf{h}_m \mathbf{e}_{0\sigma})\theta_2 + (\mathbf{h}_m \mathbf{s}_0)\theta_\omega]. \quad (11)$$

В эксперименте падающий пучок всегда имеет конечную угловую расходимость, а монохроматор имеет конечную ширину. Для простоты мы будем предполагать форму углового и частотного спектров монохроматора прямоугольной, поэтому интересующая нас спектральная линия отражения рассчитывается по формуле

$$\overline{R_{k0}^{(s)}}(\theta_\omega) = \frac{1}{T_\theta^2 T_\omega} \int d\theta_\omega' \int d\theta_1 d\theta_2 R_{k0}^{(s)}(\theta_1, \theta_2, \theta_\omega' - \theta_\omega), \quad (12)$$

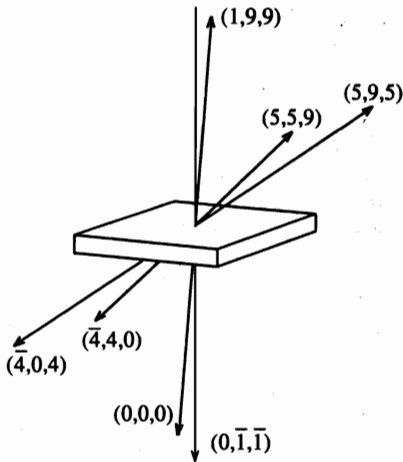


Рис. 1. Направления дифрагированных пучков относительно пластины кристалла. Плоскость пластины перпендикулярна направлению  $(0, -1, -1)$

где  $T_\theta$  и  $T_\omega$  определяют соответственно угловую и частотную ширины монохроматора и интегрирование проводится в этих пределах.

### 3. ОБРАТНОЕ РАССЯНИЕ $(1,9,9)$ В КРЕМНИИ В УСЛОВИЯХ ШЕСТИВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ. ГЕОМЕТРИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В кристаллах кубической симметрии строго обратное рассеяние на векторе обратной решетки с достаточно большими индексами Миллера всегда сопровождается отражением на другие векторы обратной решетки, которые удовлетворяют условиям Брэгга вследствие симметрии кристаллической решетки. Так, в кристалле кремния отражение  $(1,9,9)$  происходит одновременно с отражениями  $(-4, 0, 4)$ ,  $(-4, 4, 0)$ ,  $(5, 9, 5)$  и  $(5, 5, 9)$ , так что при строгом выполнении условий Брэгга реализуется шестиволновая дифракция. В этом случае укороченные блоховские волны представляют собой сумму плоских волн с волновыми векторами  $\mathbf{k}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}_m$ , имеющими в единицах  $(\pi/a)$ , где  $a$  — постоянная решетки кристалла, и в системе координат обратной решетки кристалла следующие значения:

$$\begin{aligned} &(-0.5, -4.5, -4.5); \quad (-4.5, -4.5, -0.5); \quad (-4.5, -0.5, -4.5); \\ &(4.5, 4.5, 0.5); \quad (4.5, 0.5, 4.5); \quad (0.5, 4.5, 4.5). \end{aligned}$$

Пусть пластина кристалла вырезана таким образом, что нормаль к поверхности параллельна направлению  $(0, -1, -1)$ . В этом случае параметры  $\gamma_m$  равны соответственно 0.997, 0.554, 0.554,  $-0.554$ ,  $-0.554$ ,  $-0.997$ , т.е. мы имеем три волны лауэ-типа и три волны брэгг-типа. На рис. 1 показаны направления дифрагированных пучков относительно пластины кристалла. Векторы поляризации в каждой волне можно выбирать произвольно. Принимая во внимание симметрию рассеяния, мы выбрали векторы поляризации следующим образом. Вектор  $\mathbf{e}_{0\pi}$  параллелен направлению  $(0, 1, -1)$ , а остальные векторы определяются по формулам

$$\mathbf{e}_{m\sigma} = [s_m \mathbf{e}_{0\pi}], \quad \mathbf{e}_{m\pi} = [\mathbf{e}_{m\sigma} s_m]. \quad (13)$$

Одновременно тройка векторов  $e_{0\pi}$ ,  $e_{0\sigma}$ ,  $s_0$  используется для разложения вектора  $q$ , как следует из формулы (10).

Численные значения для компонент Фурье поляризуемости кристалла  $\chi_m$  были получены с помощью программы Степанова «ХОН». К моменту выполнения данной работы эта программа свободно действовала в Интернете [16].

Как известно, симметричная матрица  $2 \times 2$  с равными друг другу диагональными элементами имеет собственные векторы с равными по модулю компонентами, что как раз соответствует динамической дифракции. Поэтому центры двухволновых максимумов отражения с учетом динамического сдвига параметров определяются не условиями  $\alpha_m = 0$ , а соотношениями  $A_m = H_{mm} - H_{00}$ , которые зависят в том числе и от параметров  $\gamma_m$ . В рассматриваемом случае эти условия имеют следующий вид в микрорадианах (мкрад):

$$\begin{aligned} (-4, 0, 4) : & -0.118\theta_1 - 0.176\theta_2 - 0.105 \theta_\omega = -0.271 \\ (-4, 4, 0) : & +0.118\theta_1 - 0.176\theta_2 - 0.105 \theta_\omega = -0.271 \\ (5, 9, 5) : & -0.118\theta_1 - 0.176\theta_2 + 0.429 \theta_\omega = +0.949 \\ (5, 5, 9) : & +0.118\theta_1 - 0.176\theta_2 + 0.429 \theta_\omega = +0.949 \\ (1, 9, 9) : & \phantom{+0.118\theta_1 - 0.176\theta_2 + 0.429 \theta_\omega} +0.296 \theta_\omega = +0.678. \end{aligned} \quad (14)$$

Как следует из этих условий, двухволновое обратное рассеяние не зависит от угловых переменных, однако максимум отражения сдвинут по энергии фотонов на величину  $\Delta E = \Delta_0 = E_c \theta_\omega^{(0)} = 33.4$  мэВ.

Трехмерную зависимость коэффициента отражения  $R_{k_0}^{(s)}(\Delta E, \theta_1, \theta_2)$ , где  $\Delta E = E_c \theta_\omega$ , трудно представить графически. Поэтому мы покажем и обсудим лишь фрагменты общей зависимости. На рис. 2 представлена зависимость коэффициента обратного отражения (1,9,9) на плоскости аргументов  $(\Delta E, \theta_2)$  при  $\theta_1 = 0$ , а на рис. 3 представлена зависимость на плоскости  $(\Delta E, \theta_1)$  при  $\theta_2 = 0$  для обоих состояний поляризации в падающей волне. Как следует из расчетов, представленных на этих рисунках, двухволновая полоса максимума обратного рассеяния вследствие дифракции (1,9,9) исчезает при подходе к многоволновой области параметров. Помимо этого легко заметить наличие дополнительных полос отражения в областях, где условие Брэгга для дифракции (1,9,9) не выполняется, но выполняется условие Брэгга для других рефлексов.

Если при движении вдоль двухволновой полосы отражения (1,9,9) от центра к краям значение коэффициента отражения увеличивается, то при движении вдоль дополнительных полос оно уменьшается. Это связано с тем, что дополнительные полосы отражения имеют существенно многоволновую природу. Угол наклона этих полос к оси энергии на плоскости  $(\Delta E, \theta_2)$  при  $\theta_1 = 0$  определяется из условий (14). Так, условия двухволновой дифракции на рефlekсах (5,9,5) и (5,5,9) выполняются на линии  $\theta_2 = 0.167\Delta E - 5.932$ . Здесь и далее сдвиг энергии фотонов  $\Delta E$  измеряется в миллиэлектронвольтах (мэВ). Это означает, что на этой линии имеет место трехволновая дифракция (0,0,0; 5,9,5; 5,5,9). Обратное отражение (1,9,9) является слабым (кинематическим), но оно усиливается из-за наличия сразу нескольких сильных волн. Более детальный анализ дается в следующем разделе.

Как следует из рис. 2, существует вторая линия дополнительного отражения. Она соответствует трехволновой дифракции  $(-4, 0, 4; -4, 4, 0; 1, 9, 9)$ . Условие Брэгга для этого случая получаем при вычитании из условия для отражения (1,9,9) условия для отражения  $(-4, 0, 4)$  в формулах (14). При  $\theta_1 = 0$  простой расчет позволяет затем определить уравнение второй линии  $\theta_2 = -0.156\Delta E + 5.932$ . Обе линии пересекаются в

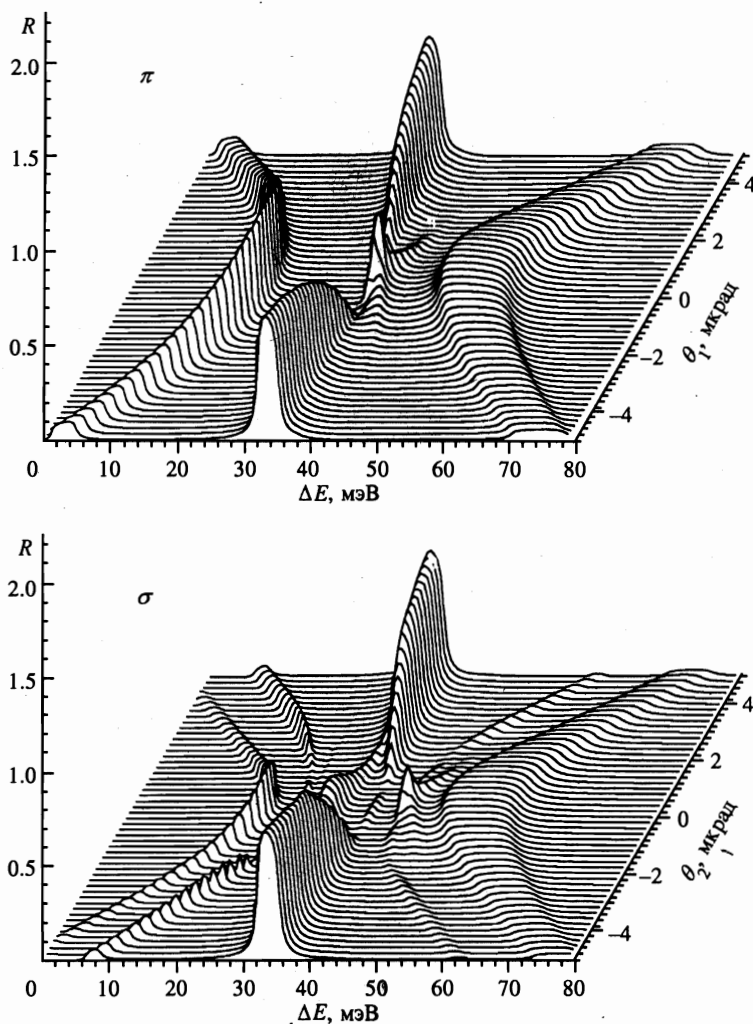


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения для обратного рассеяния (1,9,9) при  $\theta_1 = 0$  для двух состояний поляризации падающей волны ( $\pi$  и  $\sigma$ )

точке  $\Delta E = 36.73$  мэВ,  $\theta_2 = 0.742$  мкррад. В точке пересечения линии расщепляются, и существует симметрия коэффициента обратного отражения (1,9,9) на расщепленных линиях относительно изменения знака величины ( $\theta_2 - 0.742$ ), хотя физические условия отражения на обеих сторонах симметричной картины разные. В первом случае отражение (1,9,9) является возмущением в блоховской волне, где сильными волнами являются волны (0,0,0); (5,9,5); (5,5,9). Во втором случае волна (1,9,9) является сильной волной вместе с волнами (-4, 0, 4) и (-4, 4, 0), но возмущением оказывается компонента в падающем пучке (0,0,0), поэтому данная блоховская волна слабо возбуждается в кристалле. Наличие поляризации в падающей волне слабо влияет на двухволновую полосу отражения (1,9,9), но весьма существенно отражается в дополнительных полосах отражения.



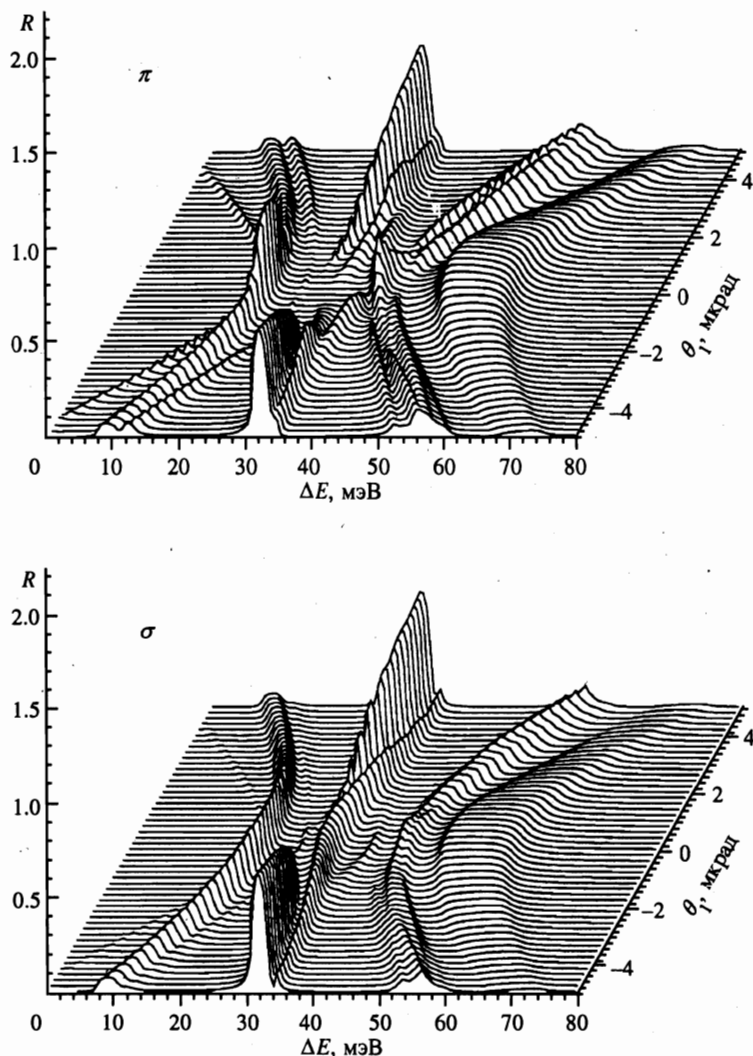


Рис. 3. Зависимость коэффициента отражения для обратного рассеяния (1,9,9) при  $\theta_2 = 0$  для двух состояний поляризации падающей волны

Зависимость, представленная на рис. 3, оказывается еще более сложной. Двухволновая дифракция на рефлексах  $(0,0,0; 5,9,5)$  и  $(0,0,0; 5,5,9)$  сейчас имеет место на линиях  $\theta_2 = \pm 0.249 (\Delta E - 32.2)$ . Дополнительные полосы отражения сильно расщеплены для обоих состояний поляризации. Помимо этого просматриваются двухволновые полосы  $(-4, 4, 0; 1,9,9)$  и  $(-4, 0, 4; 1,9,9)$  на линиях  $\theta_2 = \pm 0.239 (\Delta E - 33.7)$ . Полосы расположены близко, хотя и не совпадают друг с другом. Поэтому здесь частично реализуется двухволновый случай с сильной перенормировкой параметров рассеяния.

Для экспериментального наблюдения представленных в работе зависимостей коэффициента отражения необходимо иметь сильно сколлимированный (менее 1 мкрад<sup>2</sup>) и

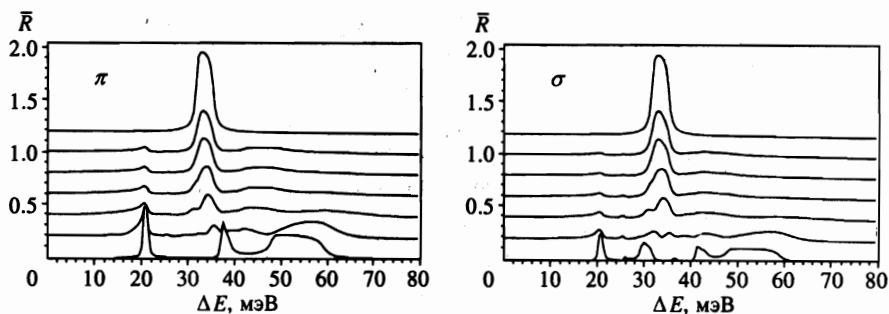


Рис. 4. Энергетические спектры интегрального по углу обратного рассеяния для различных значений коллимации падающего пучка, равных  $0 \times 0$  (нижняя кривая),  $4 \times 4$ ,  $8 \times 8$ ,  $12 \times 12$ ,  $16 \times 16$ ,  $20 \times 20$  мкрад<sup>2</sup>, и двухволновой случай (верхняя кривая).

Для лучшей наглядности кривые сдвинуты по вертикальной оси с шагом 0.2

монохроматизированный (порядка 1 мэВ) пучок. Если же пучок имеет конечную коллимацию и не сканируется по углу, то зависимость обратного отражения от сдвига энергии фотонов  $\Delta E$  может быть получена интегрированием по угловым переменным  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  в заданных пределах (см. формулу (12)). На рис. 4 показаны энергетические спектры обратного отражения для  $T_\omega = 0$ ,  $T_\theta = 0; 4; 8; 12; 16; 20$  мкрад и  $\infty$ . Интегрирование проводилось простым суммированием на квадратной сетке с шагом 0.2 мкрад по обоим осям. Для лучшей видности кривые для разных значений  $T_\theta$  сдвинуты по вертикальной оси на 0.2. Нижняя кривая соответствует  $T_\theta = 0$ , а верхняя кривая (при  $T_\theta = \infty$  в рамках рассматриваемого приближения) соответствует чисто двухволновой дифракции.

Как следует из расчетов, многоволновые эффекты проявляются даже при коллимации пучка до  $20 \times 20$  мкрад<sup>2</sup> в виде более низкого максимума основного отражения и дополнительных областей слабого отражения. Однако основной максимум уже при угловой разориентации пучка выше  $10 \times 10$  мкрад<sup>2</sup> вполне различим и имеет положение на шкале энергии, соответствующее двухволновому случаю. Этот результат может быть использован при калибровке монохроматоров с энергетическим разрешением порядка 1 мэВ.

#### 4. ДВУХВОЛНОВАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ И ВЛИЯНИЕ ДРУГИХ РЕФЛЕКСОВ НА ИХ СВОЙСТВА

Многоволновая динамическая дифракция описывается системой уравнений (6), которая в общем случае не имеет аналитического решения. Более того, до сих пор опубликованы результаты детального изучения только случаев систематической дифракции, когда все векторы обратной решетки лежат в одной плоскости. При этом изменение энергии падающих фотонов ведет лишь к изменению начала отсчета на плоскости угловых параметров без изменения угловой зависимости коэффициентов отражения. Рассматриваемый нами случай относится к несистематической (случайной) дифракции по терминологии Джана [17]. Тем не менее для качественного анализа результатов расчетов мы можем использовать приближенный подход, развитый ранее.

Рассмотрим важный частный случай, когда два из набора параметров  $A_m$ , характеризующих отклонение от условий Брэгга, близки друг другу, например, с индекса-

ми  $i$  и  $j$ , а остальные имеют значения, сильно отличные от этих двух. В этом случае естественно предположить, что только компоненты  $B_i$  и  $B_j$  собственного вектора будут иметь большие и сравнимые значения, а остальные компоненты будут малы. Рассмотрим сначала ситуацию, когда можно полностью пренебречь слабыми компонентами и разделить поляризации. Это соответствует двухволновой дифракции, когда в системе уравнений (6) достаточно сохранить только два уравнения

$$\begin{aligned}(\varepsilon + A_i - H_{ii})B_i - H_{ij}B_j &= 0, \\ -H_{ji}B_i + (\varepsilon + A_j - H_{jj})B_j &= 0.\end{aligned}\quad (15)$$

Данная система имеет два решения, в которых

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1,2} &= H_{ii} - A_i + 0.5 \left[ -a \pm (a^2 + 4H_{ij}H_{ji})^{1/2} \right], \\ a &= (A_j - A_i) - (H_{jj} - H_{ii}), \quad B_j/B_i = (\varepsilon + A_i - H_{ii})/H_{ij}.\end{aligned}\quad (16)$$

Здесь для квадратного корня выбирается ветвь с положительной мнимой частью.

Если индекс  $i = 0$  соответствует падающему пучку, а индекс  $j = h$  соответствует обратному отражению (1,9,9), то в приближении толстого поглощающего кристалла амплитуда отражения как раз равна отношению компонент блоховской волны и может быть записана в стандартных обозначениях [1] следующим образом:

$$\frac{B_h}{B_0} = i \frac{p + \sqrt{p^2 - 4\beta\chi_h\chi_h C}}{2\chi_h}, \quad (17)$$

где

$$p = \alpha\beta - \chi_0(1 + \beta), \quad \beta = \gamma_0/|\gamma_n|, \quad C = (\mathbf{e}_{0s}\mathbf{e}_{hs}). \quad (18)$$

Здесь в явном виде учтено, что  $\gamma_h < 0$ . В случае обратного рассеяния  $\beta = 1$ . Формулы (17), (18) точно соответствуют верхней кривой на рис. 4 с учетом соотношения  $\alpha = -4\theta_\omega = -4\Delta E/E_c$ .

Слабые компоненты многоволновой блоховской волны для  $m \neq i, j$  в кинематическом приближении, когда перерассеянием между ними можно пренебречь и учесть только однократное рассеяние из сильных волн в слабые, определяются следующим образом:

$$B_m = \frac{H_{mi}B_i + H_{mj}B_j}{\varepsilon + A_m - H_{mm}}. \quad (19)$$

Как следует из этой формулы, обычное одноволновое однократное рассеяние из падающей волны  $i = (000)$  в волну обратного отражения  $m = (1, 9, 9)$  может быть усилено при наличии нескольких сильных волн, и можно ожидать появления дополнительного максимума отражения в том случае, когда выполняется условие Брэгга для какой-либо волны  $j \neq (1, 9, 9)$ , и эта волна рассеивается в фазе с падающей волной.

Более того, мы можем записать систему уравнений для сильных волн в более точном виде

$$\begin{aligned}(\varepsilon + A_i - H_{ii})B_i - H_{ij}B_j &= \sum_m H_{im}B_m, \\ -H_{ji}B_i + (\varepsilon + A_j - H_{jj})B_j &= \sum_m H_{jm}B_m,\end{aligned}\quad (20)$$

где  $m \neq i, j$  в сумме. Используя теперь формулу (19) для слабых волн и подставляя ее в (20), мы получаем систему типа (15), но с перенормированными коэффициентами

$$\begin{aligned}(\varepsilon + A_i - F_{ii})B_i - F_{ij}B_j &= 0, \\ -F_{ji}B_i + (\varepsilon + A_j - F_{jj})B_j &= 0,\end{aligned}\tag{21}$$

где

$$F_{kl} = H_{kl} + \sum_{m \neq i, j} \frac{H_{km}H_{ml}}{\varepsilon + A_m - H_{mm}}, \quad k = i, j, \quad l = i, j.\tag{22}$$

Формулы типа (19), (21), (22) в более общем случае, с учетом поляризационных множителей, были получены в [18] как способ приближенного решения задачи. В работах [19–21] механизм перенормировки параметров был назван виртуальным брэгговским рассеянием. Этот же подход использовался в работах [22, 23] при исследовании стоячих рентгеновских волн и полного отражения в запрещенный рефлекс.

В обычных для двухволновой дифракции условиях параметр отклонения от условия Брэгга для слабой волны  $A_m \gg \varepsilon$ ,  $H_{mm}$  и перенормировка коэффициентов очень мала. Однако в ситуации, близкой к полностью многоволновой, эта перенормировка оказывается существенной и может значительно исказить характер двухволновой дифракции, т. е. существенно сдвинуть положение максимума и изменить его ширину и высоту. При этом даже величину дисперсионной поправки следует вычислять самосогласованно.

Таким образом, при анализе многоволновых поправок к двухволновому обратному отражению (1,9,9) мы можем выделить эффекты двух типов. Во-первых, двухволновый пик обратного рассеяния искажается за счет перенормировки параметров рассеяния, связанной с перерассеянием на других рефлексах. Во-вторых, возникает перенормировка кинематической дифракции при выполнении условий Брэгга для какого-либо из других рефлексов с учетом перенормировки его параметров. При этом происходит существенная интерференция обоих каналов рассеяния, в результате чего, как показал анализ, однозонное приближение, не дает требуемой точности по сравнению с точным многоволновым расчетом. Поэтому приведенные в этом разделе формулы удобны лишь для качественного понимания результатов точного расчета, представленных на рис. 2 и 3, но не могут быть использованы непосредственно для расчетов.

Обсуждаемые здесь механизмы можно рассматривать и в случае, когда одновременно выполняются условия для трехволновой дифракции, как это имеет место при  $\theta_1 = 0$ . Можно без труда обобщить приведенные выше формулы на этот случай. Гораздо сложнее выглядит ситуация, когда области двухволновой дифракции для разных рефлексов достаточно близки, но не совпадают полностью. При этом интерференция различных каналов рассеяния приводит к сложной структуре пиков кинематического рассеяния, что хорошо видно на рис. 3.

Авторы выражают благодарность Ю. Швидько за формулировку проблемы и интерес к работе.

## Литература

1. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика*, Наука, Москва (1982).
2. K. Kohra and T. Matsushita, *Z. Naturforsch.*, **27a**, 484 (1972).
3. O. Brümmer, H. R. Höche, and J. Nieber, *Phys. Status Solidi (a)* **53**, 565 (1979).
4. A. Caticha and S. Caticha-Ellis, *Phys. Rev. B* **25**, 971 (1982).
5. W. Graeff and G. Materlik, *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res.* **195**, 97 (1982).
6. В. И. Кушнир, Э. В. Суворов, *Письма в ЖЭТФ* **44**, 262 (1986).
7. R. Verbeni, F. Sette, M. H. Krisch, U. Bergmann, B. Gorges, C. Halcoussis, K. Martel, C. Masciovecchio, J. F. Ribois, G. Ruocco, and H. Sinn, *J. Synchrotron Rad.* **3**, 62 (1996).
8. A. Caticha, K. Aliberti, and S. Caticha-Ellis, *Rev. Sci. Instrum.* **67**, 1 (1996).
9. Yu. V. Shvyd'ko, E. Gerdau, J. Jäschke, O. Leupold, M. Lucht, and H. Ruter, *Phys. Rev. B* **57**, 4968 (1998).
10. Yu. V. Shvyd'ko, et al., submitted to *Hyperfine Interactions* (1999).
11. A. I. Chumakov, R. Rüffer, A. O. R. Baron, H. Grünsteudel, H. F. Grünsteudel, and V. G. Kohn, *Phys. Rev. B* **56**, 10758 (1997).
12. V. G. Kohn, A. I. Chumakov, and R. Rüffer, *Phys. Rev. B* **58**, 8437 (1998).
13. V. G. Kohn, *Phys. Status Solidi (a)* **54**, 375 (1979).
14. V. G. Kohn, *J. Moscow Phys. Soc.* **1**, 425 (1991).
15. В. Г. Кон, *ЖЭТФ* **105**, 665 (1994).
16. С. А. Степанов, <http://sergey.bio.aps.anl.gov>.
17. Shin-Lin Chang, *Multiple diffraction of X-Rays in Crystals*, Springer, Berlin (1984) (рус. пер. Ш. Джан, *Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах*, Мир, Москва (1987)).
18. R. Hoier and K. Martinsen, *Acta Cryst. A* **25**, 854 (1983).
19. L. D. Chappmann, D. R. Yoder, and R. Colella, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1578 (1981).
20. R. Colella, *Z. Naturforsch. (a)* **37**, 437 (1982).
21. M. C. Schmidt and R. Colella, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 715 (1985).
22. В. Г. Кон, *Кристаллография* **33**, 567 (1988).
23. V. G. Kohn, *Phys. Stat. Sol. (a)* **106**, 31 (1988).