

12  
ИАЭ-1890



Ордена Ленина

Институт атомной энергии

им. И.В. Курчатова

*А. М. Афанасьев, В. Г. Кон*

Динамическая теория  
рентгеновских лучей в  
кристаллах с дефектами

Москва 1969

### Annotation

Sets of integral equations are obtained which describe the X-ray diffraction in crystals with defects. A simple description of defects is suggested both for weakly as well as strongly distorted regions of the crystal.

In the case of ideal crystals, the equations give a simple mean of determination of wave fields in the crystal with an arbitrary incident beam distribution. For the Bragg case diffraction, the problem has been solved for the first time, the solution being given for crystals of arbitrary thickness.

For distorted crystals, the integral equations permit a universal treatment of both weakly and strongly distorted regions. The problem of image determination from strongly distorted regions is confined to the problem of solving of a simple one-dimensional integral equation.

The first iteration approximation of the initial integral equations is shown to give the results obtainable by the method of Fourier analysis with the defect being treated as a small perturbation.

### АННОТАЦИЯ

Получены замкнутые системы интегральных уравнений, описывающие дифракцию рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами. Предложено простое описание дефектов как для слабо, так и для сильно искаженных областей кристалла.

В случае идеальных кристаллов эти уравнения дают простой способ нахождения волновых полей в кристалле при произвольном распределении падающего пучка. В дифракционном случае Брэгга эта задача решена впервые, причем решение дано для произвольных по толщине кристаллов.

В случае искаженных кристаллов интегральные уравнения позволяют в едином подходе рассмотреть как слабо, так и сильно искаженные области кристалла. Задача определения изображений от сильно искаженных областей сведена к задаче нахождения решения одномерного интегрального уравнения.

Показано, что первое итерационное приближение исходных интегральных уравнений содержит в себе результаты, которые получаются методом Фурье-анализа при рассмотрении области дефекта как слабого возмущения.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени имеется довольно большое количество работ, посвященных динамической теории рентгеновских лучей в искаженных кристаллах или кристаллах с дефектами (1-7, 9, 10). Тем не менее проблема в целом остается далеко не завершенной, так как здесь возникают большие математические трудности. Одно из направлений подхода к этой проблеме, связанное с работами Пеннинга и Полдера /1/, а также с серией работ Като /2/, основано на использовании метода, близкого к квазиклассическому методу квантовой механики. В работах /1,2/ были получены интересные результаты в аналитической форме. Однако область применимости этого метода сильно ограничена случаями очень слабо искаженных кристаллов.

В другом подходе, развиваемом Топеном /3/, используются непосредственно численные методы решения линейных дифференциальных уравнений для волновых полей в кристалле, которые являются модификацией системы уравнений, ранее полученных Такаги /4/. Хотя такой путь дает возможность численного решения задачи для широкого круга дефектов, здесь довольно рано происходит переход к чисто математическим задачам, что не позволяет использовать физические аспекты явлений, которые могли бы упростить анализ. Кроме того, в этом подходе имеются трудности при описании сильно искаженных областей. Подробный анализ условий применимости метода Като, а также уравнений, используемых Топеном, дан в работе /5/.

В работах /6,7/ используется метод Фурье-анализа. Предполагается, что этот метод может дать новые результаты. Однако, как показано в настоящей работе, он является малозффективным (см. раздел 6).

В последнее время большой интерес был проявлен также к проблеме определения волнового поля в идеальном кристалле, но при произвольных граничных условиях. Для решения этой проблемы оказались полезными интегральные соотношения, связывающие волновые поля внутри и на входной поверхности кристалла. Эти соотношения были получены в работах /8-10/. Кроме того, в работе /10/ они были эффективно использованы при решении задачи об изображении, даваемом дефектом упаковки.

В настоящей работе мы развиваем новый подход, основанный на использовании интегральных уравнений. При этом предложено простое описание искаженных областей кристалла, включая и сильно деформированные области (см. раздел 2), основанное на том физическом факте, что в сильно искаженных областях не происходит дифракционного рассеяния, а, кроме того, некогерентное рассеяние всегда мало. В разделе 2 предложена система дифференциальных уравнений типа уравнений Такаги, однако в несколько иной форме, чем в работах /3, 5/. В эти уравнения включаются также и сильно искаженные области.

В разделе 3 получена система интегральных уравнений для описания волновых полей в кристалле с дефектами как для задачи прохождения (случай Лауэ), так и для задачи отражения (случай Брэгга). Прежде всего с помощью этих уравнений находится распределение поля в идеальном кристалле в случае задачи Брэгга, при произвольном распределении падающей волны и произвольной толщине кристалла. (В работах /8-10/ аналогичная задача была решена лишь в случае Лауэ) В случае искаженных кристаллов удобство интегральных уравнений состоит в том, что они позволяют в едином подходе рассмотреть как слабо, так и сильно искаженные кристаллы. Последнее обстоятельство дает возможность учесть в каждом конкретном случае специфику дефекта.

В разделе 4 намечен путь получения результатов Пеннинга и Полдера /1/ и Като /2/. В разделе 5 получены одномерные

интегральные уравнения для нахождения изображений от сильно искаженных областей произвольной формы.

В разделе 6 проводится Фурье-анализ проблемы на основе метода, разработанного ранее /11/. При этом оказывается существенным использование граничных условий для волны, рассеянных дефектами. Однако при рассмотрении дефекта как слабого возмущения анализ Фурье дает результаты, тождественные первому итерационному приближению интегральных уравнений.

## 2. ВЫВОД ИСХОДНОЙ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

При описании электромагнитного поля в кристалле будем использовать уравнения Максвелла для вектора электрического поля  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$  ( $\omega$  - частота падающей волны):

$$\nabla^2 \vec{E} - \text{grad div} \vec{E} + \varkappa^2 \vec{E} = -\varkappa^2 \frac{4\pi i}{\omega} \vec{j}, \quad (2.1)$$

где  $\varkappa = \omega/c$  ( $c$  - скорость света),  $\vec{j}(\vec{r}, \omega)$  - плотность тока, индуцированного электромагнитной волной, которая в общем случае является линейным функционалом от  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$ :

$$\vec{j}(\omega, \vec{r}) = \int d\vec{r}' \epsilon_{\omega}^{ik}(\vec{r}, \vec{r}') E^k(\vec{r}', \omega) \quad (2.2)$$

Уравнение (2.1) удобно тем, что можно провести последовательное вычисление тока  $\vec{j}$ , учитывающее все возможные процессы взаимодействия электромагнитной волны с кристаллом /12/. В общем случае, уравнение (2.2) дает нелокальную связь между  $\vec{j}$  и  $\vec{E}$ , и, как показывают расчеты, эта нелокальность связана с процессами фотоэлектрического поглощения, комптоновского рассеяния, а также с процессами неупругого рассеяния на фононах. Однако основным членом в  $\epsilon_{\omega}^{ik}(\vec{r}, \vec{r}')$ , связанный с томсоновским рассеянием, носит строго локальный характер, т.е.

$$\epsilon_{\omega}^{ik}(\vec{r}, \vec{r}') = \epsilon(\vec{r}) \delta^{ik} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.3)$$

Поэтому для простоты мы будем предполагать локальную связь (2.3) и для остальных процессов, так как, с одной стороны, учет

нелокальности приводит к резкому математическому усложнению задачи, а с другой — не вносит существенных изменений в конечные результаты.

С учетом (2.3) для правой части уравнения (2.1) имеем

$$\frac{4\pi i}{\omega} \vec{j}(\vec{r}, \omega) = \chi(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, \omega), \quad (2.4)$$

где  $\chi(\vec{r}) = \frac{4\pi i}{\omega} \epsilon(\vec{r})$  — поляризуемость кристалла.

Рассмотрим кристалл, содержащий дефекты, которые будем рассматривать как некоторые конечные области, где нарушается регулярная структура кристалла (рис. 1). В области вне дефекта (С) поляризуемость  $\chi(\vec{r})$  есть периодическая функция с периодом кристаллической решетки, и поэтому она может быть представлена рядом Фурье по векторам обратной решетки:

$$\chi^{(id)}(\vec{r}) = \sum_h \chi_h^{(id)} e^{i\vec{K}_h \vec{r}}, \quad (2.5)$$

где  $\vec{K}_h$  — вектор обратной решетки идеального кристалла, умноженный на  $2\pi$ .

Область дефекта разделим на две части: область сильных искажений А и область слабых искажений В. Последнюю мы будем понимать как область, в которой искажения кристаллической решетки могут быть описаны вектором смещений  $\vec{u}(\vec{r})$  ( $\vec{r}$  — координата реального кристалла) и, кроме того, малы относительно смещения, так что

$$\left| \frac{\partial u^i}{\partial x^k} \right| \ll 1. \quad (2.6)$$

Условие (2.6) позволяет использовать для поляризуемости формулу (см., например, /2/)

$$\chi(\vec{r}) = \chi^{(id)}(\vec{r} - \vec{u}(\vec{r})) \quad (2.7)$$

(фактически формула (2.7) есть следствие того обстоятельства, что рассеяние и поглощение рентгеновских лучей происходит в основном на внутренних электронных оболочках атомов, которые в области малых относительных смещений практически не меняются).

Область А будем предполагать настолько искаженной, что

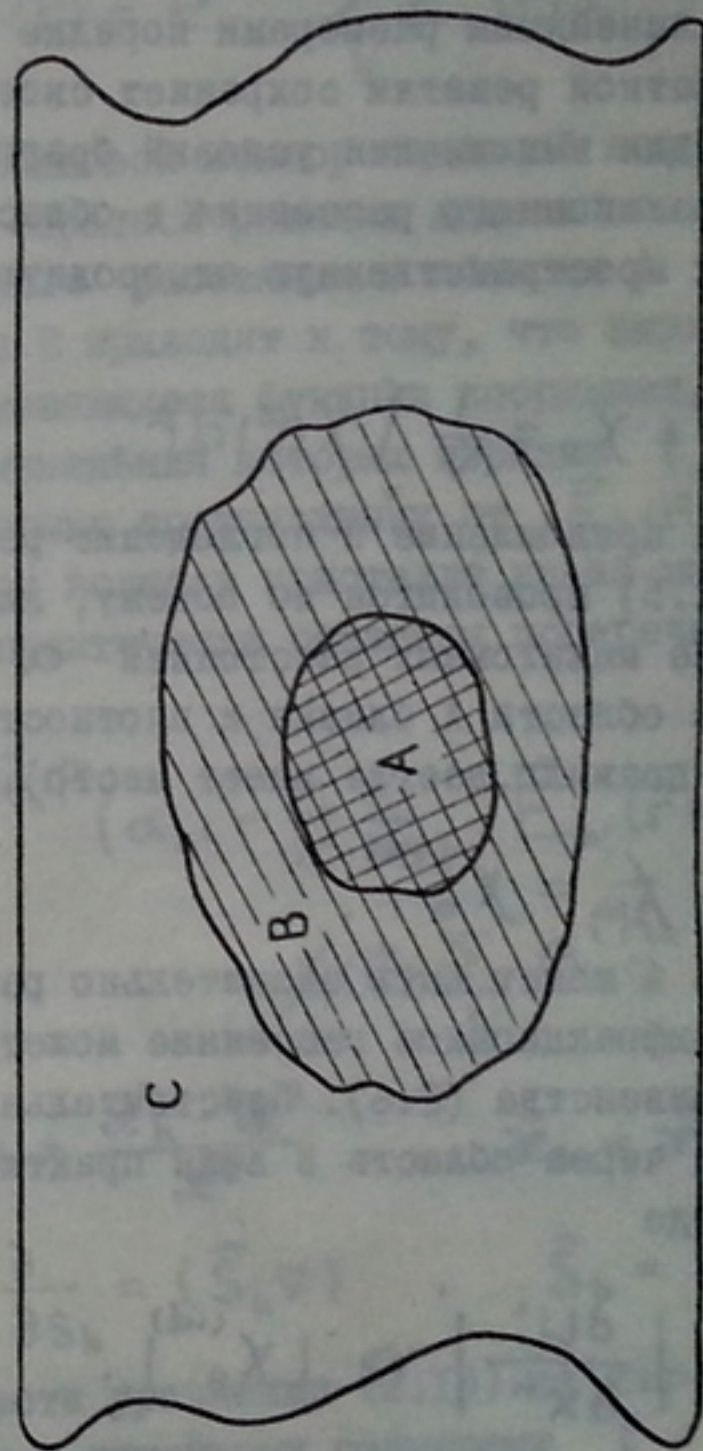


Рис. 1.

в ней практически отсутствует какое-либо дифракционное рассеяние как для проходящей волны, так и для волн, дифрагированных идеальными участками кристалла. Это могут быть области, где отсутствует какая-либо периодическая структура (например, ядро дислокации), а также области, где вектор смещения меняется достаточно быстро, так что

$$\left| \frac{\partial^2 u^i}{\partial x^k \partial x^l} \right| \alpha l_0^2 \gg 1. \quad (2.8)$$

Здесь  $l_0 = |\alpha \chi_0^{(id)}|^{-1}$  — длина дифракции идеального кристалла. Фактически условие (2.8) означает, что в области А не существует участков с линейными размерами порядка  $l_0$ , в которых локальный вектор обратной решетки сохраняет свое значение с точностью, необходимой для выполнения условий брэгговской дифракции.

Отсутствие дифракционного рассеяния в области А позволяет рассматривать ее как пространственную однородную со средней поляризуемостью

$$\overline{\chi(\vec{r})} = \chi_0 = \frac{1}{V} \int \chi(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (2.9)$$

определяющей обычное преломление и поглощение рентгеновских лучей. Усреднение в (2.5) проводится по объему, линейные размеры которого много больше межатомных расстояний  $a$ . Если плотность вещества в области А близка к плотности идеального кристалла (это, как правило, всегда имеет место), то

$$\chi_0 = \chi_0^{(id)}. \quad (2.10)$$

Заметим, что область А может быть значительно расширена за счет области В, так как дифракционное рассеяние может отсутствовать и при выполнении неравенства (2.6). Действительно, брэгговское рассеяние проходящих через область В волн практически отсутствует в областях, где

$$\left| \frac{\partial u^i}{\partial x^k} \right| \gg |\chi_0^{(id)}|. \quad (2.11)$$

А так как  $|\chi_0^{(id)}| \sim 10^{-5} + 10^{-6}$ , то существуют области, где оба неравенства (2.6) и (2.11) выполняются.

Таким образом, формулы (2.7), (2.9), (2.10) дают относительно простое описание поляризационных свойств кристалла во всей области дефекта.

Решение уравнения (2.1) будем искать в виде блоховской волны с переменными амплитудами (см., например, /4/):

$$\vec{E}(\vec{r}) = e^{i\vec{\alpha}\vec{r}} \sum_h \vec{E}_h(\vec{r}) e^{i\vec{K}_h\vec{r}}. \quad (2.12)$$

Здесь  $\vec{\alpha}$  — волновой вектор падающей волны, а сумма проводится по векторам обратной решетки идеального кристалла. Отсутствие дифракционного рассеяния в области А и наличие неравенства (2.6) в области В приводят к тому, что амплитуды  $\vec{E}_h(\vec{r})$  есть медленно меняющиеся функции координат, характерная длина существенного изменения которых порядка  $l_0$ . Поэтому, пренебрегая в (2.1) вторыми производными от  $\vec{E}_h(\vec{r})$  и учитывая, что электромагнитная волна в кристалле из-за малости ее взаимодействия со средой практически остается поперечной, приходим к уравнению вида

$$\sum_{h'} e^{i\vec{K}_{h'}\vec{r}} \left( \alpha_{h'} - \frac{2i}{\alpha} \frac{\partial}{\partial S_{h'}} \right) \vec{E}_{h'}(\vec{r}) = \chi(\vec{r}) \sum_h e^{i\vec{K}_h\vec{r}} \vec{E}_h(\vec{r}), \quad (2.13)$$

где

$$\alpha_h = \frac{\alpha_{h'}^2 - \alpha^2}{\alpha^2}, \quad \vec{\alpha}_h = \vec{\alpha} + \vec{K}_h, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial S_h} = (\vec{S}_h \nabla), \quad \vec{S}_h = \frac{\vec{\alpha}_h}{\alpha}.$$

Умножим обе части уравнения (2.13) на  $\exp(-i\vec{K}_h\vec{r})$  и проинтегрируем по объему с линейными размерами  $l$ , такими, что

$$a \ll l \ll l_0.$$

Так как амплитуды  $\vec{E}_h(\vec{r})$  слабо меняются на этих расстояниях, то их можно вынести за знак интеграла. С другой стороны, этот объем еще достаточно велик, так что

$$\frac{1}{V} \int_V e^{i(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) \cdot \vec{r}} d\vec{r} \approx \delta_{hh'} \quad (2.15)$$

При этом имеем

$$\left( \alpha_h - \frac{2i}{\alpha} \frac{\partial}{\partial s_h} \right) \vec{E}_h(\vec{r}) = \sum_{h'} \chi_{hh'}(\vec{r}) \vec{E}_{h'}(\vec{r}), \quad (2.16)$$

где

$$\chi_{hh'}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \int_V \chi(\vec{r}) e^{i(\vec{K}_{h'} - \vec{K}_h) \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (2.17)$$

В области идеального кристалла согласно (2.5) и (2.15) имеем

$$\chi_{hh'}^c(\vec{r}) = \chi_{h-h'}^{(id)} \quad (2.18)$$

В области А с учетом (2.9), (2.10) и (2.15) получаем

$$\chi_{hh'}^A(\vec{r}) = \chi_0^{(id)} \delta_{hh'} \quad (2.19)$$

В области В согласно (2.7) имеем

$$\chi_{hh'}^B(\vec{r}) = \sum_{h''} \chi_{h''}^{(id)} \frac{1}{V} \int_V e^{-i\vec{K}_{h''} \cdot \vec{u}(\vec{r})} e^{i(\vec{K}_{h''} + \vec{K}_{h'} - \vec{K}_h) \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

Неравенство (2.6) по существу отбирает в сумме по  $h''$  один член с  $\vec{K}_{h''} = \vec{K}_h - \vec{K}_{h'}$ , т.е.

$$\chi_{hh'}^B(\vec{r}) = \chi_{h-h'}^{(id)} \frac{1}{V} \int_V e^{-i(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) \cdot \vec{u}(\vec{r})} d\vec{r} \quad (2.20)$$

Если  $\vec{u}(\vec{r})$  мало меняется на расстояниях порядка  $\ell$ , то (2.20) переходит просто в формулу

$$\chi_{hh'}^B(\vec{r}) = \chi_{h-h'}^{(id)} e^{-i(\vec{K}_h - \vec{K}_{h'}) \cdot \vec{u}(\vec{r})} \quad (2.21)$$

В случае быстрых изменений  $\vec{u}(\vec{r})$  в объеме  $V$  (например, когда выполняется неравенство (2.11)) в (2.20) практически отличным от нуля остается лишь интеграл с  $\vec{K}_h = \vec{K}_{h'}$  и снова получаем (2.19). То есть мы снова видим, что область А может быть сильно расширена за счет области В. Поэтому в дальнейшем под областью А будем понимать область, включающую в себя как ядро дефекта, так и область искажений, где

$$2\pi \left| \frac{\partial u_i}{\partial x^k} \right| \frac{\ell}{a} \geq 1.$$

Здесь  $\ell$  определено неравенствами (2.14а). Отметим, что практически всегда можно выбрать  $\ell$  равным  $\ell_0$ , так как даже при выполнении знака равенства в (2.14а) дифракционное рассеяние еще мало. Оставшуюся область искаженного кристалла будем рассматривать как область В и использовать для этой области формулу (2.21).

В дальнейшем мы ограничимся случаем, когда условия Брэгга выполняются только для одного вектора обратной решетки  $\vec{K}_1$  (двухволновое приближение). Тогда, переходя, как обычно, к системе уравнений для скалярных амплитуд, имеем

$$\left. \begin{aligned} g_{10} E_0 + \left( g_{00} - \alpha + \frac{2i}{\alpha} \frac{\partial}{\partial s_1} \right) E_1 &= g_{10} \Psi_+ E_0, \\ \left( g_{00} + \frac{2i}{\alpha} \frac{\partial}{\partial s_0} \right) E_0 + g_{01} E_1 &= g_{01} \Psi_- E_1, \end{aligned} \right\} (2.22)$$

где введены обозначения:

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{в области А,} \\ 1 - \exp(\mp i \vec{K}_h \vec{u}(\vec{r})) & \text{в области В,} \\ 0 & \text{в области С,} \end{cases} \quad (2.23)$$

$$g_{hh'} = \chi_{h-h}^{(id)} \vec{\eta}_h \vec{\eta}_{h'}$$

( $\vec{\eta}_h$  — единичный вектор в направлении  $\vec{E}_h$ ).

Систему (2.22) необходимо дополнить граничными условиями. В случае Лауэ граничные условия устанавливаются на входной поверхности кристалла и имеют вид

$$E_0(\vec{r}) = E_0^{(in)}(\vec{r}), \quad E_1(\vec{r}) = 0. \quad (2.24)$$

В случае Брэгга имеем  $E_0(\vec{r}) = E_0^{(in)}(\vec{r})$  на входной поверхности кристалла и  $E_1(\vec{r}) = 0$  на противоположной поверхности. Здесь  $E_0^{(in)}(\vec{r})$  есть амплитуда падающей волны на входной поверхности кристалла.

В заключение отметим, что в области В и С подстановка  $\vec{E}_h(\vec{r}) \Rightarrow \vec{E}_h^*(\vec{r}) e^{-i \vec{K}_h \vec{u}(\vec{r})}$  дает систему уравнений, которую рассматривали ранее ряд авторов /3,5/. Система уравнений (2.22) удобна в том отношении, что она имеет более широкую область применимости, так как описывает также и сильно искаженные участки кристалла.

### 3. ИНТЕГРАЛЬНАЯ ФОРМА СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ (2.22)

#### А) СЛУЧАЙ ЛАУЭ

Рассмотрим сначала общие свойства системы (2.22). Прежде всего удобно ввести в плоскости рассеяния косоугольную систему координат с осями вдоль векторов  $\vec{S}_0$  и  $\vec{S}_1$ , так что

$$\vec{r} = s_0 \vec{S}_0 + s_1 \vec{S}_1. \quad (3.1)$$

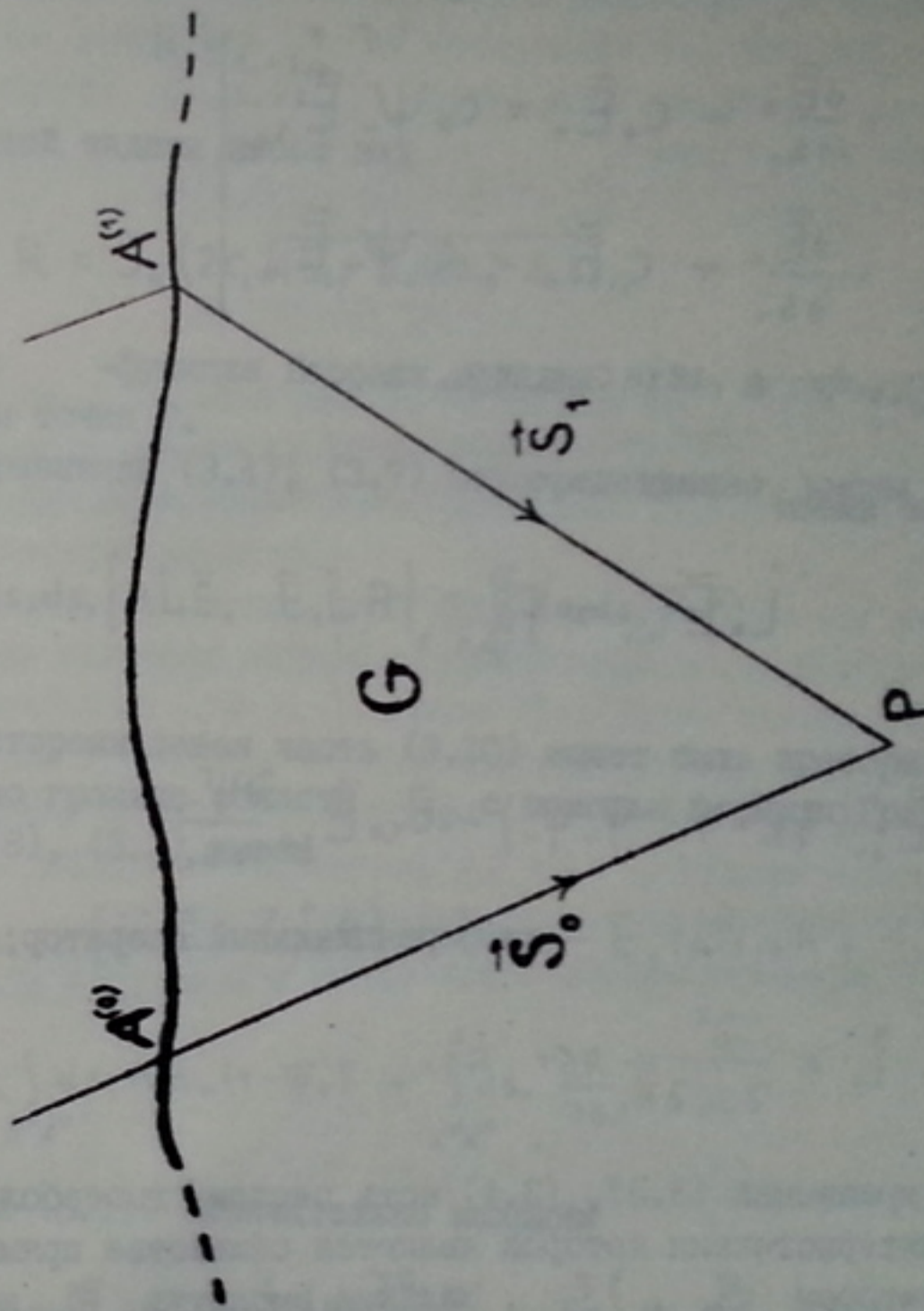


Рис. 2.



Далее сделаем подстановку

$$E_h = \tilde{E}_h \exp \left\{ i\alpha \frac{g_{00}}{2} s_0 + i\alpha \frac{g_{00} - \alpha}{2} s_1 \right\}. \quad (3.2)$$

Система уравнений для амплитуд  $\tilde{E}_h$  имеет наиболее простой вид:

$$\left. \begin{aligned} i \frac{\partial \tilde{E}_0}{\partial s_0} + c_0 \tilde{E}_1 &= c_0 \Psi_- \tilde{E}_1, \\ i \frac{\partial \tilde{E}_1}{\partial s_1} + c_1 \tilde{E}_0 &= c_1 \Psi_+ \tilde{E}_0, \end{aligned} \right\} \quad (3.3)$$

где  $c_0 = \alpha g_{01} / 2$ ,  $c_1 = \alpha g_{10} / 2$ .

Из (3.3) также имеем

$$\hat{L} \tilde{E}_{0,1} = F_{0,1}, \quad (3.4)$$

где

$$F_{0,1} = c^2 \tilde{E}_{0,1} (\Psi_+ + \Psi_- - \Psi_+ \Psi_-) - ic_{1,0} \tilde{E}_{1,0} \frac{\partial \Psi_{-,+}}{\partial s_{1,0}}, \quad (3.5)$$

$c^2 = c_0 c_1$ , а  $\hat{L}$  — дифференциальный оператор:

$$\hat{L} = \frac{\partial^2}{\partial s_0 \partial s_1} + c^2. \quad (3.6)$$

Системы уравнений (3.3), (3.4) есть системы гиперболического типа, характеристиками которой являются семейства прямых, параллельных векторам  $\vec{S}_0$ ,  $\vec{S}_1$ . Задание амплитуд  $\tilde{E}_0$  и  $\tilde{E}_1$  на линии  $A^{(1)}A^{(2)}$  (рис. 2) однозначно определяет поле внутри области  $G$ . Более того, используя метод Римана (см., например, /13/), можно написать интегральные уравнения, связывающие поле в точке  $P$  с полями в области  $G$ .

Введем функцию  $R$ , которая является решением уравнения

$$\hat{L} R = 0 \quad (3.7)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{\partial R}{\partial s_0} \right|_{s_1=S_{1p}} = 0, \quad \left. \frac{\partial R}{\partial s_1} \right|_{s_0=S_{0p}} = 0 \quad (3.8)$$

$$R \Big|_{\substack{s_0=S_{0p} \\ s_1=S_{1p}}} = 1.$$

Решение этой задачи имеет вид

$$R = J_0(2c\sqrt{(s_{0p}-s_0)(s_{1p}-s_1)}), \quad (3.9)$$

где  $J_0(z)$  — функция Бесселя порядка нуля, а  $s_{0p}$ ,  $s_{1p}$  — координаты точки  $P$ .

Из уравнений (3.4), (3.7) непосредственно имеем

$$\iint_G ds_0 ds_1 [R \hat{L} \tilde{E}_1 - \tilde{E}_1 \hat{L} R] = \iint_G ds_0 ds_1 R F_1. \quad (3.10)$$

С другой стороны, левая часть (3.10) может быть преобразована в интеграл по границе области  $G$  с помощью формулы Грина. С учетом (3.8), (3.3) имеем

$$\iint_G ds_0 ds_1 [R \hat{L} \tilde{E}_1 - \tilde{E}_1 \hat{L} R] = \tilde{E}_1(P) - \tilde{E}_1(A^{(1)}) + \quad (3.11)$$

$$+ ic_1 \int_{A^{(1)}A^{(2)}} ds_0 R \tilde{E}_0 (1 - \Psi_+) + \int_{A^{(1)}A^{(2)}} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} \tilde{E}_1.$$

Из (3.10) и (3.11) окончательно находим

$$\tilde{E}_1(P) = \tilde{E}_1(A^{(1)}) - \int_{A^{(1)}A^{(2)}} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} \tilde{E}_1 - ic_1 \int_{A^{(1)}A^{(2)}} ds_0 R \tilde{E}_0 (1 - \Psi_+) + \quad (3.12)$$

$$+ \iint_G ds_0 ds_1 R F_1$$

Уравнение для  $\tilde{E}_{0,1}(P)$  получается из (3.12) заменой всех индексов 0 на 1, + на - и обратно.

В случае задачи Лауэ, когда граничные условия на  $E_0$  и  $E_1$

задаются на одной и той же (входной) поверхности, мы имеем систему интегральных уравнений для полей в кристалле, автоматически учитывающую граничные условия (2.24)

$$\tilde{E}_0(P) = \tilde{E}_0^{(in)}(A^{(e)}) - \int_{A^{(1)}A^{(e)}} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} \tilde{E}_0^{(in)} + \iint_G ds_0 ds_1 R F_0, \quad (3.13a)$$

$$\tilde{E}_1(P) = ic_1 \int_{A^{(1)}A^{(e)}} ds_1 R \tilde{E}_0^{(in)} (1 - \Psi_+) + \iint_G ds_0 ds_1 R F_1. \quad (3.13b)$$

Если в кристалле отсутствуют дефекты, т.е.  $\Psi_+ = \Psi_- = 0$ , то уравнения (3.12) дают непосредственную связь между полем в произвольной точке кристалла и полем на входной поверхности:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{E}_0^{(id)}(P) &= \tilde{E}_0^{(in)}(A^{(e)}) - \int_{A^{(1)}A^{(e)}} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} \tilde{E}_0^{(in)}, \\ \tilde{E}_1^{(id)}(P) &= ic_1 \int_{A^{(1)}A^{(e)}} ds_1 R \tilde{E}_0^{(in)}. \end{aligned} \right\} \quad (3.14)$$

Эта задача была решена ранее в работах /9,10/.

Уравнения (3.13) можно записать также в следующей форме:

$$\tilde{E}_0(P) = \tilde{E}_0^{(id)}(P) - ic_0 \int_{A^{(1)}P} ds_0 \tilde{E}_1 \Psi_- + \iint_G ds_0 ds_1 [c^2 R \tilde{E}_0 \Psi_+ + ic_0 \frac{\partial R}{\partial s_1} \tilde{E}_1 \Psi_-], \quad (3.15a)$$

$$\tilde{E}_1(P) = \tilde{E}_1^{(id)}(P) - ic_1 \int_{A^{(1)}P} ds_1 \tilde{E}_0 \Psi_+ + \iint_G ds_0 ds_1 [c^2 R \tilde{E}_1 \Psi_- + ic_1 \frac{\partial R}{\partial s_0} \tilde{E}_0 \Psi_+]. \quad (3.15b)$$

Полученные нами системы интегральных уравнений прежде всего удобны в том отношении, что они дают непосредственную итерационную процедуру для нахождения приближенных решений. В случае областей типа А двойные интегралы в (3.15) преобразуются в интегралы по контуру (см. раздел 5), что существенно облегчает учет сильно искаженных областей. Для областей типа В удобно пользоваться формулами (3.13) (см. раздел 4), так как в этой области производные  $\partial \Psi / \partial s$  малы, а выражение

$$\Psi_+ + \Psi_- - \Psi_+ \Psi_- \equiv 0. \quad (3.16)$$

### Б) СЛУЧАЙ БРЭГГА

Если граничные условия задаются на разных поверхностях, как это имеет место в случае задачи Брэгга, то получение замкнутых интегральных соотношений типа (3.13) оказывается уже более сложной задачей.

Рассмотрим кристалл в виде плоской пластины толщиной  $t$ . Пусть на кристалл падает ограниченный пучок рентгеновских лучей в направлении  $\vec{x}$  (рис. 3). Будем искать поле отраженной волны в точке  $P_I$  на входной поверхности кристалла. Поле в этой точке определяется полями в области  $G$  в плоскости рассеяния, ограниченной линией  $AP_1A_1^{(1)}$ , причем на линии  $AB$  поле  $\tilde{E}_1$ , очевидно, равняется нулю. Пусть функция  $R_B^{(1)}$  удовлетворяет уравнению (3.7), но с граничными условиями:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial R_B^{(1)}}{\partial s_0} \Big|_{AP_1} &= 0, & \frac{\partial R_B^{(1)}}{\partial s_1} \Big|_{s_0=s_{0P}} &= 0, & R_B^{(1)} \Big|_{\substack{s_0=s_{0P} \\ s_1=s_1}} &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (3.17)$$

Решение этой задачи имеет вид

$$R_B^{(1)} = J_0(2c \sqrt{(s_{0P}-s_0)(s_{1P}-s_1)}) - \beta \frac{s_{0P}-s_0}{s_{1P}-s_1} J_2(2c \sqrt{(s_{0P}-s_0)(s_{1P}-s_1)}), \quad (3.18)$$

где  $\beta = \gamma_0 / \gamma_1$ ,  $\gamma_{0,1} = (\vec{n} \vec{s}_{0,1})$ ,  $\vec{n}$  — внутренняя нормаль к

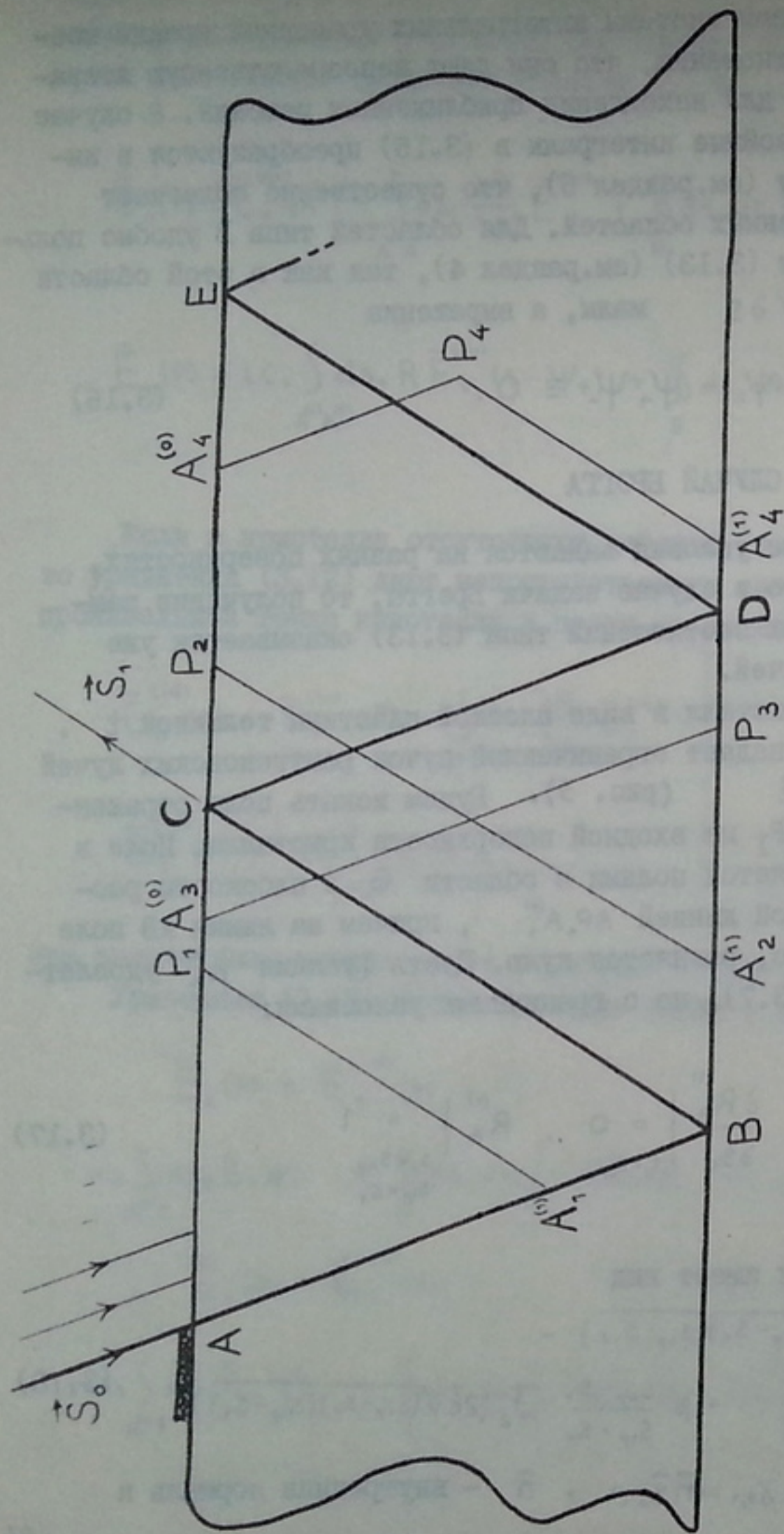


Рис. 3.

поверхности кристалла.

Аналогичная процедура, которая использовалась при выводе (3.12), дает в данном случае следующий результат:

$$\tilde{E}_1(P_1) = ic_1 \int_{AP_1} ds_1 R_B^{(1)} \tilde{E}_0^{(in)} (1 - \Psi_+) + \iint_G ds_1 ds_2 R_B^{(1)} F_1 \quad (3.19)$$

Формула (3.19) справедлива для точек \$P\_1\$ на поверхности, лежащих на отрезке AC. Для точек, лежащих правее точки C (например, \$P\_2\$), в правую часть формулы (3.19) добавляется интеграл

$$\Delta \tilde{E}_1(P_2) = -ic_1 \int_{BA_2^{(1)}} ds_1 R_B^{(1)} \tilde{E}_0 (1 - \Psi_+) \quad (3.20)$$

Если кристалл достаточно толстый, так что \$mt \gg 1\$, где \$m\$ - коэффициент поглощения, то нетрудно показать, что этот интеграл дает экспоненциально малый вклад и им можно пренебречь. Таким образом, в случае достаточно толстого, поглощающего кристалла формула (3.19) определяет поле \$\tilde{E}\_1(x)\$ во всех точках правее A.

Для идеального кристалла, когда \$\Psi\_{\pm} = 0\$, из (3.19) имеем

$$\tilde{E}_1(P) = ic_1 \int_{AP} ds_1 R_B^{(1)} \tilde{E}_0^{(in)} \quad (3.21)$$

Формула (3.20) дает возможность определить поле отраженной волны на входной поверхности кристалла в общем случае, при произвольном распределении поля падающей волны. Эту формулу удобно переписать в несколько ином виде, введя координату \$x\$ вдоль поверхности кристалла в плоскости рассеяния (за начало отсчета берется точка A), уже непосредственно для поля \$E\_1(x)\$ (см. (3.2)):

$$E_1(x) = \frac{c_1 \gamma_0}{2 \sin 2\theta_0} \int_0^x dx' [J_0(Bx') + J_2(Bx')] e^{iAx'} E_0^{(in)}(x-x') \quad (3.22)$$

где

$$A = \alpha g_{00} \frac{(\gamma_0 + 1\gamma_1)}{2 \sin 2\theta_0} - \alpha \alpha \frac{\gamma_0}{2 \sin 2\theta_0}, \quad B = 2c \frac{\sqrt{\gamma_0 \gamma_1}}{\sin 2\theta_0} \quad (3.23)$$

Если поле  $E_0^{(in)}$  постоянно:

$$E_0^{(in)}(x) = E_0, \quad x > 0,$$

то для поля  $E_1(x)$  при  $x \rightarrow \infty$  из (3.22) после преобразований получаем

$$E_1(\infty) = \frac{E_0}{2g_{01}} \left[ -(\alpha\beta + g_{00}(1-\beta)) + \sqrt{(\alpha\beta + g_{00}(1-\beta))^2 + 4\beta g_{01}g_{10}} \right] \quad (3.24)$$

Этот результат в точности соответствует результату обычной динамической теории /14/ для толстых поглощающих кристаллов.

Наряду с уравнением (3.19) нетрудно получить полностью аналогичным методом уравнение, определяющее поле  $\tilde{E}_0$  на выходной поверхности:

$$\tilde{E}_0(P_3) = \tilde{E}_0^{(in)}(A_3) - \int_{AA_3^{(1)}} ds_1 \frac{\partial R_B^{(1)}}{\partial s_1} \tilde{E}_0^{(in)} - \quad (3.25)$$

$$- ic_1 \int_{AA_3^{(1)}} ds_0 F_{10} \tilde{E}_1(1-\Psi_-) + \iint_G ds_0 ds_1 R_B^{(1)} F_0$$

Здесь

$$R_B^{(1)} = J_0(2c\sqrt{(s_{op}-s_0)(s_{op}-s_1)}) - \frac{1}{\beta} \frac{s_{op}-s_1}{s_{op}-s_0} J_2(2c\sqrt{(s_{op}-s_0)(s_{op}-s_1)}) \quad (3.26)$$

Кроме того, для внутренних точек кристалла  $P_4$  имеем общую формулу (3.11), где контур  $A^{(1)}A^{(1)}$  в данном случае есть  $A_4^{(1)}ABA_4^{(1)}$ , а с учетом того обстоятельства, что  $\tilde{E}_1=0$  на линии  $ABA_4^{(1)}$ .

Интегрирование по  $A_4^{(0)} \dots A_4^{(1)}$  сводится к интегралам по линиям  $AA_4^{(0)}$  и  $BA_4^{(1)}$ , т.е.

$$\tilde{E}_0(P_4) = \tilde{E}_0^{(in)}(A_4) - \int_{AA_4^{(0)}} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} \tilde{E}_0^{(in)} - ic_0 \int_{AA_4^{(0)}} ds_0 R \tilde{E}_1(1-\Psi_-) + \int_{BA_4^{(1)}} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} \tilde{E}_0 + \iint_G ds_0 ds_1 R F_0 \quad (3.27a)$$

$$\tilde{E}_1(P_4) = ic_1 \int_{AA_4^{(1)}} ds_1 R \tilde{E}_0^{(in)}(1-\Psi_+) + \int_{AA_4^{(1)}} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} \tilde{E}_1 - ic_1 \int_{BA_4^{(1)}} ds_1 R \tilde{E}_0(1-\Psi_+) + \iint_G ds_0 ds_1 R F_1 \quad (3.27b)$$

Система интегральных уравнений (3.19), (3.25), (3.27) дает, в частности, возможность использовать итерационную процедуру для нахождения полей  $\tilde{E}_0$  и  $\tilde{E}_1$  в искаженных кристаллах. При этом в случае толстых кристаллов,  $mt \gg 1$ , интегралы по участку  $BA_4^{(1)}$  в (3.27) и (3.20) дают экспоненциально малый вклад и ими можно пренебречь. В этом случае не возникает необходимости обращаться к уравнению (3.25).

В случае идеальных кристаллов формула (3.25) позволяет получить довольно интересный результат. Действительно, в этом случае ( $\Psi_{\pm} = 0$ ) имеем

$$E_0(x,t) = e^{i\alpha \frac{g_{00}}{2} \frac{t}{\gamma_0}} \left\{ E_0^{(in)}(x_0) - c \frac{\sqrt{\gamma_0 \gamma_1}}{\sin 2\theta_0} \int_0^{x_0} dx' \frac{2\ell}{z} J_1(\beta z) \cdot e^{iAx'} E_0^{(in)}(x_0-x') - ic_1 \frac{\gamma_0 \gamma_1}{\sin 2\theta_0} \int_0^{x_0} dx' \left[ J_0(\beta z) + \frac{x'}{x+2\ell} \right. \right. \quad (3.28)$$

$$\left. \cdot J_2(\beta z) \right] e^{iAx'} E_1(x_0-x', 0) \left. \right\},$$

где

$$z = \sqrt{x'(x'+2l)} \quad , \quad 2l = t \frac{\sin 2\theta_0}{\gamma_0 \gamma_1} \quad , \quad x_0 = x - t \frac{\sqrt{1-\gamma_0^2}}{\gamma_0}$$

Здесь мы снова вернулись к истинным амплитудам (3.2). Фигурирующее в (3.28) поле  $E_1$  определяется выражением (3.22). Зная поле  $E_0$  на отрезке BD, мы легко находим поле  $E_1$  на участке CE, которое теперь есть сумма выражений (3.22) и (3.20). Последнее выражение в развернутом виде равно

$$\Delta E_1(x) = -ic_1 \frac{\gamma_0}{\sin 2\theta_0} e^{i\alpha \frac{q_{00}-\alpha}{2} \frac{t}{|\gamma_1|} x-2t} \int_0^{x-2t} dx' [J_0(\beta z) + \frac{x'}{x'+2l} J_2(\beta z)] e^{iAx'} E_0(x_1-x', t) \quad (3.29)$$

где  $x_1 = x - t \frac{\sqrt{1-\gamma_1^2}}{|\gamma_1|}$ . Зная поле  $E_1(x)$  на участке CE, можем теперь определить поле  $E_0(x, t)$  правее точки D и т.д. Таким образом, формулы (3.22), (3.28), (3.29) дают возможность найти поле отраженной волны на всей поверхности кристалла в самом общем случае, т. е. для произвольных по толщине кристаллов и при произвольном распределении падающего излучения.

#### 4. СЛАБОИСКАЖЕННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Пусть кристалл деформирован достаточно слабо, так что всю область искажений мы будем рассматривать как область типа B. При этом с учетом явного вида  $\Psi_{\pm}$  (2.23), а также (3.16) система интегральных уравнений в случае задачи Лауэ (3.13) имеет вид

$$E_0(P) = E_0^{(id)}(P) - c_0 \iint_G ds_0 ds_1 \tilde{R} E_1 e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{u}} \frac{\partial(\vec{k}_1, \vec{u})}{\partial s_1} \quad (4.1a)$$

$$E_1(P) = E_1^{(id)}(P) + c_1 \iint_G ds_0 ds_1 \tilde{R} E_0 e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{u}} \frac{\partial(\vec{k}_1, \vec{u})}{\partial s_0} -$$

$$- ic_1 \int_{A''A'''} ds_1 \tilde{R} E_0^{(in)} (1 - e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{u}}) \quad (4.1b)$$

где

$$\tilde{R} = R \exp \left\{ i\alpha \frac{q_{00}}{2} (s_{0p} - s_0) + i\alpha \frac{q_{00}-\alpha}{2} (s_{1p} - s_1) \right\} \quad (4.2)$$

Предположим теперь, что смещения очень слабо меняются на расстояниях порядка  $l_0$ , так что

$$\left| \frac{\partial(\vec{k}_1, \vec{u})}{\partial s_{0,1}} \right| l_0 \ll 1 \quad (4.3)$$

При этом очевидно, что интеграл по области G может дать заметный вклад только за счет областей, размер которых  $\gg l_0$ . Поэтому в интегралах можно заменить функцию Бесселя (3.9) на ее асимптотическое выражение

$$J_0(2c\sqrt{s_0 s_1}) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi c}} \frac{\cos(2c\sqrt{s_0 s_1} - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{s_0 s_1}} \quad (4.4)$$

Уже это обстоятельство существенно облегчает анализ задачи.

Наличие в (4.2) и (4.4) множителей, сильно осциллирующих на расстояниях, где искажения еще меняются слабо, выделяет области, дающие основной вклад в интегралы (4.1). Если выделить такого же типа множители в амплитудах  $E_0$ ,  $E_1$ , то можно получить, что основной вклад в интеграл дают области вблизи линий, являющихся траекториями Пеннинга и Полдера /1/ и Като /2/. Детально этот вопрос будет рассмотрен отдельно в следующей статье. Однако уже сразу ясно, что интегральные уравнения дают нам возможность получить следующую поправку к решению Като, если за нулевое приближение в правой части уравнений использовать решения Като. С другой стороны, при обычном подходе очень трудно получить такого типа поправки.

#### 5. СИЛЬНОИСКАЖЕННАЯ ОБЛАСТЬ

Рассмотрим в качестве примера случай, когда в кристалле имеется только сильноискаженная область, т.е. область типа A, где полностью отсутствует дифракционное рассеяние. Этот случай, с

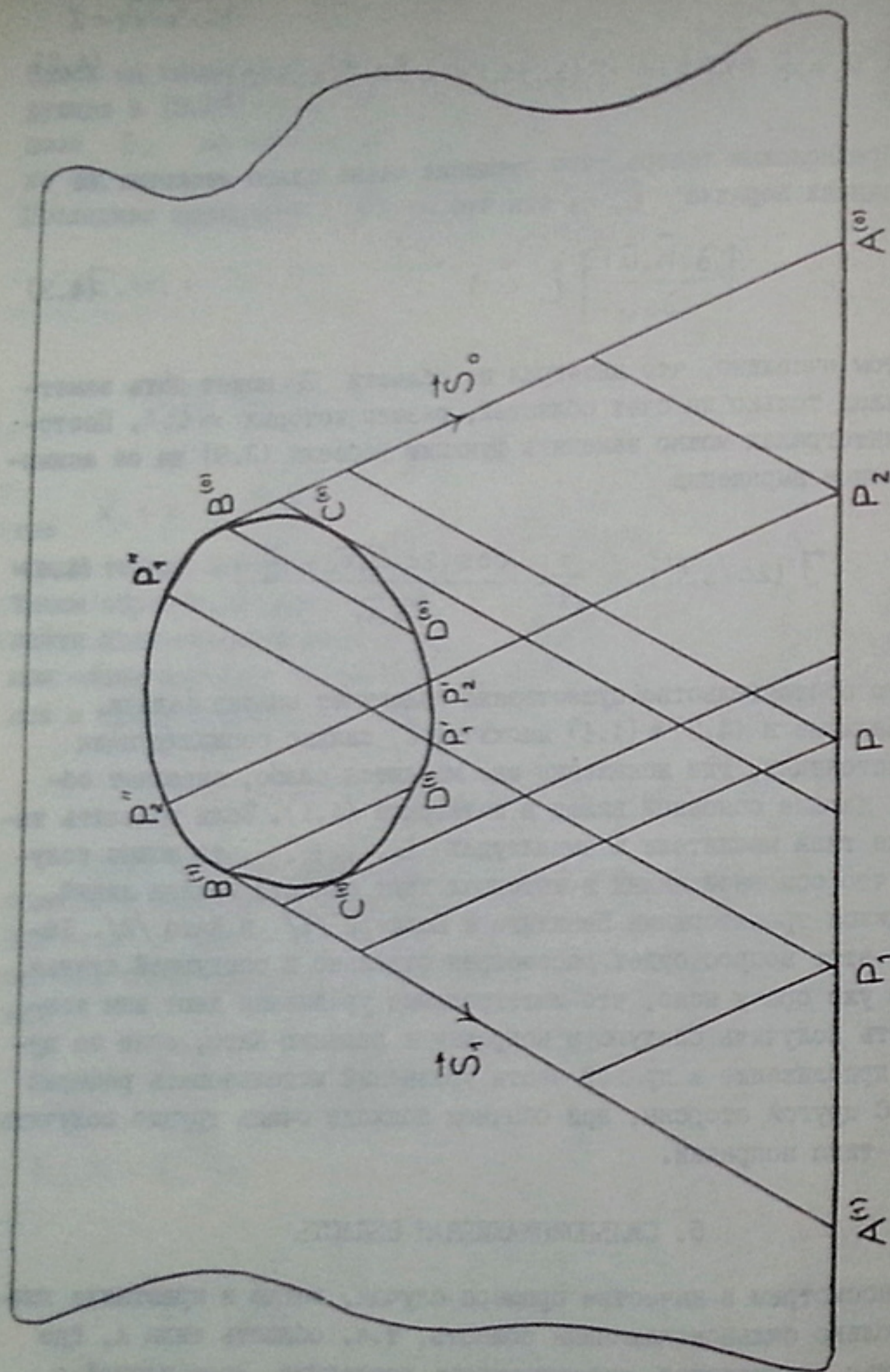


Рис. 4.

одной стороны, как будет видно ниже, существенно более прост для анализа, чем общая ситуация, а с другой – рассмотрение такого типа примеров может дать понимание общей картины формирования изображения.

Для простоты мы будем вести анализ для случая Лауэ. Пусть область  $A$  на рис. 4 есть сечение искаженной области кристалла плоскостью рассеяния. Изменение поля, вызываемое этим дефектом, будет происходить только на отрезке  $A^{(1)}A^{(0)}$ . В данном случае удобно использовать интегральные уравнения (3.15). При этом  $\Psi_2 = 1$  внутри области  $A$ . Учитывая это обстоятельство, а также формулы (2.23) и (3.3), нетрудно преобразовать двойные интегралы в (3.15) в интеграл по контуру. В результате такого преобразования находим

$$\tilde{E}_0(P) = \tilde{E}_0^{(id)}(P) + ic_0 \int_{\Gamma_A} ds_0 R \tilde{E}_0 + \int_{\Gamma_A} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} \tilde{E}_0 \quad (5.1a)$$

$$\tilde{E}_1(P) = \tilde{E}_1^{(id)}(P) - ic_1 \int_{\Gamma_A} ds_1 R \tilde{E}_0 - \int_{\Gamma_A} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} \tilde{E}_1 \quad (5.1b)$$

где  $\tilde{E}_{0,1}^{(id)}$  – поля идеального кристалла, т.е. поля, которые были в этих точках, когда дефекты отсутствовали, а  $\Gamma_A$  – та часть границы области  $A$ , которая лежит в области  $G$ . Так, для точек  $P$ , когда область  $A$  целиком лежит в области  $G$ , контур  $\Gamma_A$  есть просто граница области  $A$ . Для точек типа  $P_1$  этот контур есть  $P_1''B''C''D''P_1'$ .

Для дальнейшего нам удобно ввести величины

$$e_{0,1} = \tilde{E}_{0,1}(P) - \tilde{E}_{0,1}^{(id)}(P) \quad (5.2)$$

которые непосредственно определяют искажение волновых полей, вносимых дефектами. Уравнения (5.1) теперь приобретают вид

$$e_0(P) = ic_0 \int_{\Gamma_A'} ds_0 R e_1 + \int_{\Gamma_A'} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} e_0 \quad (5.3a)$$

$$e_1(P) = -ic_1 \int_{\Gamma'_A} ds_1 R e_0 - \int_{\Gamma'_A} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} e_1 \quad (5.3B)$$

При получении (5.3) мы использовали очевидное равенство

$$ic_{0,1} \int_{\gamma} ds_{0,1} R \tilde{E}_{1,0}^{(id)} + \int_{\gamma} ds_{1,0} \frac{\partial R}{\partial s_{1,0}} \tilde{E}_{0,1}^{(id)} = 0 \quad (5.4)$$

где  $\gamma$  — произвольный замкнутый контур в кристалле. Так как на контуре  $B^{(1)}B^{(2)}$  поля  $\tilde{E}_{0,1}$  совпадают с идеальными, т.е.

$E_{0,1} = 0$ , то интегрирование в (5.3) идет только по участку  $B^{(1)}D^{(1)}B^{(2)}$ .

Из (5.3) видно, что задача нахождения поля в кристалле сводится к нахождению полей  $E_{0,1}$  на контуре  $\Gamma'_A$ . Для решения этой задачи прежде всего следует принять во внимание, что внутри области  $A$  поле  $\tilde{E}_0$  остается постоянным вдоль линий, параллельных вектору  $\vec{z}_0$ , а поле  $\tilde{E}_1$  — вдоль линий, параллельных  $\vec{z}_1$ . Это непосредственно следует из уравнений (3.3). Используя это обстоятельство, легко видеть, что поля  $e_0, e_1$  на линиях  $D^{(1)}D^{(2)}B^{(2)}$  и  $B^{(1)}D^{(1)}D^{(2)}$  соответственно определяются простым переносом и равны:

$$e_0(P'_2) = \tilde{E}_0^{(id)}(P'_2) - \tilde{E}_0^{(id)}(P'_1) \quad \text{на} \quad D^{(1)}D^{(2)}B^{(2)},$$

$$e_1(P'_1) = \tilde{E}_1^{(id)}(P'_1) - \tilde{E}_1^{(id)}(P'_2) \quad \text{на} \quad B^{(1)}D^{(1)}D^{(2)} \quad (5.5)$$

Для определения полей  $e_{0,1}$  на остальных участках контура обратимся к уравнениям (5.3). На линии  $B^{(1)}C^{(1)}$  для поля  $e_0$  имеем уравнение

$$e(l) = ic_0 \int_0^l dl' \frac{ds'_1}{dl'} R e_1 + \int_0^l dl' \frac{ds'_1}{dl'} \frac{\partial R}{\partial s'_1} e_0 \quad (5.6)$$

где  $l$  — координата точки на кривой  $B^{(1)}C^{(1)}$ . Заметим, что в (5.6) первый интеграл есть интеграл от известных функций, так как  $e_1$  на этом контуре четко определено. Таким образом, мы имеем для определения поля  $e_0$  на линии  $B^{(1)}C^{(1)}$  неоднородное интегральное уравнение вольтерровского типа. Отметим, что практически во многих случаях  $e_0(l)$  определяется первым членом в (5.6). Поле  $e_0$  на участке  $C^{(1)}D^{(1)}$  определяется переносом с линии  $B^{(1)}C^{(1)}$ . Аналогичное уравнение мы имеем для поля  $e_1$  на контуре  $B^{(1)}C^{(1)}$ .

Таким образом, поставленная задача свелась к решению относительно простого одномерного интегрального уравнения. Конкретные примеры будут рассмотрены в следующей статье.

## 6. ФУРЬЕ — АНАЛИЗ

Ниже мы остановимся еще на одном подходе к решению рассматриваемой нами общей задачи. Мы имеем в виду здесь переход от системы дифференциальных уравнений (2.22) к системе алгебраических уравнений для Фурье-компонент амплитуд  $E_0(\vec{r}), E_1(\vec{r})$ . Возможности этого метода пока еще не известны и, кроме того, ряд авторов возлагают на этот метод большие надежды [6,7].

Мы будем предполагать искажения кристалла настолько слабыми, что изменение волнового поля в кристалле мало

$$E_{0,1}(\vec{r}) = E_{0,1}^{(id)}(\vec{r}) + E'_{0,1}(\vec{r}), \quad |E'_{0,1}| \ll |E_{0,1}^{(id)}| \quad (6.1)$$

Ниже мы ограничимся рассмотрением случая Лауэ. Пусть на кристалл падает плоская волна под углом, близким к углу Брэгга. Тогда идеальное поле внутри кристалла известно (см., например, [14])

$$E_{0,1}^{(id)}(z) = \sum_s E_{0,1}^{(s)} e^{i\alpha \epsilon_0^{(s)} \frac{z}{\delta}} \quad (6.2)$$

где  $z = (\vec{n}\vec{r})$ ,

$$E_0^{(1,2)} = \frac{2\varepsilon_0^{(1,2)} - g_{00}}{2(\varepsilon_0^{(2,1)} - \varepsilon_0^{(1,2)})}, \quad E_1^{(1,2)} = \frac{\beta g_{10}}{2(\varepsilon_0^{(1,2)} - \varepsilon_0^{(2,1)})}, \quad (6.3)$$

$$\varepsilon_0^{(s)} = \frac{1}{2} g_{00} + \frac{1}{4} \left[ -(\alpha\beta + g_{00}(1-\beta)) \pm \sqrt{(\alpha\beta + g_{00}(1-\beta))^2 + 4\beta g_{01}g_{10}} \right]. \quad (6.4)$$

Знак перед корнем в (6.4) определяется так, чтобы

$$\varepsilon_0^{(1)''} \geq \varepsilon_0^{(2)''} \quad (\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'') \quad (6.5)$$

Поля  $E_{0,1}^{(s)}(\vec{r})$  разложим в ряд Фурье вида

$$E_{0,1}^{(s)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q} \neq 0} e^{i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{s}} E_{0,1\vec{q}}^{(s)} e^{i\alpha\varepsilon_0^{(s)} \frac{z}{g_0}} \quad (6.6)$$

Для Фурье-компонент  $E_{0,1\vec{q}}^{(s)}$  непосредственно из уравнения (2.22), где в правой части положено  $E_{0,1}^{(d)} = E_{0,1}^{(d)}$ , находим

$$\left. \begin{aligned} (-2\varepsilon_{0\vec{q}}^{(s)} + g_{00})E_{0\vec{q}}^{(s)} + g_{01}E_{1\vec{q}}^{(s)} &= g_{01}\Psi_-(\vec{q})E_{1\vec{q}}^{(s)}, \\ g_{10}E_{0\vec{q}}^{(s)} + (-2\varepsilon_{1\vec{q}}^{(s)} + g_{00})E_{1\vec{q}}^{(s)} &= g_{10}\Psi_+(\vec{q})E_{0\vec{q}}^{(s)}, \end{aligned} \right\} (6.7)$$

где

$$\varepsilon_{0,1\vec{q}}^{(s)} = \varepsilon_{0,1}^{(s)} + \frac{(\vec{q}\vec{s}_{0,1})}{\alpha}, \quad \varepsilon_{1\vec{q}}^{(s)} = \frac{\alpha}{2} + \frac{\varepsilon_0^{(s)}}{\beta}. \quad (6.8)$$

Система вида (6.7) была получена в работе /11/, где также был дан метод ее решения. При этом здесь существенными оказываются два обстоятельства. Первое — система уравнений (6.7) должна быть дополнена граничными условиями для волн, рассеянных дефектом, и

второе — при решении уравнения (6.7) необходимо учитывать решение соответствующей однородной системы уравнений (подробнее смотри /II/). С учетом этих двух обстоятельств нетрудно получить окончательное выражение, например, для поля  $E'_0(\vec{r})$ :

$$E'_0(\vec{r}) = \sum_{\vec{q} \neq 0} e^{i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{s}\vec{s}'} \frac{(-1)^{s'}}{2(\tilde{\varepsilon}_0^{(s')} - \tilde{\varepsilon}_0^{(s)})} \frac{e^{i\alpha\varepsilon_0^{(s)} \frac{z}{g_0}} - e^{i\alpha(\tilde{\varepsilon}_0^{(s')} - \sigma) \frac{z}{g_0}}}{2(\varepsilon_{0\vec{q}}^{(s')} - \tilde{\varepsilon}_0^{(s')})} \times \\ \times (E_{0\vec{q}}^{(s')} \Psi_+(\vec{q}) + \frac{2\tilde{\varepsilon}_{1\vec{q}}^{(s')} - g_{00}}{g_{10}} E_{1\vec{q}}^{(s')} \Psi_-(\vec{q})), \quad (6.9)$$

где

$$\sigma = \frac{(\vec{q}\vec{s}_0)}{\alpha}, \quad \tilde{\varepsilon}_0^{(s')} = \varepsilon_0^{(s')}(\tilde{\alpha}), \\ \tilde{\alpha} = \alpha - \frac{2}{\alpha\beta} \vec{q}(\vec{s}_0 - \beta\vec{s}_1), \quad \tilde{\varepsilon}_{1\vec{q}}^{(s')} = \frac{\tilde{\alpha}}{2} + \frac{\tilde{\varepsilon}_0^{(s')}}{\beta}. \quad (6.10)$$

Хотя выражение (6.9) имеет довольно сложный вид, окончательный результат может быть представлен в более простой форме. Переходя снова к описанию искажений в координатном пространстве, из (6.9) для поля  $E'_0(\vec{r})$  получаем

$$E'_0(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \left[ \mathcal{D}_{00}(\vec{r}, \vec{r}') \Psi_+(\vec{r}') + \mathcal{D}_{01}(\vec{r}, \vec{r}') \Psi_-(\vec{r}') \right], \quad (6.11)$$

где

$$\mathcal{D}_{00}(\vec{r}, \vec{r}') = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} \sum_{\vec{s}\vec{s}'} \frac{(-1)^{s'}}{2(\tilde{\varepsilon}_0^{(s')} - \tilde{\varepsilon}_0^{(s)})} E_{0\vec{q}}^{(s')}. \quad (6.12)$$

$$\times \frac{e^{i\alpha\varepsilon_0^{(s)} \frac{z}{g_0}} - e^{i\alpha(\tilde{\varepsilon}_0^{(s')} - \sigma) \frac{z}{g_0}}}{2(\varepsilon_{0\vec{q}}^{(s')} - \tilde{\varepsilon}_0^{(s')})},$$



и аналогичные выражения имеем для  $\mathcal{D}_{01}(\vec{r}, \vec{r}')$ . Интегрирование по  $q_y$  в (6.12) дает  $\delta(y-y')$ , где  $y$  — координата в перпендикулярном к плоскости рассеяния направлении, а интегрирование по  $q_z$  легко проводится с помощью теоремы о вычетах. В результате для (6.12) имеем

$$\mathcal{D}_{00}(\vec{r}, \vec{r}') = i \frac{\alpha}{2\gamma_0} \delta(y-y') \theta(z') \theta(z-z') I(x-x', z-z') \times \left( \sum_s E_0^{(s)} e^{i\alpha \hat{\epsilon}_0^{(s)} \frac{z'}{\gamma_0}} \right), \quad (6.13)$$

где

$$I(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_x}{2\pi} e^{iq_x x} \sum_{s'} \frac{(-1)^{s'} \beta q_{01} q_{10}}{2(\hat{\epsilon}_0^{(s')} - \hat{\epsilon}_0^{(s)})} \times e^{-is_0^* q_x \frac{z}{\gamma_0} + i\alpha \hat{\epsilon}_0^{(s')} \frac{z}{\gamma_0}} \quad (6.14)$$

Вычисляя последний интеграл (см. приложение), окончательно получаем

$$\mathcal{D}_{00}(\vec{r}, \vec{r}') = c^2 \left| \frac{\partial(s_0', s_1')}{\partial(x', z')} \right| \delta(y-y') \theta(z') \theta(z-z') \times \exp \left\{ i\alpha \frac{q_{00}}{2} (s_0 - s_0') + i\alpha \frac{q_{00} - \alpha}{2} (s_1 - s_1') \right\} A_{00} E_0^{(id)}(z'), \quad (6.15)$$

где

$$A_{00} = J_0(2c\sqrt{(s_0 - s_0')(s_1 - s_1')}) \frac{\text{sign}(s_0 - s_0') + \text{sign}(s_1 - s_1')}{2} \quad (6.16)$$

Для функций  $\mathcal{D}_{01}$  аналогичный анализ дает выражение вида (6.15) с заменой  $A_{00}$  на

$$A_{01} = -\frac{i}{c_1} \frac{\partial A_{00}}{\partial s_1}, \quad E_0^{(id)} \rightarrow E_1^{(id)} \quad (6.17)$$

Таким образом, в результате довольно сложных вычислений (практически в этом параграфе мы дали лишь схему вывода формул (6.12), (6.16)) мы, как уже нетрудно убедиться, непосредственно получаем выражение для поля  $E_0$ , которое довольно просто находится из интегральных уравнений (3.15) в линейном по  $\psi$  приближении. Аналогичный анализ в случае задачи Брэгга приводит нас в конечном счете к интегральным соотношениям типа (3.19). Из сказанного следует, что Фурье-анализ является довольно неэффективным для определения поля, вызываемого статическими дефектами, так как интегральные уравнения (3.13), (3.19), (3.25), (3.26) дают гораздо более простой путь решения проблемы.

Заметим, однако, что в задаче определения диффузного рассеяния за счет колебаний кристаллической решетки метод Фурье-анализа является, по-видимому, единственным пригодным методом. Действительно, здесь физическое отличие от задачи со статическими искажениями заключается в том, что рассеяние на фононах является строго некогерентным, и поэтому мы имеем возможность определить только интенсивность полей, а не сами амплитуды. Это означает, что в случае рассеяния на фононах принципиально не могут существовать интегральные соотношения типа (3.13), (3.19), (3.25).

В заключение авторы выражают благодарность Ю.М.Кагану за постоянный интерес к работе и многочисленные дискуссии.

Рукопись поступила в печать  
15 июля 1969 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ИНТЕГРАЛА  $\bar{I}(x, z)$

Прежде всего перейдем от декартовых координат  $x, z$  к координатам  $s_0, s_1$ .  
Далее введем функцию  $t$  соотношением

$$\bar{\xi}_0^{(2)} = \frac{1}{2} g_{00} + \sqrt{\beta} \frac{\sqrt{g_{01} g_{10}}}{2} t \quad (\text{п } 1)$$

При этом

$$\bar{\xi}_0^{(1)} = \frac{1}{2} g_{00} + \sqrt{\beta} \frac{\sqrt{g_{01} g_{10}}}{2} t_1, \quad t_1 = -\frac{1}{t} \quad (\text{п } 2)$$

Из (п 1), (п 2) и (6.4) имеем

$$\tilde{\alpha} = -\frac{\sqrt{g_{01} g_{10}}}{\sqrt{\beta}} (t + t_1) + g_{00} (1 - \frac{1}{\beta}) \quad (\text{п } 3)$$

с другой стороны, согласно (6.10)

$$q_x = -\frac{\gamma_0 x}{2 \sin 2\theta_0} (\tilde{\alpha} - \alpha) \quad (\text{п } 4)$$

Перейдем в (6.14) к интегрированию по комплексной переменной  $t$ .  
При этом

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_x}{2\pi} \rightarrow -\frac{1}{2\pi} \frac{x \sqrt{g_{01} g_{10}}}{2} \frac{\gamma_0}{\sqrt{\beta} \sin 2\theta_0} \int_{\Gamma_t} \frac{dt}{t} (t - t_1) \quad (\text{п } 5)$$

где  $\Gamma_t$  — контур в комплексной плоскости, который проходит переменная  $t$  при изменении  $\tilde{\alpha}$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Заметим, что при переходе от  $\delta' = 1$  к  $\delta' = 2$  в  $\Sigma_{\delta'}$  и последующей замене  $t \rightarrow t_1$ , подынтегральная функция в (6.14) и (п 5) не меняют своего вида. Поэтому достаточно вычислить какой-нибудь один член в  $\Sigma_{\delta'}$ , но интегрировать при этом по контуру  $\gamma = \Gamma_t + \Gamma_{t_1}$ . Пусть  $\delta' = 2$ . Интеграл (6.14), записанный в новых переменных, имеет

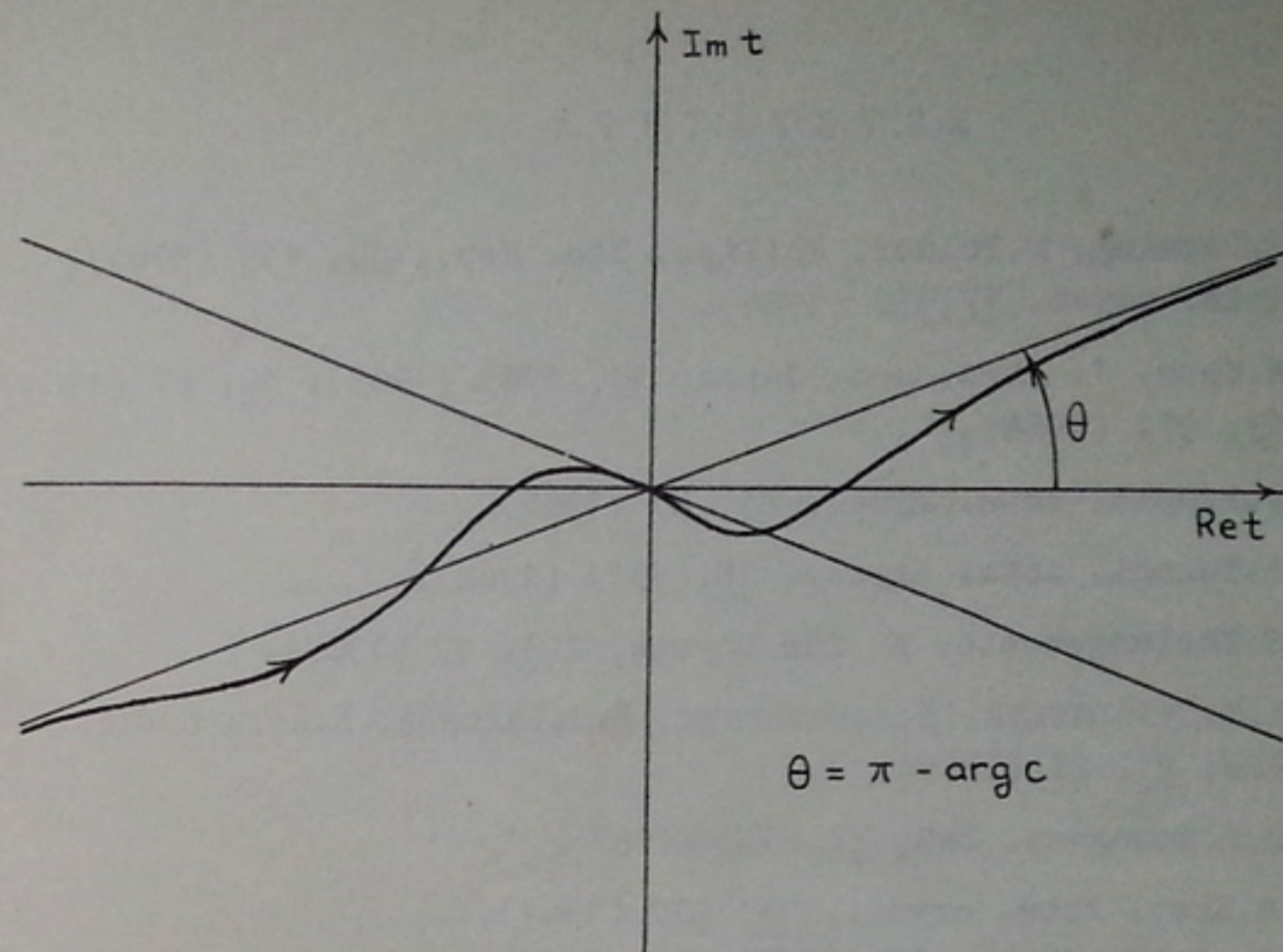


Рис. 5.

вид

$$I = -ic^2 \frac{2\gamma_0}{x \sin 2\theta_0} e^{i\alpha(\frac{g_{00}}{2} s_0 + \frac{g_{00}-\alpha}{2} s_1)} A_{00} \quad (\text{п } 6)$$

где  $c^2 = x^2 g_{01} g_{10} / 4$ ,

$$A_{00}(s_0, s_1) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{dt}{t} e^{ic(\sqrt{\beta} s_0 t + \frac{s_1}{\beta} \frac{1}{t})} \quad (\text{п } 7)$$

Контур  $\gamma$  показан на рис.5. Анализ выражения (п 7) с учетом вида контура  $\gamma$  (см., например, /15/) приводит к (6.16).

ЛИТЕРАТУРА

1. F.Fenning, D.Polder, Philips. Res. Rep., 16, 419 (1961); Acta. cryst., 17, 950 (1964).
2. N.Kato. J. Phys. Soc. Japan, 18, 1785 (1963); 19, 67 (1964); 19, 971 (1964).
3. D.Taupin. Acta. cryst., 23, 25 (1967).
4. S.Takagi. Acta. cryst., 15, 1311 (1962).
5. H.Schlangenotto. Z. für Physik, 203, 17 (1967).
6. И.М.Дубровский, В.Б.Молодкин, Л.В.Тихонов, Е.А.Тихонова. ФММ, 27, 21 (1969).
7. В.Б.Молодкин. ФММ, 27, 582 (1969).
8. N.Kato. Acta. cryst., 14, 627 (1961); J. Appl. Phys., 39, 2225, 2231 (1968).
9. И.Ш.Слободецкий, Ф.Н.Чуховский, В.Л.Инденбом. Письма ЖЭТФ, 8, 90 (1968).
10. A.Authier, D.Simon. Acta. cryst., A24, 517 (1968).
11. A.M.Afanas'ev, Yu.Kagan, F.N.Chukhovskii. Phys. Stat. Sol., 28, 287 (1968).
12. A.M.Afanas'ev, Yu.Kagan. Acta. cryst., A24, 163 (1968).
13. Р.Курант. Уравнения с частными производными. "Мир", М., 1964, стр. 446.
14. W.H.Zachariasen. X-ray diffraction in crystals. New York. John Wiley Sons INC Chapman Hall LTD. London, 1946.
15. Г.Ватсон. Теория бесселевых функций. Т. 1. ИЛ, М., 1949, стр. 198.