

Лекции по курсу

# МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА МАТЕРИАЛОВ

Д.ф.-м.н., проф. Э.В.Суворов

## ЛЕКЦИЯ 4

### ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

#### ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ В СОВЕРШЕННОМ КРИСТАЛЛЕ

В общем случае, когда взаимодействием падающей и рассеянных волн пренебречь нельзя, то есть когда скорость распространения поля в среде отличается от скорости в вакууме, распространение электромагнитной волны в среде должно в общем случае описываться системой уравнений Максвелла [1,2,4,5,11]

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} & \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{J} \right) & \operatorname{div} \mathbf{H} = 0 \end{cases} \quad (1.62)$$

Константы среды здесь учитываются через вектор поляризации  $\mathbf{P}(\mathbf{r},t)$ , который связан с вектором электрической индукции  $\mathbf{D}(\mathbf{r},t)$  соотношением  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ ;  $c$  - фазовая скорость поля; диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  связана с поляризуемостью среды, коэффициентом преломления и скоростью поля -  $\varepsilon = \frac{1}{c^2} = 1 + \chi = n^2$ ;  $n$  - коэффициент преломления;  $\chi(\mathbf{r}) = -\frac{R\lambda^2}{\pi} \rho(\mathbf{r})$  - поляризуемость среды,  $R = \frac{e^2}{mc^2}$  - радиус электрона,  $\rho(\mathbf{r})$  - распределение электронной плотности в веществе.

Для того что бы получить более привычный вид уравнений для волнового поля в среде, уравнения Максвелла необходимо несколько преобразовать. Для этого подставим значение вектора  $\mathbf{E}$ , выраженное через вектор электрической индукции, в первое уравнение Максвелла, тогда оно примет вид

$$\operatorname{rot}(\mathbf{D} - 4\pi\mathbf{P}) = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (1.63)$$

Воспользовавшись соответствующими теоремами векторного анализа, можно записать

$$\operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{D}) = \nabla(\operatorname{div} \mathbf{D}) - \Delta \mathbf{D} \quad (1.64)$$

Учитывая отсутствие свободных зарядов в среде т.е.  $\text{div}\mathbf{D}=0$  получим

$$\Delta\mathbf{D} - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial(\text{rot}\mathbf{H})}{\partial t} = -4\pi \cdot \text{rot}(\text{rot}\mathbf{P}) \quad (1.65)$$

$$\text{rot}\mathbf{H} = \frac{1}{c} \cdot \left( \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \cdot \frac{\partial\mathbf{P}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.66)$$

$$\Delta\mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2\mathbf{D}}{\partial t^2} + 4\pi \cdot \text{rot}(\text{rot}\mathbf{P}) = 0 \quad (1.67)$$

Так как  $\varepsilon$  мало отличается от единицы, можно написать  $\chi = \varepsilon - 1 \approx 1 - \frac{1}{\varepsilon}$ , тогда из

$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$  следует, что  $4\pi\mathbf{P} \approx \chi\mathbf{D}$  и, следовательно, в окончательном виде уравнение (1.67), описывающее волновое поле в среде с поляризуемостью  $\chi(\mathbf{r})$ , примет вид неоднородного волнового уравнения

$$\Delta\mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2\mathbf{D}}{\partial t^2} + \text{rot}(\text{rot}\chi\mathbf{D}) = 0 \quad (1.68)$$

Волновое уравнение  $\Delta\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0$  является частным случаем только что написанного уравнения (1.68) и описывает свободные колебания электромагнитного поля в среде с поляризуемостью среды  $\chi(\mathbf{r})$ . Здесь  $\Delta$  - оператор Лапласа.

После несложных преобразований и учитывая известные векторные равенства для плоской волны типа  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A} \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{k}, \mathbf{r})]}$

$$\Delta\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = -|\mathbf{K}|^2 \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}, t); \quad \frac{\partial^2\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -\omega^2 \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}, t), \quad (1.69)$$

написанное выше уравнение можно записать в более удобном для дальнейших рассуждений виде

$$\text{rot}(\text{rot}\chi\mathbf{D}) - 2|\mathbf{K}|^2 \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (1.70)$$

Известно два подхода при решении полученного уравнения. Первый - состоит в непосредственном решении уравнения (1.70) и был впервые проведен Эвальдом и Лауэ. Этот путь очень нагляден и позволяет легко понять физическую картину явлений. Второй - сводится к преобразованию уравнения (1.70) в систему дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных. Такой подход был впервые реализован С.Такаги [27,28]. Система уравнений полученная С.Такаги легко может быть обобщена на случай деформированного кристалла. Вначале мы рассмотрим как эта задача была решена М.Лауэ.

Волновое уравнение (1.70) имеет множество частных решений  $\mathbf{D}_1(\mathbf{r}, t), \mathbf{D}_2(\mathbf{r}, t), \dots, \mathbf{D}_n(\mathbf{r}, t)$ , например в виде плоских волн  $\mathbf{D}_j(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})}$ . Здесь вектор  $\mathbf{k}$  перпендикулярен фронту волны, а его величина  $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$  определяет волновой вектор в вакууме. В случае распространения волны в среде необходимо учесть отличие коэффициента преломления от единицы. Тогда уравнение волны следует записать  $\mathbf{D}_j(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot e^{i(\omega t - \mathbf{K}\mathbf{r})}$ , где  $|\mathbf{K}| = \sqrt{1 + \chi} \cdot \frac{\omega}{c}$ , или  $|\mathbf{K}| = n \cdot |\mathbf{k}|$ . Общее решение представляется суперпозицией частных решений и может быть записано в виде

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_j A_j \mathbf{D}_j(\mathbf{r}, t) \quad (1.71)$$

Амплитуды волн  $A_j$  не зависят от времени, но могут меняться в пространстве, т.е. зависеть от координат. Дело в том, что электроны колеблются под действием распространяющейся волны, и испускаемые ими электромагнитные волны интерферируют между собой и с исходной волной. Устанавливается некоторое стационарное поле, характер которого будет определяться функцией распределения электронной плотности  $\rho(\mathbf{r})$  в кристаллической решетке. Поэтому, если мы имеем дело с кристаллической решеткой, распределение электронной плотности можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \cdot \sum_{hkl} F(hkl) \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})} \quad (1.72)$$

Подставляя это выражение в соотношение для поляризуемости среды, получаем

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{R\lambda^2}{\pi V} \cdot \sum_{hkl} F(hkl) \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})} = \sum_{hkl} \left\{ -\frac{R\lambda^2}{\pi V} \cdot F(hkl) \right\} \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})} \quad (1.73)$$

Выражение в фигурных скобках есть не что иное, как Фурье компонента разложения поляризуемости среды по векторам обратной решетки, и, следовательно, предыдущее выражение можно записать в виде

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \chi_{hkl} \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})}, \quad (1.74)$$

где  $\chi_{hkl} = -\frac{R\lambda^2}{\pi V} \cdot F(hkl)$  Полученное выражение для коэффициентов поляризуемости показывает, что  $\chi_{hkl} = \chi_{\mathbf{H}}$  может иметь действительную и мнимую части, т.е.  $\chi_{\mathbf{H}} = \chi_{\mathbf{H}r} + i\chi_{\mathbf{H}i}$ , что соответствует учету поглощения в среде, причем в общем случае для структур, не имеющих центра симметрии,  $\chi_{\mathbf{H}} \neq \chi_{\mathbf{H}^-}$ . Численное значение действительной части  $\chi$  составляет величину порядка  $10^{-6}$ .

Как уже отмечалось выше, решение волнового уравнения можно представить в виде волны,  $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}, \mathbf{r})]}$ , где амплитуда  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  должна иметь периодичность кристаллической решетки и может быть записана в виде ряда Фурье по векторам обратной решетки

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{r})} \quad (1.75)$$

Индекс суммирования  $m$  определяет здесь узел в обратной решетке с индексами  $hkl$ . Тогда решение волнового уравнения может быть записано в виде пакета плоских волн, или, блоховской волны, с амплитудой, имеющей периодичность решетки.

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}, \mathbf{r})]} = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_m, \mathbf{r})]} = e^{i\omega t} \cdot \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i(\mathbf{K}_m, \mathbf{r})}, \quad (1.76)$$

где  $\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ .

Если среда представляет собой кристаллическую решетку и следовательно распределение электронной плотности имеет трехмерную периодичность уравнение (1.70) можно преобразовать не решая его до конца и получить очень важные законы поведения волнового поля в кристалле.

Произведение  $\chi \mathbf{D}$  можно записать, используя полученные выше соотношения для  $\chi$  и  $\mathbf{D}$

$$\chi^{\mathbf{D}} = \sum_H \sum_m \chi_H \cdot \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_m + \mathbf{H}, \mathbf{r})]} \quad (1.77)$$

Введя новый индекс суммирования  $n=m+H$  и заменив вектор  $\mathbf{K}_m + \mathbf{H} = \mathbf{K}_n$ , получим

$$\chi^{\mathbf{D}} = \sum_m \sum_n \chi_{n-m} \cdot \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} \quad (1.78)$$

Если обозначить  $(\chi^{\mathbf{D}})_n = \sum_m \chi_{n-m} \cdot \mathbf{D}_m$ , предыдущая формула примет вид

$$\chi^{\mathbf{D}} = \sum_n (\chi^{\mathbf{D}})_n \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} \quad (1.79)$$

Напомним некоторые соотношения векторной алгебры. Если вектор  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$  имеет вид плоской волны  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A} \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}, \mathbf{r})]}$ , можно легко получить следующие векторные соотношения-заготовки:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) &= -i(\mathbf{K}, \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)); \operatorname{rot} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = -i[\mathbf{K} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]; \\ \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)) &= |\mathbf{K}|^2 \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{K} \cdot (\mathbf{K}, \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)) = |\mathbf{K}|^2 \cdot [\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{K}}, \end{aligned} \quad (1.80)$$

где  $[\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{K}}$  - компонента вектора  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ , перпендикулярная вектору  $\mathbf{K}$ . Подставляя полученные выражения для  $\chi^{\mathbf{D}}$  и  $\mathbf{D}$ , а также только что приведенные теоремы из векторной алгебры в уравнение (1.70), получим

$$\begin{aligned} -|\mathbf{K}_n|^2 \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} = \\ = -|\mathbf{K}_n|^2 \cdot \sum_H \chi_H \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r})} \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i(\mathbf{K}_n, \mathbf{r})} \end{aligned} \quad (1.81)$$

После несложных преобразований, исключая временную зависимость, уравнение будет иметь вид

$$\frac{\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_n^2} \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i(\mathbf{K}_n, \mathbf{r})} = \sum_m \sum_n \chi_{m-n} \cdot \mathbf{D}_n \cdot e^{-i(\mathbf{K}_n, \mathbf{r})} \quad (1.82)$$

Условием для выполнения этого равенства является тождественное равенство коэффициентов при соответствующих экспонентах, т.е.

$$\frac{\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_n^2} \cdot \mathbf{D}_n = \sum_m \chi_{n-m} \cdot (\mathbf{D}_m)_n \quad (1.83)$$

Здесь  $(\mathbf{D}_m)_n$  - проекция вектора  $\mathbf{D}_m$  на направление, перпендикулярное вектору  $\mathbf{K}_n$ , а

$|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$  - значение волнового вектора в вакууме. Полученные уравнения (1.83) носят название фундаментальных уравнений динамической теории [1,4,5,11]. Они представляют собой систему линейных уравнений, число которых равно числу волн с индукцией  $\mathbf{D}_n$ . и связывают между собой значения волновых векторов и амплитуд волн самосогласованного волнового поля в кристаллической решетке, возбужденного внешней падающей волной, или, другими словами, полученная система уравнений связывает значения волновых векторов и энергий соответствующих мод. Поэтому эта система уравнений представляет собой дисперсионные уравнения для самосогласованного поля в кристаллической решетке.

Очень полезна геометрическая интерпретация приведенной выше системы уравнений. Согласно представлений Эвальда дисперсионные уравнения описывают  $m$ -листную поверхность в обратном пространстве в окрестности точки Лауэ (точных условий дифракции). Если из любой точки  $M$  (см. рис.1.12) этой поверхности провести прямые линии в точки обратного пространства с индексами  $0, 1, \dots, m$ , полученные отрезки будут

волновыми векторами  $\mathbf{K}_0, \mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_n$  волн самосогласованного волнового поля распространяющегося в кристалле. Таким образом поверхность, описываемая дисперсионными уравнениями, является геометрическим местом точек распространения для  $m$ -волновой дифракционной задачи.

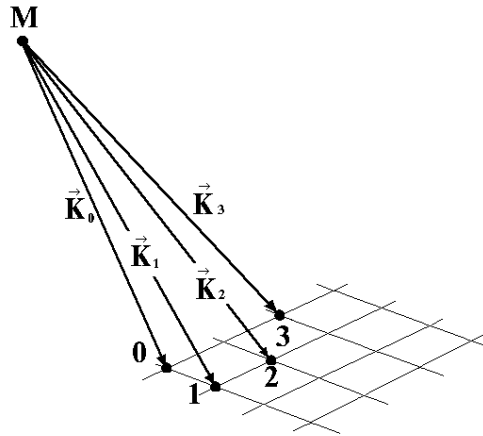


Рис.1.12. Геометрическая интерпретация связи волновых векторов с дисперсионной поверхностью. Точка  $M$  принадлежит  $m$ -листной поверхности, называемой дисперсионной поверхностью. Узлы  $0, 1, 2, 3$  соответствуют узлам обратной решетки с индексами  $h_0 k_0 l_0, h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2, h_3 k_3 l_3$ .

## ДВУХВОЛНОВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В СОВЕРШЕННОМ КРИСТАЛЛЕ

Система уравнений (1.83) в общем случае должна состоять из бесконечного числа уравнений, однако даже беглый анализ системы показывает, что величины  $D_m$  резко уменьшаются с ростом разности  $\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2$ . Действительно, правая часть системы не может сильно изменяться при переходе от одного уравнения этой системы к другому, т.е.  $D_m$  велико, если  $\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2$  мало. Это означает, что значениями  $D_m$  для всех членов с большим  $\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2$  можно пренебречь, ввиду их малости. Тогда число уравнений в системе (1.83) можно ограничить.

Наибольший практический интерес представляет тот случай, когда ориентация кристалла близка к одному из береговых положений, например, к положению с волновым вектором (вектором отражения)  $\mathbf{K}_l$ , т.е. когда только два узла обратной решетки с индексами  $0$  и  $l$  (индексы Миллера которых  $(000)$  и  $(hkl)$  соответственно) лежат вблизи сферы Эвальда. Такой случай показан на рис.1.13 и получил название двухволнового приближения [1,4,5,11].

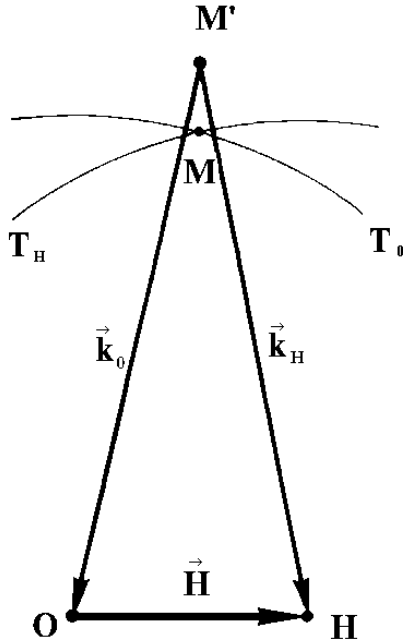


Рис1.13. Геометрия расположения волновых векторов для случая двух сильных волн. Точка  $M'$  соответствует случаю, когда коэффициент преломления равен единице, т.е. рассеяние происходит в вакууме и носит название точки Лоренца. Точка  $M$  соответствует центру распространения с учетом преломления, но для чисто кинематического случая, когда взаимодействием волн можно пренебречь.  $T_H$  и  $T_0$  - следы от пересечения сфер радиуса  $k$  и  $k$ , проведенных из узлов решетки  $O$  и  $H$ . Точка их пересечения называется точкой Лауэ.

В этом случае в решении волнового уравнения остается только два члена

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_0, \mathbf{r})]} + \mathbf{D}_1 \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_1, \mathbf{r})]} \quad (1.84)$$

Тогда система уравнений (1.83) будет состоять из двух уравнений

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{K}_0^2 - k^2}{\mathbf{K}_0^2} \cdot \mathbf{D}_0 = \chi_0 \mathbf{D}_0 + C \chi_{-1} \mathbf{D}_1 \\ \frac{\mathbf{K}_1^2 - k^2}{\mathbf{K}_1^2} \cdot \mathbf{D}_1 = \chi_1 \mathbf{D}_0 + C \chi_0 \mathbf{D}_1 \end{cases} \quad (1.85)$$

После несложных преобразований написанная выше система может быть записана в матричной форме

$$\begin{vmatrix} \frac{\mathbf{K}_0^2 - k^2}{\mathbf{K}_0^2} - \chi_0 & -\chi_{-1} C \\ -\chi_1 C & \frac{\mathbf{K}_1^2 - k^2}{\mathbf{K}_1^2} - \chi_0 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{D}_0 \\ \mathbf{D}_1 \end{vmatrix} = 0 \quad (1.86)$$

Эта линейная система уравнений будет иметь нетривиальные решения, если детерминант системы тождественно равен нулю, т.е. когда

$$\left( \frac{\mathbf{K}_0^2 - k^2}{\mathbf{K}_0^2} - \chi_0 \right) \cdot \left( \frac{\mathbf{K}_1^2 - k^2}{\mathbf{K}_1^2} - \chi_0 \right) = C \chi_{-1} \chi_1 \quad (1.87)$$

Здесь поляризационный множитель  $C=1$  для компонент волнового поля, поляризованных перпендикулярно к плоскости рассеяния ( $\sigma$ -поляризация), и  $C=\cos 2\theta$  для компонент, поляризованных в этой плоскости ( $\pi$ -поляризация),  $\theta = \frac{1}{2} \mathbf{K}_0 \wedge \mathbf{K}_1$  - брегговский угол.

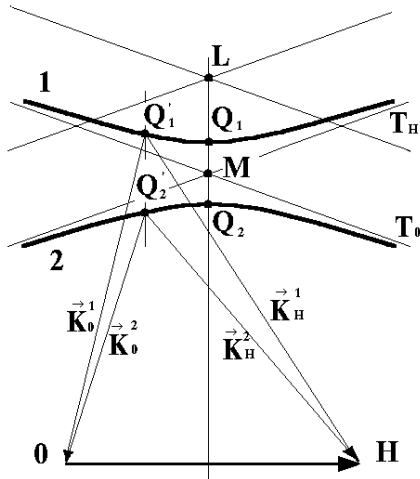


Рис.1.14. Сечение (1,2) дисперсионной поверхности плоскостью рассеяния для двухволнового случая. Кривые 1 и 2 соответствуют двум листам дисперсионной поверхности.  $Q_1$  и  $Q_2$  - связанные точки возбуждения, соответствующие двум типам блоховских волн.  $T_0$  и  $T_1$  - асимптотические поверхности, к которым приближаются ветви дисперсионной поверхности вдали от точного условия брегговского отражения.

Это уравнение описывает двулистную поверхность вращения типа гиперболического цилиндра с осью вращения, совпадающей с вектором обратной решетки  $\mathbf{H}_1$  (называемым вектором дифракции или вектором отражения) и асимптотами  $T_0$ ,  $T_1$ , и носит название дисперсионного уравнения (см. рис.1.14). Дисперсионные уравнения позволяют в каждом конкретном случае определить амплитуды всех волн участвующих в рассеянии и, следовательно, определить интенсивности всех дифракционных пиков.

Не вдаваясь в детали вывода можно получить выражения связывающие коэффициенты отражения  $R(\theta)$  и прохождения  $T(\theta)$  с величиной дифракционного угла и таким образом построить профили дифракционных линий, однако в общем случае выражения эти достаточно громоздки. Для симметричного лауэвского случая дифракции рентгеновских лучей на плоскопараллельной пластинке при отсутствии поглощения эти соотношения вид

$$T(y) = \frac{I}{I+y^2} \cdot \left[ y^2 + \cos^2(A\sqrt{I+y^2}) \right]$$

$$R(y) = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \cdot \frac{\sin^2(A\sqrt{I+y^2})}{I+y^2}, \quad (1.88)$$

где  $A = \frac{\pi t}{\Lambda}$ ,  $y = \frac{\sin 2\theta_B}{C|\chi_{rh}|} \cdot \Delta\theta$ ,  $\Lambda = \frac{\lambda \cdot \cos \theta_B}{C|\chi_{rh}|}$ . Из этих соотношений легко видеть, что, как проходящая, так и отраженная волны зависят не только от величины угла  $\Delta\theta$ , но и от толщины кристалла  $t$ . На рис.1.15 показаны коэффициенты прохождения  $T(A,y)$  и отражения  $R(A,y)$  вблизи максимума для случая прозрачной плоскопараллельной кристаллической пластики. Эти зависимости имеют осциллирующий характер и быстро убывают с увеличением отклонения от точного брегговского положения за счет множителя  $(I+y^2)^{-1}$ .

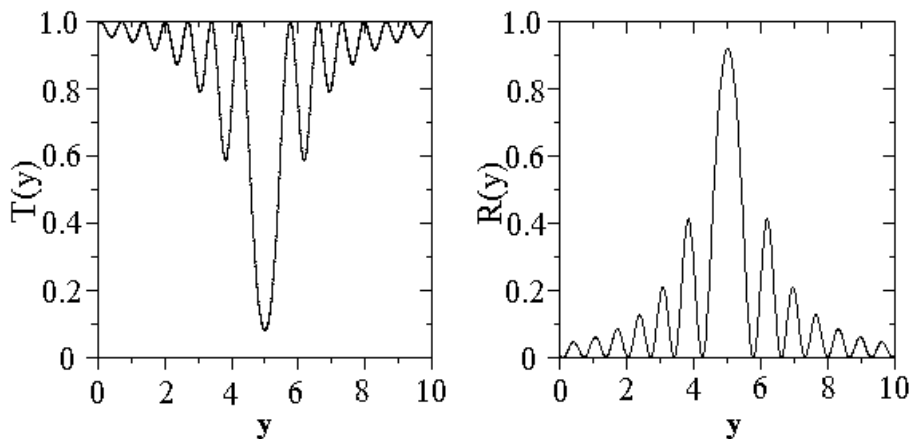


Рис.1.15. Характер изменений коэффициентов прохождения  $T(A,y)$  и отражения  $R(A,y)$  в окрестности брегговского максимума.

Чтобы проследить изменение коэффициентов  $T(A,y)$  и  $R(A,y)$  с толщиной кристалла необходимо проинтегрировать выражения (1.88) по параметру  $y$  определяемому величиной отклонения от брегговского положения. На рис.1.16 показана зависимость интегрального коэффициента отражения от толщины кристалла. Из рисунка видно, что интенсивность дифрагированного пучка осциллирует с увеличением толщины кристалла. Аналогичным образом ведет себя и проходящая волна. Этот эффект впервые был обнаружен теоретически Эвальдом и получил название маятникового эффекта. Такое поведение интенсивности дифрагированной и отраженной волн связано с взаимной перекачкой энергии между этими волнами и совершенно аналогично перекачки энергии между двумя связанными маятниками. Отсюда становится понятно название эффекта.

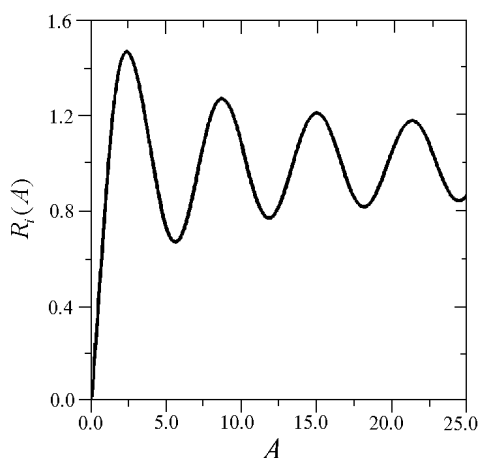


Рис.1.16. Осциллирующий характер зависимости  $R_i(A)$  интегрального коэффициента отражения от толщины кристалла.

## ВАЖНЕЙШИЕ СЛЕДСТВИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Поскольку дисперсионная поверхность по существу представляет собой изоэнергетическую поверхность в пространстве обратной решетки, анализ ее формы аналогичен анализу формы Ферми-поверхности вблизи границы зоны Бриллюэна [1,5,11,22,23].

В рассматриваемом двухволновом случае легко показать, что в плоскости рассеяния вблизи точки  $M$  (пересечения двух сфер распространения с плоскостью рассеяния) уравнения описывают гиперболу с асимптотами  $T_0$  и  $T_1$ , являющимися следами сфер распространения. Вблизи этой точки сферы мало отличаются от плоскостей, а их следы в плоскости рассеяния мало отличаются от прямых линий. Радиус сфер равен  $k\sqrt{1+\chi_0}$ , что соответствует распространению волн в однородной среде ( $k \approx 10^8 \tilde{n}^{-1}$ ) с показателем преломления  $\sqrt{1+\chi} \approx 1 + \frac{\chi_0}{2}$ . Так как  $\chi_0 < 0$ ,  $|\chi| \approx 10^{-5}$ , кристалл для рентгеновских волн является менее плотной средой, чем вакуум. На языке теории зон Бриллюэна каждой точке дисперсионной поверхности соответствует квазичастица, или, другими словами, блоховская волна с заданным квазиимпульсом, распространяющимся вдоль нормали к дисперсионной поверхности. На границе зоны Бриллюэна благодаря сильному брегговскому отражению дисперсионная поверхность расщепляется. Именно этот участок дисперсионной поверхности, похожий на гиперболический цилиндр, представляет интерес для анализа волновых полей в кристалле, находящемся вблизи брегговского положения. Как и всякая изоэнергетическая поверхность в пространстве



обратной решетки, дисперсионная поверхность перпендикулярна границе зоны Бриллюэна.

Двум листам дисперсионной поверхности соответствуют два типа блоховских волн (квазичастиц), различающихся знаком эффективной массы и величиной фазовой скорости. Разница в скоростях блоховских волн определяется величиной расщепления дисперсионной поверхности. Для точного брегговского положения расщепление минимально и соответственно равно расстоянию между вершинами гипербол

$$\Delta k_{min} = |\mathbf{K}^{-2}\mathbf{K}| \approx kC\sqrt{\chi_{-1}\chi_1} \cdot \sec\theta \quad (1.89)$$

Если  $k \approx 10^8 \tilde{n}i^{-1}$ , а  $|\chi| \approx 10^{-5}$ , величина расщепления оказывается порядка  $\Delta k_{min} \approx 10^3 \tilde{n}i^{-1}$ .

Распространение в кристалле двух типов блоховских волн с близкими волновыми векторами приводит к возникновению в суммарном волновом поле пространственных по глубине биений (аналогично биениям в системе двух связанных маятников) - на расстоянии  $L = \frac{2\pi}{|\Delta\mathbf{K}|}$  в направлении нормали к выходной поверхности происходит

перекачка энергии из проходящей волны в дифрагированную и обратно. Это явление получило название "маятникового эффекта"; период  $L$  в динамической теории называется экстинкционной длиной и определяется величиной

$$L = \frac{2\pi}{|\Delta\mathbf{K}|} = \frac{\lambda \cdot \cos\theta}{c\sqrt{\chi_H\chi_H^-}} \quad (1.90)$$

Это явление было предсказано еще Эвальдом в 1917 году, но экспериментально было обнаружено только в 1959 году Като и Лангом в виде полос равной толщины на клиновидных кристаллах [1,4,5,19].

Блоховские волны, принадлежащие разным листам дисперсионной поверхности, имеют существенно различные коэффициенты поглощения. Физическая причина этого различия состоит в том, что пучности волн *1-ого типа* точно попадают на узлы кристаллической решетки, в то время как пучности волн *2-ого типа* скользят между узлами решетки. Величина коэффициентов поглощения определяется соотношением

$$\mu_{1,2} = \frac{\mu_0}{\cos\theta} \cdot \left( 1 \pm C \cdot \frac{\chi_H''}{\chi_0''} \right) \quad (1.91)$$

Здесь  $\mu_0 = |\mathbf{K}| \cdot \chi_0'' = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \chi_0''$  - фотоэлектрический коэффициент поглощения;  $\chi_0'', \chi_H''$  - мнимая часть Фурье компонент поляризуемости. Два знака относятся к волнам *1-ого* и *2-ого типа*. Это различие в поглощении лежит в основе явления аномального прохождения рентгеновских лучей, открытого Борманом в 1941 году ("эффект Бормана") [1,4,5].

Если на идеальный кристалл, находящийся в точном брегговском положении, падает плоская монохроматическая волна, как уже говорилось выше, внутри кристалла возбуждается волновое поле, являющееся суперпозицией двух блоховских волн. Это соответствует возбуждению двух связанных точек на дисперсионной поверхности. В симметричном лауэвском случае этими точками будут вершины гипербол. Отклонение кристалла от точного брегговского положения будет приводить к смещению точек возбуждения вдоль ветвей дисперсионной поверхности и соответствующим поворотам волновых векторов блоховских волн двух типов (см. рис.1.17).

Следует подчеркнуть, что незначительным по величине поворотам кристалла внутри области динамического отражения (на углы порядка единиц угловых секунд) соответствуют повороты вектора фазовой скорости блоховских волн на угол порядка  $2\theta$  внутри треугольника Бормана, т.е. при дифракции имеет место еще один чрезвычайно важный "эффект углового усиления" с коэффициентом порядка  $-10^4 \div 10^5$ .

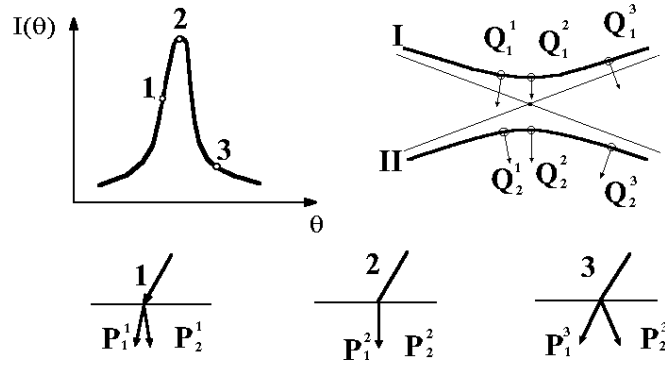


Рис.1.17.Схема, иллюстрирующая динамический эффект углового усиления. а)-кривая отражения, выделены рабочие точки 1,2,3 б)-дисперсионная поверхность, на которой показаны соответствующие точки возбуждения  $Q_1^1, Q_1^2, Q_1^3$ ;  $Q_2^1, Q_2^2, Q_2^3$ ; в)-участки кристалла и соответствующие направления групповых скоростей блоховских волн, для точек 1,2,3.

## ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ В КРИСТАЛЛАХ С ИСКАЖЕНИЯМИ. УРАВНЕНИЯ ТАКАГИ - ТОПЕНА

Проведенный выше анализ уравнения (1.70) достаточно трудно обобщить на случай деформированного кристалла. Однако, как отмечалось выше в 1.4.1., С.Такаги [27,28] предложил способ преобразования уравнения (1.70) в систему дифференциальных уравнений первого порядка.

Характеристики среды в волновом уравнении можно учесть через функцию поляризуемости  $\chi(\mathbf{r})$ . Будем описывать искажения кристалла в виде некоторого поля смещения  $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ , связанного с каким-либо дефектом, причем будем полагать, что искажения достаточно медленно меняются в пространстве, т.е. на расстояниях порядка экстинкционной длины, тогда вместо координаты  $\mathbf{r}$  необходимо записать  $\mathbf{r}-\mathbf{U}(\mathbf{r})$ , т.е.

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \chi_{hkl} \cdot e^{i(\mathbf{H}_{hkl} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{U}(\mathbf{r})))} = \sum_{hkl} \chi_{hkl} \cdot e^{i(\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{r})} \cdot e^{i(\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}))} \quad (1.92)$$

Первые два множителя, стоящие под знаком суммы, точно такие же, как и для идеального кристалла. Последний экспоненциальный множитель связан с полем смещений в искаженной решетке. Учитывая сказанное, решение уравнения для волнового поля в таком кристалле следует искать в виде [18-23]

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \mathbf{D}_{hkl} \cdot e^{i\{(\mathbf{K}_{hkl} \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{r})\}} \quad (1.93)$$

Если искажения достаточно слабо меняются на расстоянии экстинкционной длины т.е.  $\left| \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right| \ll 1$ , то после несложных, но достаточно громоздких преобразований уравнение (1.70) для случая двухволнового рассеяния, когда на сферу Эвальда попадает только два узла обратной решетки, примет вид

$$\begin{cases} -2i \left( \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{D}_0 = \chi_{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_1 \\ -2i \left( \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{D}_1 = \chi_1 \mathbf{C} \mathbf{D}_0 - \alpha(r) \cdot \mathbf{D}_1 \end{cases}, \quad (1.94)$$

где  $\alpha(\mathbf{r}) = \alpha_0 - 2\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot (\mathbf{H}_{\text{нкл}}, \mathbf{U}(\mathbf{r}))$  - функция, описывающая локальные разориентации решетки, связанные с полем  $\mathbf{U}(\mathbf{r})$  дефекта. Полученную систему уравнений можно переписать в матричной форме

$$\begin{vmatrix} 2i\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right) & \chi_{-1} \\ \chi_1 & 2i\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right) - \alpha(\mathbf{r}) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{D}_0 \\ \mathbf{D}_1 \end{vmatrix} = 0, \quad (1.95)$$

или в форме телеграфного уравнения вида

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + j \frac{\alpha(\mathbf{r})}{2} \left( \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\chi^2}{4} \right] \cdot \mathbf{D}_j = 0 \quad (1.96)$$

Эта система впервые была получена в 1969 году С.Такаги [27,28] и носит его имя. Для случая дифракции электронов проведенные выше рассуждения и выводы остаются в основном в силе с той лишь разницей, что исходными уравнениями будут не уравнения Максвелла, а уравнение Шредингера и в решении будут фигурировать волновые функции электронов. Существенным отличием для электронов будет очень малая величина дифракционного угла ( $\theta \approx 10^{-2} \text{ рад}$ ), что приводит к возможности использования так называемого "колонкового приближения". Малость дифракционного угла позволяет пренебречь зависимостью волновых функций в задачах дифракции от координаты  $x$  (в установке принятой на стр.43). В этом приближении для решения задач о дифракции электронов в кристаллах содержащих дефекты могут быть выведены уравнения аналогичные уравнениям (1.94). Они имеют следующий вид

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} \Psi_0(z) \\ \Psi_1(z) \end{pmatrix} = \frac{i\pi}{\xi_g} \cdot \begin{pmatrix} -w & 1 \\ 1 & w \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_0(z) \\ \Psi_1(z) \end{pmatrix} \quad (1.97)$$

Параметр  $w(\mathbf{r})$  описывает локальные разориентации кристаллической решетки связанные с дефектом и определяется выражением

$$w(\mathbf{r}) = \frac{\xi_g \mathbf{K}}{2\pi} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (1.98)$$

$\xi_g$  - комплексная длина экстинкции  $\frac{\pi}{\xi_g} = \frac{\pi}{\Lambda} + i\mu$ . Эти уравнения аналогичны уравнениям (1.94) для рентгеновского волнового поля и носят название уравнений Хови-Уэлана [16,31].

Уравнения Такаги (Хови-Уэлана) являются основой для расчетов изображения дефектов любого вида. Для большинства случаев дефектов кристаллической решетки решение этих уравнений может быть проведено лишь численно. Например, для случая упругого поля дислокаций функция  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  имеет достаточно сложный вид [37]

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \left\{ -\Omega \mathbf{b} - \frac{1-2\nu}{1-\nu} \cdot [\mathbf{t} \times \mathbf{b}] \cdot \ln|\mathbf{x}| + \frac{1}{1-\nu} \cdot [\mathbf{t} \times \mathbf{b}] \cdot \frac{|\mathbf{x}|}{|\mathbf{x}|^2} \cdot \mathbf{x} \right\} \quad (1.99)$$

Здесь  $\mathbf{x}$  - вектор, определяющий кратчайшее расстояние от оси дислокации до точки наблюдения  $r$ ,  $\Omega$  - телесный угол, под которым из точки  $r$  видна положительная сторона полуплоскости, границей которой является ось дислокации,  $\mathbf{t}$  - единичный вектор, определяющий ориентацию дислокации,  $\mathbf{b}$  - вектор Бюргера дислокации,  $\nu$  - коэффициент Пуассона. Для расчета дифракционного изображения какого-либо дефекта необходимо найти значения амплитуд поля  $\mathbf{D}_0$  и  $\mathbf{D}_1$  в узлах сетки  $(x_r, y_r)$ , на которую разбивается все поле дифракционной топограммы. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла для случая

неполяризованного излучения будет определяться сложением интенсивностей для двух поляризаций

$$I(x, y) = \frac{1}{2} \cdot [|\mathbf{D}(x, y)|_{\sigma}^2 + |\mathbf{D}(x, y)|_{\pi}^2] \quad (1.100)$$

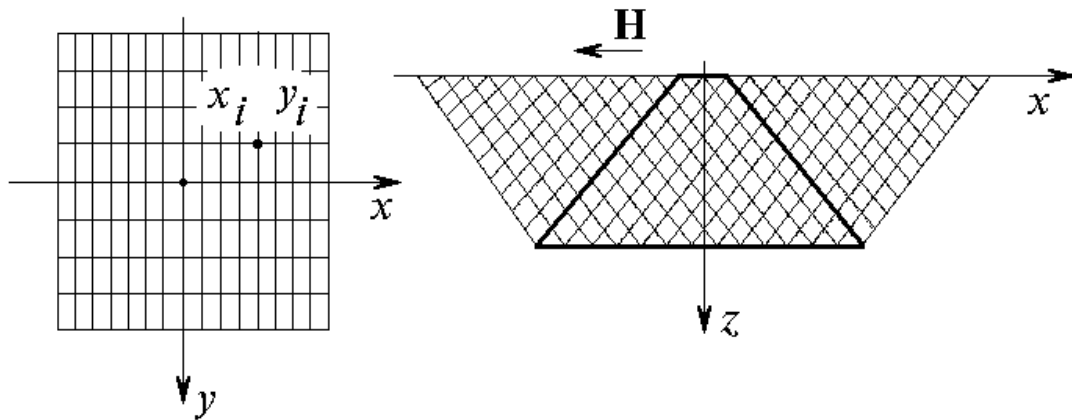


Рис.1.18. Сетка, в узлах которой вычисляется интенсивность на рентгеновской топограмме -а); сетка для проведения вычислений по методу конечных разностей в плоскости рассеяния -б).

Для решения уравнений подобного типа обычно используется метод конечных разностей [18-23]. Задача считается в точках сетки  $(x_p, y_p)$  для каждого фиксированного  $y_p$ , для двух значений поляризации, т.е. в каждом сечении, образованного дифракционными векторами  $\mathbf{K}_0, \mathbf{K}_1$  (так называемого треугольника Бормана). На рис.1.18 показаны схемы разбиения дифракционного изображения на элементы для численного расчета методом конечных разностей.

