

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

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...

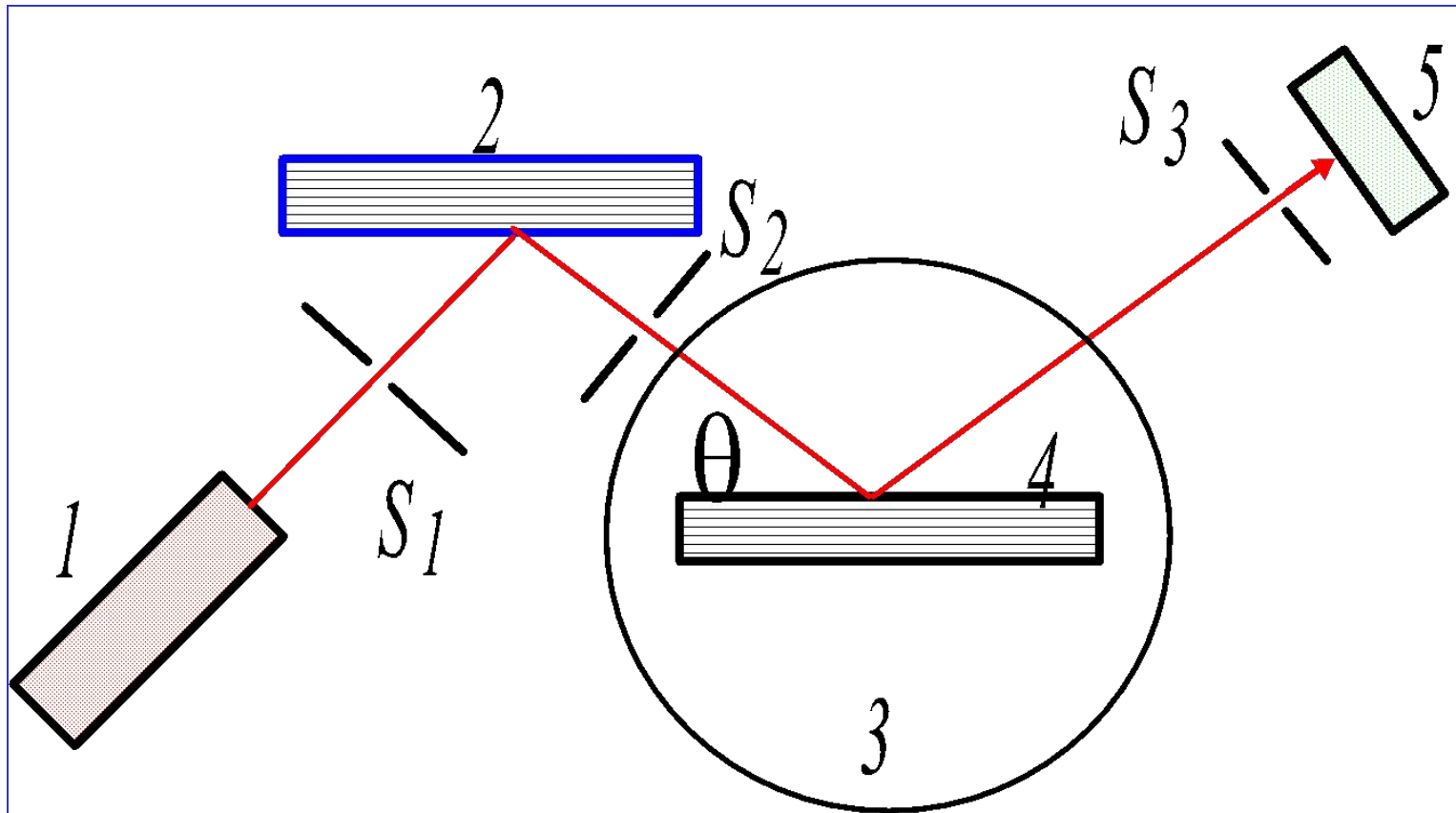


Схема эксперимента по регистрации кривой дифракционного отражения (КДО). 1 - рентгеновская трубка, СИ, РЛСЭ; 2 - кристалл-монокроматор, 3 - гониометр, 4 – исследуемый образец, 5 - детектор, S_{1-3} - щели.

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)

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

χ^{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 ω ??

.....**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 $\varepsilon = 1 + \chi$,

ε - **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 χ_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 χ_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 CuK_α -излучения ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$) получим, что

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

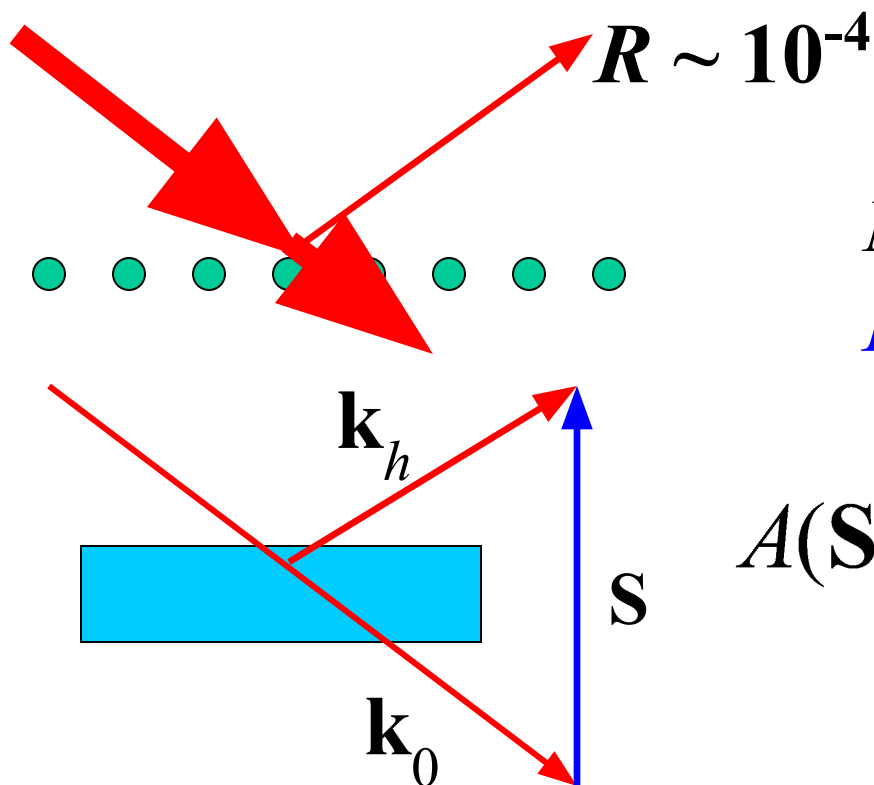
Видно, что величина χ_0 крайне **мала и отрицательна**. Последнее приводит, в частности, к явлению полного внешнего отражения (**ПВО**) РЛ (в отличие от полного внутреннего отражения в оптике видимого диапазона, для которого $\chi_0 > 0$).

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).

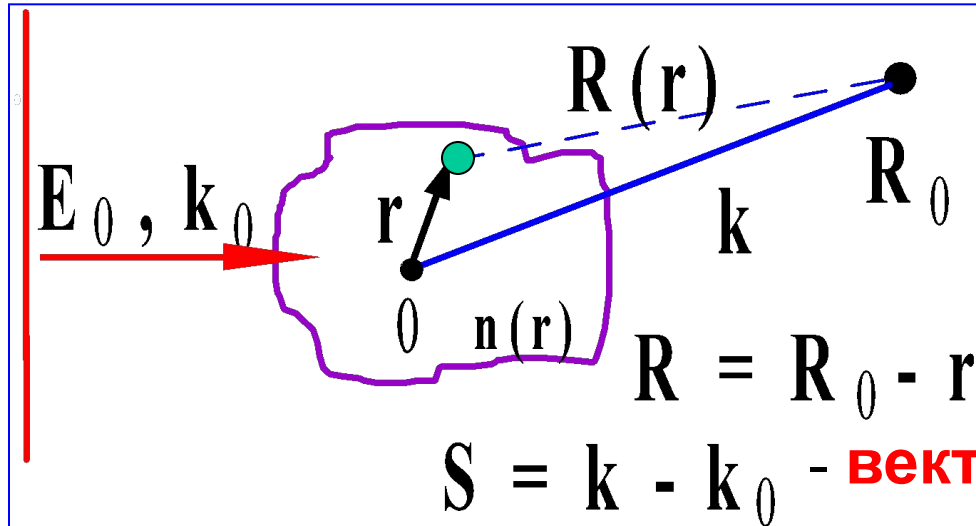


$N \ll 1/R = 10^4$, т.е. толщина
 $L = Nd \ll 3$ мкм.

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

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

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).

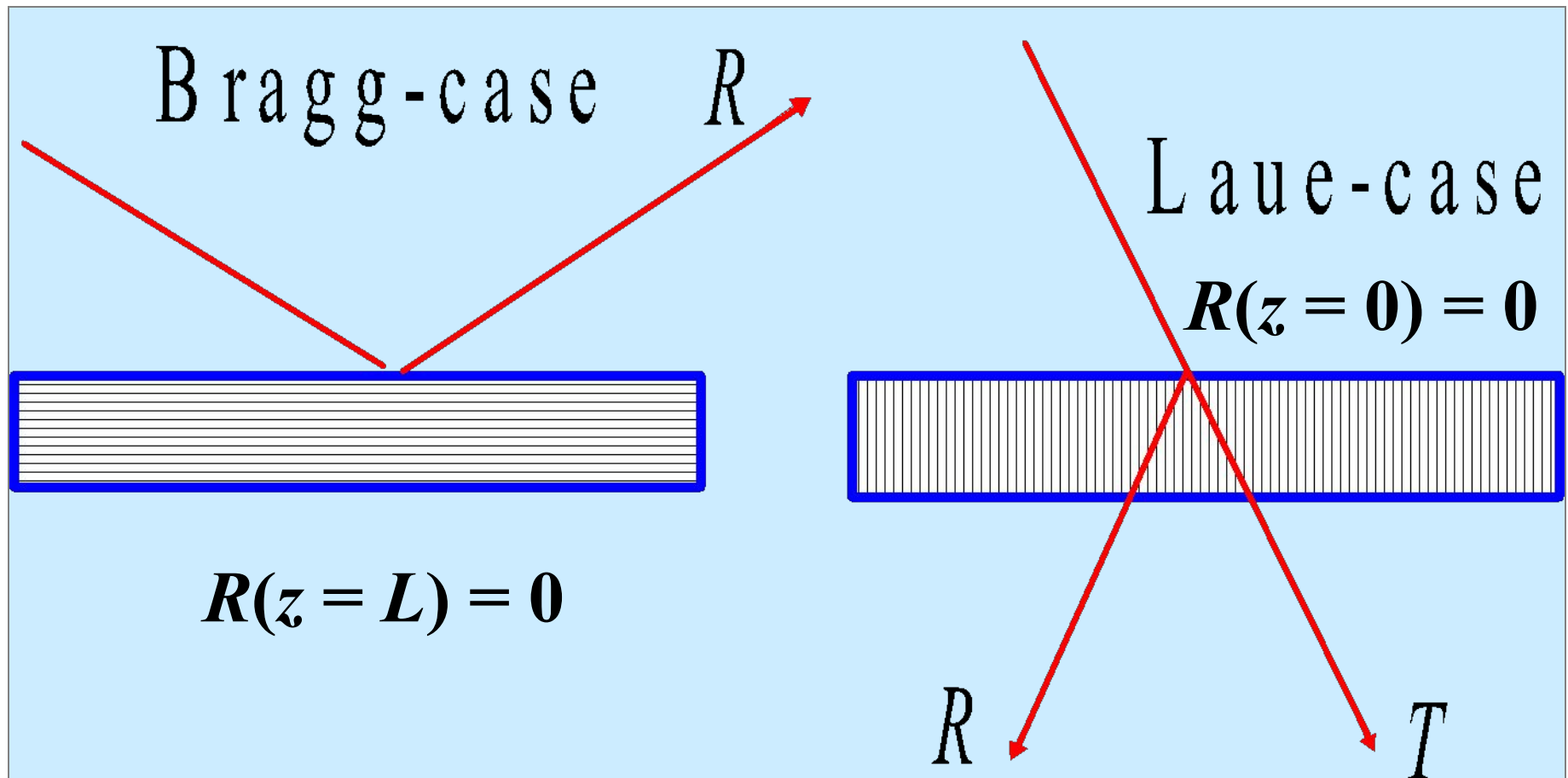
Динамическая дифракция

Здесь самосогласованным образом учитывается все:

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

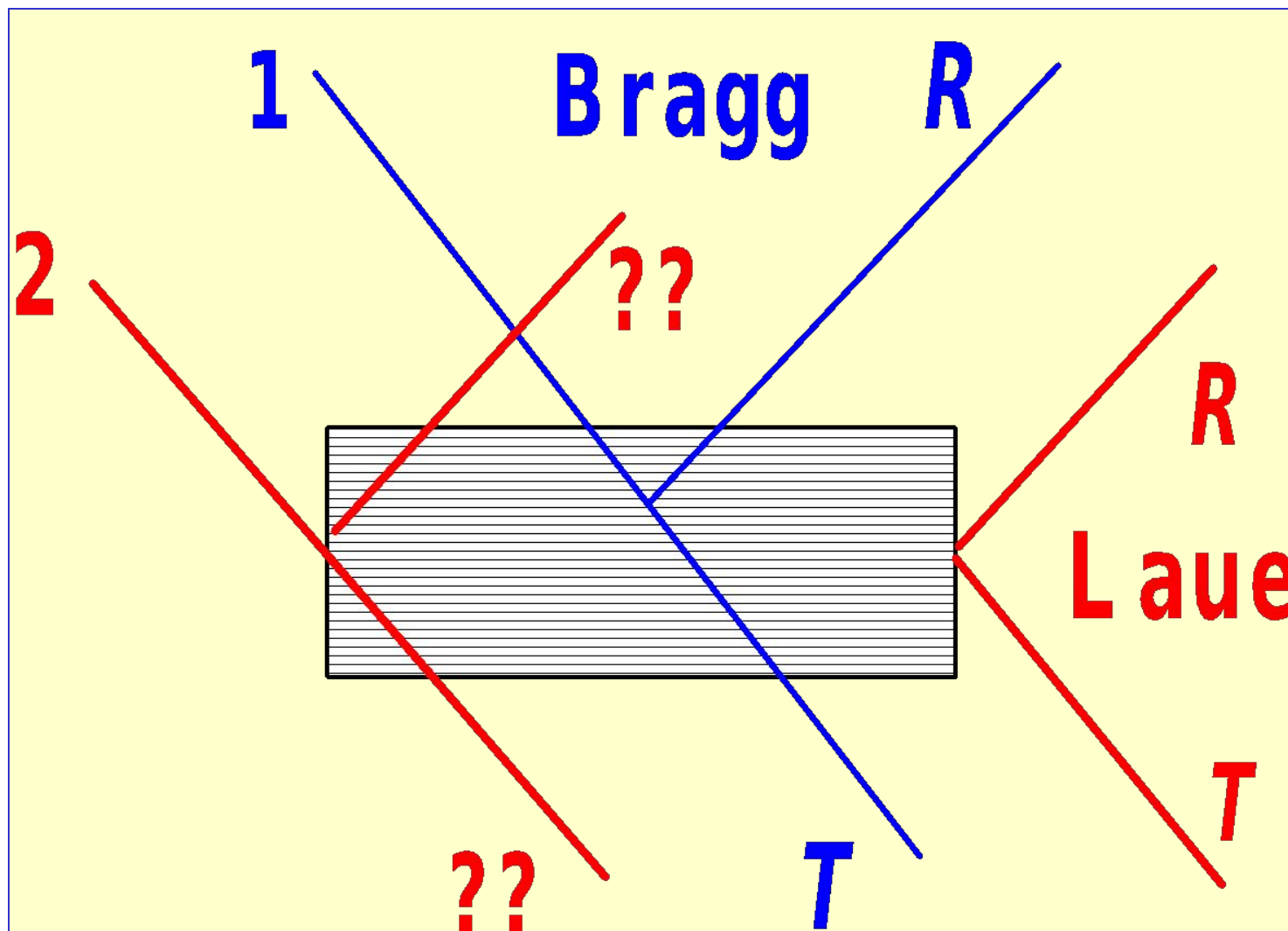


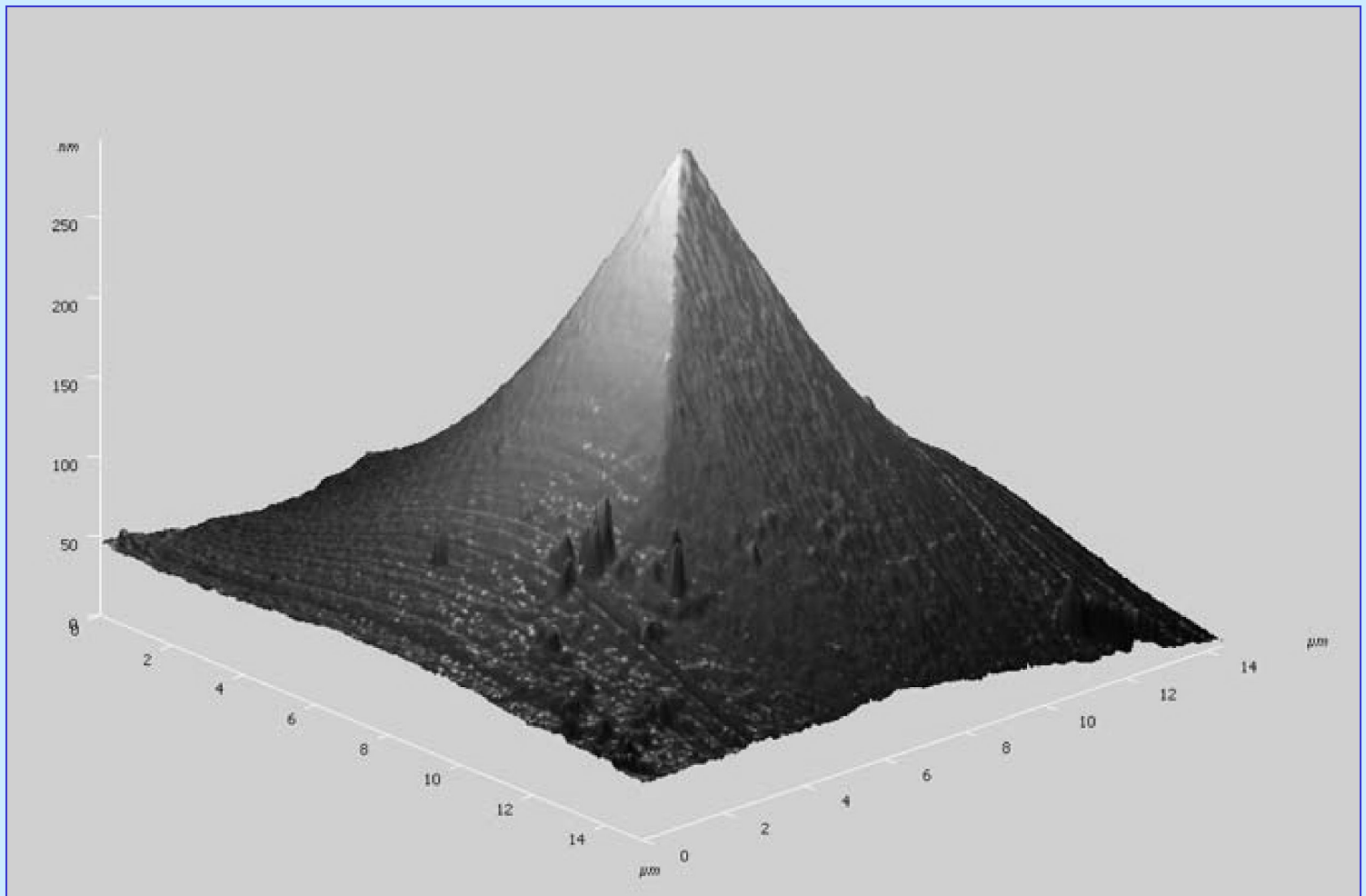
Граничные условия



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

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

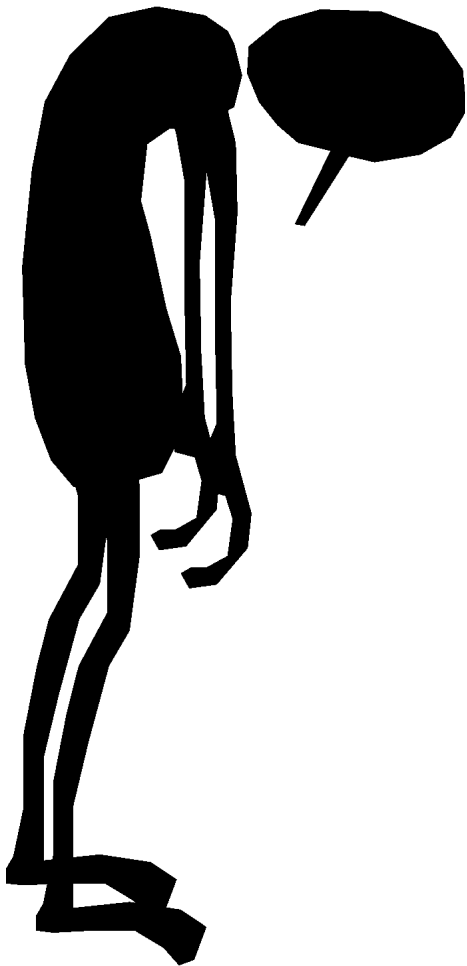




Y. Feldman, V. Lyahovitskaya, G. Leitus, I. Lyubomirsky,
E. Wachtel, **V.A.Bushuev**, Yu.Rosenberg & G.Vaughan
Synchrotron radiation–induced crystallization of amorphous Barium
Titanate Oxide membranes //

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

В итоге мы приходим к таким состояниям:



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

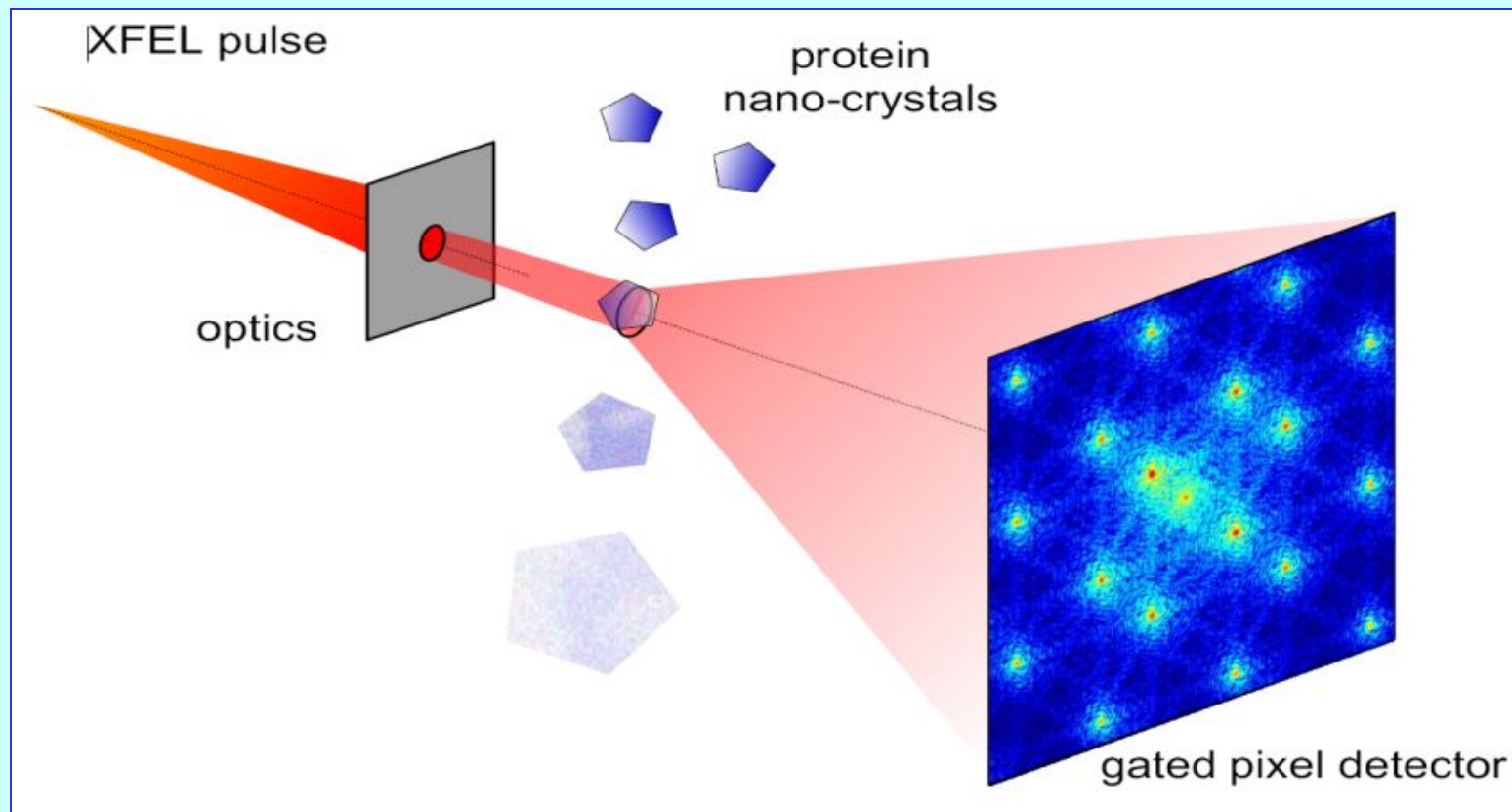
$$A(\mathbf{S}) = \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{S}) \exp(i\mathbf{S}\mathbf{R}_n)$$

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

... 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.....

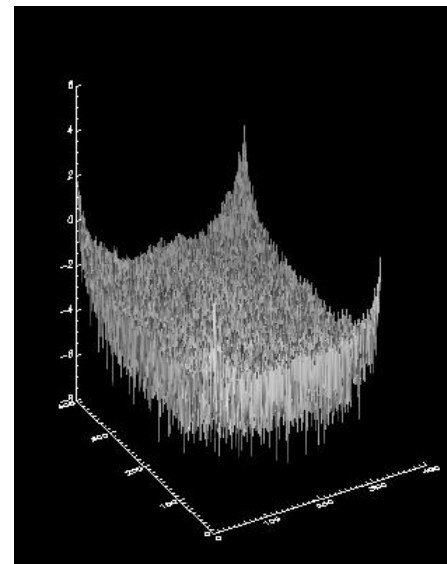
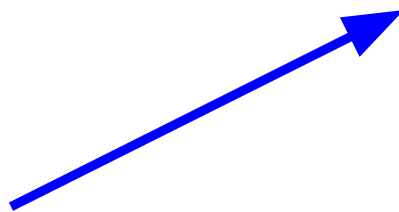
$$\mathbf{F} = \mathbf{A}(\mathbf{Ньютон}) \exp[i\varphi(\mathbf{Бритни Спирс})]$$

Что (кто) получится ???!

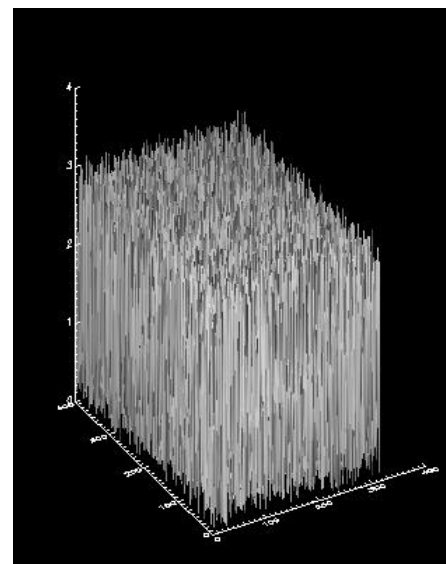
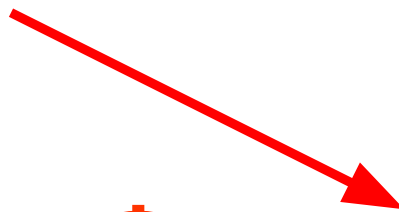
Прямое Фурье-преобразование



Фурье-амплитуды



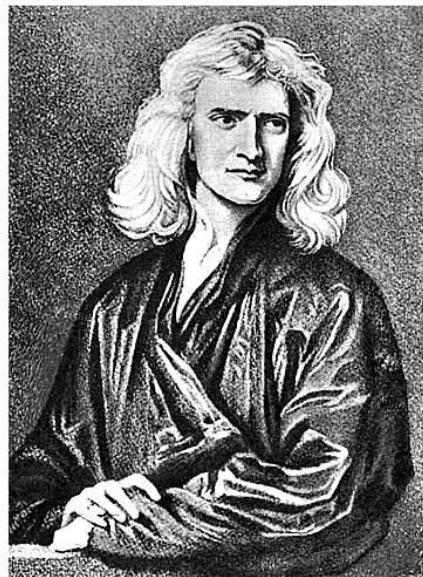
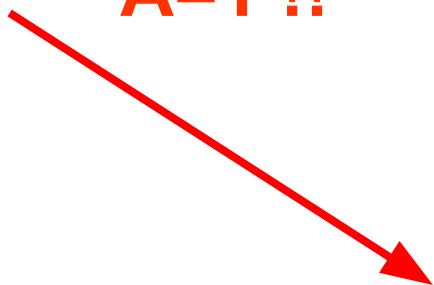
Фурье-фазы



Теперь переходим в прямое пространство



Фурье-
фазы, а все
 $A=1$!!

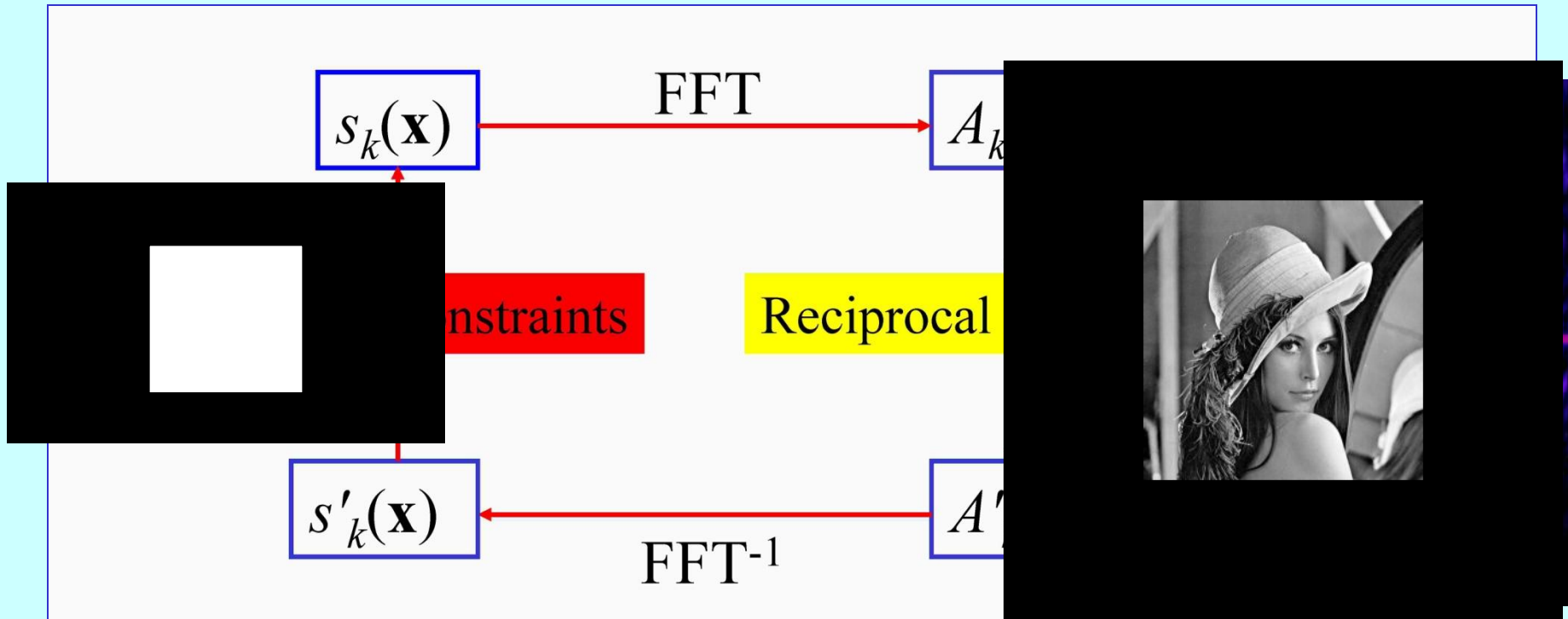


Исаак Ньютон



Фурье-
амплитуды

Итерационный алгоритм восстановления фазы



Real space constraints:



Reciprocal space constraint:

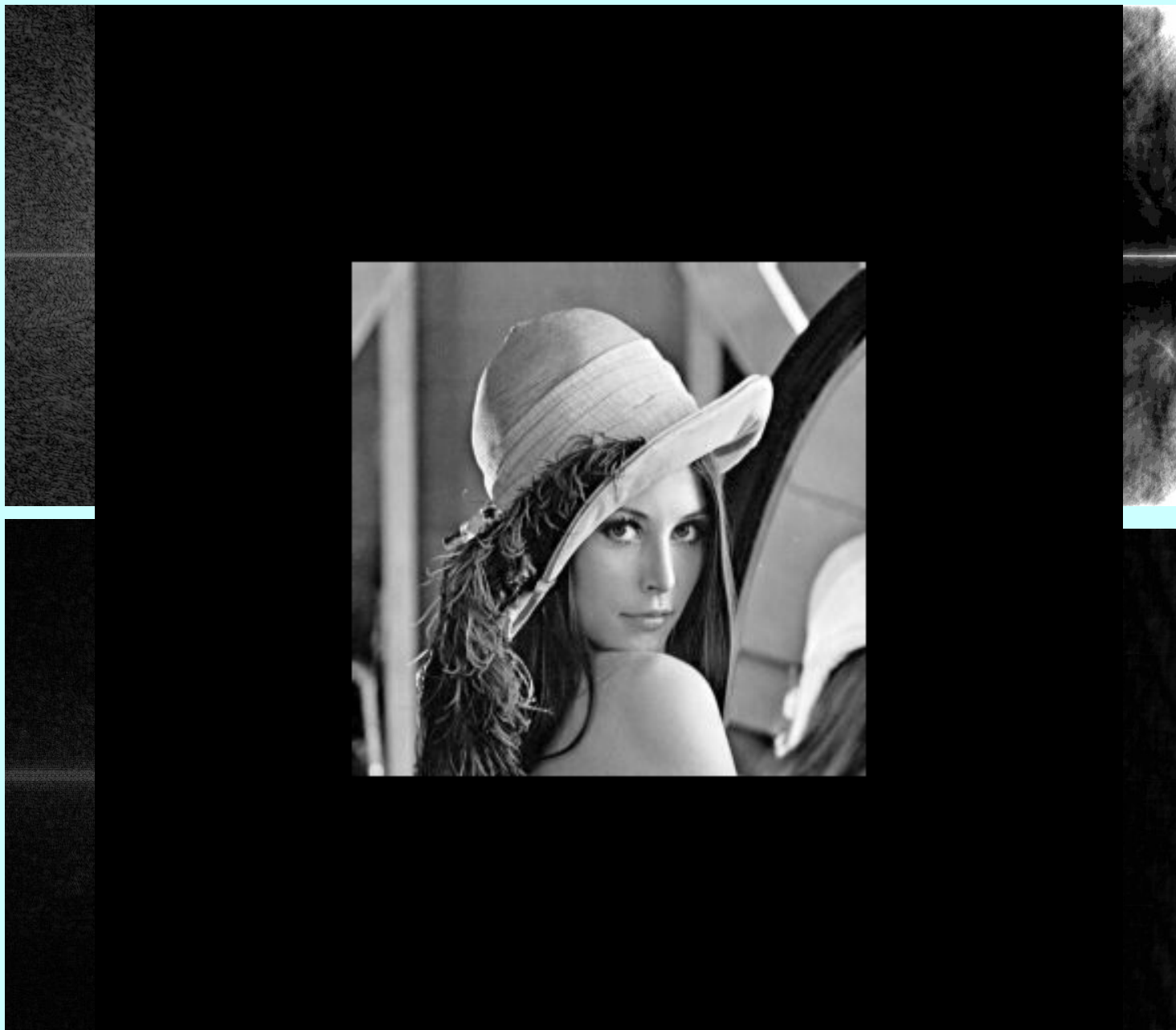
$$|A_k(\mathbf{q})| \rightarrow \sqrt{I_{exp}(\mathbf{q})}$$

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 ω и длиной волны λ (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).

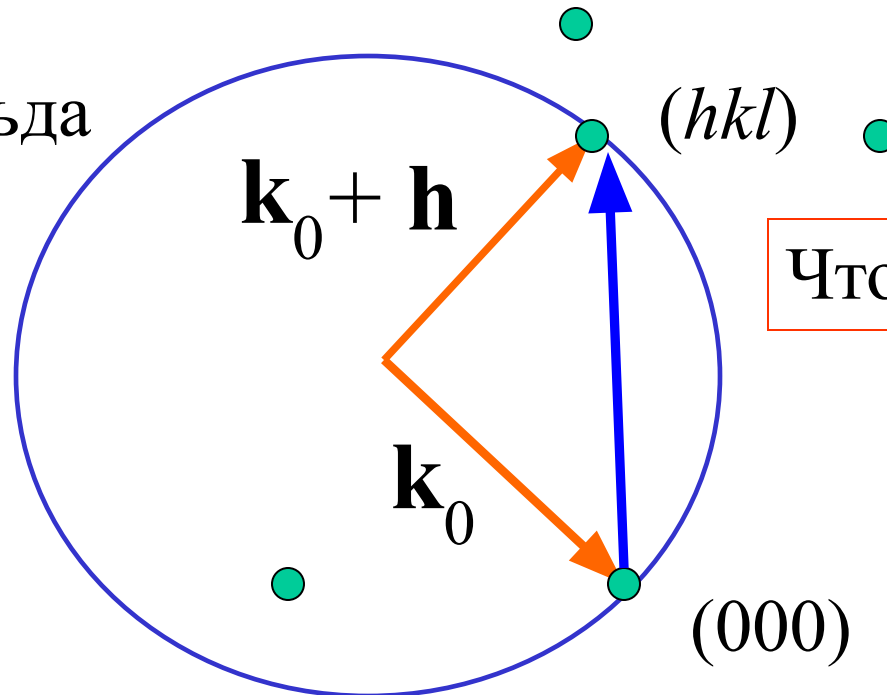
Основное уравнение динамической теории

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

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

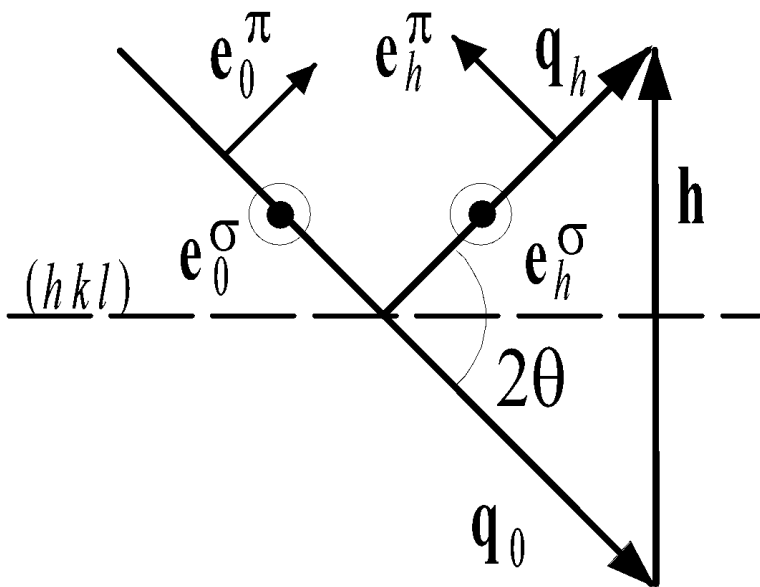


Рис. 3

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

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

$C = 1$ для σ -поляризации и
 $C = \cos 2\vartheta_B$ для π -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).

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

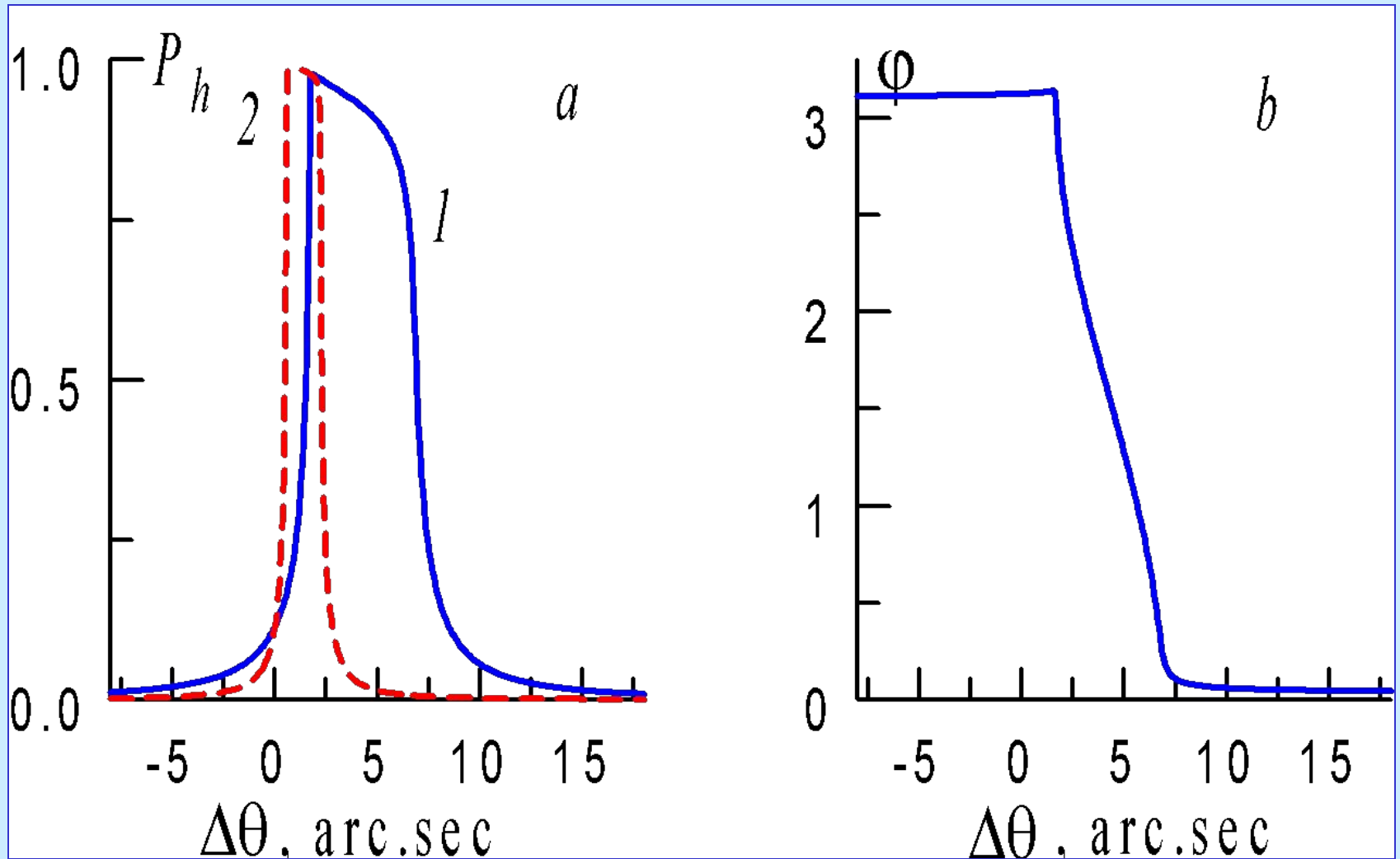
Коэффициент отражения

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

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

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

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



a) - кривые дифракционного отражения (220) излучения CuK_{α} (1) и AgK_{α} (2) от толстого кристалла кремния, $b = 1$, b) - зависимость фазы отражения от угловой отстройки.

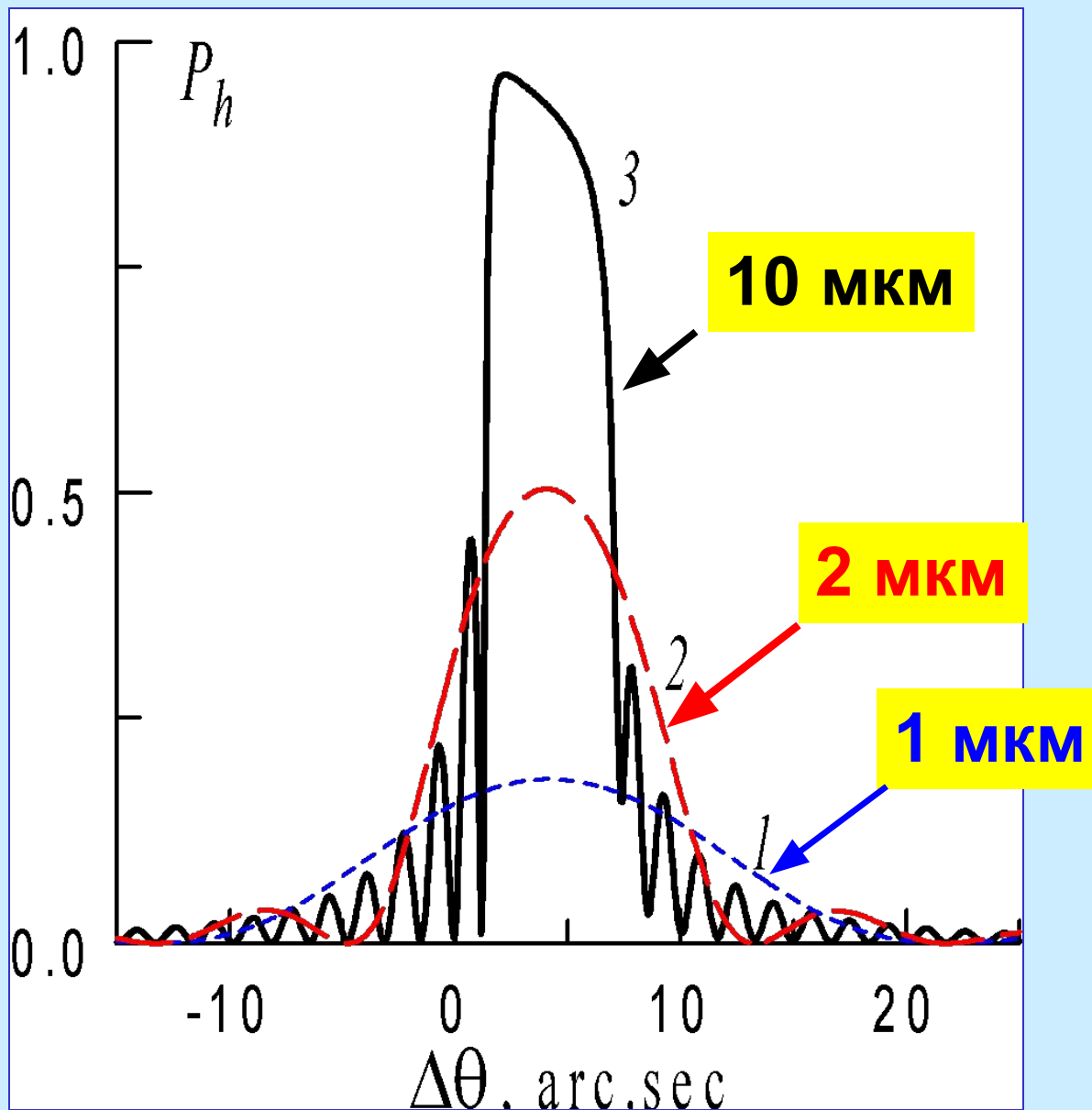
$\Delta\vartheta_B = C|\chi_h| / b^{1/2} \sin 2\vartheta_B$ – ширина КДО.

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

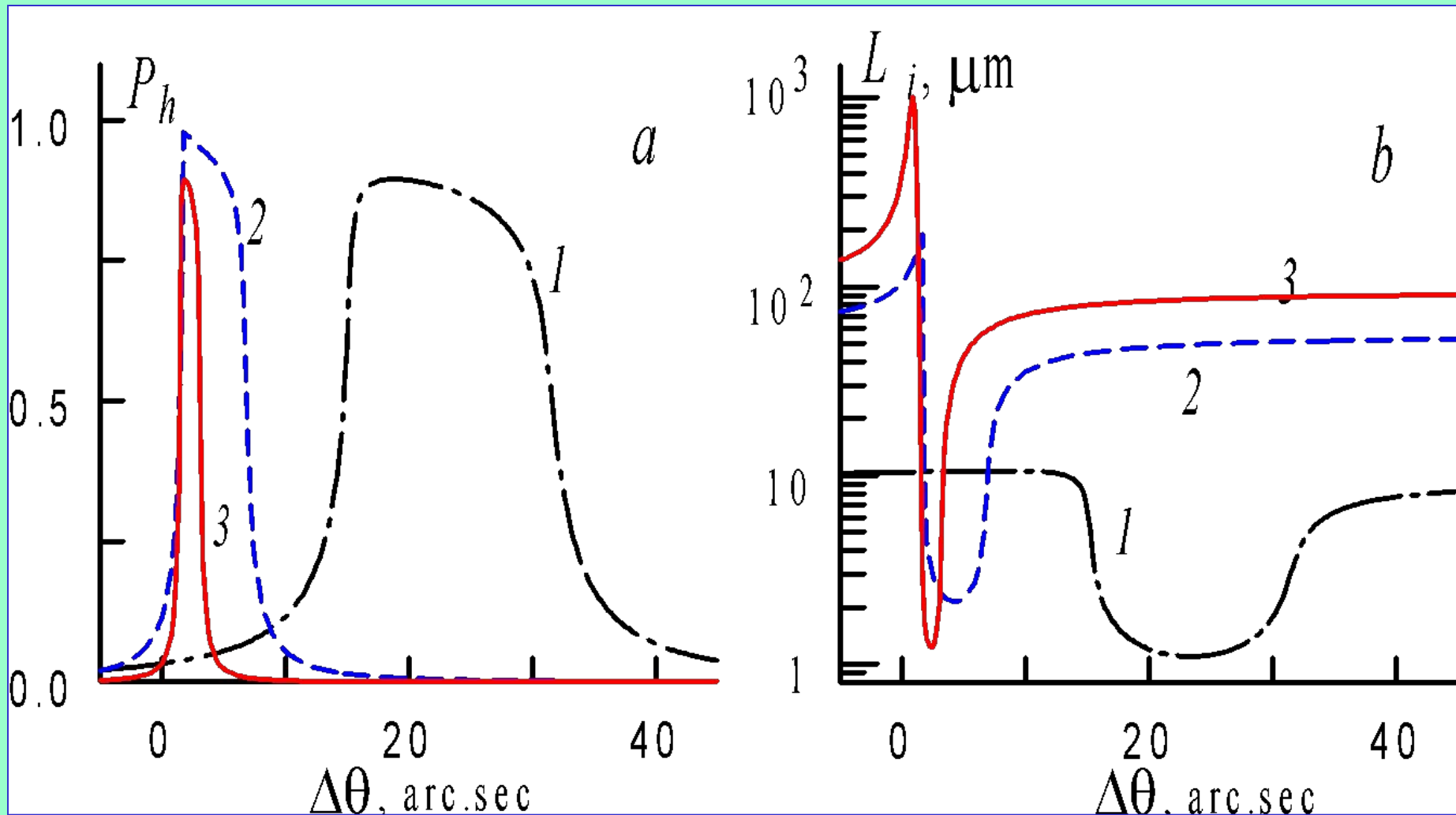
$\Lambda = \lambda(\gamma_0\gamma_h)^{1/2} / \pi C|\chi_h|$ - глубина экстинкции.

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

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



КДО CuK_α -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) CuK_α -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

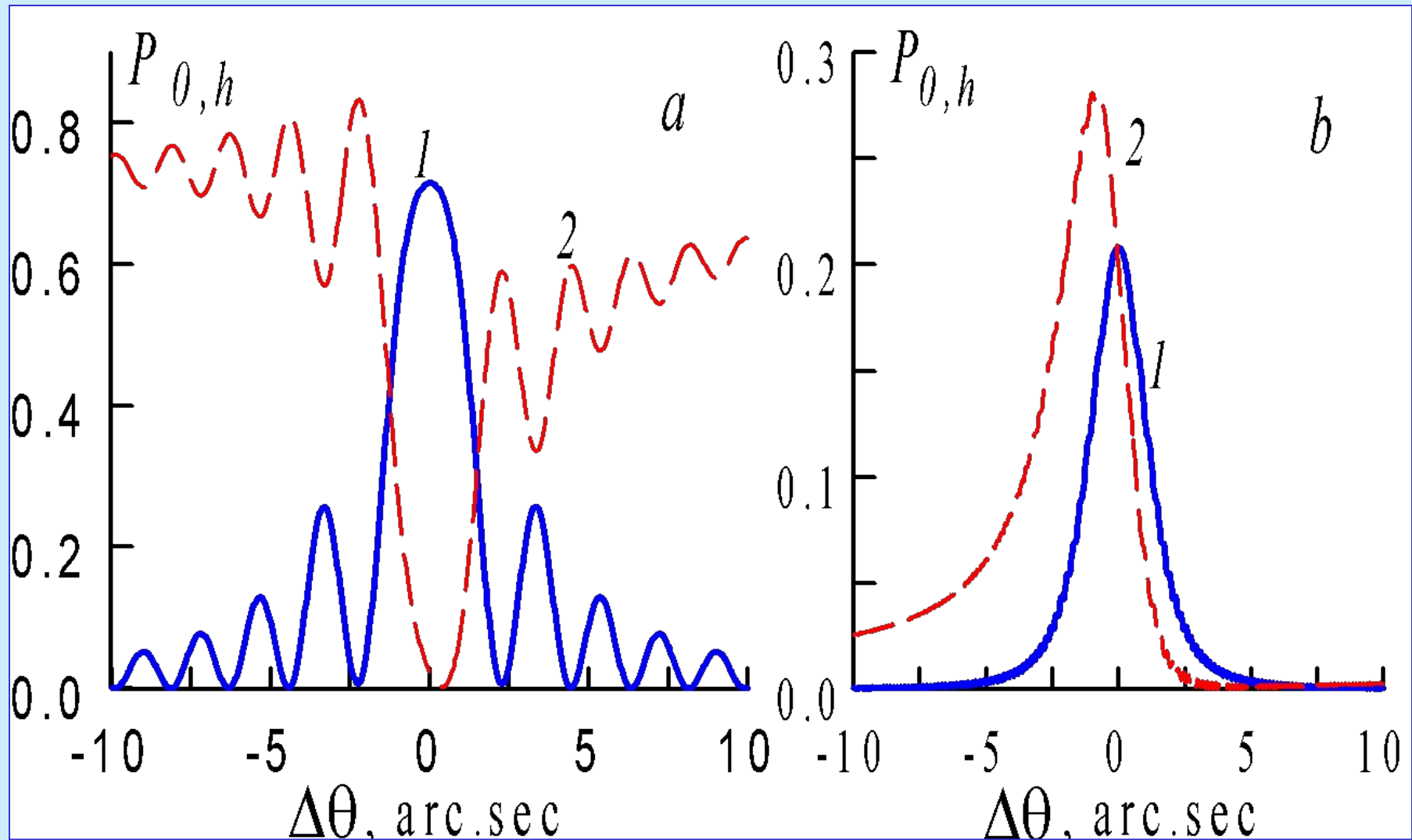
Граничные условия:

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

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**).

CuK_α -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

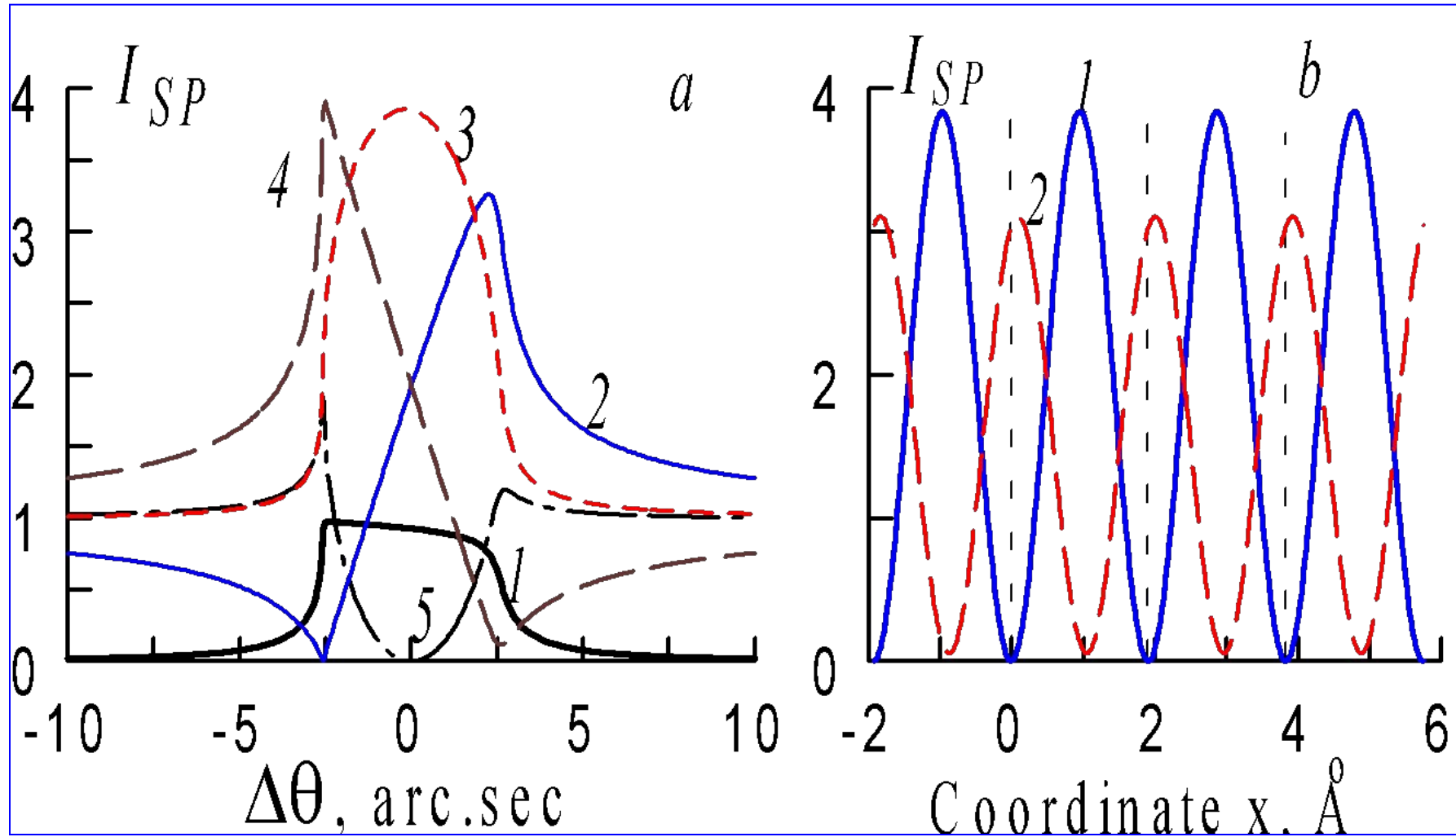
$$I(\Delta\theta) = [1 + b|R|^2 + 2C\sqrt{b}|R|F_c \cos(\varphi + \varphi_c)]V_{eff}$$

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

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

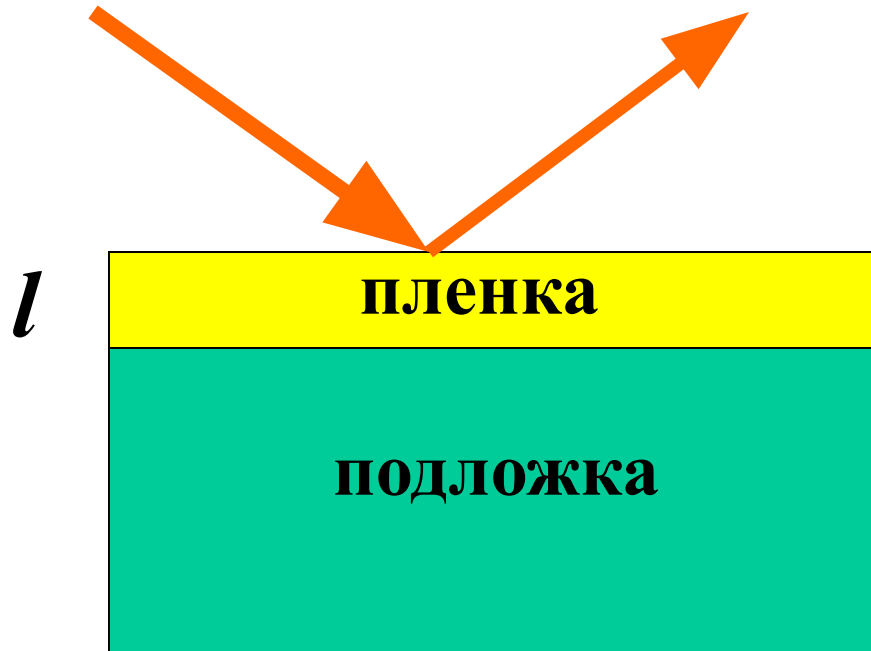
$F_c = \exp[-(1/2)h^2 \langle (z - z_c)^2 \rangle]$ – **когерентная фракция**

$\varphi_c = 2\pi m z_c / d$, 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. CuK_α -излучение, $\text{Si}(220)$, $b = 1$.

Дифракция на бикристалле

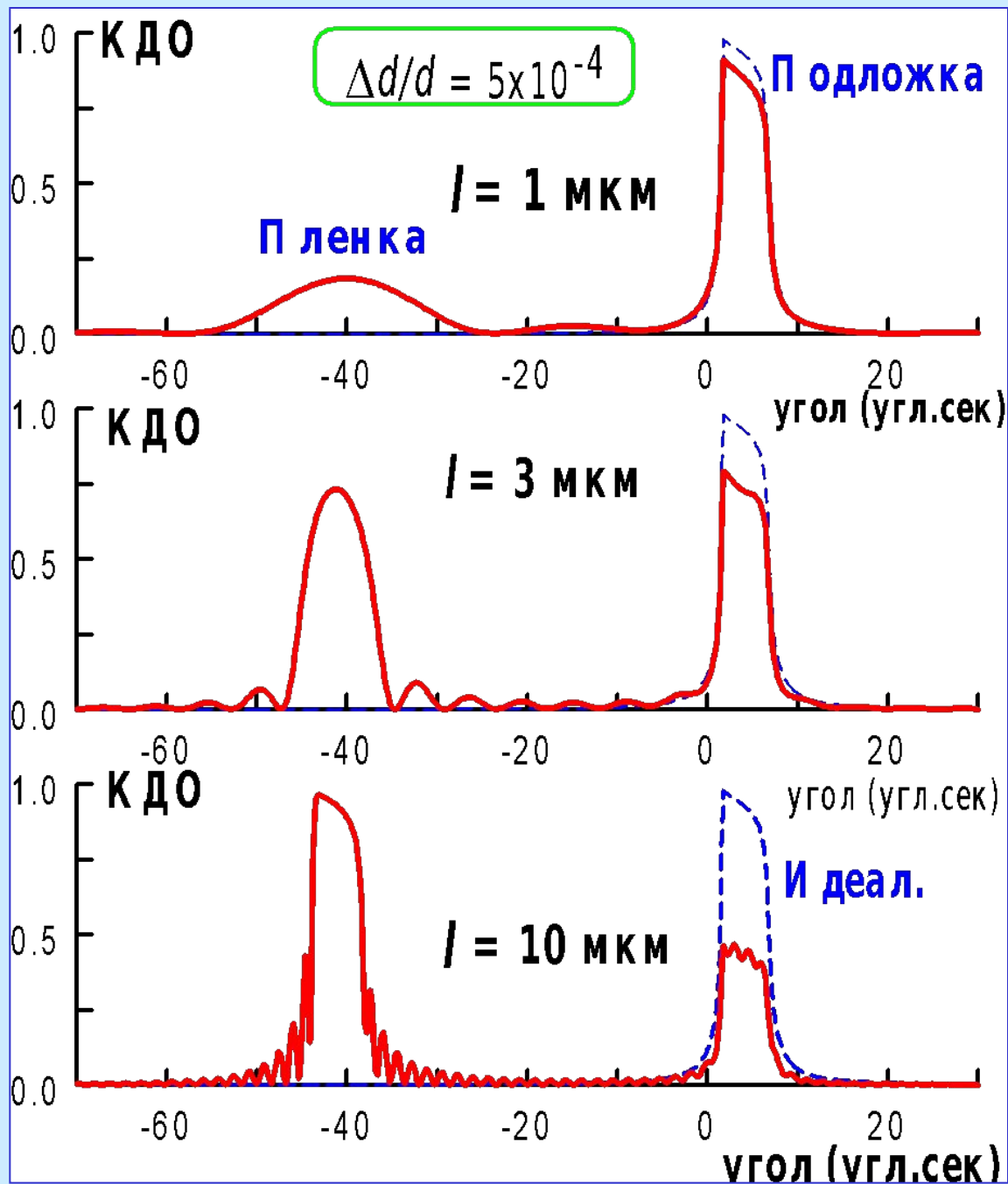


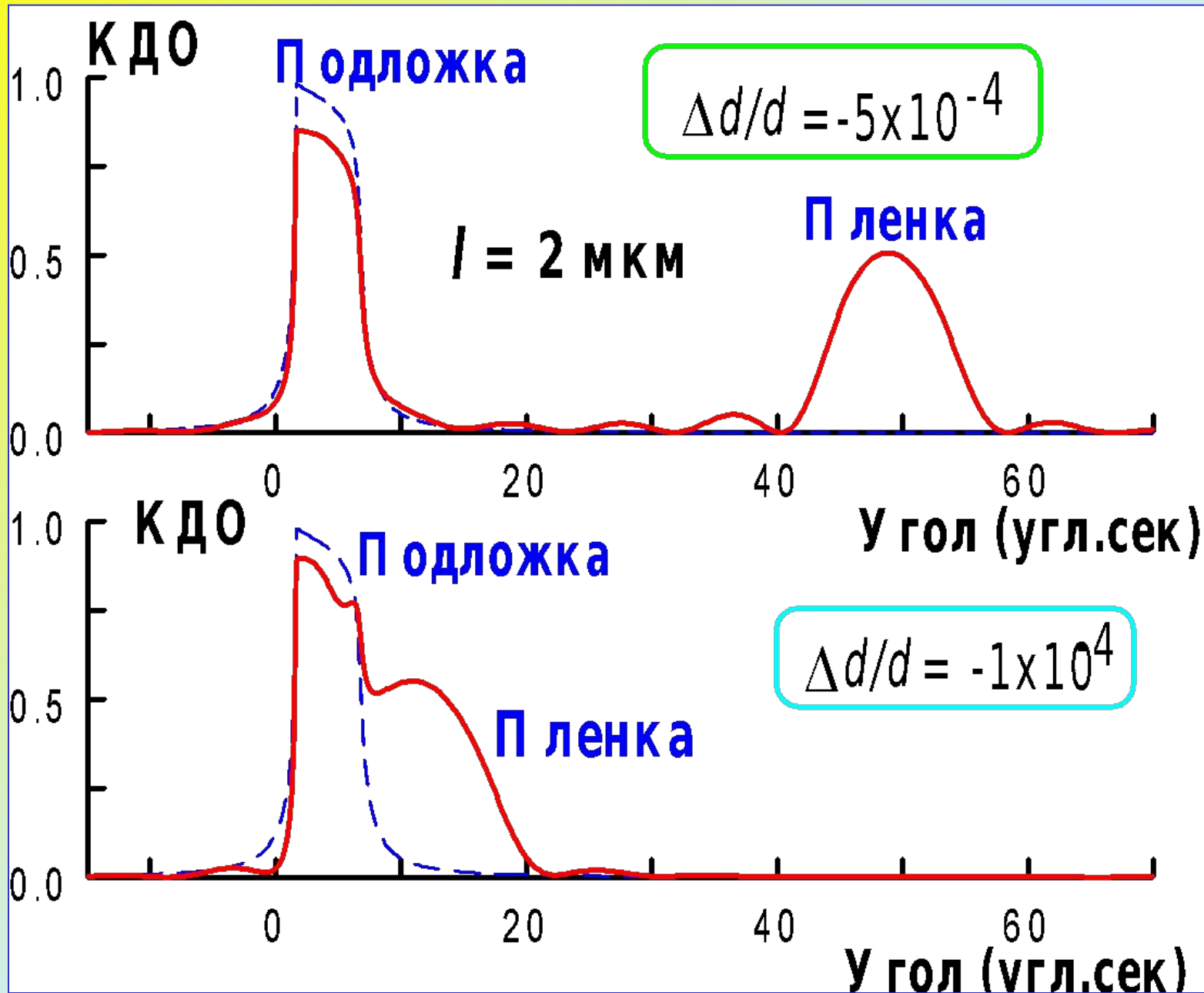
$$d + \Delta d$$

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

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

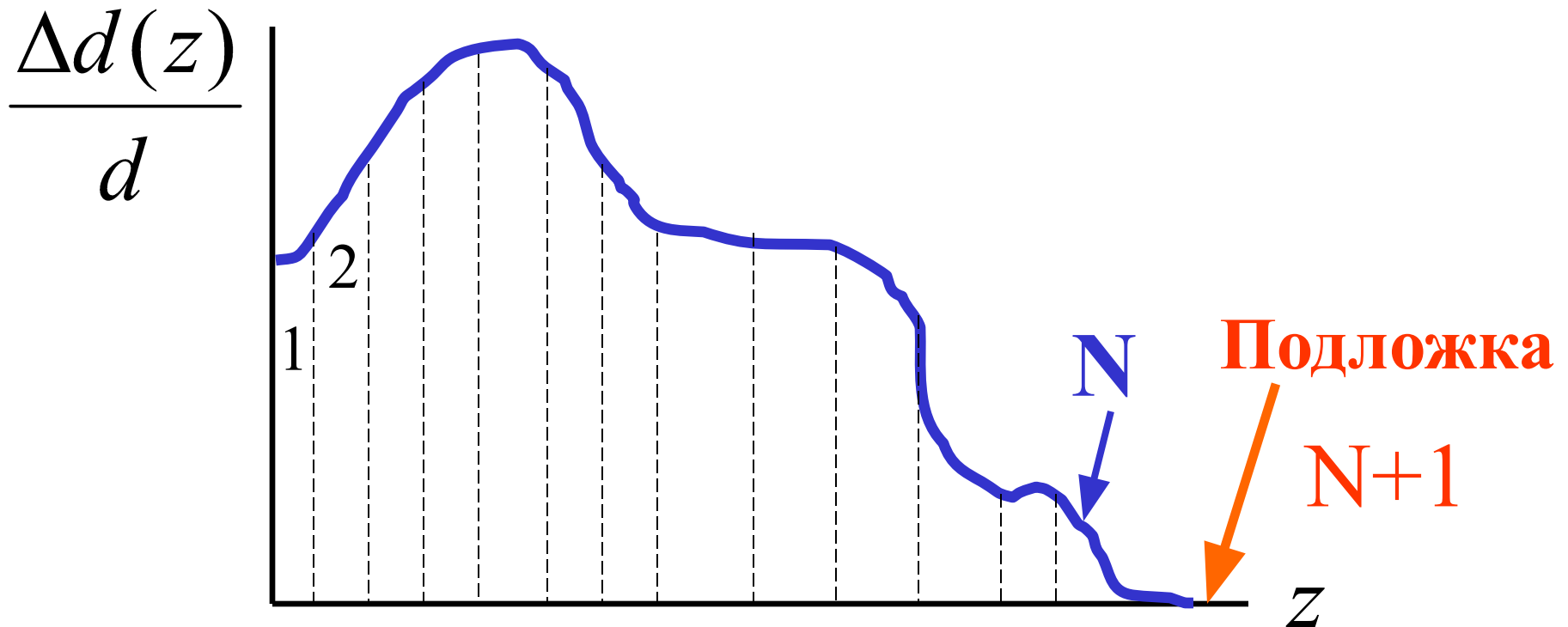
$$\Delta \theta_0 = -(\Delta d/d) \operatorname{tg} \theta_B$$





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

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

χ_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

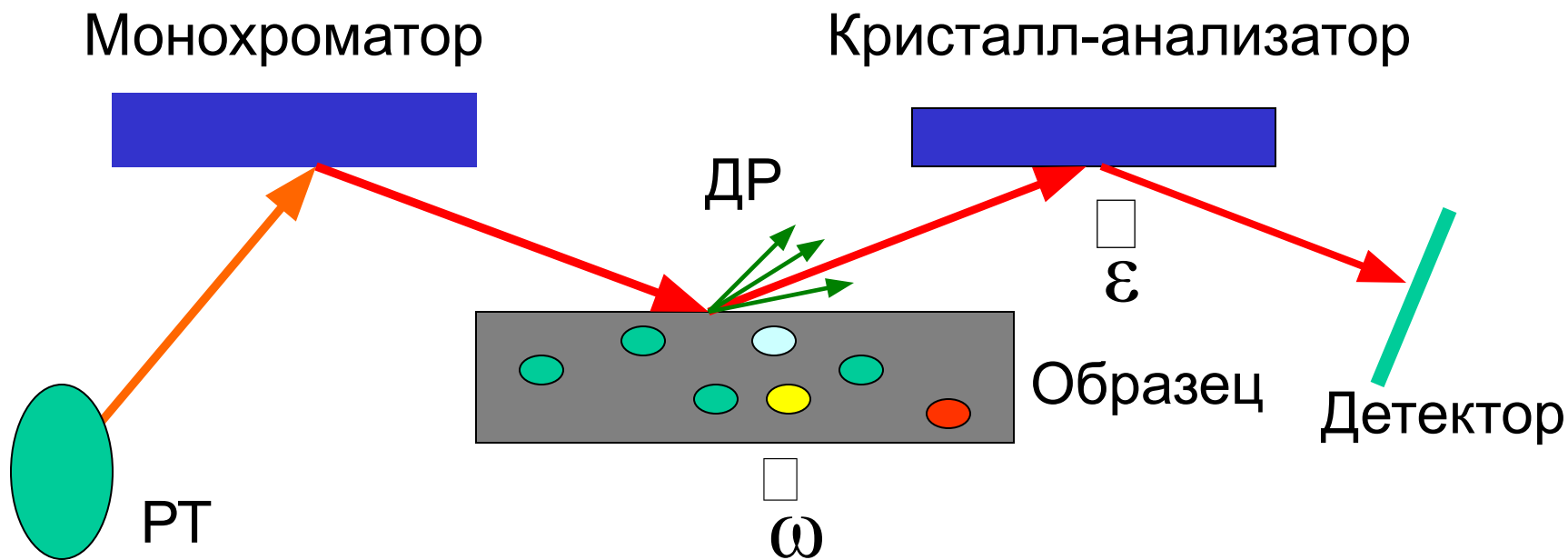
$$R(z) = \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{E_h(z)}{E_0(z)} \sqrt{\frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h}} e^{i\Phi(z)}$$

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

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

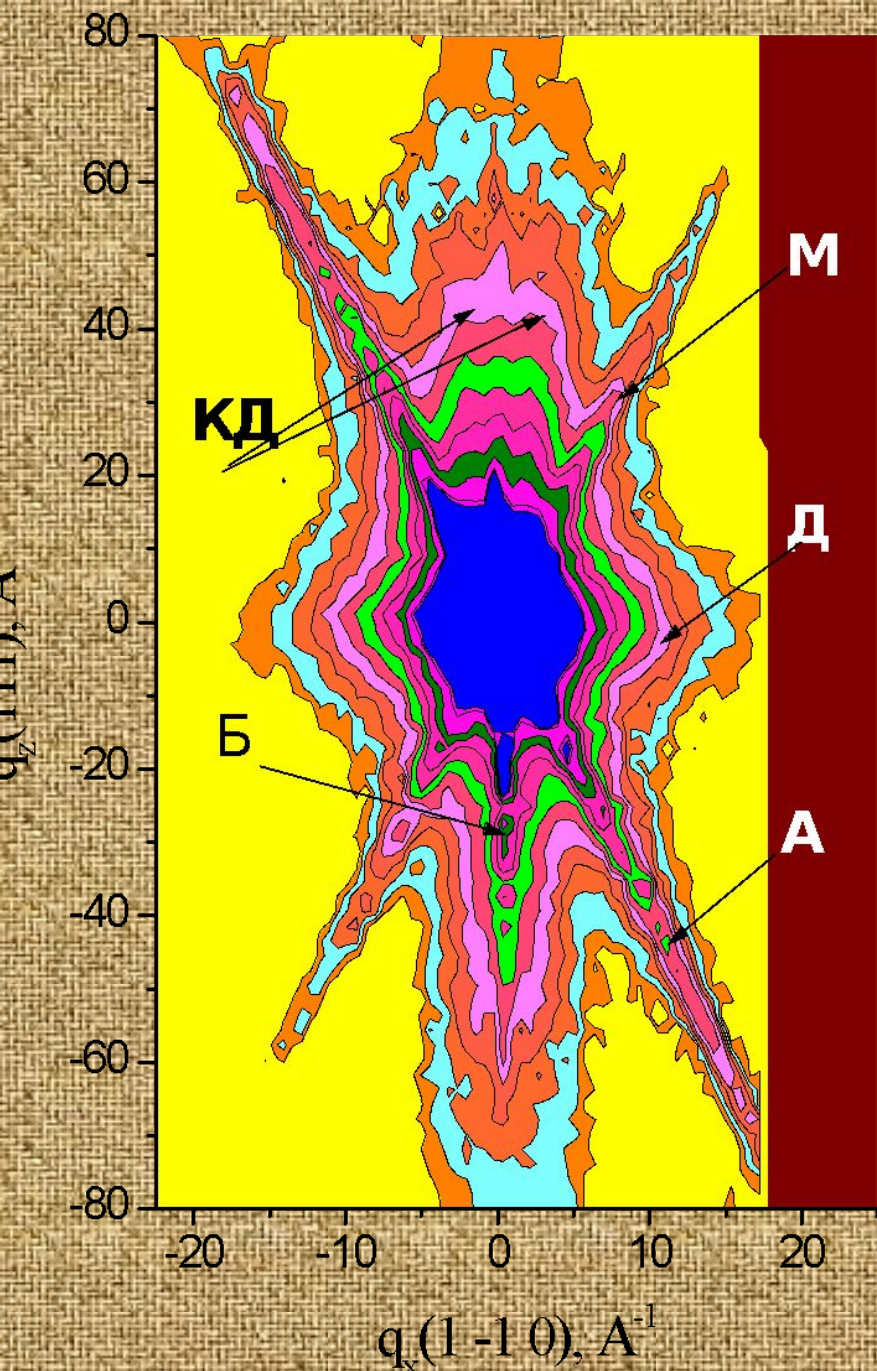
$$\tilde{C} = \frac{\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}{|\chi_{hr}|}.$$

Трехкристальная (высокоразрешающая) рентгеновская дифрактометрия



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

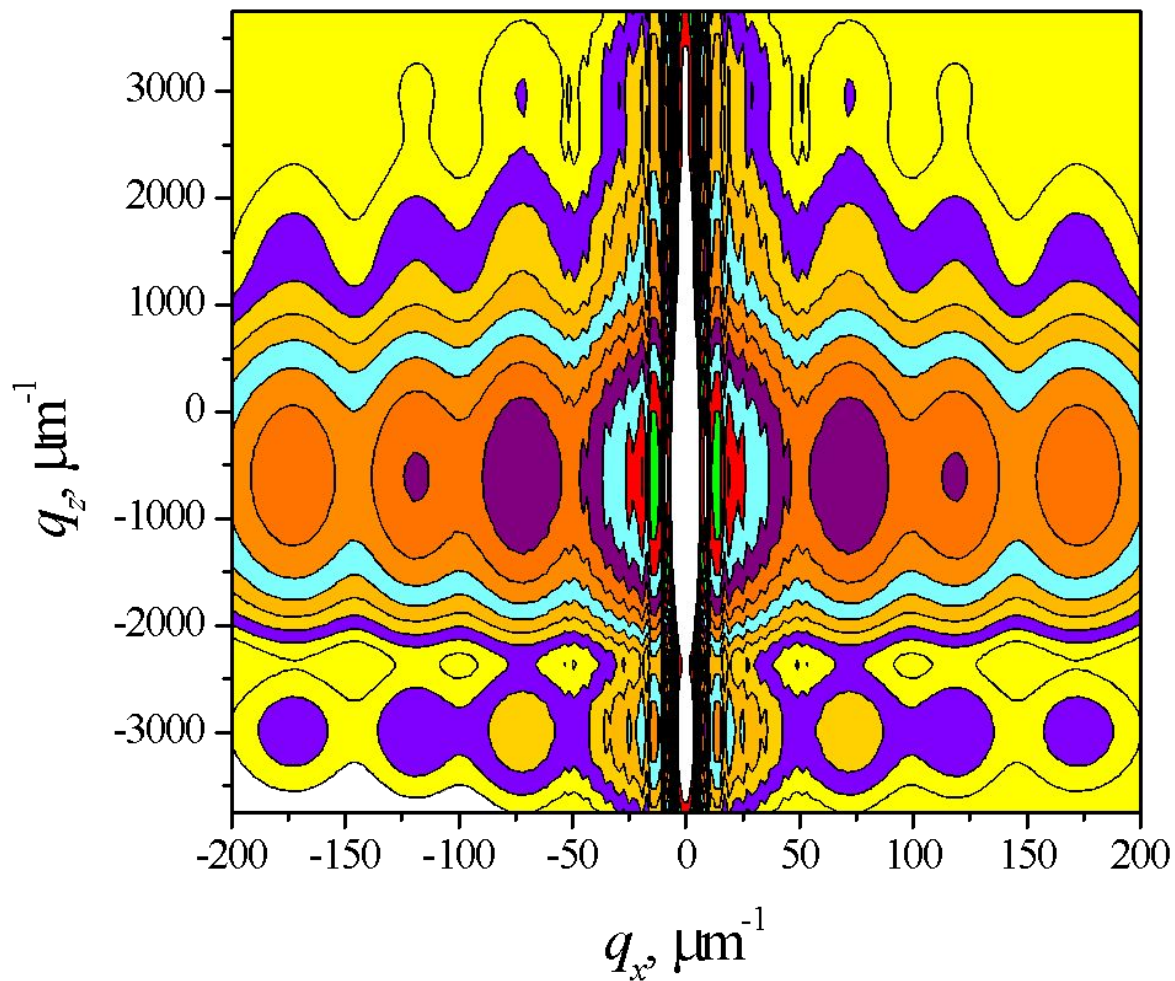
$$q_z = \frac{2\pi}{\lambda} \cos \theta_B \times \varepsilon$$



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.

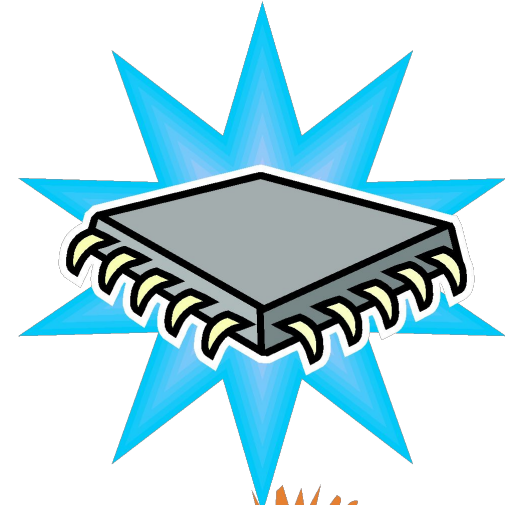
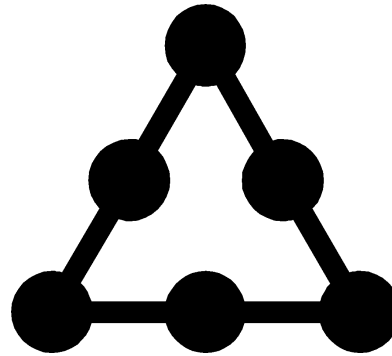
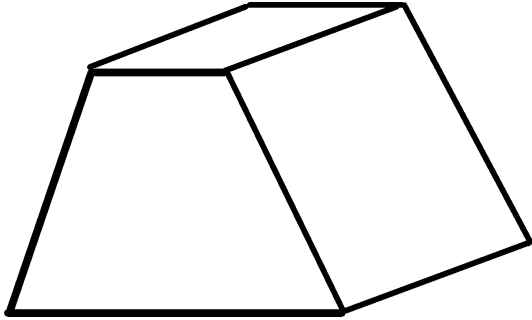
Радиус пор 25-30 нм,
 нанокристаллиты - 10 нм,
 степень пористости 56%.



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 ???



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

Спасибо за внимание

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