

Кинематическая теория дифракции в анизотропных кристаллах

М.А. Андреева, М.В. Горбунова, Е.Н. Овчинникова

МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва 119991, Ленинские горы, д. 1, стр.2

Анизотропия рассеяния рентгеновского излучения вблизи краев поглощения приводит, как известно, к появлению «запрещенных» рефлексов. В теории дифракции в этом случае амплитуду рассеяния и показатель преломления представляют в виде матрицы в ортах σ - и π - поляризованных волн, поскольку анизотропия приводит к изменению поляризации рассеянного излучения. Вблизи краев поглощения нельзя игнорировать влияние поглощения и преобразования поляризации при распространении излучения. В теории дифракции для мозаичного кристалла до сих пор ограничивались учетом этих эффектов для интенсивности проходящего и рассеянного излучения [1-3].

Мы рассматриваем влияние поглощения и преобразования поляризации на распространение излучения в одном блоке мозаики, то есть пересчитываем функцию Лауэ $\hat{F}^L$ в матричном виде:

$$\hat{F}^L = (\hat{F} + \hat{A}_2 \hat{F} \hat{A}_1 + \hat{A}_2^2 \hat{F} \hat{A}_1^2 + \dots + \hat{A}_2^{N-1} \hat{F} \hat{A}_1^{N-1}) \quad (1)$$

где $\hat{F}$ - матрица структурной амплитуды в σ - и π - ортах, N - число отражающих плоскостей, а матричные экспоненциалы $\hat{A}_1 = e^{i\hat{\eta}_1 kz}$, $\hat{A}_2 = e^{i\hat{\eta}_2 kz}$, описывают набег фазы, а также преобразование поляризации и поглощение для проходящей и рассеянной волн соответственно,

$$\hat{\eta}_i = \sqrt{\sin^2 \theta_i + 2(\hat{\eta}_i - 1)} \approx \sin \theta_i + \frac{\hat{\eta}_i - 1}{\sin \theta_i}, \quad i = 1, 2, \quad (2).$$

θ_i - углы с поверхностью для проходящей и дифрагированной волн, $\hat{\eta}_i$ - матричный показатель преломления для этих направлений. Существенно, что $\hat{F}$ нельзя вынести из суммы, как это обычно делается для применения формулы геометрической прогрессии, ввиду смешивания компонент при перемножении трех матриц. Однако, вычисление (1) достаточно быстрое по принципу мультипликативного интеграла.

Спектральные зависимости компонент матриц $\hat{F}$ и $\hat{\eta}_i$ для вычисления спектров отражения получены с использованием FDMNS комплекса [4]. Результат расчета $|\hat{F}^L|^2 / N^2$ при фиксированном угле

$$\theta = \arcsin\left(\frac{\lambda}{2D}\right) = 57.224^\circ \quad (D=0.1037 \text{ нм для отражения (105)}, \lambda = \frac{12.398}{E_{ph}^{res}}, E_{ph}^{res} = 7.112 \text{ keV} - \text{энергия К-края поглощения атомов Fe})$$

представлен на Рис. 1. На графиках также представлено изменение формы спектра при некогерентном сложении волн (модули в квадрате в сумме (1)) для толщины 424.65 нм, со-

ответствующей 4048 периодам (кривая обозначена «Mosaic»).

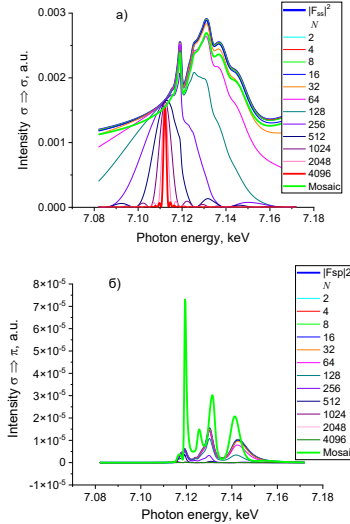


Рис. 1. Спектры (105) симметричного $\sigma \rightarrow \sigma'$ (а) и $\sigma \rightarrow \pi'$ (б) разрешенного отражения от кристалла $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_{12}\text{O}_{14}$, рассчитанные с использованием (1) для разного числа элементарных ячеек N в одном блоке мозаики.

Расчет показывает, что поглощение и преобразование поляризации при когерентном сложении волн (по формуле (1)) существенно даже для небольших толщин блока мозаики, что не учитывалось в предшествующих работах, рассматривающих только преобразование интенсивности при распространении волн [1-3]. Для $|F_{\sigma\sigma}^L|^2 / N^2$ (Рис. 1а) при увеличении N возникает примечательный эффект: преобразование спектра фактически в функцию Лауэ (фазовый множитель $e^{i4\pi \sin \theta D / \lambda}$ побеждает слабую спектральную зависимость). Интенсивность рассеяния с «повернутой поляризацией» при некогерентном сложении волн (Рис. 1б) существенно усиливается за счет преобразования поляризации при распространении волн. Этот эффект описан в [5].

Нами обнаружен также интересный эффект [6] совпадения форм спектров для случая некогерентного и интегрального по углу когерентного сложения волн.

Нами обнаружен также интересный эффект [6] совпадения форм спектров для случая некогерентного и интегрального по углу когерентного сложения волн.

1. М.А. Андреева, R.N. Kuz'min. Phys. Stat. Sol. (b), 1975, 71, K201-204.
2. V.E. Dmitrienko, V.A. Belyakov. Acta Cryst., 1980, A36, 1044-1050.
3. S.P. Collins, I. Dolbnya, B.A. Palmer et al. Journal of Physics: Conf. Ser., 2013, 425, 132015-1-5.
4. www.neel.cnrs.fr/fdmnes
5. Е.Н. Овчинникова, М.И. Горбунова, Кристаллография, 2026, в печати
6. М.А. Андреева, Е.Н. Овчинникова, М.В. Горбунова, J. Appl. Cryst., in press.