

# Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей в кристаллах (лекция)



**В. А. Бушуев**

*Московский государственный университет  
имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*  
**e-mail: [vabushuev@yandex.ru](mailto:vabushuev@yandex.ru)**

Functional  
Nanomaterials



**БФУ** имени  
И. Канта

International  
Baltic School

**Вторая Балтийская школа “Методы и инструменты  
рентгеновских исследований”**  
**Калининград, 3-7 октября 2013 года**

**Дорогие коллеги !!!**

**Это не научный доклад в бешеном ритме.**

**Это ЛЕКЦИЯ !!!**

**Поэтому прошу задавать ЛЮБЫЕ вопросы**

**прямо во время чтения лекции !!!!**

# Краткий план:

1. **Общие сведения о рентгеновском излучении**
2. **Уравнения Максвелла**
3. **Кинематическое приближение**
4. **А так ли нам она нужна**, эта самая динамическая теория ??
5. **Основные положения** и уравнения динамической теории дифракции. **Два подхода** к этой теории.
6. **Граничные условия**. Геометрии Брэгга и Лауэ.  
**Коэффициенты отражения и прохождения.**
7. **Некоторые примеры**

## ...ОСМЕЛЮСЬ НАПОМНИТЬ, ЧТО...

Рентгеновские лучи (X-rays) – электромагнитное излучение с длиной волны  $\lambda \sim r_{\text{ат}} \sim d \sim 1$  Ангстрема =  $10^{-8}$  см = 0.1 нм.

**Именно поэтому они применяются для ....**

Энергия рентгеновских фотонов  $\hbar\omega \sim 10$  кэВ  $\gg$  энергии связи не слишком глубоких электронов

Открытие X-rays – Вильгельм Конрад Рентген (1895 г.)

**Нобелевская премия (первая в мире) – 1901 г.**

... **и это всегда приятно напомнить** другому физическому, но не рентгеновскому люду, а именно: оптикам, акустикам, магнетологам, радиофизикам, астрономам, гонцами за новыми элементарными частицами, искателями кварков и других темных и скрытых материй, энергий и действенных идей....)

...всегда надо “танцевать” от эксперимента...

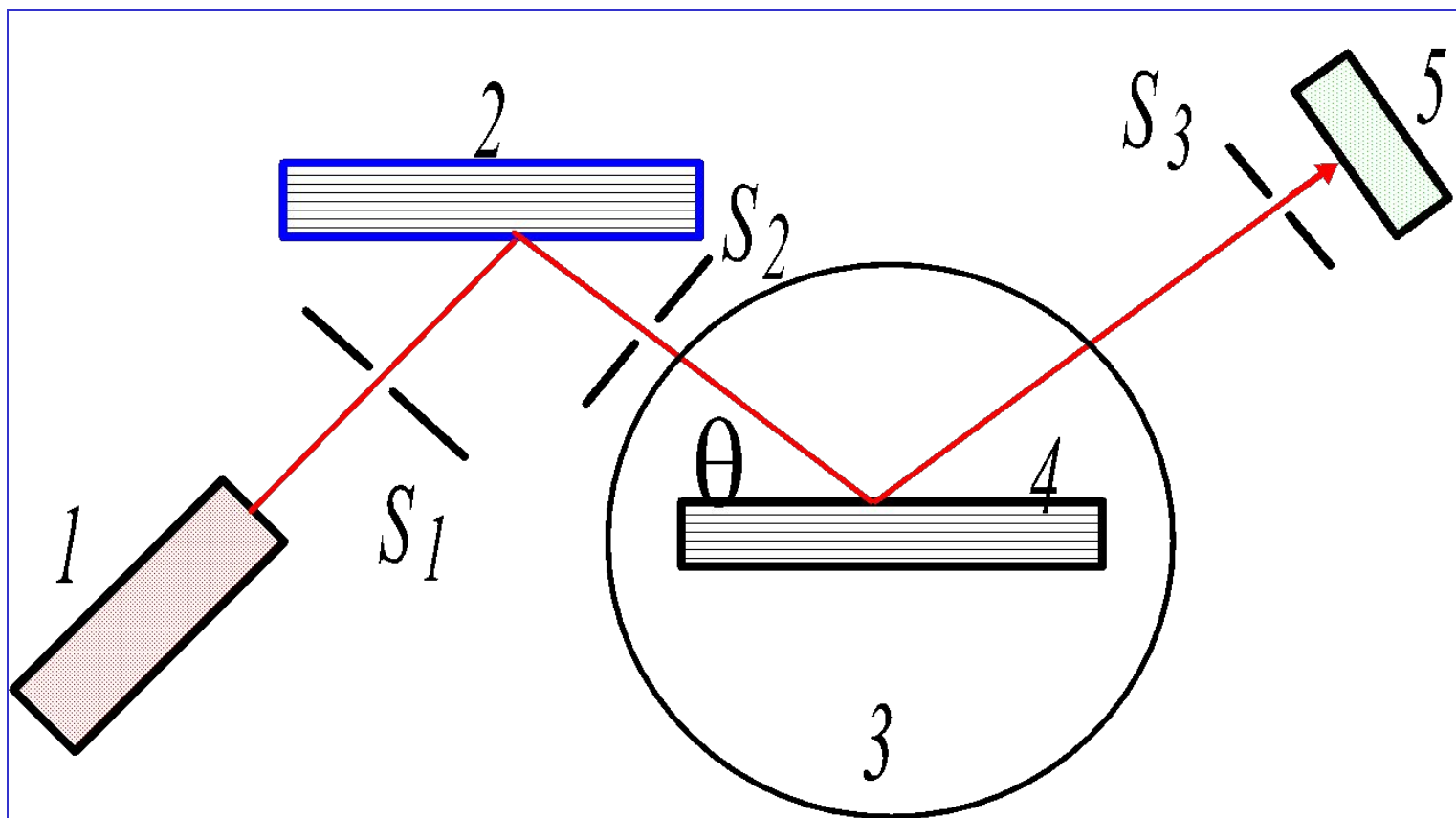


Схема эксперимента по регистрации кривой дифракционного отражения (КДО). 1 - рентгеновская трубка, СИ, РЛСЭ; 2 - кристалл-монокроматор, 3 - гониометр, 4 – исследуемый образец, 5 - детектор,  $S_{1-3}$  - щели.

# Микроскопические уравнения Максвелла

(поле + заряды в вакууме)

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \left( \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \mathbf{j} \right)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi \rho, \quad \operatorname{div} \mathbf{H} = 0.$$

$\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$  – вещественные не усредненные функции **координаты**  $\mathbf{r}$  и **времени**  $t$  (*никакой мистики*).

$\rho(\mathbf{r}, t) = e\psi\psi^*$  – плотность заряда,

$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  – ток зарядов, возмущенный эл.-магн. полем.

# Макроскопическое уравнение Максвелла

Введем поляризацию  $\mathbf{P}$  и индукцию  $\mathbf{D}$ :

$$\mathbf{j} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$$

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0.$$

Уравнение одно, а неизвестных – два ( $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{D}$ ) ??

## Материальное уравнение (линейный случай)

$$4\pi P^i(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \chi^{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') E^j(\mathbf{r}', t'),$$

$\chi^{ij}$  – поляризуемость среды (в общем случае тензор второго ранга).

Для стационарных сред:  $\tau = t - t'$ .  
Для кристаллов (*трансляционная симметрия*)

$$\begin{aligned} \hat{\chi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= \hat{\chi}(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{a}; \tau) = \\ &= \sum_{\mathbf{g}} \hat{\chi}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \tau) e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}'} \end{aligned}$$

- теорема Блоха



# Метод преобразований (интегралов) Фурье

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t) d^3\mathbf{k} d\omega,$$

где фурье-амплитуды (частотно-угловой спектр)

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega t) d^3\mathbf{r} dt.$$

**Вопрос:** что такое  $\mathbf{k}$  и  $\omega$  ??

.....**волновой вектор и частота** – **не правильно**

*Немые переменные интегр:*  $\mathbf{k} = \text{щ, ы; } 1, 2, 3$ ; синий, красный, серо-буро-малиновый и т.п.

## Простейший случай.

Излучение в вакууме ( $\mathbf{P} = 0$ ,  $\mathbf{D} = \mathbf{E}$ )

Из уравнения Максвелла следует, что

$$k^2 = (\omega/c)^2$$

Обычно отвечают, что  $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$ .

**Правильно, но не совсем...**

Еще говорят, что  $\mathbf{k} = \pm(\omega/c)\mathbf{n}$

Уже лучше, учтена возможность наличия встречных (обратных) волн, но все равно ответ не полный ... кое-что мы потеряли ...

Мы чуть не упустили такое решение:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''$$

(комплексный вектор, в вакууме, как это не звучит парадоксально !!!!)

Условие прежнее:


$$k^2 = k'^2 - k''^2 + 2i\mathbf{k}'\mathbf{k}'' = \omega^2/c^2$$

Отсюда:

$$k'^2 - k''^2 = k^2;$$

$$\mathbf{k}'\mathbf{k}'' = 0.$$

**Это плоская неоднородная (эванесцентная) волна. Поверхности равных фаз и амплитуд взаимно ортогональны.**

$$4\pi\mathbf{P}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{g}} \hat{\chi}_{-\mathbf{g}}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{g}, \omega),$$


где

$$\hat{\chi}_{\mathbf{g}}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\rho \int_0^{\infty} d\tau \hat{\chi}_{\mathbf{g}}(\rho, \tau) \exp(-i\mathbf{k}\rho + i\omega t).$$

В рентгеновском диапазоне вдали от краев поглощения связь между  $\mathbf{P}$  и  $\mathbf{E}$  **локальная и изотропная (!!):**

$$4\pi\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \chi(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

Индукция  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \varepsilon\mathbf{E}$ , где  $\varepsilon = 1 + \chi$ ,

$\varepsilon$  - **диэлектрическая проницаемость.**

При больших частотах смещение электрона  $\mathbf{x}$  определяется вторым законом Ньютона  $m d^2 \mathbf{x} / dt^2 = e \mathbf{E}$ . Отсюда смещение  $\mathbf{x} = -(e/m\omega^2) \mathbf{E}$ , а поляризация  $\mathbf{P} = e \mathbf{x} n(\mathbf{r})$ , где  $n(\mathbf{r})$  - плотность электронов.

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi n(\mathbf{r}) e^2}{m\omega^2}$$

Фурье-компоненты поляризуемости  $\chi_h$

$$\chi_h = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} \chi(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

где  $V_c$  - объем элементарной ячейки.

$$\chi_h = -\frac{n_0 r_0 \lambda^2}{\pi} F_h$$

где  $n_0 = V_c^{-1}$  - плотность элементарных ячеек,  $r_0 = e^2/mc^2$

Оценим  $\chi_0$  **для кристалла кремния** (параметр решетки  $a = 5.43 \text{ \AA}$ , 8 атомов в ячейке, 14 электронов в атоме). Так как  $r_0 = 2.8 \times 10^{-13} \text{ см}$ ,  $n_0 = 1/a^3 = 6.25 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ,  $F_0 = 8 \times 14$ , то для  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения ( $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ ) получим, что

$$\chi_0 = -1.5 \times 10^{-5}.$$

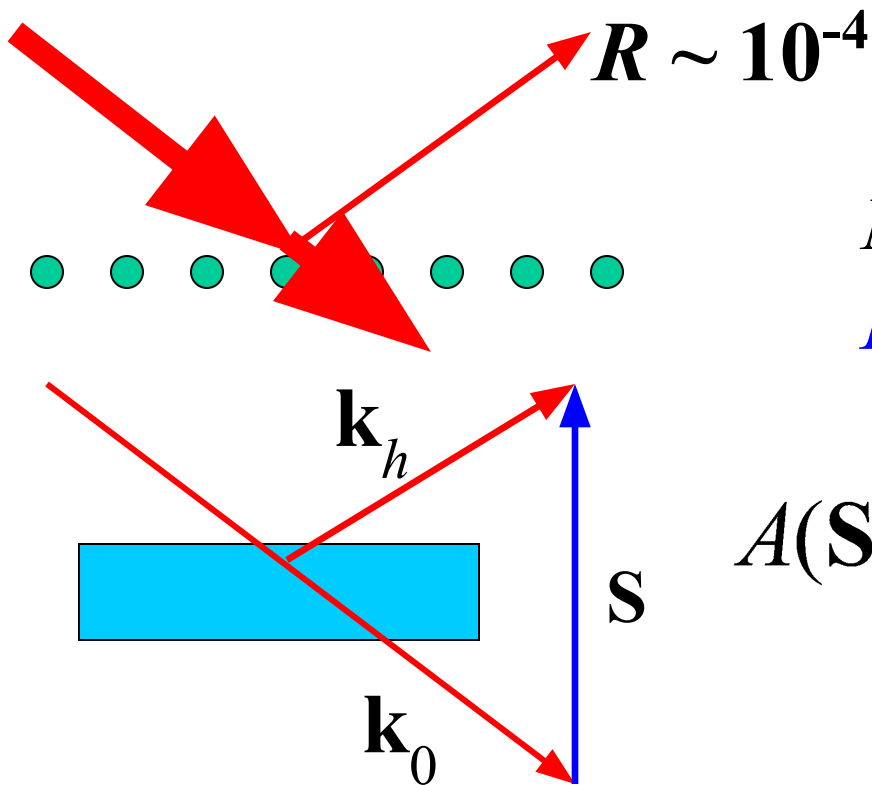
Видно, что величина  $\chi_0$  крайне **мала и отрицательна**. Последнее приводит, в частности, к явлению полного внешнего отражения (**ПВО**) РЛ (в отличие от полного внутреннего отражения в оптике видимого диапазона, для которого  $\chi_0 > 0$ ).

Есть два понятия (подхода) в физике рассеяния рентгеновских лучей:

1. **Кинематическая теория** (а лучше и правильнее сказать – **приближение**)
2. **Динамическая теория** (как наиболее точная и адекватная)

# Аксиомы кинематической теории

1. Пренебрегаем поглощением ( $\mu l \ll 1$ )
2. Пренебрегаем преломлением ( $\Delta\theta \sim 1-5$  угл. сек)
3. Пренебрегаем влиянием рассеянной волны на проходящую волну, т.е.  $R \ll 1$  (однократное рассеяние).



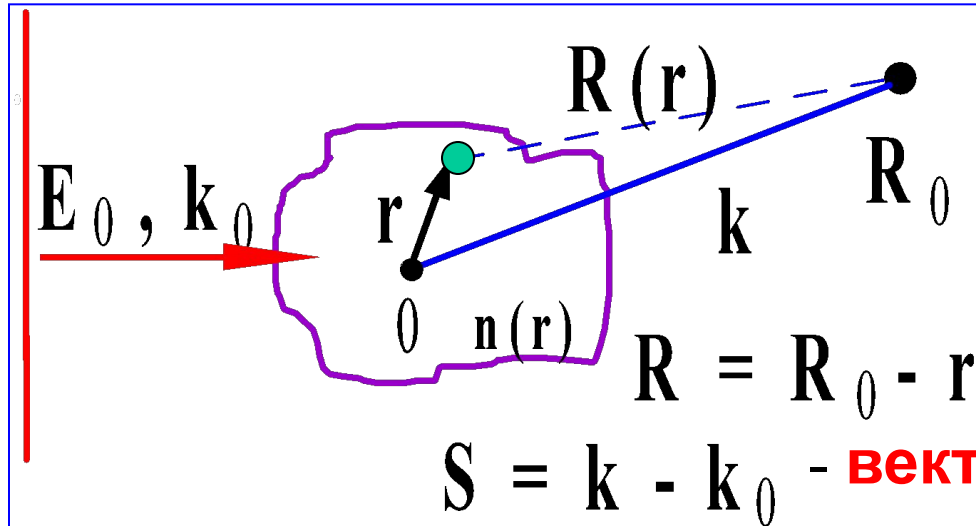
$N \ll 1/R = 10^4$ , т.е. толщина  
 $L = Nd \ll 3$  мкм.

$$A(\mathbf{S}) = \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{S}) \exp(i\mathbf{S}\mathbf{R}_n)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$$



# Кинематическое рассеяние



$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \dots \quad (E_1 \ll E_0)$$

$$\Delta \mathbf{E}_1 + k^2 \mathbf{E}_1 = - \underline{k^2 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{E}_0}$$

$$E_1(R_0) = -E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\mathbf{r}) \frac{e^{ikR}}{R} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad \text{- первое Борновское приближение}$$

В дальней зоне (**область Фраунгофера**)  $R \approx R_0 - (\mathbf{R}_0/R_0)\mathbf{r}$

$$E_1(\mathbf{S}) \propto \int_{-\infty}^{\infty} n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{S}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Если бы знать фазу, то можно из обратного фурье-преобразования восстановить 3D-строение объекта  $n(\mathbf{r})$  !!! (см. ниже)

$$F_h = \sum_a f_h^{(m)} \exp(-W_h^{(m)}) \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r}_m),$$

$$f_h^{(m)} = \int_m n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Здесь  $F_h$  – структурная амплитуда,  
 $f_h^{(m)}$  – атомный фактор рассеяния  $m$ -го атома,  
 $\mathbf{r}_m$  – координата  $m$ -го атома в элементарной ячейке,  
 $\exp(-W_h^{(m)})$  – тепловой фактор Дебая-Валлера.

Более строгая теория приводит к

$$f_h = f_{h0} + \Delta f_h' + i\Delta f_h'',$$

где  $f_{h0}$  – его потенциальная часть,  $\Delta f_h'$  и  $\Delta f_h''$  – дисперсионные поправки (их вклад возрастает с приближением энергии квантов к энергиям электронных переходов).

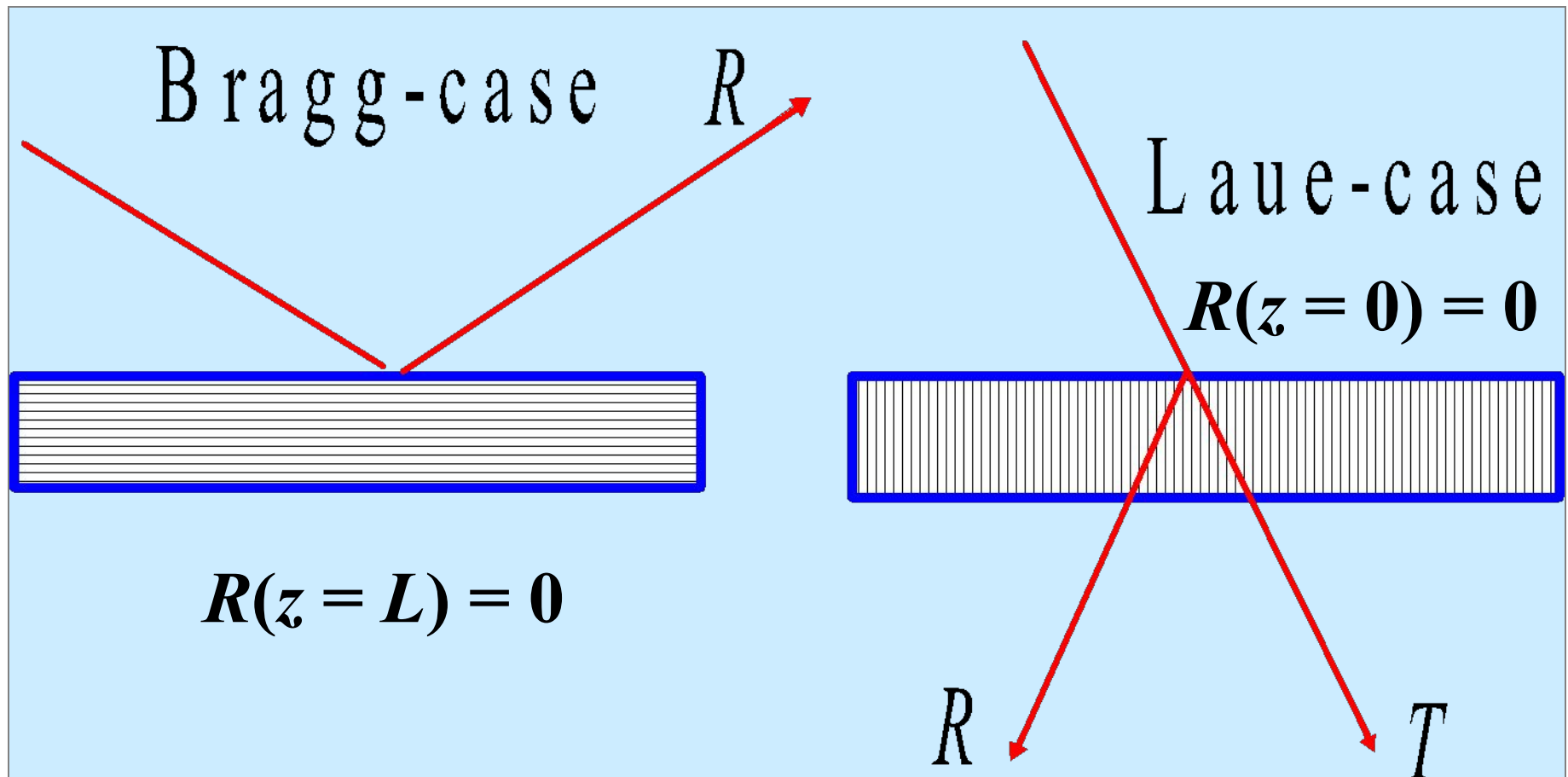
# Динамическая дифракция

Здесь самосогласованным образом учитывается все:

1. Поглощение,
2. Преломление, иными словами – **граничные условия** !!
3. И самое главное – **многократность** процессов рассеяния

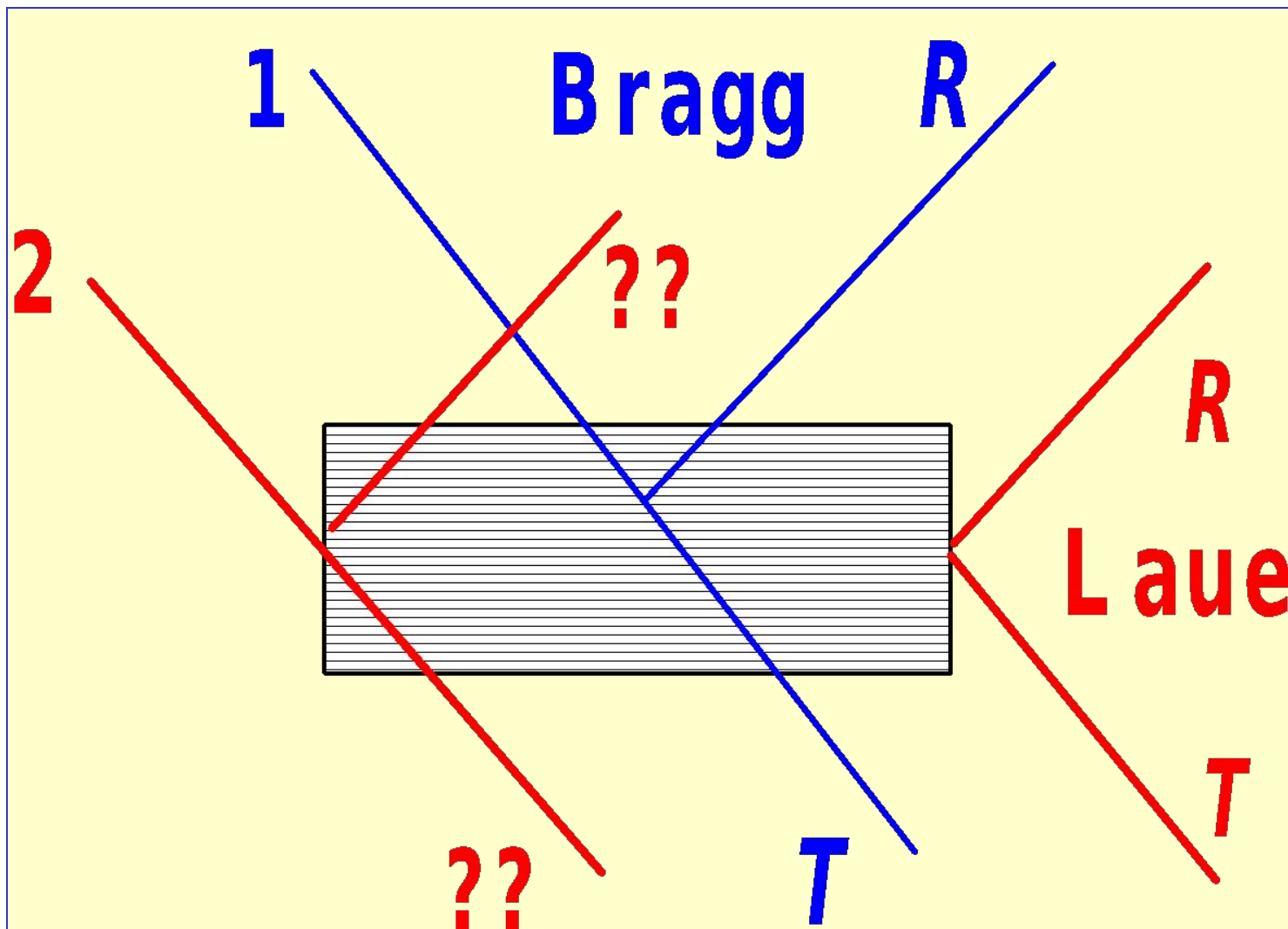


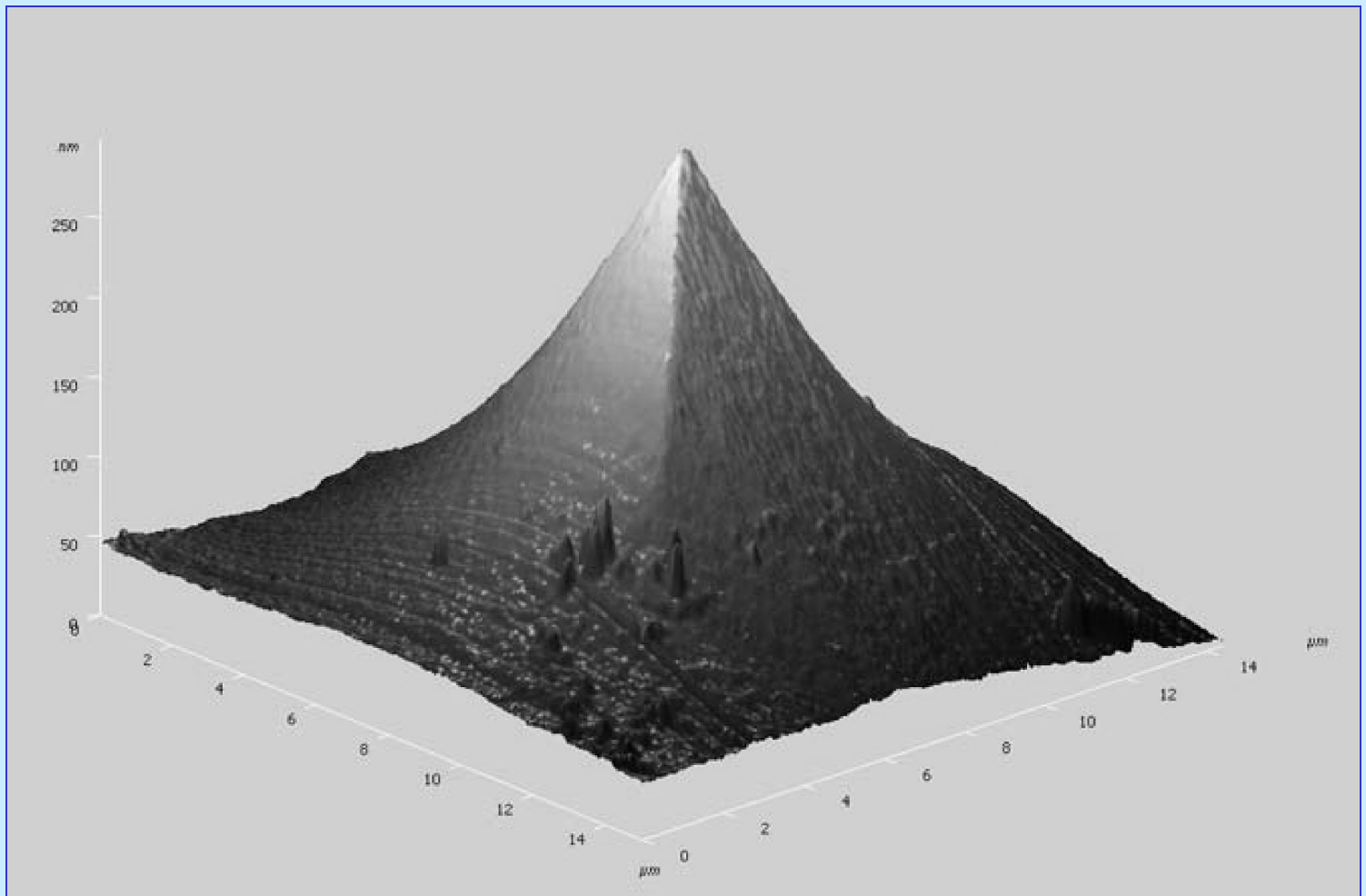
# Граничные условия



**Две схемы дифракции:** геометрия **Брэгга** (“на отражение”) и геометрия **Лауэ** (“на прохождение”).

# Проблемы в динамической теории: (даже в случае идеальных кристаллов)

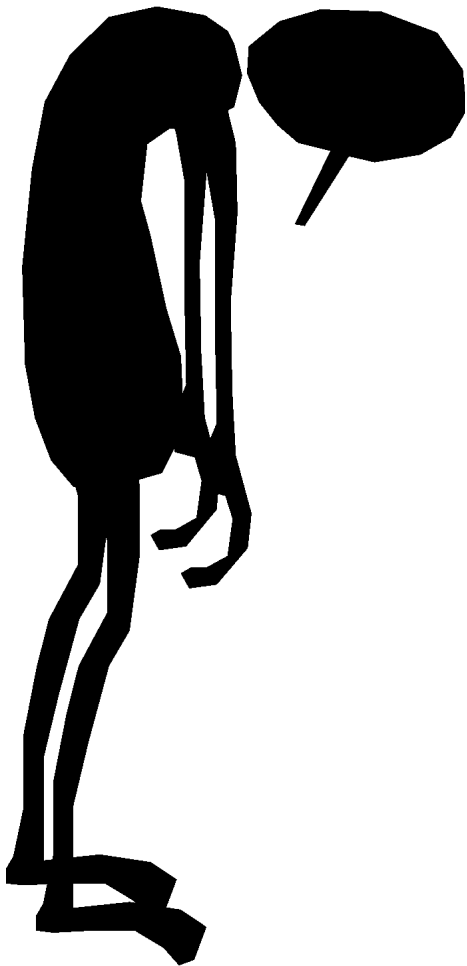




Y. Feldman, V. Lyahovitskaya, G. Leitus, I. Lyubomirsky,  
E. Wachtel, **V.A.Bushuev**, Yu.Rosenberg & G.Vaughan  
Synchrotron radiation–induced crystallization of amorphous Barium  
Titanate Oxide membranes //

**Appl. Phys. Lett. 95, 051919 (2009).**

В итоге мы приходим к таким состояниям:



....а в “кинематике” все просто: (!!!)

$$A(\mathbf{S}) = \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{S}) \exp(i\mathbf{S}\mathbf{R}_n)$$

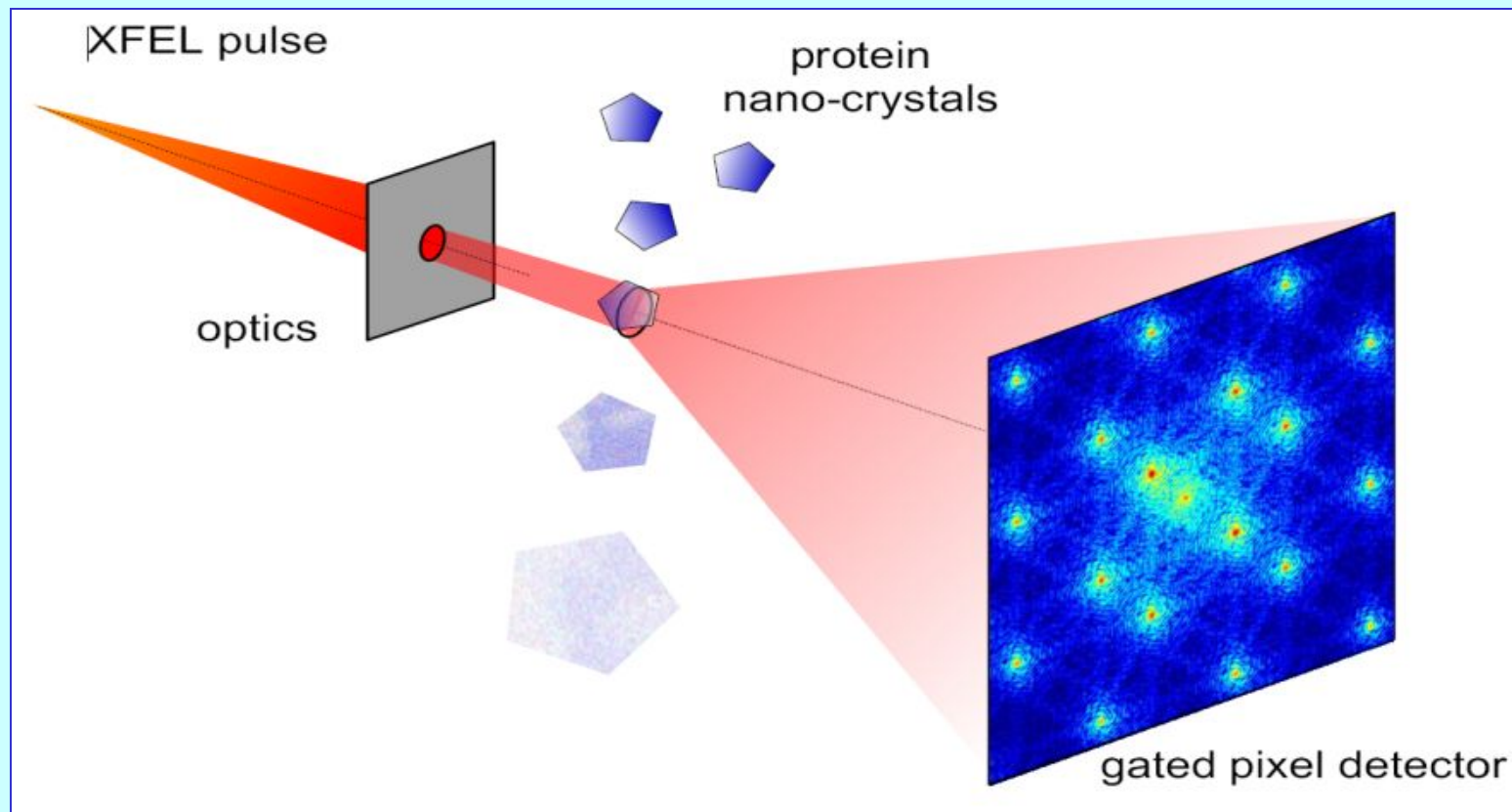
$$E_1(\mathbf{S}) \propto \int_{-\infty}^{\infty} n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{S}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

... А так как объекты малы, то и возникает **крамольная мысль** – **а так ли нам она нужна** эта самая динамическая теория ??



# Когерентная рентгеновская дифракция

## (безлинзовая X-ray микроскопия)



**Price to pay:**



**To develop methods to solve:  
Inverse and Phase Problem in  
Scattering**

# Преобразования Фурье

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(q) \exp(iqx) dq \quad F(q) = A(q) e^{i\varphi(q)}$$

**Что важнее –  
амплитуда или фаза поля ??**

Есть две фотографии – Исаак Ньютон и Бритни Спирс.  
...Оцифровываем изображения и делаем прямые и  
обратные Фурье-преобразования.....

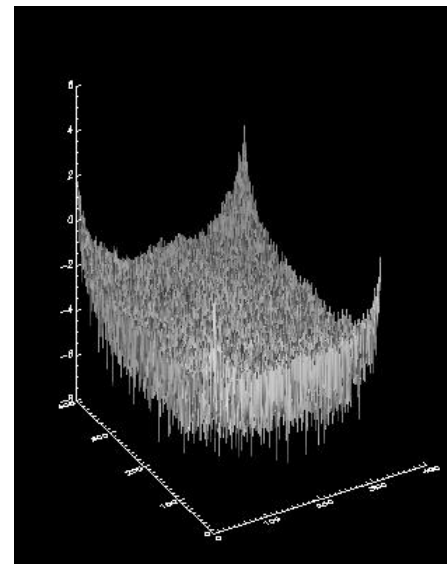
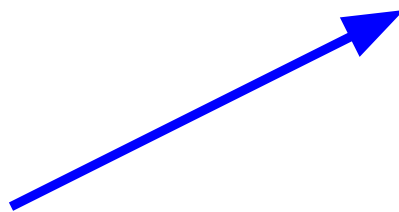
$$\mathbf{F} = \mathbf{A}(\mathbf{Ньютон}) \exp[i\varphi(\mathbf{Бритни Спирс})]$$

**Что (кто) получится ???!**

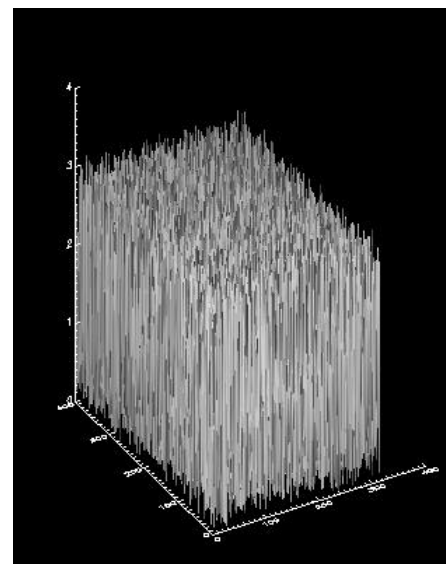
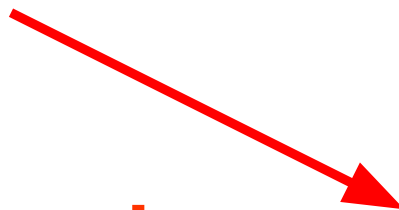
# Прямое Фурье-преобразование



Фурье-амплитуды



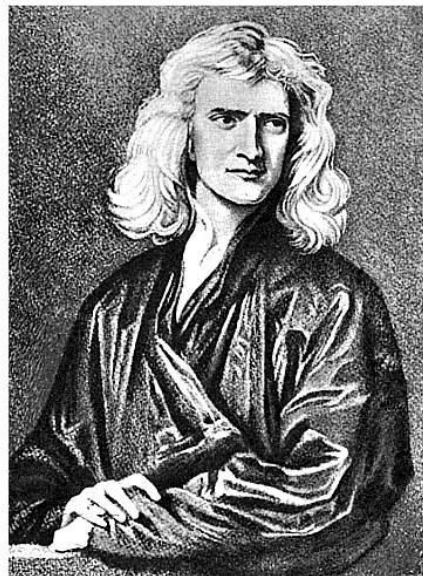
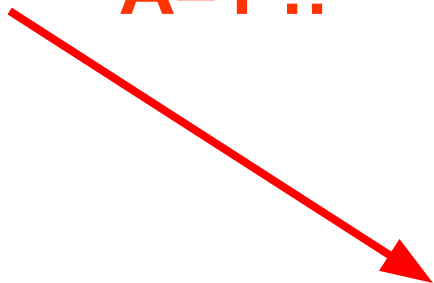
Фурье-фазы



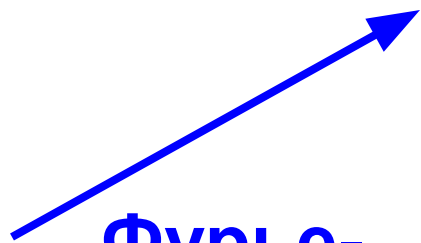
# Теперь переходим в прямое пространство



Фурье-  
фазы, а все  
 $A=1$  !!

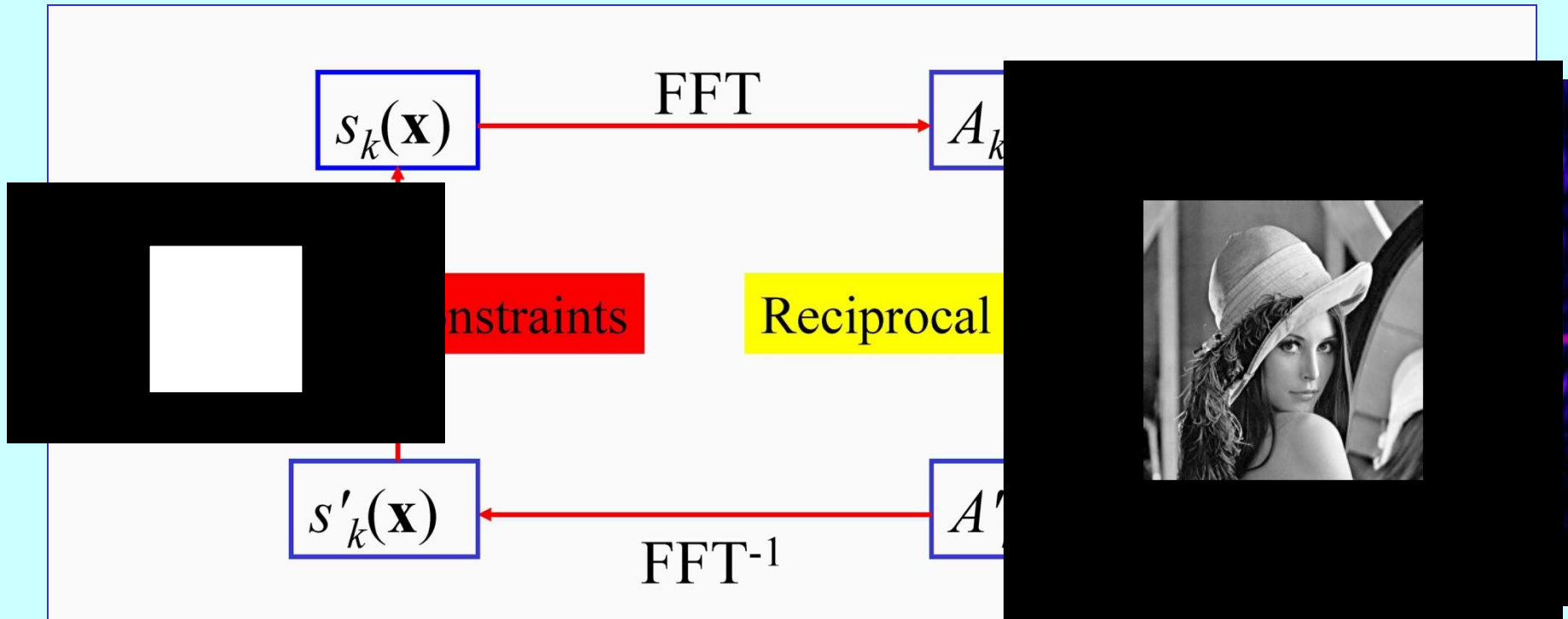


Исаак Ньютон



Фурье-  
амплитуды

# Итерационный алгоритм восстановления фазы



Real space constraints:



Reciprocal space constraint:

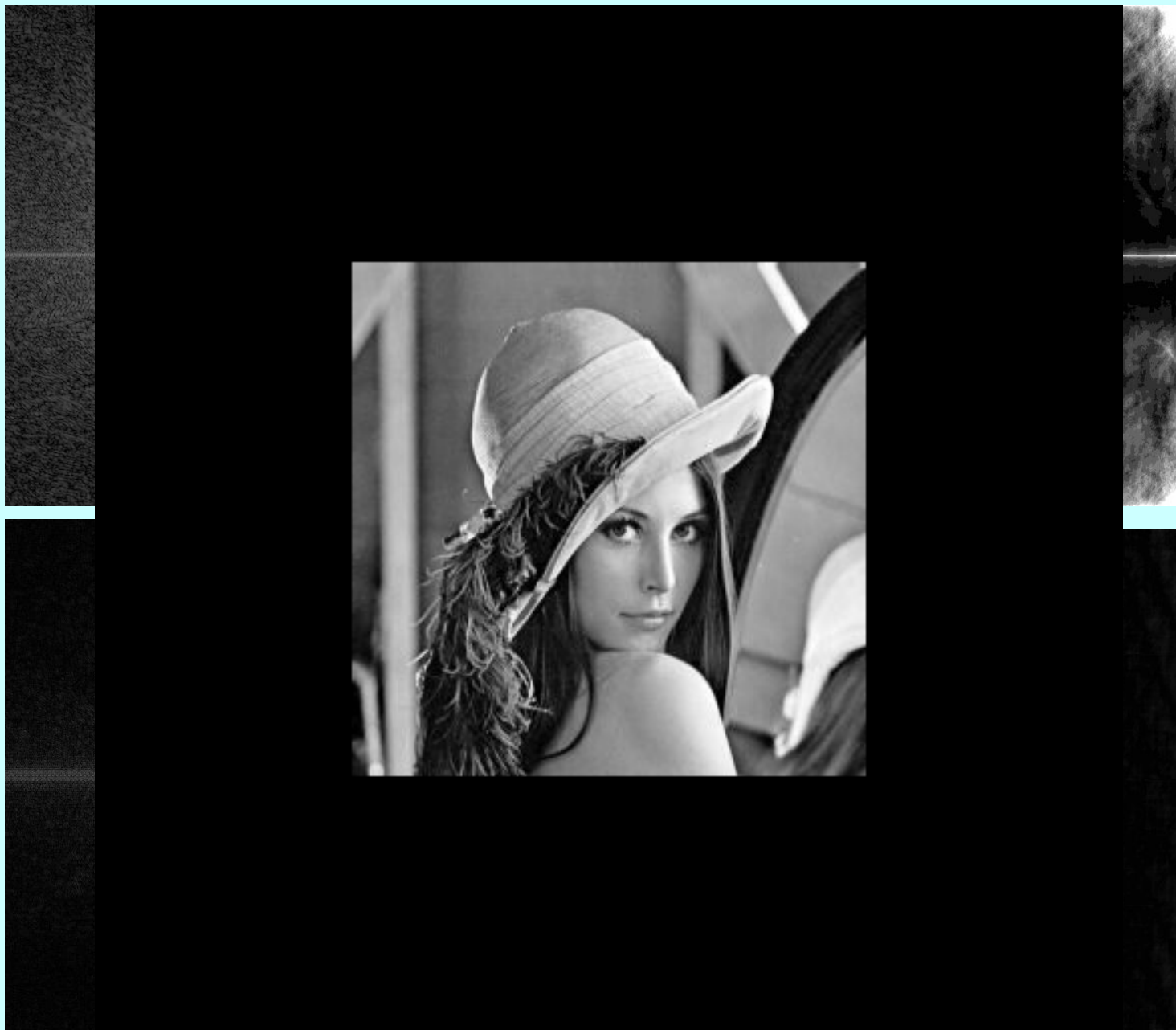
$$|A_k(\mathbf{q})| \rightarrow \sqrt{I_{exp}(\mathbf{q})}$$

R.W.Gerchberg & W.O. Saxton, *Optic* (1972) **35**, 237

J.R. Fienup, *Appl Opt.* (1982). **21**, 2758

R.P. Millane & W.J. Stroud, *J. Opt. Soc. Am.* (1997) **A14**, 568

# Пример реконструкции (I. Vartanyants, A. Efano, DESY, 2010)



Замена  
амплитуды

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}).$$

**Поле в кристалле**

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_h \mathbf{E}_h \exp(i\mathbf{q}_h \mathbf{r}).$$

где  $\mathbf{q}_h = \mathbf{q}_0 + \mathbf{h}$

$$\text{rot rot}\mathbf{E} = \text{grad div}\mathbf{E} - \Delta\mathbf{E}$$

**Основное уравнение динамической теории:**

$$\Delta\mathbf{E} + k_0^2\mathbf{E} = -k_0^2(\chi\mathbf{E}),$$

где  $k_0 = \omega/c = 2\pi/\lambda$  – величина волнового вектора волны в вакууме с частотой  $\omega$  и длиной волны  $\lambda$  (волновое число).

... Все это, конечно, хорошо, однако давно пора вернуться к основной теме лекции – к динамической теории дифракции

## Есть два подхода

### 1. Метод дисперсионного уравнения:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{A} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}),$$

где  $\mathbf{A} = \text{const}$ ,  $\mathbf{k}$  – **неизвестный** вектор.

### 2. Метод уравнений Такаги:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_{vac} \mathbf{r}),$$

где  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  – **неизвестная** медленно меняющаяся функция,  $\mathbf{k}_{vac}$  - известная (как в вакууме).



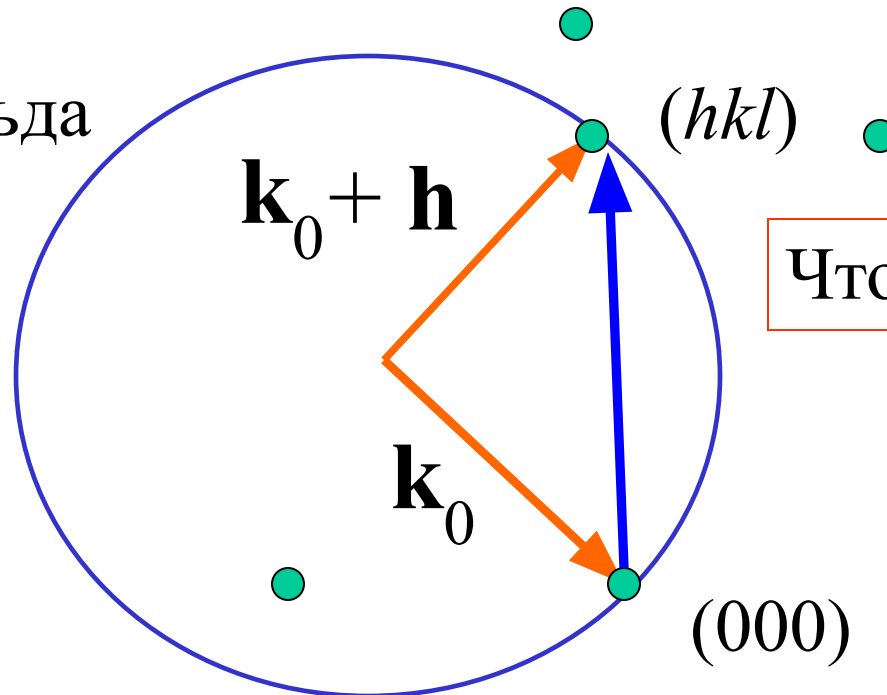
# Основное уравнение динамической теории

где

$$\delta_h \mathbf{E}_h = \sum_G \chi_{h-G} \mathbf{E}_G,$$

$$\delta_h = (q_h^2 - k_0^2) / k_0^2.$$

Сфера Эвальда



Что надо найти ??

$\mathbf{E}_h, q_h$

# Дисперсионное уравнение в двухволновом приближении

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_0 E_0 \exp(i\mathbf{q}_0 \mathbf{r}) + \mathbf{e}_h E_h \exp(i\mathbf{q}_h \mathbf{r}),$$

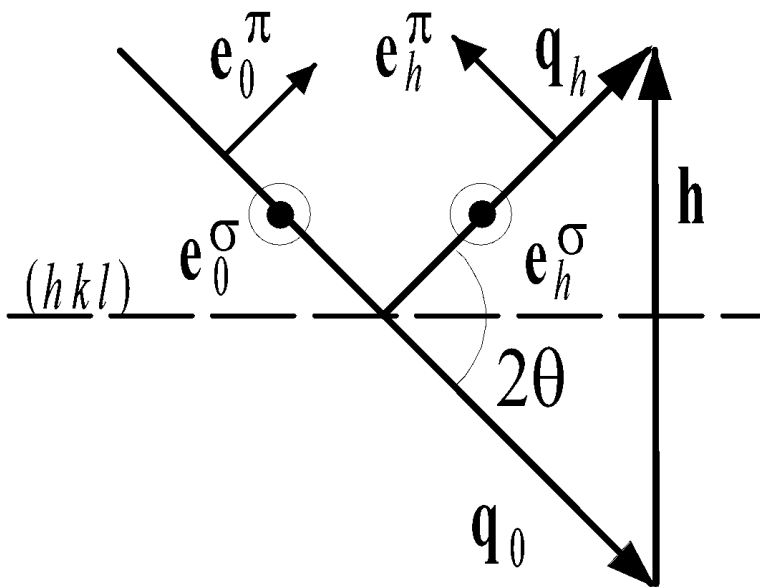


Рис. 3

$$(\delta_0 - \chi_0)E_0 - C\chi_{-h}E_h = 0,$$

$$(\delta_h - \chi_0)E_h - C\chi_h E_0 = 0,$$

$C = 1$  для  $\sigma$ -поляризации и  
 $C = \cos 2\vartheta_B$  для  $\pi$ -поляризации.

$$(\delta_0 - \chi_0)(\delta_h - \chi_0) - C^2 \chi_h \chi_{-h} = 0,$$

$$\mathbf{q}_0 = \mathbf{k}_0 + k_0 \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{n}$$

(!!!!)

$$(2\gamma_0 \varepsilon - \chi_0)E_0 - C \chi_{-h} E_h = 0,$$

$$(2\gamma_h \varepsilon - \alpha - \chi_0)E_h - C \chi_h E_0 = 0,$$

$$(2\gamma_0 \varepsilon - \chi_0)(2\gamma_h \varepsilon - \alpha - \chi_0) - C \chi_h \chi_{-h} = 0,$$

$$\gamma_0 = k_{0z} / k_0, \quad \gamma_h = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{h})_z / k_0.$$

В геометрии дифракции Брэгга  $\gamma_h < 0$ , в случае Лауэ  $\gamma_h > 0$ .

$$\alpha = [k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{h})^2] / k_0^2$$

Учтем, что  $h = 2k_0 \sin \vartheta_B$ , получим

$$\alpha = 2\Delta\vartheta \sin 2\vartheta_B,$$

где  $\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_B$

## Два корня решения дисперсионного уравнения

$$\varepsilon_{1,2} = (1/4\gamma_0) \{ \chi_0(1+b) + \alpha b \pm [(\chi_0(1-b) - \alpha b)^2 + 4bC^2\chi_h\chi_{-h}]^{1/2} \},$$

где  $b = \gamma_0/\gamma_h$  - коэффициент асимметрии брэгговского отражения. В геометрии Брэгга  $b < 0$ , в случае Лауэ  $b > 0$ .

Два корня – автоматически **ДВЕ** проходящих и **ДВЕ** дифрагированных волны !!!!

$$R_{1,2} = E_h^{(1,2)}/E_0^{(1,2)} = (2\gamma_0\varepsilon_{1,2} - \chi_0)/C\chi_{-h}$$

$$\gamma_0 = \sin(\psi + \theta_B), \quad \gamma_h = \sin(\psi - \vartheta_B).$$

# Геометрия Брэгга

Граничные условия для амплитуд полей:

$$E_0(z = 0) = 1, \quad E_h(l) = 0.$$

Поле в любой точке кристалла:

$$E_g(\mathbf{r}) = \exp[i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})\mathbf{r}][E_{g1} \exp(ik_0 \varepsilon_1 z) + E_{g2} \exp(ik_0 \varepsilon_2 z)],$$

где  $g = 0$  (проходящая волна),  $g = h$  (дифрагированная).

$$\text{Im}(\varepsilon_1)\text{Im}(\varepsilon_2) < 0 \quad \text{!!!!}$$

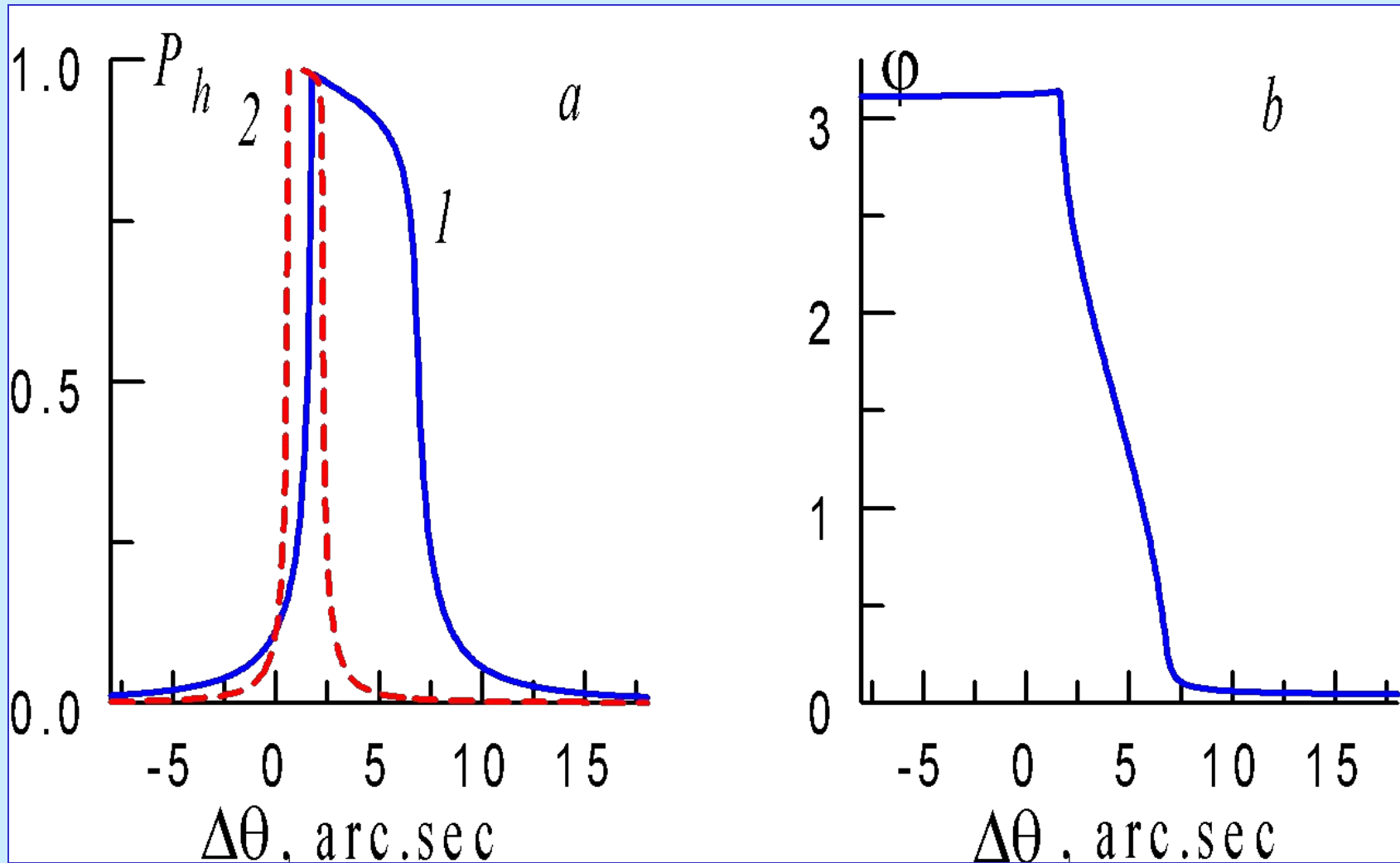
## Коэффициент отражения

$$E_{01} = 1/(1 - p), \quad E_{02} = -p/(1 - p), \quad E_{g1,2} = R_{1,2}E_{01,2},$$

$$p = (R_1/R_2)\exp[ik_0(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)l].$$

$$R \equiv E_h(0)/E_0(0) = (R_1 - pR_2)/(1 - p).$$

$$P_h(\Delta\vartheta) = (\gamma_h/\gamma_0)|R|^2 \quad (\text{КДО})$$



a) - кривые дифракционного отражения (220) излучения  $\text{CuK}_{\alpha}$  (1) и  $\text{AgK}_{\alpha}$  (2) от толстого кристалла кремния,  $b = 1$ , b) - зависимость фазы отражения от угловой отстройки.

$\Delta\vartheta_B = C|\chi_h| / b^{1/2} \sin 2\vartheta_B$  – ширина КДО.

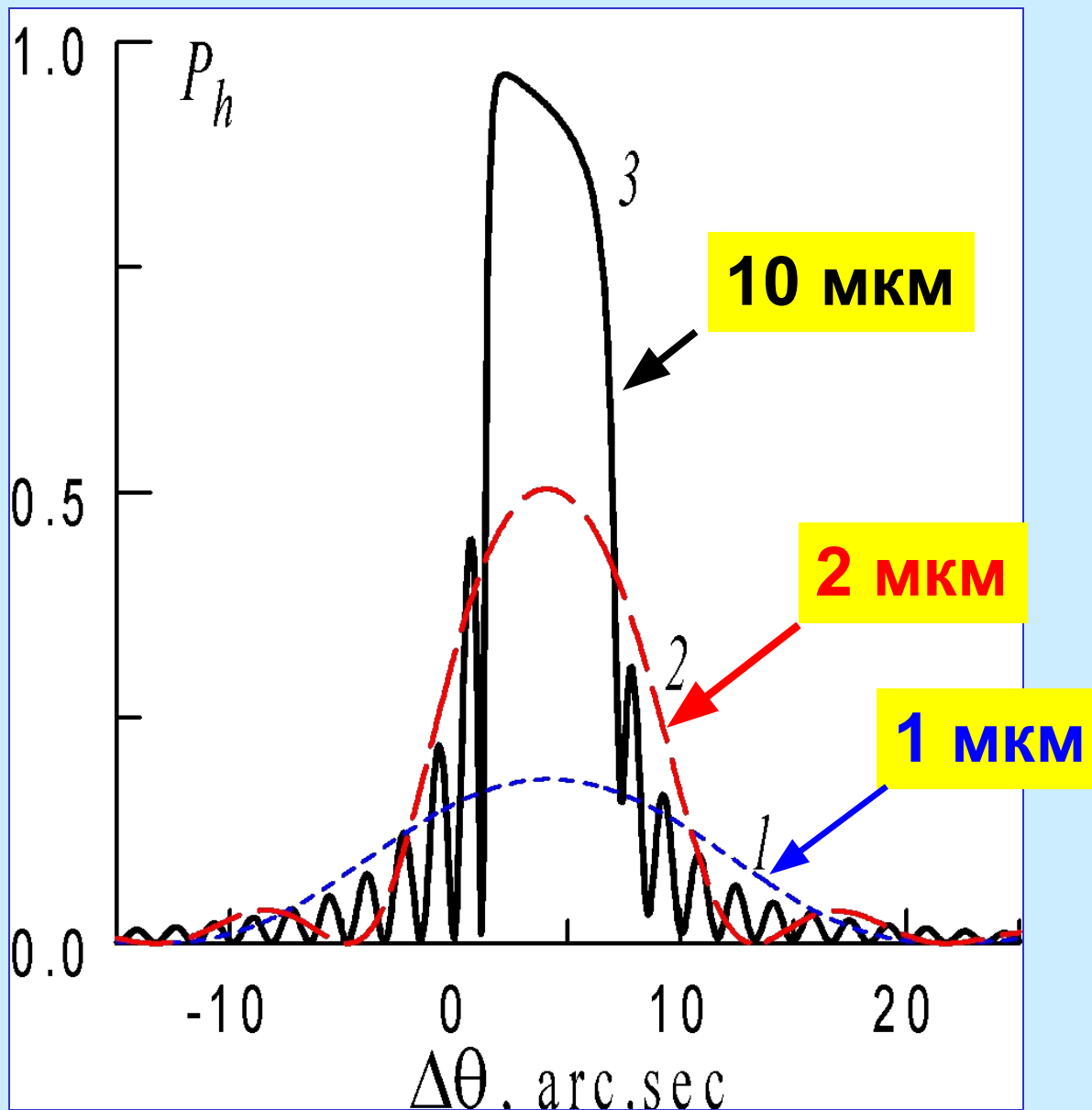
Типичная ширина КДО  $\Delta\theta_B \sim 0.1 - 10$  угл. сек

$\Lambda = \lambda(\gamma_0\gamma_h)^{1/2} / \pi C|\chi_h|$  - глубина экстинкции.

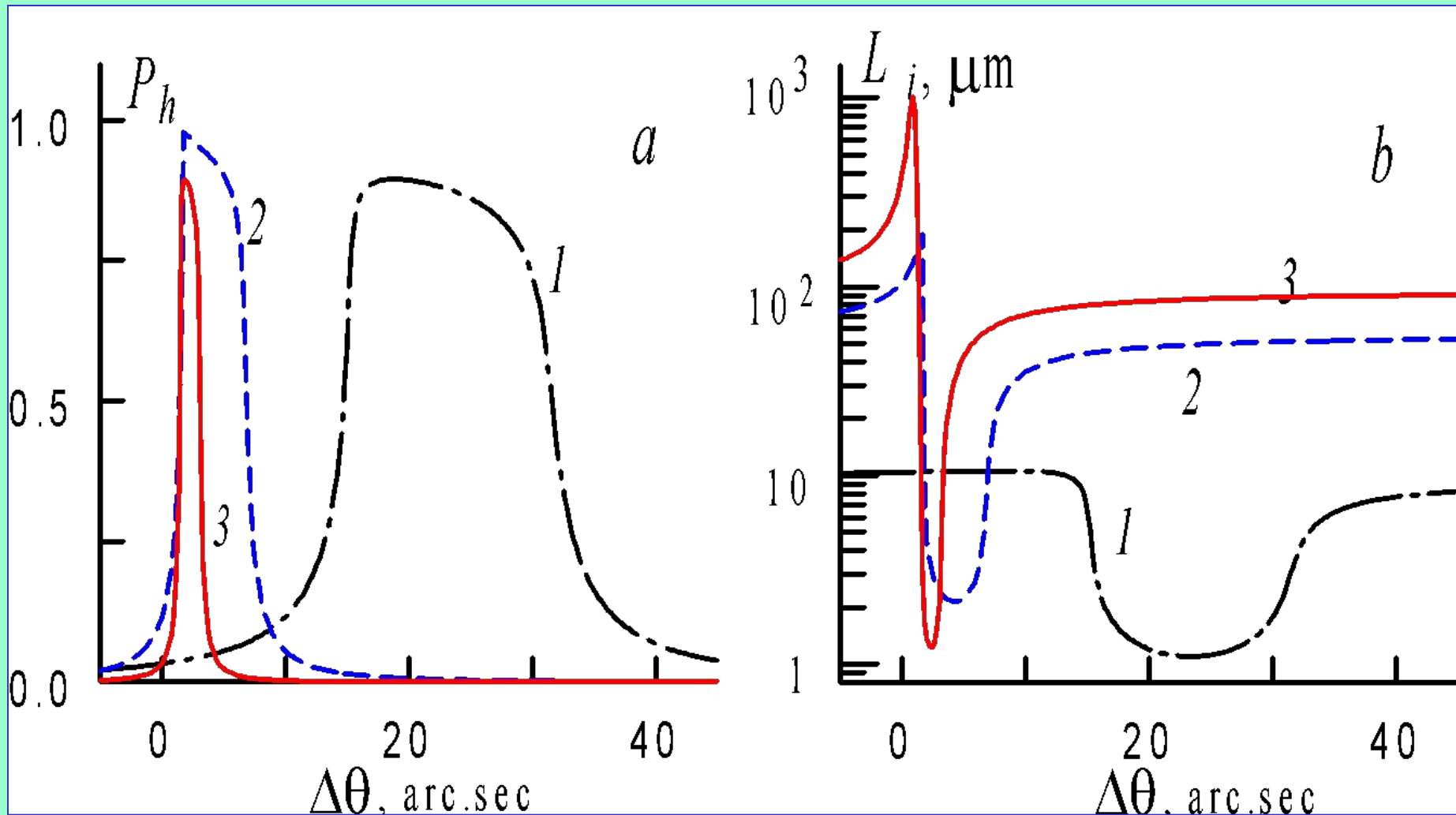
Типичная глубина экстинкции  $\Lambda \sim 1 - 10$  мкм

$$\Delta\theta_B = \frac{\lambda}{\Lambda} \frac{\gamma_h}{\pi \sin 2\theta_B}$$





КДО  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения от кристалла кремния с толщиной  $l = 1 \mu\text{m}$  (1),  $2 \mu\text{m}$  (2) и  $10 \mu\text{m}$  (3); симметричное отражение (220).



Кривые дифракционного отражения (220)  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения от кристалла кремния (a) и угловые зависимости глубины проникновения РЛ в кристалл (b). Коэффициент асимметрии отражения  $b$ : кривые 1 - 0.1, 2 - 1, 3 - 10.

# Геометрия дифракции Лауэ

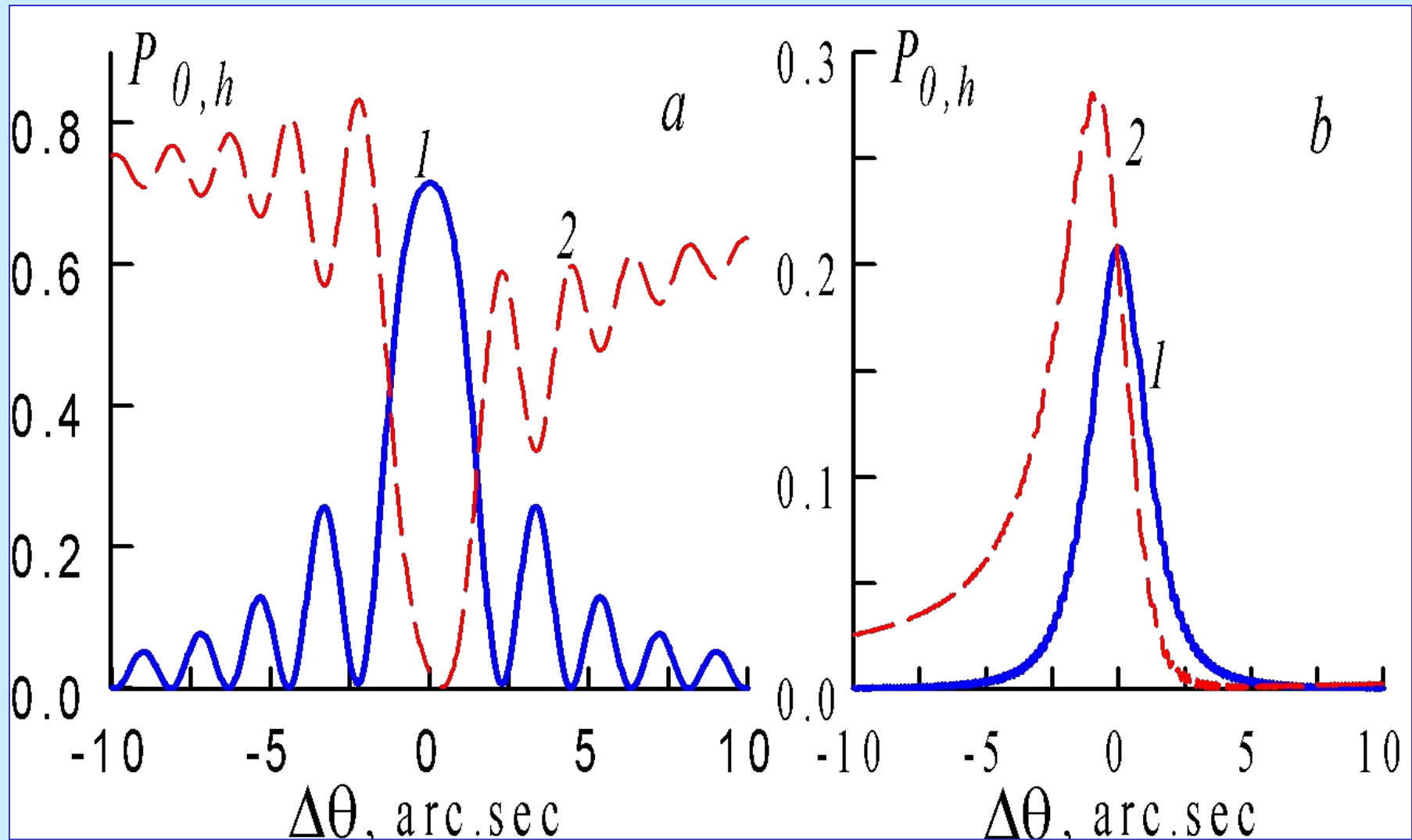
**Граничные условия:**

$$E_0(0) = 1, \quad E_h(0) = 0.$$

**Амплитуды полей в кристалле:**

$$E_{01} = -R_2 / (R_1 - R_2), \quad E_{02} = R_1 / (R_1 - R_2).$$

$$\gamma_0 = \cos(\psi + \theta_B), \quad \gamma_h = \cos(\psi - \theta_B),$$



Кривые дифракционного отражения (1) и прохождения (2) в случае Лауэ для кристаллов с толщиной  $l = 23 \mu\text{m}$  (a, **тонкий кристалл**) и  $l = 300 \mu\text{m}$  (b, **толстый кристалл, эффект Бормана**).

$\text{CuK}_\alpha$ -излучение, Si(220),  $b = 1$ .

# Интенсивность полного поля в кристалле

Вблизи поверхности ( $z \ll \Lambda$ )

$$I_{SP}(z, \Delta\theta) = |1 + R \exp(ih_z z)|^2.$$

**В общем случае**

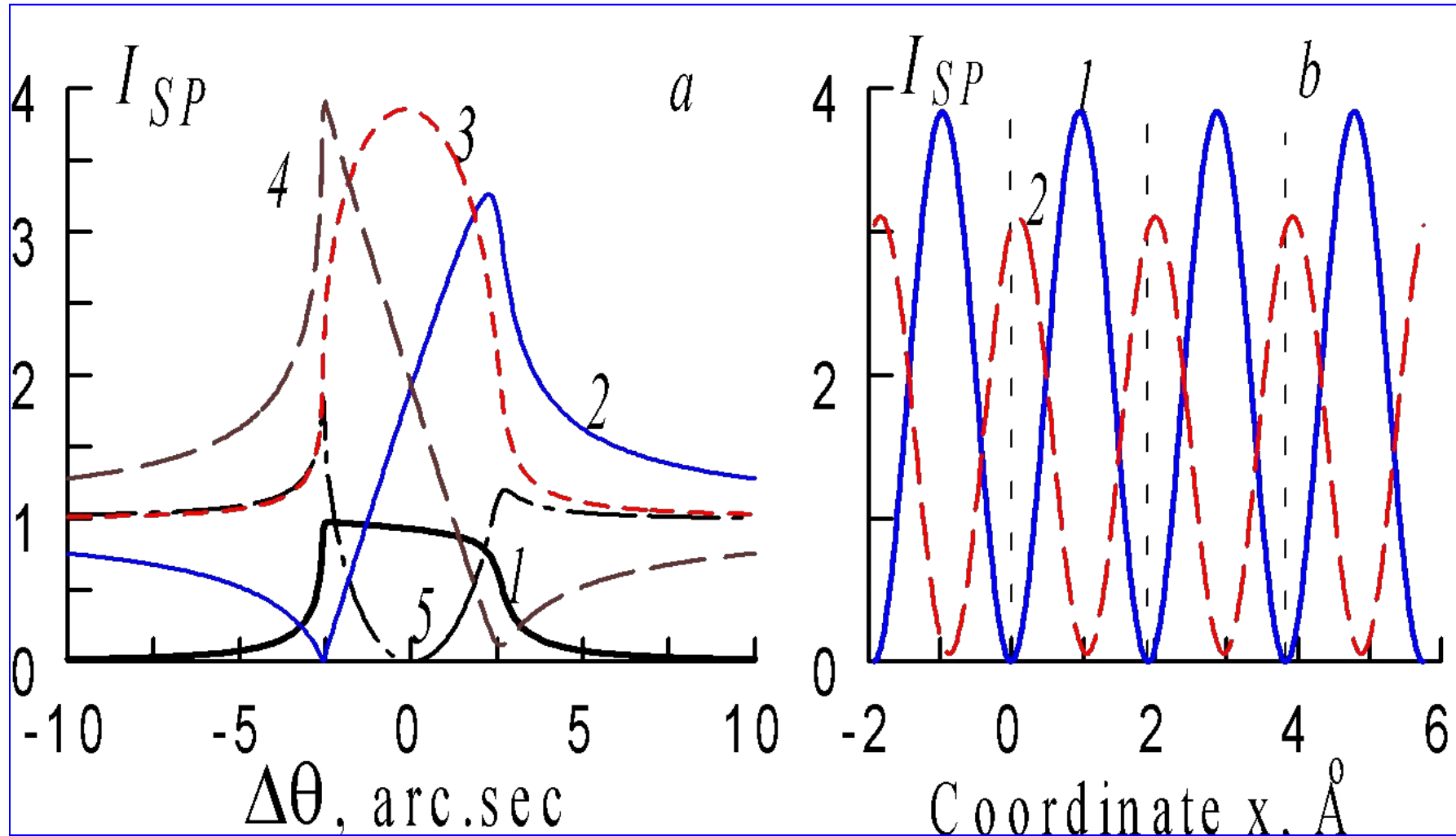
$$I(\Delta\theta) = [1 + b|R|^2 + 2C\sqrt{b}|R|F_c \cos(\varphi + \varphi_c)]V_{eff}$$

$$V_{eff} = \frac{\mu/\gamma_0 + \mu'/\gamma'}{\mu_{int} + \mu'/\gamma'}$$

$\mu_{int}(\Delta\theta) = 2k_0 \text{Im}(\varepsilon)$  - интерф. коэффициент поглощения

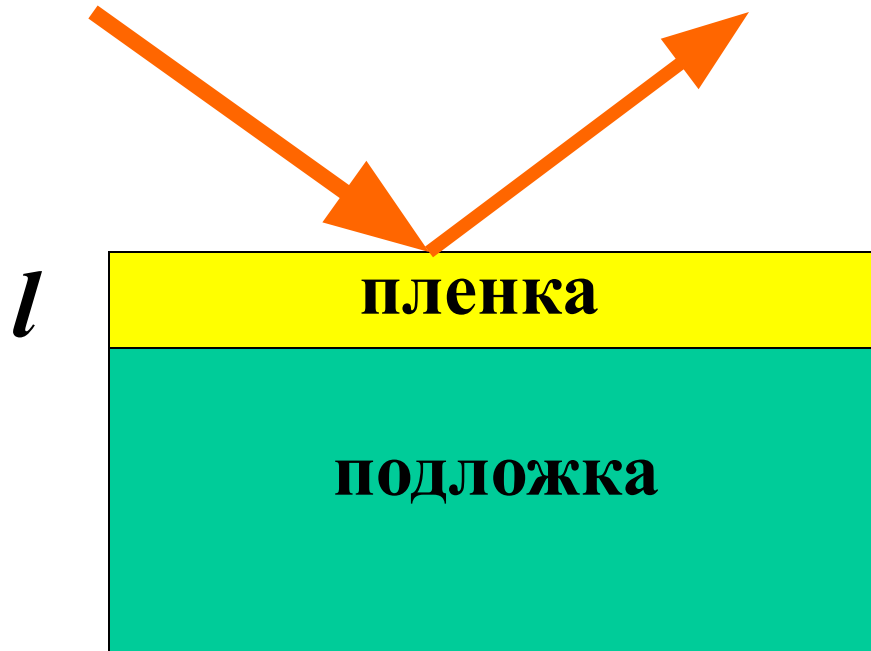
$F_c = \exp[-(1/2)h^2 \langle (z - z_c)^2 \rangle]$  – **когерентная фракция**

$\varphi_c = 2\pi m z_c / d$ ,  $z_c$  – **когерентная позиция**



*a* - КДО (1), угловая зависимость интенсивности полного поля в кристалле при  $z = 0$  (2),  $z = d/4$  (3),  $z = d/2$  (4),  $z = 3d/4$  (5); *b* – пространственное распределение стоячей волны при угловых отстройках  $\Delta\theta = -\Delta\theta_B$  (1) и  $\Delta\theta = \Delta\theta_B$  (2). Вертикальные линии показывают положение атомных плоскостей.  $\text{CuK}_\alpha$ -излучение, Si(220),  $b = 1$ .

# Дифракция на бикристалле

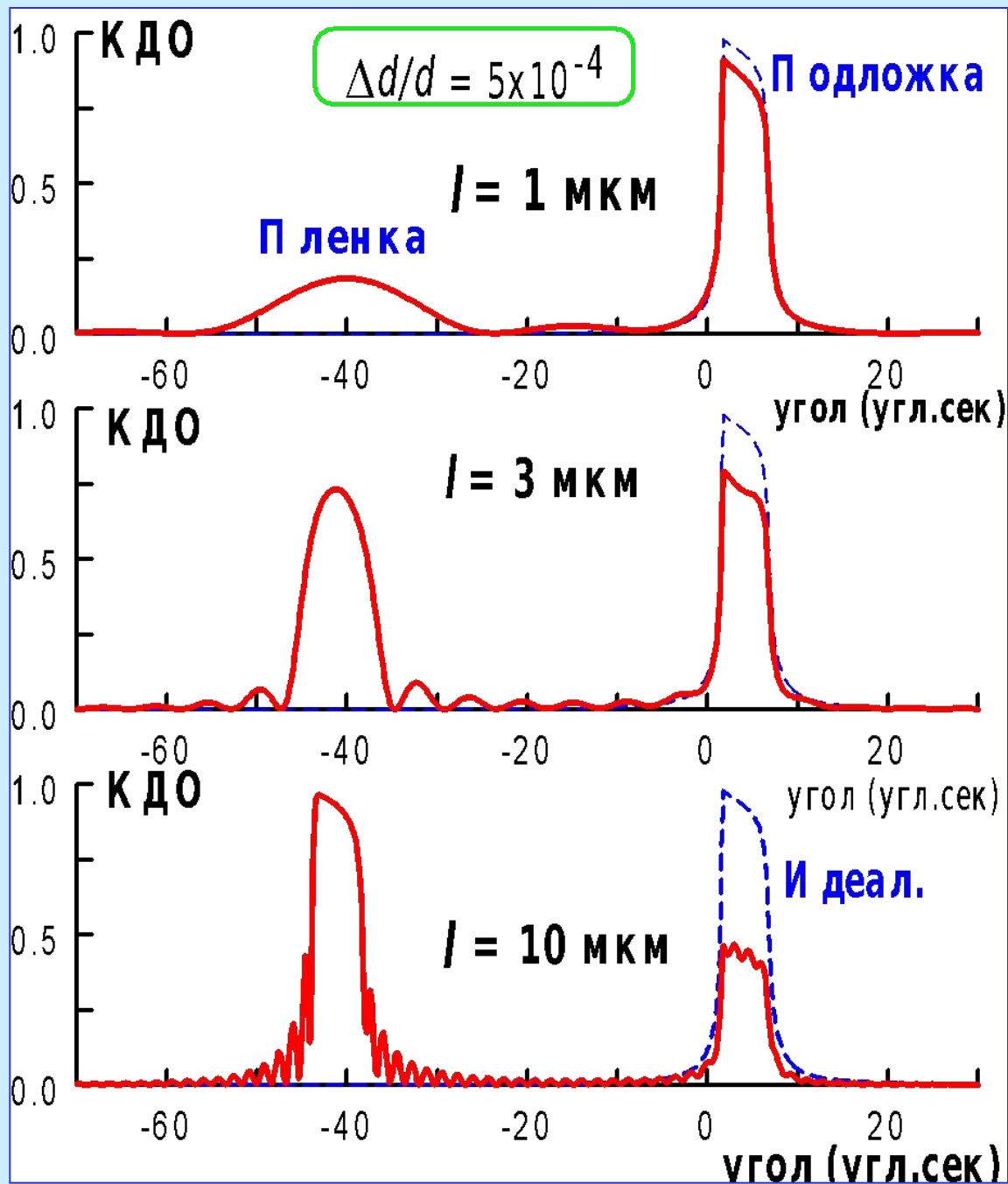


$$d + \Delta d$$

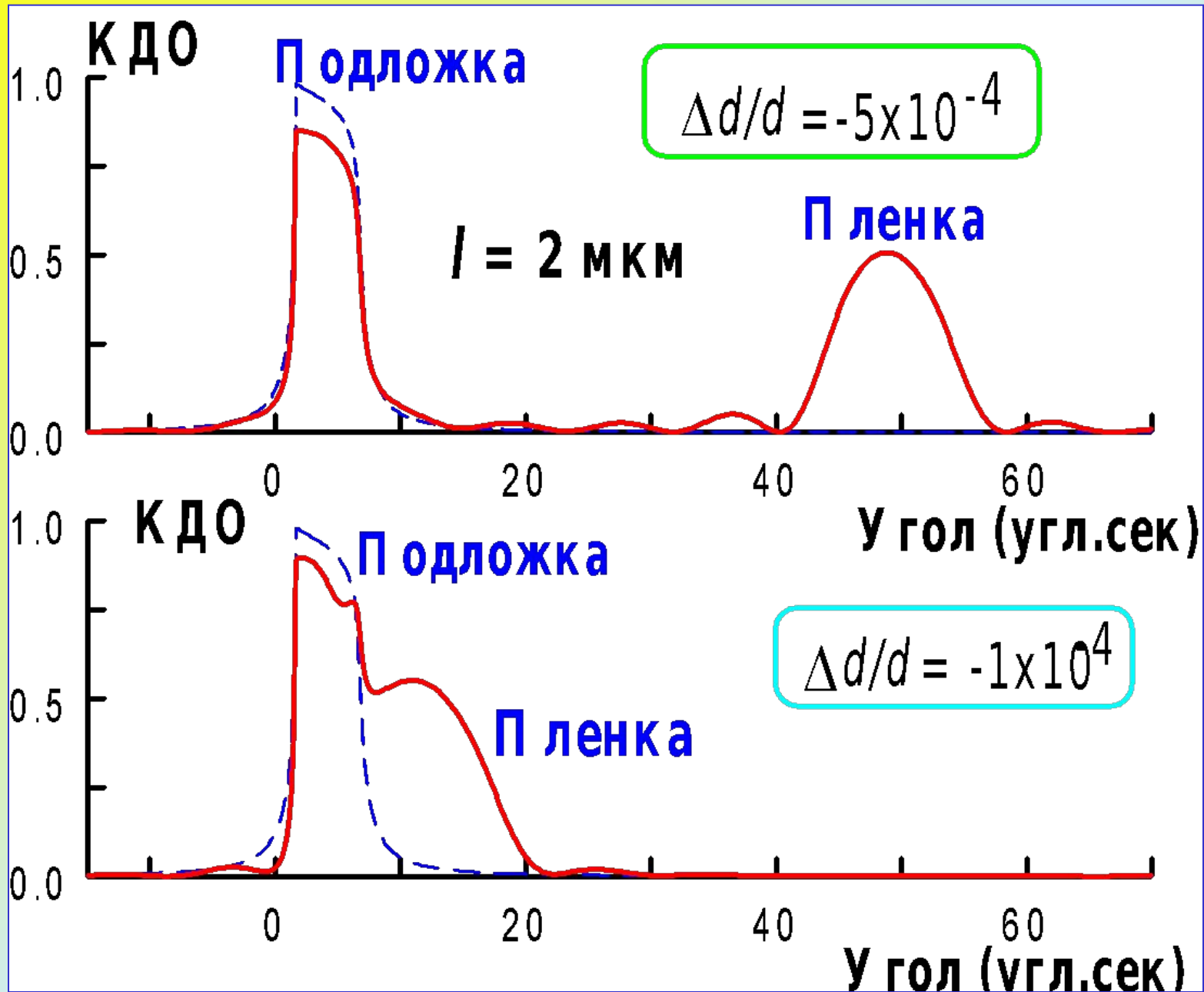
$$d \quad 2d \sin \theta_B = n\lambda$$

$$2(d + \Delta d) \sin(\theta_B + \Delta \theta_0) = n\lambda$$

$$\Delta \theta_0 = -(\Delta d/d) \operatorname{tg} \theta_B$$

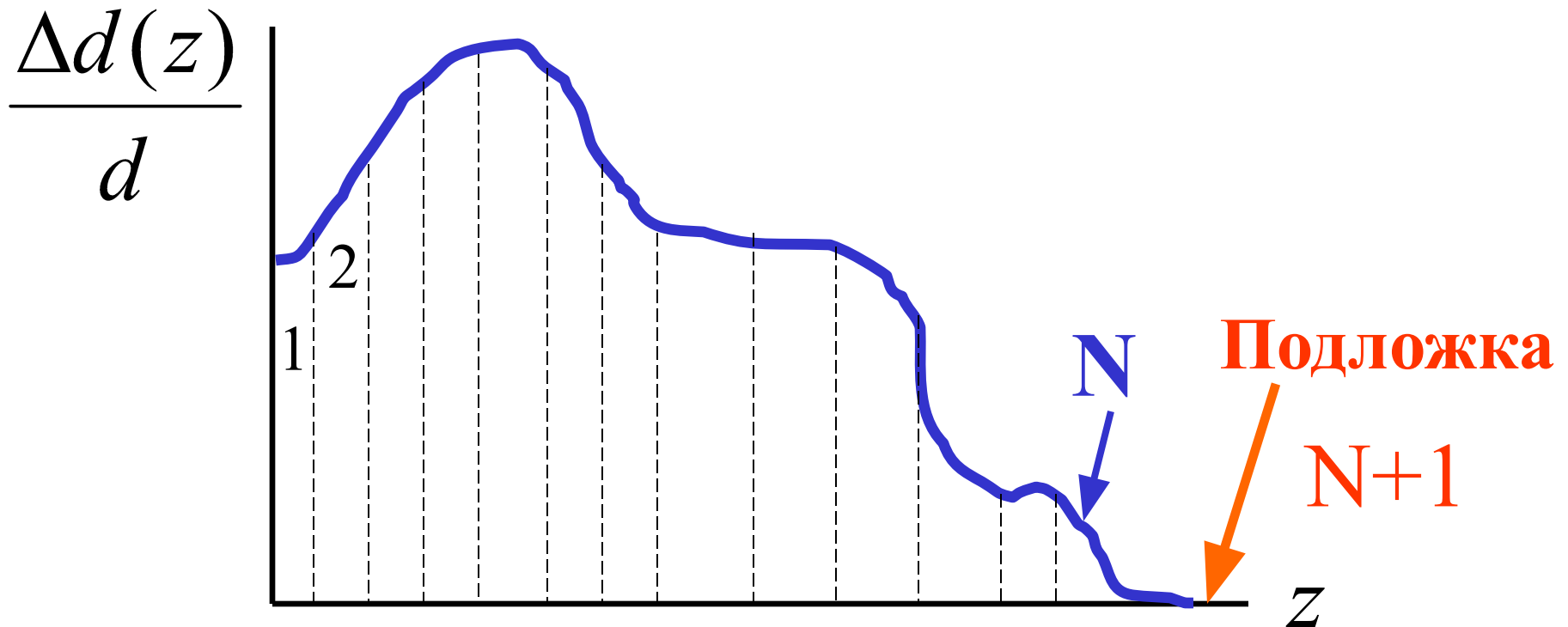






# Рекуррентная формула

$$R = r + \frac{R_0 t \bar{t}}{1 - R_0 \bar{r}}, \quad \rightarrow \quad R_N = r_N + \frac{R_{N+1} t_N \bar{t}_N}{1 - R_{N+1} \bar{r}_N}$$



# Уравнения Такаги

$$\chi_d(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r} - \underline{\mathbf{u}(\mathbf{r})})$$

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r})$$

$$\chi_d(\mathbf{r}) = \sum_h (\chi_h e^{-i\mathbf{h}\mathbf{u}}) e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}}$$

# Слоистая среда

$$\chi_h(z) = \chi_h e^{-i\Phi(z) - W(z)}$$

$\chi_h$  – поляризуемость идеального кристалла,  
 $\Phi(z) = \mathbf{h}u(z)$  – **фаза**,  $u(z)$  – **смещение**  
**атомных плоскостей**,  
 $\exp(-W(z))$  – статический фактор Дебая-Валлера.

$$E(\mathbf{r}) = E_0(z)e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} + E_h(z)e^{i\mathbf{k}_h\mathbf{r}}$$

$\mathbf{k}_0$  – волновой вектор в вакууме,  
 $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$ .

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \Delta \mathbf{E}$$

$$\Delta E e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} = \left[ -k_0^2 E(z) + 2ik_{0z} \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} \right] e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}$$

# Уравнения Такаги

$$\frac{dE_0}{dz} = \frac{i\pi}{\lambda\gamma_0} \left[ \chi_0 E_0 + \chi_{\bar{h}} e^{i\Phi(z) - W(z)} E_h \right]$$

$$\frac{dE_h}{dz} = \frac{i\pi}{\lambda\gamma_h} \left[ (\chi_0 + \alpha) E_h + \gamma_h e^{-i\Phi(z) - W(z)} E_0 \right]$$

$$\alpha = 2(\theta - \theta_B) \sin 2\theta_B$$

# Уравнение Такаги-Топена

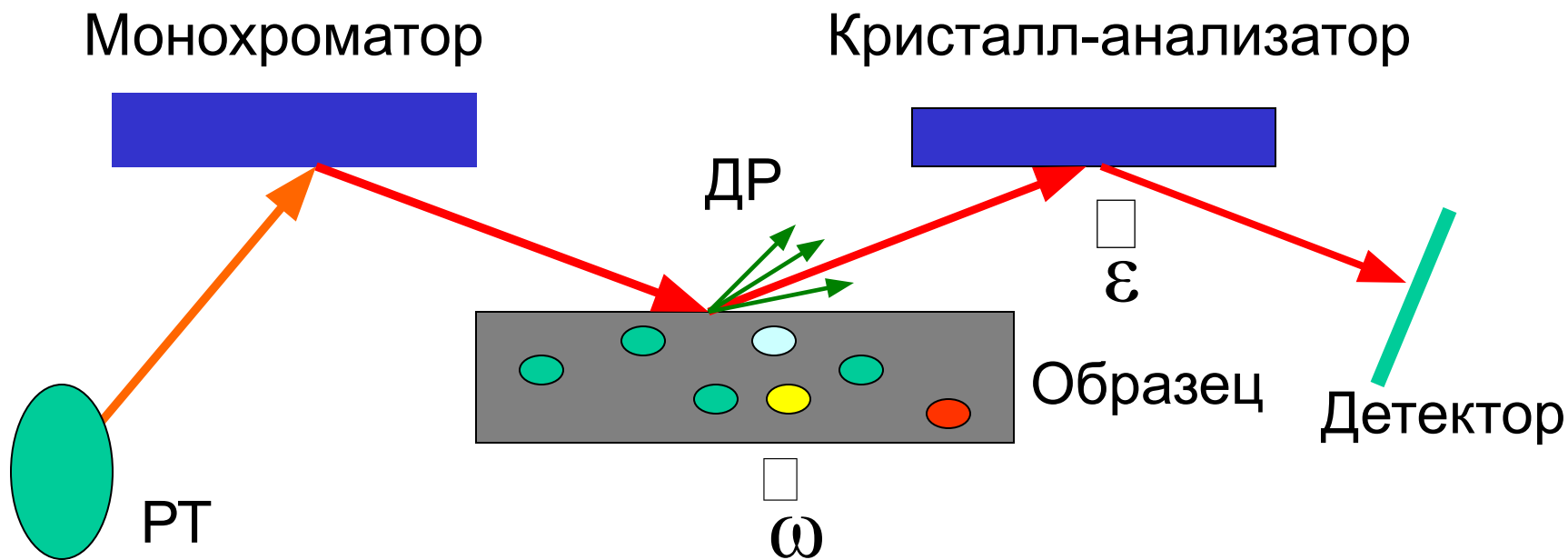
$$R(z) = \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{E_h(z)}{E_0(z)} \sqrt{\frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h}} e^{i\Phi(z)}$$

$$\frac{dR}{dz} = -\frac{2i}{\Lambda} [y\tilde{C} + Y(z)]R(z) - \frac{i\tilde{C}}{\Lambda} (1 + R^2) e^{-W(z)},$$

$$y = \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_B}, \quad Y(z) = -\frac{1}{2} \Lambda \frac{d\Phi}{dz} = \frac{1}{2} \Lambda \left| h_z \right| \frac{\Delta d(z)}{d},$$

$$\tilde{C} = \frac{\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{|\chi_{hr}|}.$$

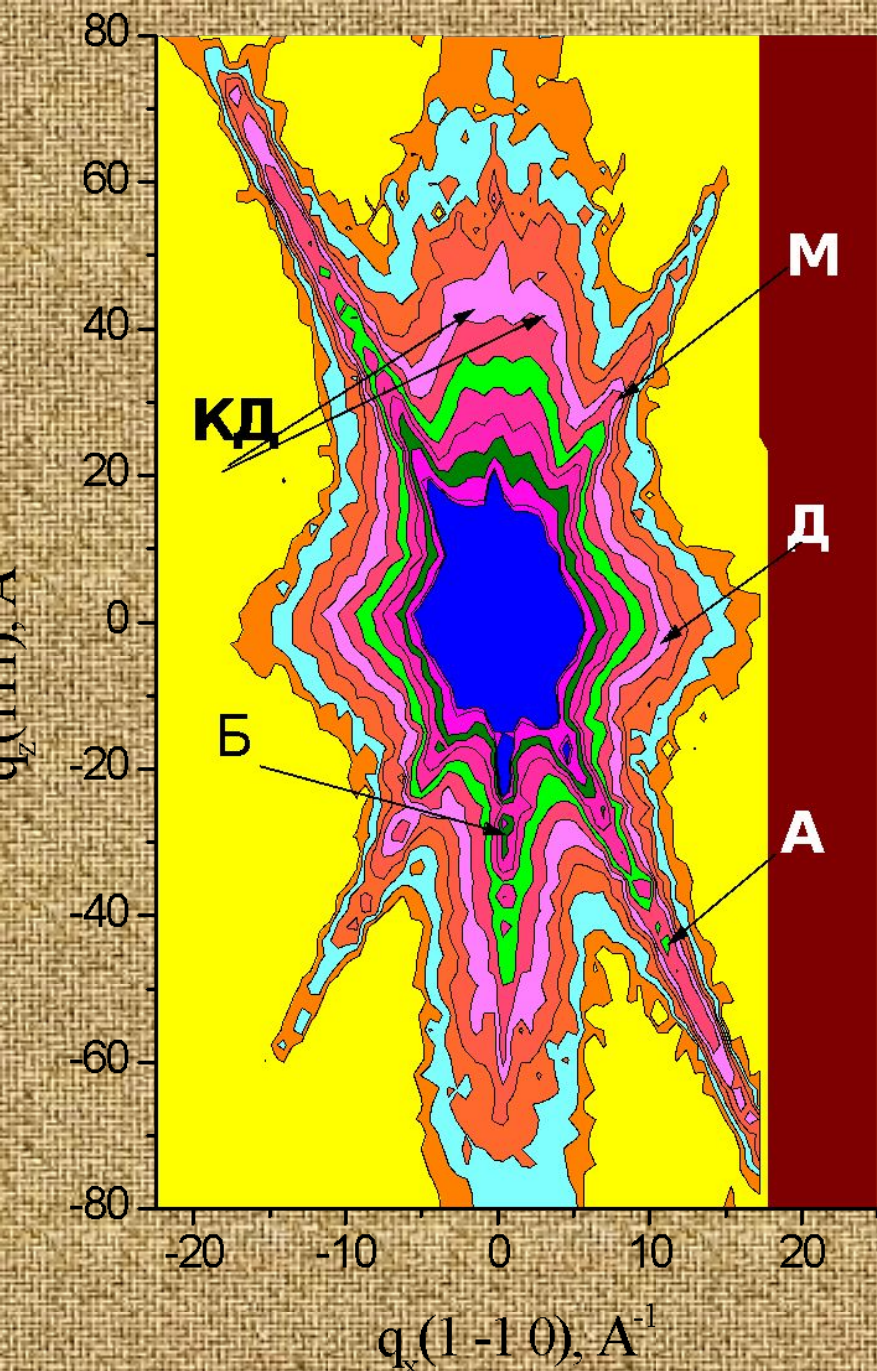
# Трехкристальная (высокоразрешающая) рентгеновская дифрактометрия



$$q_x = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon)$$

$$q_z = \frac{2\pi}{\lambda} \cos \theta_B \times \varepsilon$$

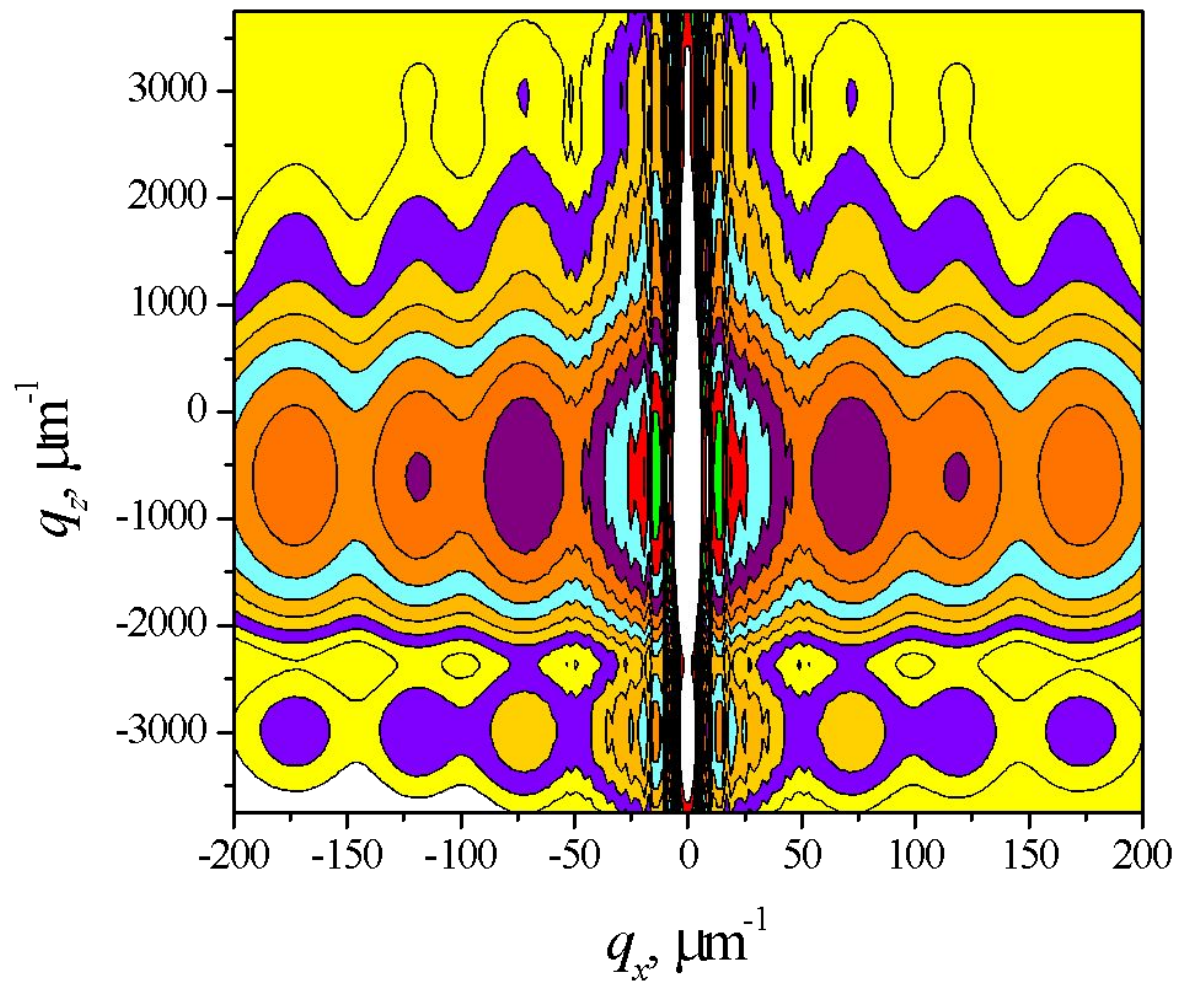




## Структура слоев пористого германия по данным высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии

Б - брэгговское рассеяние,  
 А - псевдопик кристалла анализатора,  
 М - отраженное от подложки малоугловое рассеяние рентгеновского пучка на пористой структуре,  
 КД - частично когерентное диффузное рассеяние,  
 Д - диффузное рассеяние на нанокристаллитах и нанопорах.

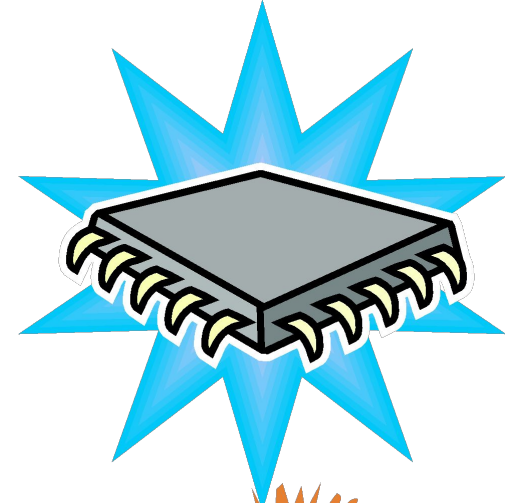
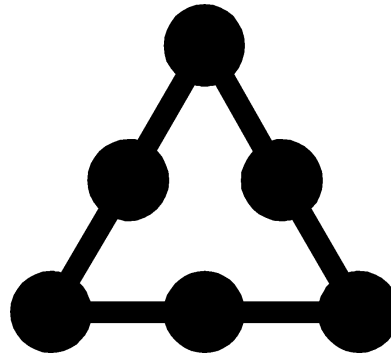
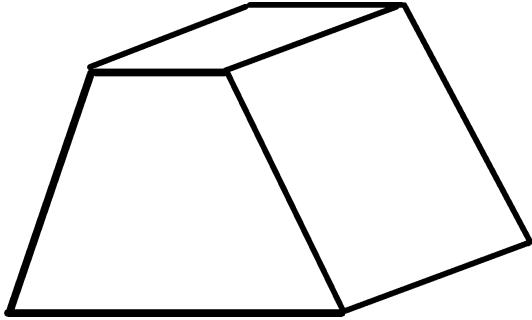
Радиус пор 25-30 нм,  
 нанокристаллиты - 10 нм,  
 степень пористости 56%.



**Bushuev (2007)**

Распределение интенсивности рассеяния  $\text{CuK}\alpha$ -излучения на кристалле Si с **КТ** из Ge в окрестности узла Si(111).  
 ( $Dd/d = 0.04$ ,  $r_0 = 10$  нм,  $a_z = 2$  нм,  $l_0 = 40$  нм,  $s_0 = 0.2d_0$  )

....а если форма кристалла более сложная ???



“Пыль глотать замучаетесь..” (В.В.Путин)

**Спасибо за внимание**

**... Но это еще не все – будет  
еще одна лекция....**