## ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

# ТЕОРИЯ ЛАУЭ-ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ТОЛСТОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ С НАКЛОННОЙ СТУПЕНЬКОЙ НА ВЫХОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ. II. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

© 2020 г. В. Г. Кон<sup>1</sup>, И. А. Смирнова<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия <sup>2</sup> Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия \*E-mail: irina@issp.ac.ru Поступила в редакцию 24.10.2019 г. После доработки 26.11.2019 г. Принята к публикации 02.12.2019 г.

Получено аналитическое решение задачи о дифракции Лауэ рентгеновской сферической волны в монокристалле с наклонной ступенькой на выходной поверхности. Общие формулы применяются для конкретного случая дифракции плоской волны в толстом кристалле в условиях реализации эффекта Бормана. Показано, что при условии увеличения толщины со стороны отраженного пучка относительная амплитуда отраженной волны определяется тремя комплексными членами, что формально может приводить к интерференции с увеличением максимумов интенсивности до 9 раз по отношению к ее значению в кристалле без ступеньки. Формула для проходящего пучка содержит только два члена, и увеличение не может быть более чем в 4 раза. Результаты расчетов по аналитической формуле совпадают с результатами, полученными численным методом, рассмотренным в первой части работы.

DOI: 10.31857/S0023476120040128

#### введение

В статье представлены результаты второй части работы, первая часть которой опубликована в [1]. Теоретически решается задача о распределении в пространстве (поперек пучка) интенсивностей проходяшей и отраженной волн в случае дифракции Лауэ рентгеновских лучей в толстом монокристалле с наклонной ступенькой на выходной поверхности. В первой части работы задача была решена численно. Было показано, что в переходной области между границей ступеньки и границей треугольника Бормана с вершиной на нижней границе ступеньки имеет место эффект сильного перераспределения интенсивности отраженного пучка таким образом, что максимумы интенсивности увеличиваются более чем в 7 раз по сравнению с ее значением перед ступенькой. Одновременно средняя по области интерференции интенсивность проходящего пучка существенно уменьшается, как и суммарная интенсивность двух пучков, что свидетельствует о нарушении условий для эффекта Бормана.

В [1] было показано, что задачу удобно разбить на два этапа. На первом этапе рассматривают кристалл в форме пластины, и решение находят методом преобразования Фурье, как сделано в [2–6]. На втором этапе необходимо решать уравнения Такаги [7]. Если в образце нет деформации кристаллической решетки, но он имеет форму со сложной границей, то решение уравнений Такаги можно получить в интегральной форме [8–14]. Иногда интегральная форма уравнений не дает прямого решения задачи, а приводит к уравнению, которое в ряде случаев удается решить аналитически.

Именно такой случай реализуется в рассматриваемой задаче дифракции Лауэ в монокристалле с наклонной ступенькой на выходной поверхности. В работе представлен вывод аналитического решения для второго этапа задачи. Используется метод, который впервые был применен в [15].

### ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ И ЕЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Схема численного эксперимента показана в первой части работы. Предполагается, что монохроматическая сферическая волна от точечного источника рентгеновского излучения, расположенного на расстоянии L от образца, падает на монокристалл в форме пластины толщиной t (максимальная толщина). На выходной поверхности кристалла имеется наклонная ступенька высотой  $t_0$ . Будем считать, что известны волновые





**Рис. 1.** Выходная граница кристалла в форме ступеньки и треугольник Бормана, в котором хотя бы одно поле зависит от координаты *x* (а). Различные варианты наклона ступеньки (б) при разных значениях параметра  $R = \text{tg } \theta/\text{tg } \theta_{\text{B}}$  (указаны на рисунке).

функции  $E_0(x)$  и  $E_h(x)$  для проходящего и отраженного пучков на толщине  $z = t_1 = t - t_0$ .

На втором этапе необходимо решить уравнения Такаги [7]:

$$\frac{2}{i}\frac{\partial E_0}{\partial s_0} = X_0 E_0 + X_{-h} E_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}), \qquad (1)$$

$$\frac{2}{i}\frac{\partial E_h}{\partial s_h} = [X_0 + 2\alpha_q]E_h + X_h E_0 \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}).$$
(2)

Здесь  $X_{0,h,-h} = K\chi_{0,h,-h}$ , где  $K = 2\pi/\lambda$  — волновое число,  $\chi_0$ ,  $\chi_h$ ,  $\chi_{-h}$  — компоненты Фурье поляризуемости кристалла для векторов обратной решетки 0, **h**, —**h** соответственно, координаты  $s_0$  и  $s_h$  отсчитываются вдоль направлений проходящей и отраженной волн, **u** — вектор смещения из-за возможной деформации кристаллической решетки, параметр отклонения от условия Брэгга  $\alpha_q = K(\theta - \theta_0)\sin 2\theta_B$ ,  $\lambda$  — длина волны рентгеновского излучения. Угол  $\theta - \theta_0$  описывает угловое положение кристалла относительно падающего излучения.

Рассмотрим случай, когда  $\alpha_q = 0$  и в кристалле нет деформаций (**u** = 0). В случае совершенного кристалла решение уравнений (1), (2) можно получить в интегральной форме через известные поля  $E_0$  и  $E_h$  на некоторой границе внутри треугольника Бормана с вершиной в точке наблюдения и сторонами в направлениях проходящей ( $s_0$ ) и отраженной ( $s_h$ ) волн [8–14]. В [1] рассматривали случай, когда толщина плоской части кристалла  $t_1$ велика по сравнению с толщиной дифракционной фокусировки [6, 16]:  $t_{df} = L|\chi_h|F$ , где F =

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 65 № 4 2020

 $= 1/(\sin\theta_B \sin 2\theta_B), \theta_B -$ угол Брэгга. Тогда на толщине  $t_1$  в области ступеньки на горизонтальной оси *х* волновая функция близка к константе, что соответствует плоской волне.

В отличие от [1] рассмотрим случай падающей плоской волны при точном выполнении условия Брэгга. Расстояние от точечного источника до кристалла должно быть значительно больше расстояния дифракционной фокусировки:  $L_{df} = t_1 C$ , где  $C = (|\chi_h|F)^{-1}$ . Для  $t_1 = 1$  мм это расстояние равно  $L_d = 32.9$  м. Заметим, что коллимацию падающего пучка на источниках синхротронного излучения третьего поколения легко выполнить с помощью составной преломляющей линзы [17].

На рис. 1а показана форма образца в области ступеньки на выходной поверхности, а также треугольник Бормана, в котором хотя бы одна волновая функция зависит от координаты x. Используем прием, который впервые был предложен в [15]. Он состоит в рассмотрении вместо реальных волновых функций разности волновых функций для исследуемого образца  $E_k(\mathbf{r})$  и образца в форме пластины  $A_k(z)$ . Заметим, что в случае плоской волны функция  $A_k(z)$  известна в аналитическом виде. Ясно, что интегральные уравнения для разностей будут такие же, однако граничные условия существенно различаются, потому что разность равна нулю там, где кристалл однороден по оси x.

Итак, рассмотрим функции

$$e_k(\mathbf{r}) = (E_k(\mathbf{r}) - A_k(z))F_0^{-1}(z), \quad k = 0, h,$$
 (3)

где

$$A_k(z) = C_k F_0(z) F_h^{-1}(z), \quad F_{0,h} = \exp(iX_{0,h}z/2\gamma_0).$$
 (4)

Здесь  $\gamma_0 = \cos \theta_B$ , коэффициенты  $C_k$  зависят от нормировки. В случае плоской волны они равны  $\pm 0.5$  для k = 0, *h* соответственно. Заметим, что поля  $e_k(\mathbf{r})$  отличны от нуля только внутри треугольника *acd* (рис. 1a).

Согласно интегральной формулировке теории [12] функцию  $e_h(p)$  в точке p на отрезке abможно выразить через функции на линиях ad и db. Но разности полей на линии ad равны нулю, поэтому имеем решение в виде:

$$e_h(p) = e_h(p') - \int_{dp'} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} e_h - \frac{i}{2} X_h \int_{dp'} ds_h R e_0, \quad (5)$$

$$R = J_0 (X((s_{0p} - s_0)(s_{hp} - s_h))^{1/2}),$$
 (6)

где  $X = (X_h X_{-h})^{1/2}$ ,  $s_{0p}$ ,  $s_{hp}$  – координаты точки *p*. Здесь и далее используем обозначения  $J_n(x)$  для функции Бесселя *n*-го порядка. С другой стороны, функция  $e_0(p')$  на линии db является решением интегрального уравнения

$$e_0(p') = \int_{dp'} ds_h \frac{\partial R}{\partial s_h} e_0 + \frac{i}{2} X_{-h} \int_{dp'} ds_0 R e_h, \tag{7}$$

если функция  $e_h(\mathbf{r})$  известна на этой линии. В рассматриваемом случае линия *db* является прямой. Введем координаты  $\xi$  и  $\xi_{\eta}$  для точек на линии *dp'* и в точке *p'*. Связь новых координат со старыми имеет вид

$$z = \cos \theta_{\rm B}(s_0 + s_h) = \xi x \cos \theta,$$
  

$$x = \sin \theta_{\rm B}(s_0 - s_h) = -\xi x \sin \theta.$$
(8)

Обозначим аргумент функции Бесселя в (6) буквой А. С учетом (8) легко получить, что на линии db

$$s_0 = \gamma_1 \xi, \quad s_h = \gamma_2 \xi,$$
  
 $A = b(\xi_\eta - \xi), \quad b = X(\gamma_1 \gamma_2)^{1/2},$ 
(9)

где

$$\xi_{\eta} = \xi_0 - \eta D_1, \quad \xi_0 = \frac{t_0}{\gamma}, \quad D_1 = \frac{\gamma_0}{\sin(\theta_B - \theta)}, \quad (10)$$

$$\gamma_{1} = \frac{\sin(\theta_{B} - \theta)}{\sin 2\theta_{B}}, \quad \gamma_{2} = \frac{\sin(\theta_{B} + \theta)}{\sin 2\theta_{B}}, \quad (11)$$
$$\gamma = \cos \theta.$$

Здесь  $\xi_{\eta}$  — длина отрезка *dp*',  $\eta$  — длина отрезка *pb*. Найдем зависимость интенсивностей проходящей и отраженной волн от параметра  $\eta$ .

Интеграл в (7) вычисляется по координате  $\xi$  в пределах от нуля до  $\xi_{\eta}$ . С целью упрощения записи сделаем замену переменных  $\xi \to \xi_{\eta} - \xi$ , которая не меняет пределов интегрирования. Тогда для производной можно записать выражение

$$\frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial \boldsymbol{s}_h} = \frac{1}{2} X \left( \frac{\boldsymbol{s}_0}{\boldsymbol{s}_h} \right)^{1/2} J_1(\boldsymbol{A}) = \frac{1}{2} X \left( \frac{\boldsymbol{\gamma}_1}{\boldsymbol{\gamma}_2} \right)^{1/2} J_1(\boldsymbol{b}\boldsymbol{\xi}).$$
(12)

В результате уравнение (7) после замены переменных принимает вид

$$e_{0}(\xi_{\eta}) = \frac{b}{2} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{0}(\xi_{\eta} - \xi) J_{1}(b\xi) + \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_{1} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{h}(\xi_{\eta} - \xi) J_{0}(b\xi).$$
(13)

Справа стоят интегралы в виде свертки. Для решения интегрального уравнения (13) применим к нему преобразование Лапласа

$$e(q) = \int_{0}^{\infty} d\xi \exp(-q\xi) e_0(\xi)$$
(14)

и используем его свойство, согласно которому свертка двух функций превращается в произведение их образов. Тогда имеем

$$e_0(q) = \frac{b}{2} e_0(q) [J_1(b\xi)]_q + \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_1 e_h(q) [J_0(b\xi)]_q.$$
(15)

Квадратные скобки обозначают преобразование Лапласа функции внутри них, которое зависит от аргумента *q*. В справочнике [18] есть интеграл с номером 6.646.1, который можно преобразовать к виду

$$\left[ \left( \frac{\xi}{\xi + a} \right)^{n/2} J_n(b[\xi(\xi + a)]^{1/2}) \right]_q = \frac{b^n \exp(a_2(q - u))}{u(q + u)^n},$$
(16)

где

$$a_2 = a/2, \quad u = (q^2 + b^2)^{1/2}.$$
 (17)

Подставим (16) при a = n = 0 в (15) и выполним вычисления, используя обозначение  $W = iX_{-h}\gamma_1/2$ :

$$e_{0}(q) = We_{h}(q) \left( \frac{[J_{0}(b\xi)]_{q}}{1 - (b/2)[J_{1}(b\xi)]_{q}} \right) =$$

$$= \frac{We_{h}(q)}{u - (b^{2}/2)(u + q)^{-1}}.$$
(18)

Можно показать, что знаменатель в правой части (18) равен (u + q)/2, а обратная функция 2/(u + q) равна преобразованию Лапласа функции  $U(b\xi)$ , где

$$U(x) = 2\frac{J_1(x)}{x}.$$
 (19)

Решение интегрального уравнения (13) после обратной замены переменных  $\xi \to \xi_{\eta} - \xi$  имеет следующий вид:

$$e_{0}(\xi_{\eta}) = \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_{1} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi U(b[\xi_{\eta} - \xi]) e_{h}(\xi).$$
(20)

Рассмотрим уравнение (5). В данном случае ситуация сложнее, поскольку аргумент функции Бесселя зависит от координат точки *p* на линии *ab*. Эти координаты равны:  $z_p = t_0 = \xi_0 \cos\theta$ ,  $x_p = -\xi_0 \sin\theta - \eta$ , а для точки на отрезке *dp'* координаты определены в (8). В результате простых вычислений легко получить, что

$$s_{op} - s_o = \gamma_1 \xi_d,$$
  

$$s_{hp} - s_h = \gamma_2 (\xi_d + a), \quad \xi_d = \xi_\eta - \xi,$$
(21)

$$R = J_0(b\sigma_{\xi}), \quad \frac{\partial R}{\partial s_0} = \frac{b\varsigma_{\xi}}{2\gamma_1} J_0(b\sigma_{\xi}),$$
  
$$a = \varepsilon\eta, \quad \varepsilon = D_1 + D_2,$$
 (22)

$$\sigma_{\xi} = \left(\xi_d [\xi_d + a]\right)^{1/2},$$

$$\varsigma_{\xi} = \left(\frac{\xi_d + a}{\xi_d}\right)^{1/2}, \quad D_2 = \frac{\gamma_0}{\sin(\theta_{\rm B} + \theta)}.$$
(23)

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 65 № 4 2020

С учетом описанных выше соотношений уравнение (5) имеет следующий вид:

$$e_{h}(\eta) = e_{h}(\xi_{\eta}) - \frac{b}{2} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{h}(\xi) \varsigma_{\xi} J_{1}(b\sigma_{\xi}) - \frac{i}{2} X_{h} \gamma_{2} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{0}(\xi) J_{0}(b\sigma_{\xi}).$$

$$(24)$$

Интегралы снова представляют собой свертку двух функций, поэтому удобно использовать преобразование Лапласа, однако в данном случае имеем функции от более сложного аргумента. Применим преобразование Лапласа к третьему члену в (24) и подставим (18). Получаем с учетом формулы (16):

$$\frac{b}{2}e_{h}(q)\frac{b\exp(a_{2}(q-u))}{u(q+u)} =$$

$$= \frac{b}{2}e_{h}(q)\left[\left(\frac{\xi}{\xi+a}\right)^{1/2}J_{1}(b[\xi(\xi+a)]^{1/2})\right]_{q}.$$
(25)

Переходя из *q*-пространства обратно в ξ-пространство и прибавляя первый член, получаем для суммы второго и третьего членов выражение

$$-\frac{b}{2}\int_{0}^{\xi_{\eta}}d\xi e_{h}(\xi)J_{1}(b\sigma_{\xi})\left[\left(\frac{\xi_{d}+a}{\xi_{d}}\right)^{1/2}-\left(\frac{\xi_{d}}{\xi_{d}+a}\right)^{1/2}\right].$$
 (26)

Выполняя вычисления для волновой функции отраженного пучка на линии *ab*, получаем вместо (24) более удобную формулу

$$e_{h}(\eta) = e_{h}(\xi_{\eta}) - \frac{1}{4}b^{2}\varepsilon\eta \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{h}(\xi) \times$$

$$\times U(b([\xi_{\eta} - \xi][\xi_{\eta} - \xi + \varepsilon\eta])^{1/2}).$$
(27)

Эта формула выражает неизвестную функцию  $e_h(\eta)$  на линии *ab* через известную функцию  $e_h(\xi)$  на линии *bd*. Эта функция известна, так как функция  $E_h(\mathbf{r})$  на этой линии просто переносится с линии *de* в направлении отраженного пучка, т.е. ее значение в точке p' совпадает с ее значением в точке p'', а разность легко вычислить.

Формулу для функции  $e_0(\eta)$  на линии *ab* получим аналогично (24) с очевидными изменениями:

$$e_{0}(\eta) = \frac{b}{2} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{0}(\xi) \frac{1}{\zeta_{\xi}} J_{1}(b\sigma_{\xi}) + \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_{1} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi e_{h}(\xi) J_{0}(b\sigma_{\xi}).$$
(28)

Применим преобразование Лапласа к первому члену в правой части с учетом (25) и подставим  $e_0(q)$  из (18). В результате получим выражение,

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 65 № 4 2020

равное второму члену, если заменить в нем  $J_0(b\sigma_{\xi})$ на  $J_2(b\sigma_{\xi})\zeta_{\xi}^{-2}$ . Соответственно получаем в сумме:

$$\frac{J_0(b\sigma_{\xi})(\xi_d + a) + J_2(b\sigma_{\xi})\xi_d}{\xi_d + a} =$$

$$= \frac{U(b\sigma_{\xi})\xi_d + J_2(b\sigma_{\xi})a}{\xi_d + a}.$$
(29)

Здесь использовано соотношение  $J_0 + J_2 = U$ . Ответ можно записать в виде

$$e_{0}(\eta) = \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_{1} \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi U_{1}(\xi_{\eta} - \xi, \eta) e_{h}(\xi), \qquad (30)$$

где

$$U_1(\zeta, \eta) = \frac{\xi U(b[\xi(\xi + \varepsilon\eta)]^{1/2}) + \varepsilon\eta J_0(b[\xi(\xi + \varepsilon\eta)]^{1/2})}{\xi + \varepsilon\eta}.$$
 (31)

TT (8 ...)

Функции на линии *bc* вычисляются проще. Так, поле  $E_h(\mathbf{r})$  на этой линии просто переносится с линии *de* в направлении отраженного пучка и в случае падающей плоской волны не зависит от *x*. А поле  $E_0(\mathbf{r})$  переносится с линии *bd* в направлении проходящего пучка. То есть поле в точке  $p_0$ равно полю в точке *p'*. Поле  $E_0(\mathbf{r})$  на линии *bd* вычисляется по формуле (20).

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим те же параметры, что и первой части работы, а именно: энергию фотонов  $E = \hbar \omega =$ = 10 кэВ,  $t_1 = 1$  мм, кристалл кремния, отражение 220, угол Брэгга  $\theta_B = 18.84^\circ$ . Для функции  $e_h(\xi)$  на линии *bd* получим выражение с учетом (4):

$$e_h(\xi) = C_h F_h^{-1}(t_1) [F_0^{-1}(\gamma \xi) - F_h^{-1}(\gamma \xi)].$$
(32)

Удобно анализировать отношение интенсивностей пучков на полной толщине *t* в кристалле со ступенькой к отношению в кристалле без ступеньки. Для этого рассмотрим отношение  $R_h(\eta) = E_h(\eta)/A_h(t)$  на линии *ab*. Тогда из (27) с учетом (4) имеем

 $R_h(\eta) = 1 + g_h(\gamma D_1 \eta) - G_h(\eta),$ 

где

$$G_{h}(\eta) = \frac{1}{4}b^{2}\epsilon\eta \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi g_{h}(t_{0} - \gamma\xi) \times$$

$$\times U(b([\xi_{\eta} - \xi][\xi_{\eta} - \xi + \epsilon\eta])^{1/2}),$$
(34)

(33)

$$g_h(x) = CF_0(x) - F_h(x), \quad C = F_h(t_0)F_0^{-1}(t_0).$$
 (35)

В интеграле  $G_h(\eta)$  удобно сделать замену переменных  $\xi = \xi_{\eta} - \xi_1$  без изменения пределов интегрирования, окончательно получим

$$G_{h}(\eta) = \frac{1}{4}b^{2}\varepsilon\eta \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi_{1} \times (36)$$
$$\times g_{h}(\gamma D_{1}\eta + \gamma\xi_{1})U(b(\xi_{1}[\xi_{1} + \varepsilon\eta])^{1/2}).$$

Заметим, что при  $\eta = \eta_m = t_0/\gamma D_1$  второй и третий члены в (33) равны нулю и отношение равно единице, т.е. решение непрерывно на границе треугольника Бормана. При  $\eta = 0$  параметр  $R_h(0) =$  $= F_h(t_0)/F_0(t_0)$ , и относительная интенсивность очень слабо зависит от высоты ступеньки, однако реальная интенсивность от высоты ступеньки не зависит и равна интенсивности поля на толщине  $t_1$ .

Итак, формула для относительной интенсивности содержит три члена, причем второй и третий члены являются комплексными. Соответственно в сумме три члена формально могут увеличить интенсивность в 9 раз, если их модули примерно равны. В [1] было показано, что численный расчет приводит к увеличению максимумов интенсивности более чем в 7 раз. Формула (33) позволяет проанализировать, как это происходит.

Из формулы (30) с учетом (4) получаем формулу для отношения  $R_0(\eta) = E_0(\eta)/A_0(t)$  на линии *ab*:

$$R_0(\eta) = 1 - G_{01}(\eta), \tag{37}$$

где

$$G_{01}(\eta) = \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_1 \int_0^{\varsigma_{\eta}} d\xi_1 g_h(\gamma D_1 \eta + \gamma \xi_1) U_1(\xi_1, \eta). \quad (38)$$

В формуле (37) всего два члена, т.е. формально максимум интенсивности может увеличиваться до четырех.

Рассмотрим отношение  $R_0(\eta) = E_0(\eta)/A_0(t)$  на линии *bd*. В этом случае координата  $\eta$  отсчитывается от точки *b* в сторону точки *d*, а  $\xi_{\eta} = \xi_0 - \eta D_2$ . Точке *p* соответствует точка *p*<sub>0</sub> на рис. 1а. Делая те же преобразования, что и раньше, получаем

$$R_0(\eta) = F_0^{-1}(\gamma D_2 \eta) [F_h(\gamma D_2 \eta) - G_{02}(\eta)], \qquad (39)$$

где

$$G_{02}(\eta) = \frac{i}{2} X_{-h} \gamma_1 \int_{0}^{\xi_{\eta}} d\xi_1 g_h(\gamma D_2 \eta + \gamma \xi_1) U(b\xi_1).$$
(40)

При выводе формулы (39) было учтено, что напряженность поля  $E_0$  в точках  $\eta$  на отрезке *bc* и  $\xi_{\eta}$ на отрезке *bd* имеет одно и то же значение, а также что  $C_h = -C_0$ . При  $\eta = 0$  формула (39) дает такое же значение, что и формула (37), а при  $\eta = \eta_m = t_0/\gamma D_2$ выражение равно  $F_h(t_0)/F_0(t_0)$ , т.е. чуть больше единицы, так как на высоте  $t_0$  реальное поле не поглощается, а знаменатель в отношении соответствует толщине *t*.

На рис. 16 показаны три типа наклона ступеньки, которые можно характеризовать разны-



**Рис. 2.** Зависимость относительной интенсивности проходящего (*T*) и отраженного (*R*) пучка на участке выходной поверхности, совпадающей с основанием треугольника Бормана (линия *ac* на рис. 1a),  $x_0 = 68.2 \text{ мкм}$ , *R*: 0.5 (a), 0 (б), -0.5 (в).

ми значениями параметра  $R = \operatorname{tg} \theta/\operatorname{tg} \theta_{\mathrm{B}}$  при отсчете угла  $\theta$ , как на рис. 1а. На рис. 2 показаны распределения вычисленной по формулам (33), (37), (39) относительной интенсивности  $I/I_0 =$  $= |R_{0,h}|^2$  проходящего (*T*) и отраженного (*R*) пуч-

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ том 65 № 4 2020

ков на всем основании *ас* треугольника Бормана для условий:  $t_0 = 0.2$  мм, R = 0.5, 0, -0.5 соответственно. Результаты расчета численным методом [1] для тех же параметров совпадают с данными, полученными в настоящей работе. Интересно, что результат расчета [1] в случае L = 2 м не сильно отличается от того, который показан на рис. 2а. Дело в том, что толстый кристалл на малом расстоянии от точечного источника излучения сам создает расходящуюся сферическую волну, которая в области ступеньки почти совпадает с плоской волной.

Как следует из расчетов, наиболее интересные результаты получаются при положительных значениях параметра R, когда отличие от единицы невелико. В этом случае интенсивность отраженного пучка осциллирует с малым периодом, достигая в максимумах наиболее высоких значений, близких к девяти. Но это происходит не всегда, а периодически зависит от высоты ступеньки.

Относительная интенсивность отраженного пучка остается больше, чем падающего пучка, для всех значений |R| < 1. При |R| > 1 формулы (33), (37), (39) не применимы, и расчет надо делать иначе. Отметим, что наблюдается некоторая корреляция между максимумами и минимумами интенсивности прошедшего и отраженного пучков в том смысле, что они возникают одновременно. В этом заключается отличие данных осцилляций от экстинкционных осцилляций интенсивности плоской волны в зависимости от толщины кристалла, когда интенсивность прошедшего пучка перетекает в интенсивность отраженного и обратно.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Кон В.Г., Смирнова И.А. // Кристаллография. 2020. Т. 65. № 4. С. 515.
- 2. Kato N. // Acta Cryst. 1961. V. 14. P. 526.
- 3. Kato N. // Acta Cryst. 1961. V. 14. P. 627.
- 4. Kato N. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. P. 2225.
- 5. Kato N. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. P. 2231.
- 6. *Афанасьев А.М., Кон В.Г.* // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 1775.
- 7. Takagi S. // Acta Cryst. 1962. V. 15. P. 1311.
- Слободецкий И.Ш., Чуховский Ф.Н., Инденбом В.Л. // Письма в ЖЭТФ. 1968. Т. 8. С. 90.
- 9. Uragami T.S. // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. V. 27. P. 147.
- 10. Uragami T.S. // J. Phys. Soc. Jpn. 1970. V. 28. P. 1508.
- 11. Uragami T.S. // J. Phys. Soc. Jpn. 1971. V. 31. P. 1141.
- 12. *Afanas'ev A.M., Kohn V.G.* // Acta Cryst. A. 1971. V. 27. P. 421.
- Saka T., Katagawa T., Kato N. // Acta Cryst. A. 1971. V. 28. P. 102.
- Saka T., Katagawa T., Kato N. // Acta Cryst. A. 1971. V. 28. P. 113.
- 15. Афанасьев А.М., Кон В.Г. // Укр. физ. журн. 1972. Т. 17. С. 424. http://kohnvict.ucoz.ru/art/004r.pdf
- Kohn V.G., Smirnova I.A. // Acta Cryst. A. 2018. V. 74. P. 699.
- Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Lengeler B. // Nature. 1996. V. 384. P. 49.
- Градитейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматлит, 1963. 1100 с.