1972 г. Июнь Том 107, вып. 2

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

548.732

ПРОБЛЕМА ИЗОБРАЖЕНИЯ В РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКЕ

В. Л. Инденбом, Ф. Н. Чуховский

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ

После открытия М. Лауэ дифракции рентгеновских лучей были разработаны и получили широкое практическое применение разнообразные методы рентгеновского исследования структуры и свойств кристаллов. До последнего времени все эти методы были основаны на упрощенной, так называемой кинематической теории рассеяния, предполагающей, что области когерентного рассеяния рентгеновских лучей в кристалле настолько малы, что первичный рентгеновский пучок испытывает лишь малое возмущение, и можно не учитывать ни многократное рассеяние, ни интерференцию рассеянных пучков, ни ослабление первичного пучка. Достижения рентгенографии при использовании кинематического приближения в структурном анализе [1], исследовании различных дефектов кристалла [2], определении внутренних напряжений [3], изучении электронного спектра методами рентгеновской спектроскопии [4], анализе тепловых колебаний атомов [5] прочно вошли в современную физику твердого тела и физическое материаловедение.

Между тем еще в первых теоретических работах по дифракции рентгеновских лучей [6] были заложены основы динамической теории, отнюдь не предполагающей несовершенство кристалла и, наоборот, трактующей кристалл как идеальный, обладающий абсолютно правильной решеткой и служащий резонатором для падающего рентгеновского пучка. Поскольку интенсивность когерентно рассеянных пучков не предполагается малой по сравнению с первичным пучком, все эти пучки в динамической теории рассматриваются равноправными и поле в кристалле находится из решения уравнений Максвелла для системы самосогласованно колеблющихся диполей (*метод Эвальда*) или, что эквивалентно, для неоднородной среды с поляризуемостью, периодически зависящей от координат (*метод Дарвина*). Возобновление в последние годы интереса к динамической теории рассеяния рентгеновских лучей было связано с появлением новых методов использования кристаллов в науке и технике, требующих все более и более совершенных монокристаллов и породивших новые методы исследования качества кристаллов. От анализа формы линий на дебаеграммах или пятен на лауэграммах рентгенография перешла к рентгенотопографическим методам, дающим изображение внутреннего строения кристалла в одном лауэ-отражении с разрешением, обеспечивающим выявление и идентификацию отдельных дислокаций [7–9a].

Новые потребности и новые экспериментальные возможности ускорили развитие динамической теории рассеяния рентгеновских лучей. Был подробно исследован эффект аномального прохождения рентгеновских лучей через совершенный кристалл, находящийся в точном брэгговском положении (*эффект Бормана* [10a, 11]), была развита теория рассеяния рентгеновских лучей, учитывающая тепловые колебания атомов [12] и позволяющая, в частности, проанализировать неупругое диффузное рассеяние в условиях динамической задачи [13]. Интенсивному изучению подверглась проблема формирования динамического рентгеновского изображения кристалла с дефектами различного типа. Здесь задача оказалась особенно сложной, и наметилось резкое отставание теории от эксперимента.

На практике для исследования реальной структуры полупроводниковых, ионных или металлических кристаллов уже получили широкое распространение различные методы рентгеновской топографии, обладающие высокой чувствительностью к нарушениям идеальности кристаллической решетки и позволяющие получать информацию об объемном распределении дефектов без нарушения целостности и качества образца. В полупроводниковой промышленности, в частности, эти методы уже несколько лет применяются для заводского контроля совершенства кристаллов. Однако отсутствие теории изображения реального кристалла приводит к утрате богатой информации, получаемой на опыте, ставит рентгеновскую топографию в неравноправное положение с оптическими и электронномикроскопическими методами исследования кристаллов и является главным препятствием к эффективному использованию рентгеновской топографии в практике заводских и научно-исследовательских лабораторий.

Как и в случае интерференционной оптической микроскопии [14] и дифракционной электронной микроскопии [15,16], изображение на топограммах обусловлено явлением фазового контраста: в неоднородном кристалле рентгеновское волновое поле оказывается пространственно модулированным не только по амплитуде, но и по фазе. Специфика рентгеновского дифракционного изображения, в отличие от оптического и электронномикроскопического, определяется соотношением длины волны излучения λ и межатомного расстояния d. Если в оптике $\lambda \gg d$ и в электронной микроскопии $\lambda \ll d$, то для рентгеновских лучей $\lambda/d \leqslant 1$ и соответственно угол дифракции оказывается порядка единицы. В результате в формировании каждой детали рентгеновского изображения принимают участие области кристалла, протяженные не только в направлении просвечивания, но и в перпендикулярном направлении. Если в электронной микроскопии изображение можно считать состоящим из точек, каждая из которых изображает структуру образца вдоль направления просвечивания (колонковое приближение [16]), то в рентгеновской топографии изображение следует считать скорее штриховым, причем каждой точке в кристалле отвечает полоска длиной порядка толщины образца. Перекрытие геометрического и дифракционного изображений, редко встречающееся в оптике и электронной микроскопии, оказывается общим случаем в рентгеновской топографии.

В последние годы в литературе наметились различные подходы к решению проблемы рентгеновского изображения, появилась возможность проанализировать накопленные результаты и наметить наиболее перспективные для практического использования приемы теоретического анализа изображения. В настоящей статье рассматривается динамическая теория формирования рентгеновского изображения, основанная на представлении рентгеновского поля в виде двух пространственно-неоднородных волновых пакетов. В гл. 2 рассматривается однородное волновое поле в идеальном кристалле, определяющее, в частности, изображение рельефа поверхности и формы образца. В гл. 3 исследуется неоднородное волновое поле в идеальном кристалле, строятся функции влияния, описывающие распространение локального возмущения, и анализируется изображение щелей, экранов и небольших объемных включений. В гл. 4 строится общая теория изображения кристалла с известным полем искажений, указываются частные случаи, допускающие простые аналитические оценки. Результаты численного расчета изображения сложных полей искажений, вызванных дислокациями, сопоставляются с приближенными оценками, полученными с помощью функций влияния. В гл. 5 разбирается геометрическая оптика рентгеновских лучей. Устанавливается аналогия траекторий лучей с движением заряженных частиц в электрическом поле. Выводятся условия отражения и преломления лучей при переходе через границу раздела. В гл. 6 развивается общий метод построения аналитического решения уравнений для волнового поля в кристалле в приближении геометрической оптики. В качестве примера строится изображение дислокации, перпендикулярной к поверхности образца. Результаты сопоставляются с численным расчетом изображения дислокации на ЭВМ и с экспериментом. Для двумерного поля искажений развивается асимптотический метод расчета изображения, облегчающий анализ изображения для толстого кристалла и позволяющий непосредственно учесть эффекты полного внутреннего отражения, возникновения волноводов, теней и т. д.

2. ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ В ИДЕАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ

Будем описывать поле рентгеновского излучения в кристалле с помощью вектора электрического поля $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r})$. Этот вектор удовлетворяет уравнению Максвелла

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}) = \varkappa^2\varepsilon(\omega, \mathbf{r})\,\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}), \qquad (2.1)$$

где $\varkappa$ и ω — волновой вектор и частота падающей волны, $\varepsilon(\omega, \mathbf{r})$ — диэлектрическая постоянная, мало отличающаяся от единицы, так что поляризуемость кристалла $\chi(\omega, \mathbf{r}) = \varepsilon(\omega, \mathbf{r}) - 1$ является малой величиной. В идеальном кристалле функция $\chi(\omega, \mathbf{r})$ периодически зависит от координат и может быть разложена в ряд по векторам обратной решетки $\mathbf{K}_h$:

$$\chi(\omega, \mathbf{r}) = \sum_h \chi_h(\omega)\, e^{i\mathbf{K}_h\mathbf{r}}. \qquad (2.2)$$

Решением уравнения (2.1) служат блоховские волны

$$\mathbf{E}_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\sum_h \mathbf{E}_h e^{i\mathbf{K}_h\mathbf{r}}, \qquad (2.3)$$

где вектор $\mathbf{k}$ удовлетворяет дисперсионному уравнению, которое получается при подстановке (2.3) в (2.1) и приравнивании нулю детерминанта матрицы $A_{hh'}^{ij} = \{[(\mathbf{k}+\mathbf{K}_h)^2 - \varkappa^2]\,\delta_{ij}\delta_{hh'} - (\mathbf{k}+\mathbf{K}_h)_i\,(\mathbf{k}+\mathbf{K}_h)_j\,\delta_{hh'} - \varkappa^2\chi_{h-h'}\,\delta_{ij}\}$, связывающей компоненты векторов $\mathbf{E}_h$.

а) Двухволновое приближение. Наибольший практический интерес представляет тот случай, когда ориентация кристалла близка к одному из брэгговских положений, например, к положению

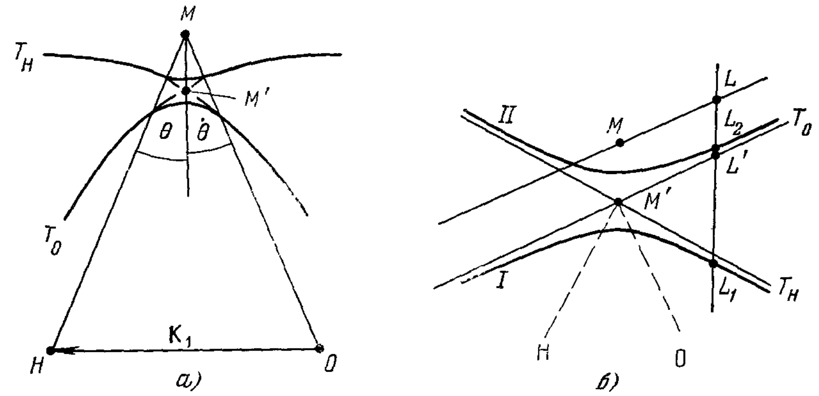


Рис. 1. Сечение дисперсионной поверхности плоскостью рассеяния.

с вектором отражения $\mathbf{K}_1$. При этом в разложении (2.3) можно ограничиться двумя членами с амплитудами E_0 и E_1, соответствующими проходящей и дифрагированной волнам (двухволновое приближение):

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}} = \mathbf{e}_0 E_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{e}_1 E_1 e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}; \tag{2.4}$$

здесь $\mathbf{e}_0$ и $\mathbf{e}_1$ — орты, перпендикулярные соответственно векторам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \mathbf{K}_1$ (малой непоперечностью электромагнитного поля в кристалле можно пренебречь) и расположенные либо в плоскости рассеяния $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}_1$, либо перпендикулярно к ней. Амплитуды E_0 и E_1 удовлетворяют вытекающему из (2.1) матричному уравнению

$$\begin{pmatrix} (k^2-\varkappa^2)\,\varkappa^{-2}-\chi_0 & -\chi_{-1}C \\ -\chi_1 C & (k_1^2-\varkappa^2)\,\varkappa^{-2}-\chi_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix} = 0, \tag{2.5}$$

где $C = 1$ для компонент волнового поля, поляризованных в плоскости рассеяния, и $C = \cos 2\theta$ — для компонент, поляризованных перпендикулярно к этой плоскости; $\theta = \widehat{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}/2$ — брэгговский угол.

Соответствующее (2.5) дисперсионное уравнение

$$[(k^2-\varkappa^2)\varkappa^{-2}-\chi_0]\,[(k_1^2-\varkappa^2)\varkappa^{-2}-\chi_0] = C^2\chi_{-1}\chi_1$$

описывает двухлистную поверхность вращения с осью, параллельной вектору $\mathbf{K}_1$. Поскольку дисперсионную поверхность можно трактовать как изоэнергетическую поверхность в пространстве обратной решетки, анализ ее формы ничем не отличается, например, от обычного анализа формы ферми-поверхности вблизи границы зоны Бриллюэна.

Рис. 1 иллюстрирует сечение дисперсионной поверхности плоскостью рассеяния. $\overrightarrow{OH} = \mathbf{K}_1$ — вектор отражения. Условию Брэгга $k = k_1 = \varkappa$ ($OM = HM = \varkappa$) соответствует точка M, падающей волне — точка L. При больших отклонениях от условий Брэгга листы дисперсионной поверхности переходят в сферы T_O и T_H с центрами в точках O и H (*а*), отстоящих друг от друга на расстояние $\overrightarrow{OH} = \mathbf{K}_1$; при малых отклонениях — в гиперболические цилиндры (*б*). Радиус сфер равен $\varkappa\,(1 + \chi_0)^{1/2}$, что соответствует распространению волн в однородной среде с показателем преломления $(1 + \chi_0)^{1/2} \approx 1 + (\chi_0/2)$. (Поскольку $\chi_0 < 0$, кристалл для рентгеновских волн является менее плотной средой, чем вакуум.) Линия пересечения сфер соответствует точке M'. Вблизи этой точки сферы T_O и T_H мало отличаются от плоскостей, перпендикулярных к $\overrightarrow{OM'}$ и $\overrightarrow{HM'}$, а дисперсионная поверхность близка к гиперболическому цилиндру

$$[\mathbf{k}\overrightarrow{M'O} - \varkappa^2\,(1 + \chi_0)]\,[\mathbf{k}_1\overrightarrow{M'H} - \varkappa^2\,(1 + \chi_0)] = C^2\chi_{-1}\chi_1\varkappa^2/_4, \tag{2.6}$$

для которого плоскости T_O и T_H служат асимптотами (как χ_{-1}, так и χ_1 — отрицательные величины, поэтому правая часть (2.6) положительна). Дисперсионная поверхность для поляризации в плоскости падения отличается от дисперсионной поверхности для поляризации в перпендикулярной к плоскости большей длиной действительной оси гиперболы, определяющей минимальное расщепление дисперсионной поверхности

$$\Delta k_{\min} \approx \varkappa C\,(\chi_{-1}\chi_1)^{1/2}\sec\theta. \tag{2.7}$$

При $\varkappa \approx 10^8$ *см*$^{-1}$ и $|\chi| \approx 10^{-5}$ величина расщепления оказывается порядка 10^3 *см*$^{-1}$.

б) Блоховские функции. Разным листам дисперсионной поверхности соответствуют блоховские функции разных типов. Первый лист (нижний на рис. 1, *б*) соответствует отрицательным значениям обеих скобок в левой части уравнения (2.6). Как видно из (2.5), в этом случае E_0 и E_1 имеют одинаковые знаки, поэтому пучности блоховских волн проходят вблизи узлов решетки. Второй (верхний) лист дисперсионной поверхности соответствует разным знакам E_0 и E_1 и расположению пучностей блоховских волн между узлами решетки. В симметричном случае (для вершин гипербол) векторы $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{E}_1$ равны по абсолютной величине, и блоховские функции для поляризации в плоскости падения, когда $\mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_1$, приобретают простой вид

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}\,(\mathbf{r}) = 2\mathbf{e}_0E_0\exp\,[i\,(\mathbf{k} + 0{,}5\mathbf{K}_1)\,\mathbf{r}]\cos\,(\mathbf{K}_1\mathbf{r}/2)$$

для первого листа и

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}\,(\mathbf{r}) = -2i\mathbf{e}_0E_0\exp\,[i\,(\mathbf{k} + 0{,}5\mathbf{K}_1)\mathbf{r}]\sin\,(\mathbf{K}_1\mathbf{r}/2) \tag{2.8}$$

для второго листа дисперсионной поверхности. В первом случае узлы блоховской функции располагаются точно между узлами решетки, во втором случае — ложатся на отражающие атомные плоскости и при распространении волны проходят через узлы решетки. Аналогичная ситуация для электронных волновых функций, как известно, имеет место в случае расщепления энергетических уровней вблизи границы зоны Бриллюэна в результате сильного отражения электронов [17].

Отмеченное различие блоховских функций оказывается очень существенным при учете поглощения рентгеновских лучей. Фотоэлектрическое поглощение приводит к появлению в поляризуемости $\chi\,(\omega, \mathbf{r})$ малой мнимой части. Соответственно коэффициенты χ_h являются комплексными величинами $\chi_h = \chi'_h + i\chi''_h$, где $0 < \chi''_h < -\chi'_h$. Средний показатель преломления кристалла $(1 + \chi_0)^{1/2} \approx 1 + (\chi'_0/2) + i\,(\chi''_0/2)$ отвечает фотоэлектрическому поглощению с коэффициентом поглощения $\mu = \varkappa\chi''_0$. При $\chi'_1 \approx \chi'_{-1}$ для коэффициента поглощения блоховских волн первого типа с $E_0 \approx E_1$ из (2.6) следует

$$\mu_1 = (\mu/\cos\theta)\,[1 + (C/2\chi_0'')\,(\chi_1'' + \chi_{-1}'')].$$

Аналогично для блоховских волн второго типа с $E_0 \approx -E_1$

$$\mu_2 = (\mu/\cos\theta)\,[1 - (C/2\chi_0'')\,(\chi_1'' + \chi_{-1}'')]. \qquad (2.9)$$

В обоих случаях учтено, что направление распространения рассматриваемых блоховских волн образует углы θ с векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_1$. При $C = 1$ и $\chi_1'' \approx \chi_1'' \approx \chi_0''$ получаем $\mu_1 \approx 2\mu/\cos\theta$ и $\mu_2 \ll \mu_1$, т. е. блоховские волны различных типов испытывают существенно различное поглощение, причем блоховские волны типа (2.8), поляризованные в отражающей плоскости и распространяющиеся вдоль отражающих плоскостей таким образом, что их узлы бегут вдоль атомных плоскостей, испытывают аномально слабое поглощение по сравнению с обычным фотоэлектрическим поглощением. Этот эффект Бормана [10a] аномального происхождения рентгеновских лучей позволяет использовать совершенные кристаллы в качестве коллиматоров с угловой расходимостью порядка χ (т. е. порядка нескольких секунд и поляризаторов со степенью поляризации порядка $1 - \exp(-\delta\mu t)$, где t — толщина кристалла, а $\delta\mu \approx \mu\,(1 - C)\sec\theta$ — определяемая (2.9) разность минимальных коэффициентов поглощения для волн разной поляризации, характеризующая *рентгеновский дихроизм* кристалла.

в) Возбуждение волнового поля в кристалле. В общем случае внешний рентгеновский пучок, падающий на кристалл, возбуждает в нем целую серию блоховских волн. Если на плоскую грань кристалла, расположенного почти точно в брэгговском положении, падает плоская волна с волновым вектором $\varkappa$ ($\overrightarrow{LO}$ на рис. 1), в кристалле для каждой поляризации возбуждаются две блоховские волны с волновыми векторами $\overrightarrow{L_1O}$ и $\overrightarrow{L_2O}$ на рис. 1, отвечающие двум точкам, L_1 и L_2, на разных листах дисперсионной поверхности, связанным с точкой L условием непрерывности тангенциальной компоненты волнового вектора на границе кристалла

$$[\varkappa\mathbf{n}] = [\mathbf{k}^{(\mathrm{I})}\mathbf{n}] = [\mathbf{k}^{(\mathrm{II})}\mathbf{n}], \qquad (2.10)$$

где $\mathbf{n}$ — нормаль к входной грани кристалла. Условие (2.10) означает, что точки L, L_1 и L_2 — концы волновых векторов $\varkappa = \overrightarrow{LO}$, $\mathbf{k}^{(\mathrm{I})} = \overrightarrow{L_1O}$, $\mathbf{k}^{(\mathrm{II})} = \overrightarrow{L_2O}$ — располагаются на одной прямой, параллельной вектору $\mathbf{n}$ (см. рис. 1). Точка пересечения L' этой прямой с асимптотой T_O определяет волновой вектор $\overrightarrow{L'O}$, $|\overrightarrow{L'O}| = \varkappa' = \varkappa\,(1 + \chi_0)^{1/2}$ для волны, которая распространялась бы в кристалле с однородной поляризуемостью $\chi = \chi_0$.

Суперпозиция независимо распространяющихся в кристалле блоховских волн с близкими волновыми векторами $\mathbf{k}^{(\mathrm{I})}$ и $\mathbf{k}^{(\mathrm{II})}$ приводит к возникновению в суммарном волновом поле пространственных биений с волновым вектором $\Delta\mathbf{k} = 0{,}5\,(\mathbf{k}^{(\mathrm{I})} - \mathbf{k}^{(\mathrm{II})})$ (маятниковое решение [18a], аналогичное случаю связанных маятников в механике). На расстоянии $l = \pi/|\Delta\mathbf{k}|$ в направлении нормали к входной грани происходит перекачка энергии из проходящей волны в дифрагированную и обратно. В точном брэгговском положении, соответствующем минимальному расстоянию (2.7) между листами дисперсионной поверхности, длина l достигает максимального значения $\Lambda = 2\pi\,(C\varkappa)^{-1}\,(\chi_1\chi_{-1})^{-1/2}\cos\theta$, называемого *экстинкционной длиной*. Соотношение амплитуд E_0 и E_1 в каждой блоховской волне согласно (2.5) определяется пропорцией

$$E_0/E_1 = C\chi_{-1}/[(\mathbf{k}^2 - \varkappa^2)\,\varkappa^{-2} - \chi_0]. \qquad (2.11)$$

С точностью до поправок порядка χ_0 (т. е. в пренебрежении поправками на среднюю рефракцию) амплитуды блоховских функций находятся из условия непрерывности электромагнитного поля на границе кристалла: сумма блоховских волн (2.4) для векторов $\mathbf{k}^{(I)}$ и $\mathbf{k}^{(II)}$ (и обеих поляризаций) должна давать на входной грани для напряженности электрического поля и ее нормального градиента значения, соответствующие полю падающей на кристалл волны.

Подробное решение граничных задач в динамической теории рассеяния плоских волн имеется в ряде монографий и обзоров [18б]. Мы приведем в качестве примера лишь выражение для суммарного волнового поля, поляризованного в плоскости рассеяния, в случае $\mathbf{nK}_1 = 0$ (симметричная дифракция Лауэ)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_0 E_0(z)\, e^{i\varkappa\mathbf{r}} + \mathbf{e}_1 E_1(z)\, e^{(i\varkappa+\mathbf{K}_1)\mathbf{r}}, \qquad (2.12)$$

где

$$E_0(z) = \exp\{i\,[(\chi_0\varkappa z/2\cos\theta) - (\alpha\varkappa z/4\cos\theta)]\}\,\{\cos[(\chi_1\varkappa z/2\cos\theta)\,[1+(\alpha/2\chi_1)^2]^{1/2}] + (i\alpha/2\chi_1)\sin[(\chi_1\varkappa z/2\cos\theta)\,[1+(\alpha/2\chi_1)^2]^{1/2}]\,[1+(\alpha/2\chi_1)^2]^{-1/2}\}, \qquad (2.13)$$

$$E_1(z) = i\exp\{i\,[(\chi_0\varkappa z/2\cos\theta) - (\alpha\varkappa z/4\cos\theta)]\}\times \sin\{(\chi_1\varkappa z/2\cos\theta)\,[1+(\alpha/2\chi_1)^2]^{1/2}\}\,[1+(\alpha/2\chi_1)^2]^{-1/2}; \qquad (2.14)$$

здесь $z = \mathbf{rn}$ — расстояние от входной грани кристалла — для упрощения положено $\chi_1 = \chi_{-1}$ (что справедливо для центросимметричного кристалла), параметр $\alpha = [(\varkappa + \mathbf{K}_1)^2 - \varkappa^2]/\varkappa^2$ определяет отклонение направления падающей волны от точного условия Брэгга: отклонению на угол φ соответствует $\alpha = 2\varphi\sin 2\theta$. (На рис. 1 расстояние $LM = \varphi\varkappa = \alpha\varkappa/2\sin 2\theta$.)

Как видно из (2.13), (2.14), интенсивность проходящей и дифрагированной волн пространственно модулирована с периодом $l = \Lambda/[1+(\alpha/2\chi_1')]^{1/2}$. При учете поглощения на глубине порядка $l_1 \approx \mu_1^{-1}\,[1+(\alpha/2\chi_1')^2]^{1/2}$ осцилляции интенсивности прекращаются, и при $z \gg l_1$ формируется бормановское волновое поле. Экстинкционные модуляции прекращаются на глубине порядка

$$l_1 = \cos\theta\cdot(\chi_1''\varkappa)^{-1}\,[1+(\alpha/2\chi_1')^2]^{1/2} \approx (\mu_1/2)^{-1}\,[1+(\alpha/2\chi_1')^2]^{1/2},$$

соответствующей поглощению блоховской волны первого типа. В области $z > l_1$ распространяется лишь блоховская волна второго типа (эффект Бормана), обладающая относительно слабым поглощением и исчезающая на глубине порядка

$$l_2 = \varkappa^{-1}\cos\theta/\{\chi_0'' - \chi_1''\,[1+(\alpha/2\chi_1')^2]^{-1/2}\}.$$

При $|\alpha| \ll |\chi_1'|$ бормановское поле простирается на максимальную глубину $l_2 \approx \mu_2^{-1}$. По мере отклонения от условия Брэгга l_2 быстро уменьшается. Когда $|\alpha| > |\chi_1'|$,

$$l_2 \approx l_1/\{[1+(\alpha/2\chi_1')^2]^{1/2} - 1\} \approx (\mu_1/2)^{-1}/\{1 - [1+(\alpha/2\chi_1')^2]^{-1/2}\}.$$

Когда отношение $|\alpha/\chi_1'|$ достигает нескольких единиц (отклонение падающей волны от точного направления Брэгга составляет при этом примерно 10—15 *угл. сек*), величина l_2 приближается к l_1 и эффект Бормана полностью исчезает.

г) Изображение рельефа поверхности и формы кристалла. Если выходная грань кристалла не параллельна ее входной грани, экстинкционные модуляции (2.13), (2.14) приводят к возникновению экстинкционных полос на рентгеновском изображении кристалла, толщина которого не превышает величины l_1. Эти полосы аналогичны известным в оптике полосам равной толщины и для изображения в дифрагированной волне соответствуют толщине образца, равной полуцелому числу периодов экстинкционной модуляции $t = l\,(n + {}^1/_2)$ ($n = 0, 1, 2, \ldots$). Простейшим примером служит изображение клиновидного кристалла, где полосы параллельны вершине клина и расположены на расстояниях l/ψ, где ψ — угол клина. Системы интерференционных полос для различных поляризаций накладываются друг на друга. При этом в изображении клина возникают биения с периодом $l' = 2l/(1 - C)$. Эти биения хорошо заметны, когда $l' < l_1$.

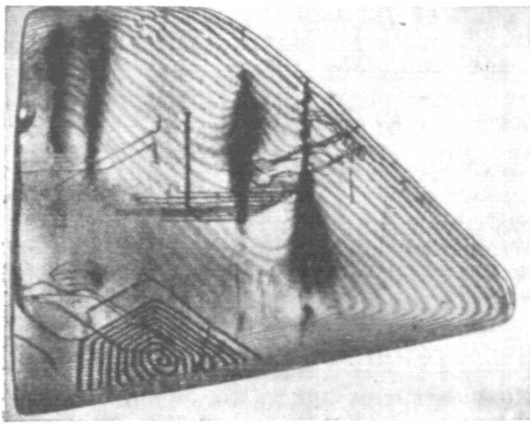


Рис. 2. Рентгеновская фотография кристалла кремния [19].

На рис. 2 приведена рентгеновская дифракционная фотография кристалла кремния (отражение $\overline{1}11$; по краям образца видны экстинкционные полосы равной толщины, в центральной части — дислокации и макроскопические дефекты кристалла). Контуры полос равной толщины наглядно передают пирамидальную форму кристалла. С помощью фотографий типа рис. 2 можно по расстоянию между экстинкционными полосами определить экстинкционную длину Λ и величину χ_1', а по ослаблению полос — длину l_1 и соответственно коэффициент поглощения блоховских волн первого типа и величину χ_1''. Как видно из (2.13), (2.14), экстинкционные полосы соответствуют постоянству произведения $t\,[(\chi_1'/2)^2 + (\alpha/4)^2]^{1/2}$. Поэтому в равнотолщинной пластинке, освещаемой расходящимся рентгеновским пучком, могут возникнуть интерференционные полосы равного наклона, соответствующие контурам $\alpha = \text{const}$. Полосы этого типа возникают также при изгибании тонких кристаллических пластинок и позволяют судить о форме образца.

3. ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ В ИДЕАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ

Пространственно-неоднородное волновое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ может быть представлено в виде суперпозиции блоховских волн (2.3), но при этом требуется, вообще говоря, неограниченный выбор блоховских волн. Более удобно представить пространственно-неоднородное поле в виде суперпозиции двух волновых пакетов, соответствующих проходящей и дифрагированной волнам:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{E}_0(\mathbf{r})\, e^{i\varkappa\mathbf{r}} + \mathbf{E}_1(\mathbf{r})\, e^{i(\varkappa+\mathbf{K}_1)\mathbf{r}}, \tag{3.1}$$

где $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ и $\mathbf{E}_1(\mathbf{r})$ — плавно меняющиеся функции координат.

Введем в плоскости рассеяния безразмерные декартовы координаты $x = [(\mathbf{K}_1\mathbf{r})/(\varkappa \mathbf{K}_1)]\,\varkappa^2$, $z = [((2\varkappa + \mathbf{K}_1)\mathbf{r})/((2\varkappa + \mathbf{K}_1)\,\varkappa)]\,\varkappa^2$. Подставляя (3.1) в (2.1) и пренебрегая малой продольной составляющей электрического поля в кристалле, получим в этих координатах для каждой из двух возможных поляризаций следующую систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} -2i\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)-\chi_0 & -\chi_{-1}C \\ -\chi_1 C & -2i\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\right)-\chi_0+\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix}=0. \tag{3.2}$$

Подстановка $E_0 \to E_0 e^{i\chi_0 z/2}$, $E_1 \to E_1 e^{i\chi_0 z/2}$ приводит (3.2) к виду

$$\begin{pmatrix} -2i\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right) & -\chi_{-1}C \\ -\chi_1 C & -2i\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\right)+\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix}=0, \tag{3.3}$$

что соответствует для амплитуд E_0 и E_1 телеграфному уравнению с постоянными коэффициентами

$$\hat{D}[E_j] \equiv \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{i\alpha}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{\chi^2}{4}\right]E_j=0, \quad \chi^2=\chi_{-1}\chi_1 C^2 \quad (j=0,\ 1). \tag{3.4}$$

а) Ф у н к ц и и в л и я н и я. Общее решение уравнения (3.4) строится с помощью функции Римана [20], отличной от нуля в области $|x| \leqslant z$:

$$G(x, z) = -0{,}5 J_0 \left(0{,}5\chi\,(z^2-x^2)^{1/2}\right) e^{-i\alpha(z-x)/4}\ \theta(z)\,[\theta(x+z)-\theta(x-z)]; \tag{3.5}$$

здесь $J_0(t)$ — функция Бесселя нулевого порядка, $\theta(t)$ — ступенчатая функция: $\theta(t)=0$ при $t<0$ и $\theta(t)=1$ при $t>0$. Пусть на контуре L, который пересекается характеристиками $z \pm x = \mathrm{const}$ лишь в одной точке, известны значения функции $E_j(x, z)$ и ее нормальной производной $\partial E_j(x, z)/\partial n$. Для любой точки (x, z) треугольной области, образованной контуром L и характеристиками, проведенными из его концов, значения $E_j(x, z)$ определяются выражением

$$\begin{aligned} E_j(x, z) &= \int_L dl\,(dx'-dz')\,\frac{i\alpha}{2}E_j(x', z')\,G(x-x', z-z') + \\ &+ \int_L dl\left[\left(\frac{dz'}{dl}\right)^2-\left(\frac{dx'}{dl}\right)^2\right]\left[\frac{\partial E_j}{\partial n}(x', z')\,G(x-x', z-z') - \right. \\ &\left. - E_j(x', z')\,\frac{\partial G(x-x', z-z')}{\partial n}\right] + 2\int_L dl\,\frac{dx'}{dl}\,\frac{dz'}{dl}\times \\ &\times\left[\frac{\partial E_j(x', z')}{\partial l}\,G(x-x', z-z') - E_j(x', z^1)\,\frac{\partial G}{\partial l}(x-x', z-z')\right]. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Формула (3.6) вытекает очевидным образом из теоремы Грина, если учесть, что функция Римана (3.5) удовлетворяет уравнению

$$\hat{D}\,[G(x, z)] = -\delta(x)\,\delta(z).$$

Исключая с помощью (3.2) производные $\partial E_j/\partial n$ и $\partial E_j/\partial l$ из формулы (3.6), получаем

$$\begin{aligned} E_0(x, z) &= \int_L (dx'+dz')\,G_{01}(x-x', z-z')\,E_1(x', z') + \\ &+ \int_L (x'-dzd')\,G_{00}(x-x', z-z')\,E_0(x', z'), \end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned} E_1(x, z) &= \int_L (dx'-dz')\,G_{10}(x-x', z-z')\,E_0(x', z') + \\ &+ \int_L (dx'+dz')\,G_{11}(x-x', z-z')\,E_1(x', z'); \end{aligned}$$

здесь

$$G_{01}(x, z) = -(i\chi_{-1}C/4)\, e^{-i\alpha(z-x)/4} J_0(\chi(z^2 - x^2)^{1/2}/2)\,\theta(z)\,[\theta(x+z) - \theta(x-z)],$$

$$G_{10}(x, z) = -(i\chi_1 C/4)\, e^{-i\alpha(z-x)/4} J_0(\chi(z^2 - x^2)^{1/2}/2)\,\theta(z)\,[\theta(x+z)-\theta(x-z)], \quad (3.8)$$

$$G_{00}(x, z) = -e^{-i\alpha(z-x)/4}\{\delta(z-x) - 0{,}25\chi[(z+x)/(z-x)]^{1/2} \times J_1(\chi(z^2-x^2)^{1/2}/2)\,\theta(z)\,[\theta(x+z) - \theta(x-z)]\},$$

$$G_{11}(x, z) = -e^{-i\alpha(z-x)/4}\{\delta(z+x) - 0{,}25\chi[(z-x)/(z+x)]^{1/2} \times J_1(\chi(z^2-x^2)^{1/2}/2)\,\theta(z)\,[\theta(x+z) - \theta(x-z)]\}.$$

Функции (3.8) являются функциями влияния, описывающими распространение локального возмущения волнового поля и играют в оптике

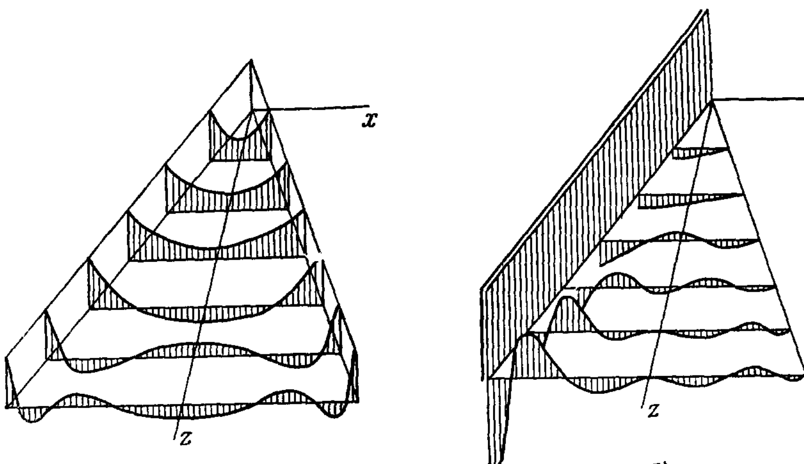


Рис. 3. Схема распространения локального возмущения.

рентгеновских лучей такую же роль, какую в световой оптике играет функция $r^{-1}\exp(i\varkappa r)$, описывающая, согласно принципу Гюйгенса — Френеля, распространение возмущения от элементарного источника. Функции влияния (3.8) отличны от нуля только в так называемой дельте Бормана $|x| \leqslant z$.

Характер распространения возмущения внутри дельты Бормана существенно зависит от поглощения рентгеновского излучения в кристалле. В слабопоглощающих (тонких) кристаллах с $\mu t < 1$ коэффициент χ можно считать действительной величиной, и функции влияния выражаются через бесселевы функции J_0 и J_1 действительного аргумента, которые по мере возрастания аргумента осциллируют со все уменьшающейся амплитудой. Соответственно вблизи границы дельты Бормана (вблизи характеристик) возникают осцилляции, число которых зависит от расстояния до источника возмущения. Из (3.8) видно, что функции G_{00} и G_{11} имеют соответственно на характеристиках $z = \pm x$ δ-образные особенности, которые можно интерпретировать как прямое геометрическое изображение источника. На рис. 3 схематически показан ход функций влияния для непоглощающего кристалла и точной брэгговской его ориентации ($\alpha = 0$), когда: а) $i\chi_1 G_{01}(x, z) = i\chi_{-1}G_{10}(x, z)$ и б) $G_{11}(x, z)$ и $G_{00}(-x, z)$.

В поглощающих кристаллах необходимо учитывать как действительную $\chi' \approx C\,(\chi_1'\chi_{-1}')^{1/2}$, так и мнимую

$$\chi'' \approx -0{,}5C\,[\chi_1'\,(\chi_{-1}'/\chi_1')^{1/2} + \chi_{-1}'\,(\chi_1'/\chi_{-1}')^{1/2}]$$

части коэффициента $\chi = \chi' + i\chi''$. (При указанном выборе знаков $\chi' > 0$ и $\chi'' < 0$.) Поскольку $|\chi''| \ll \chi' \approx |\chi|$, при малых значениях $(z^2 - x^2)^{1/2}$ (вблизи границ дельты Бормана) пространственное распределение возмущения мало отличается от случая непоглощающего кристалла — нужно лишь учесть общее ослабление возмущения с глубиной по закону $\exp(-\chi_0''z/2)$. Однако с увеличением аргумента бесселевых функций

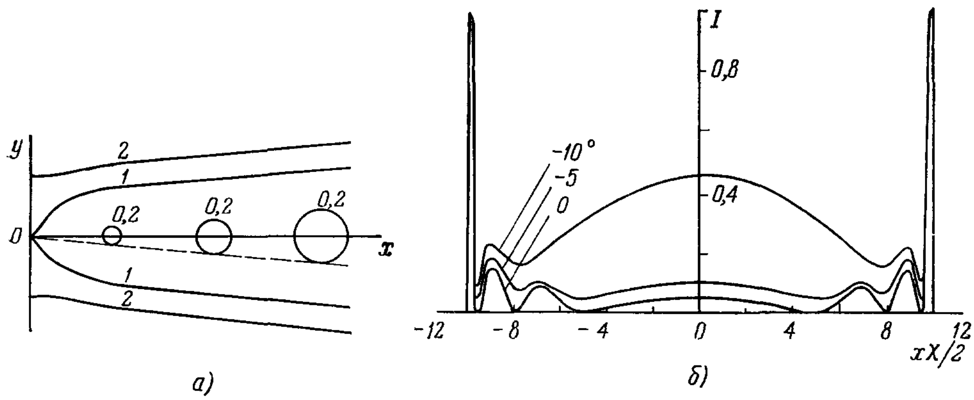


Рис 4 Влияние поглощения на распространение локального возмущения

их (абсолютная) величина уже перестает осциллировать и начинает экспоненциально нарастать. В результате возмущение локализуется не у краев, а в центральной части дельты Бормана. На рис. 4, *а* в качестве иллюстрации поведения функций влияния G_{01} и G_{10} приведена карта модуля функции $J_0(\rho e^{i\varphi})$ (штриховая прямая соответствует $\varphi = \operatorname{arctg}(y/x) = -5°$). Из рис. 4, *а* видно, что в плоскости (x, y), где $x + iy \equiv \rho e^{i\varphi}$, рельеф функции $|J_0(x + iy)|$ представляет собой вытянутую вдоль оси x долину, которая по мере возрастания мнимой части аргумента y переходит в крутые склоны Лучи $\varphi = \mathrm{const}$ соответствуют значениям $\chi'' = -|\chi|\sin\varphi$. Полагая $\rho = |\chi|\,(z^2 - x^2)^{1/2}/2$, получаем распределение интенсивности излучения внутри дельты Бормана для точечного источника, схематически показанное на рис. 4, *б* (построенное по рельефу рис. 4, *а* распределение интенсивности дифракционного изображения узкой щели для $|\chi t| = 20$ в зависимости от коэффициента поглощения; на кривых указано значение параметра φ). Используя асимптотическое представление функций Бесселя для больших аргументов, можно убедиться, что переход от осцилляций к экспоненциальному нарастанию функций влияния в центральной части дельты Бормана происходит при $(z^2 - x^2)^{1/2} \gtrsim -1/\chi''$, что соответствует затуханию блоховских волн первого типа и возникновению волнового бормановского поля. В этой области интенсивность возмущения, вызванного точечными источниками, распределена по закону $(z^2 - x^2)^{-1/2}\exp[-\chi''(z^2 - x^2)^{1/2}]$, который при $|x| \ll z$ приближается к гауссовскому закону с полушириной максимума порядка $(z/\chi'')^{1/2}$. Убывание интенсивности с глубиной для центральной части дельты Бормана описывается функцией $z^{-1}\exp[-(\chi_0'' + \chi'')\,z]$ и определяется в основном поглощением блоховских волн второго типа.

б) Изображение щели и экрана. Функции влияния (3.8) позволяют непосредственно построить волновое поле при произвольном распределении падающей волны на входной поверхности кристалла. Пусть, например, эта поверхность совпадает с плоскостью $z = 0$. Полагая при $z = 0$ $E_0 = E_0(x, y)$ и $E_1 = 0$, получаем из (3.7)

$$E_0(x, y, z) = \int E_0(x', y)\, G_{00}(x - x', z)\, dx',$$

$$E_1(x, y, z) = \int E_0(x', y)\, G_{10}(x - x', z)\, dx'. \qquad (3.9)$$

При $E_0(x', y, 0) = \mathrm{const}$, используя табличный интеграл, получаем

$$\int_{-z}^{z} J_0(\chi (z^2 - x^2)^{1/2}/2)\, e^{i\alpha x/4} dx =$$
$$= 2 \sin \{z (\chi^2/4) + (\alpha^2/16)]^{1/2}\}/[(\chi^2/4) + (\alpha^2/16)]^{1/2}.$$

Из (3.9) снова получаем волновое поле (2.13), (2.14) для падающей плоской волны. В обратном предельном случае бесконечно узкой щели ее

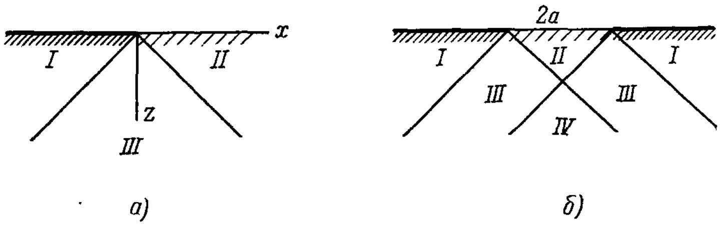


Рис. 5. Схема изображения полубесконечного экрана (*а*) и щели (*б*).

изображение непосредственно дается функциями G_{00} в проходящей и G_{10} в дифрагированной волне. Рис. 3 и 4, таким образом, можно трактовать как изображение узкой щели для непоглощающих и поглощающих кристаллов.

Изображение полубесконечного экрана вытекает из (3.9) при $E_0(x, y) = \mathscr{E}\,\theta(x)$. Характеристики, проходящие через край экрана, рассекают изображение на три характерные области (рис. 5, *а*). В области $x < -z$ поле полностью отсутствует (область тени *I*). В области $x > z$ (полностью освещенная область *II*) волновое поле не зависит от x и определяется формулами (2.13), (2.14). В переходной области $|x| < z$ (изображение края экрана — область *III*), которую нельзя, вообще говоря, рассматривать как область полутени, возникает интерференцированное изображение экрана. На рис. 5, *б* приведена аналогичная рис. 5, *а* схема изображения щели (область *IV*). В этом случае $E_0(x, y) = \mathscr{E}\,[\theta(x + a) - \theta(x - a)]$, где a — полуширина щели. В областях *I—III* изображение совпадает с соответствующей частью изображения экрана. В области *IV* происходит наложение интерференционных изображений от обоих экранов, создающих щель. В этой области влияние ширины щели на характер изображения сказывается в первую очередь на экстинкционных модуляциях вблизи границ области: по сравнению с изображением бесконечно узкой щели исчезают экстинкционные полосы, расположенные на расстоянии меньше ширины щели. Расчет изображения экрана и конечной щели различной ширины для непоглощающих и поглощающих кристаллов дан в работах [21, 22]. В качестве иллюстрации на рис. 6, *а* приведена фотография [23] узкой щели [ширина щели $2a = 10$ *мкм*, кристалл Si толщиной $t =$

$= 0{,}42$ *мм*, отражение (224); Mo K_α], а на рис. 6, *б* — *г* — типичные примеры расчета изображений экрана (*б*) и щели (*в*, *г*) (*б* — край экрана при $\alpha = 0$ и $\chi t = 11\pi$; *в* и *г* — щель соответственно при $a/t = 0{,}625$ и $a/t = 0{,}125$; принято $\alpha = 0$, $\chi t = 16\pi$; фигурной скобкой отмечена область $|x - t| < a$).

Качественный анализ изображений экранов и щелей может быть проведен по аналогии с известным в оптике методом зон Френеля. Для этого в формулах (3.9) нужно разделить вклад областей, соответствующих разным знакам функций влияния. В частности, при $\alpha = 0$ такими

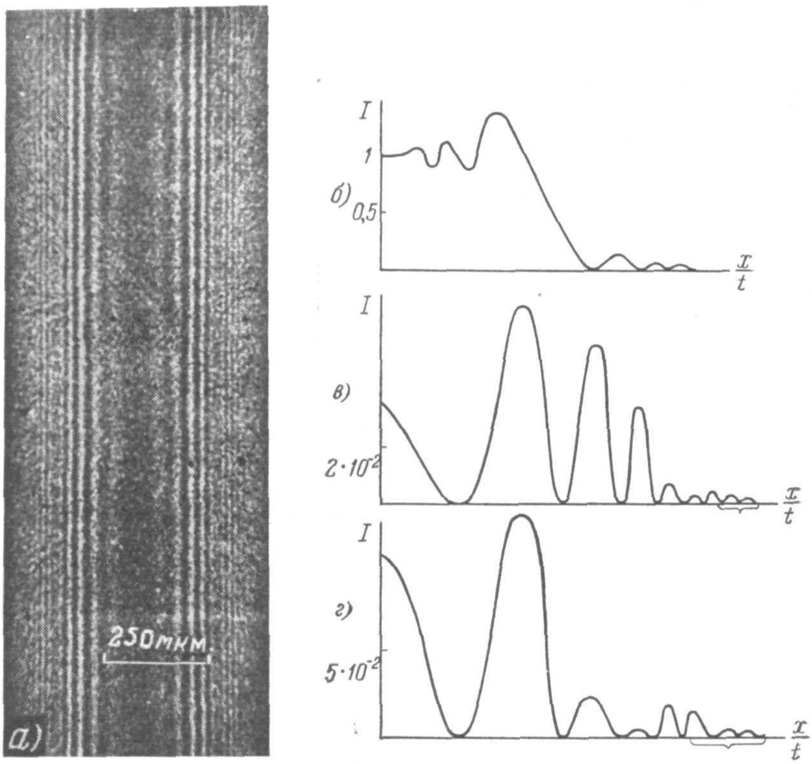


Рис. 6. Дифракционные изображения щели и полубесконечного экрана

областями служат полосы, расположенные между соседними нулями функций Бесселя. Если, например, на поверхности пластинки толщиной z_0 расположить зонную пластинку, состоящую из серии непрозрачных экранов, закрывающих промежутки между нечетными и следующими четными нулями функции $J_0\left(\chi\,(z_0^2 - x^2)^{1/2}/2\right)$, то на выходной грани кристалла вблизи линии $x = 0$ возникает ярко освещенная полоска, которую можно использовать в качестве линейного источника рентгеновских лучей. Интенсивность такой дифракционной щели нарастает пропорционально квадратному корню из толщины кристалла.

Волновое поле, возникающее при падении на кристалл пучка плоских волн с различными волновыми векторами, можно свести к рассмотренному выше случаю плоской волны: распределение плоских волн по волновым векторам $\varkappa$ эквивалентно их распределению по параметру α. Изменение волнового вектора на $\delta\varkappa$ соответствует изменению параметра α на $\delta\alpha = 2\varkappa^{-2}\mathbf{K}_1\delta\varkappa$, что эквивалентно введению дополнительной пространственной модуляции волнового пакета с множителем exp $[-i\,(\delta\alpha/4)\,(x-z)]$. Таким образом, угловая расходимость рентгеновского пучка может быть заменена эквивалентным пространственным размазыванием волнового пакета.

В случае некогерентного расходящегося пучка волны с разными значениями α не интерферируют между собой и интегральная интенсивность изображения определяется суммой интенсивностей изображений для волн всех направлений. Для бесконечно узкой щели волновое поле при полном учете фазы вообще не зависит от параметра α. Благодаря этому обстоятельству определение структурных параметров по интерференционной картине изображения узкой щели оказывается более надежным (относительная точность определения параметра χ достигает 10^{-3}—10^{-2} [24, 25б,д], чем в случае полос равной толщины, указанном в п. г) гл. 2. Для когерентного расходящегося пучка складываются не интенсивности, а амплитуды дифрагированных волн, отвечающих разным значениям α. Поскольку зависимость функции влияния (3.8) от параметра α сводится к появлению множителя exp $[i\,(\alpha/4)\,(z-x)]$, в свертках внешнего поля с функциями влияния интегрирование по ориентациям падающих волн выполняется независимо от интегрирования по поверхности входной грани. Эквивалентность углового и пространственного распределений волн в волновом пакете позволяет, в зависимости от конкретной задачи, по-разному выбирать представления одного и того же пакета.

Пусть, например, амплитуды и фазы плоских волн в широком волновом пакете не зависят от α в области малых значений этого параметра, единственно существенной для возбуждения поля в кристалле (частной иллюстрацией может служить цилиндрическая волна). Введение форм-фактора $\int \exp\,[i\,(\alpha/4)\,(z-x)]\,d\alpha$ стягивает этот пакет в узкий луч, эквивалентный тонкой щели на входной поверхности кристалла. Каждая плоская волна из волнового пакета возбуждает в кристалле волновое поле типа (2.12) — (2.14). Суперпозиция этих полей и дает поле, описываемое функциями влияния (3.8). Действительно, интегрируя соотношения (2.12) — (2.14) по параметру α [с учетом зависимости от α волнового вектора $\boldsymbol{\varkappa}$, фигурирующего в уравнении (2.12), что дает $\boldsymbol{\varkappa}\mathbf{r} = \boldsymbol{\varkappa}_0\mathbf{r} + 0{,}25\,(\alpha-\alpha_0)\,(z-x)$] и используя табличный интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin\{z\,[(\chi^2/4)+\alpha^2]^{1/2}\}\,[(\chi^2/4)+\alpha^2]^{-1/2}\,e^{i\alpha x} = \begin{cases} \pi J_0\left(\chi\,(z^2-x^2)^{1/2}/2\right), & 0<|x|<z, \\ 0, & 0<z<|x|, \end{cases}$$

получаем выражения, приводящие после перехода к безразмерным координатам к функциям влияния G_{00} и G_{10} для $\boldsymbol{\varkappa} = \boldsymbol{\varkappa}_0$ и $\alpha = \alpha_0$. Таким образом, функции влияния могут быть построены не только по методу волновых пакетов, как это впервые было сделано в работе [21] и независимо в работе [26], но и суперпозицией плоских волн, рассматривавшихся еще в классических работах по динамической теории рассеяния, или путем непосредственного исследования дифракции цилиндрической волны, выходящей из источника, помещенного на поверхность кристалла и эквивалентного узкой щели.

К последнему упомянутому приему очень близок метод [25а], основанный на рассмотрении поля, возбужденного в кристалле источником расходящихся сферических волн, расположенным на некотором удалении z_0 от входной поверхности образца. Интенсивное волновое поле в кристалле возникает лишь на небольшом участке, близком к правильной брэгговской ориентации. На этом участке сферическую волну можно заменить волновым пакетом с амплитудой, пропорциональной $r^{-1}\exp(i\varkappa r - i\boldsymbol{\varkappa}\mathbf{r})$, где $\boldsymbol{\varkappa}$ — волновой вектор, соответствующий точному выполнению условия Брэгга, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, связывающий точки входной поверхности с источником. Можно пренебречь изменением предэкспоненциального множителя и учитывать лишь пространственную фазовую модуляцию волнового пакета. В плоскости падения $y = 0$ вблизи точки $x = 0$, соответствующей точному условию Брэгга, разность фаз $\Delta\psi$ меняется по закону

$$\Delta\psi = \varkappa r - \boldsymbol{\varkappa}\mathbf{r} = \varkappa\,[(z_0^2 \sec^2\theta + 2z_0 x \operatorname{tg}\theta + x^2)^{1/2} - z_0 \sec\theta - x \sin\theta] \approx$$
$$\approx (x^2/4z_0)\cos^3\theta,$$

или, в безразмерных координатах,

$$\Delta\psi \approx x^2 \sin^2 2\theta/16 z_0.$$

Свертка амплитуды $e^{i\Delta\psi}$ волнового пакета с функциями влияния (3.8) дает волновое поле в кристалле. Характер этого поля определяется протяженностью участка стационарной фазы $|\Delta\psi| \ll 1$ по отношению к ширине дельты Бормана. Под участком стационарной фазы возникают плоские волны типа (2.12) — (2.14), проникающие в глубь кристалла на расстояние порядка $z_0^{1/2}$ (в безразмерных единицах). В другом предельном случае на расстояниях, намного превышающих протяженность участка стационарной фазы, волновое поле сходно с изображением тонкой щели и описывается функциями типа G_{00} и G_{10} (этот результат был получен в оригинальной работе [25а] путем разложения сферической волны по плоским волнам и приближенного суммирования выражений типа (2.12) — (2.14). Эффективная ширина щели оказывается порядка протяженности участка стационарной фазы, что приводит к соответствующему размыванию осцилляций поля у краев дельты Бормана и самих этих краев. Следует заметить, что в ряде работ (см., например, [25е]) под названием «приближение сферических волн» фактически использовался лишь упомянутый выше предельный случай, соответствующий приближению функций влияния. Неудивительно, что в этих работах часто отмечалось удовлетворительное согласие теории и эксперимента.

в) Изображение дефектов, вызывающих локальное возмущение волнового поля. Функции влияния (3.8) позволяют выяснить основные черты картины изображения объемных дефектов кристалла, линейные размеры которых в плоскости рассеяния малы по сравнению с экстинкционной длиной. Такие дефекты вызывают локальные искажения волнового поля (локальное ослабление поля в случае поглощающего включения или локальный сдвиг фазы в случае пор и преципитатов). Дальнейшее распространение этих возмущений описывается линейными комбинациями функций (3.8). Как видно из рис. 3, возмущение в проходящей волне дает симметричное, а возмущение в дифрагированной волне — резкое асимметричное распределение интенсивности в дифракционном изображении, причем вдоль характеристики $x + z = \mathrm{const}$ распространяется локальное искажение, дающее кинематическое («прямое» по терминологии Отье [9а]) изображение дефекта. У противоположного края дельты Бормана происходит, вообще говоря, ослабление дифрагированной волны, дающее динамическое теневое изображение дефекта, а в промежуточной области интенсивность осциллирует в соответствии с осцилляциями функций G_{10} и G_{11}. На расстоянии, соответствующем длине l_1 фотоэлектрического поглощения, перечисленные детали изображения исчезают и возмущение сосредоточивается в центральной части дельты Бормана.

Пусть, например, на расстоянии z_0 от плоской входной грани кристалла располагается небольшое сильно поглощающее включение протяженностью $2l_0 \ll 1/|\chi|$ в направлении вектора отражения. Подходящие к включению волны E_0 и E_1 практически полностью поглощаются включением. По принципу дополнительности возникающее при этом искажение волнового поля можно представить как поле, порождаемое при $z = z_0$ локальным возмущением $E_j = -E_j(z_0, x)[\theta(x + l_0) - \theta(x - l_0)]$, где x отсчитывается от центра включения. Согласно (3.7), (3.8) вклад включения в дифрагированную волну при $|\alpha l_0| \ll 1$ и $\chi((z - z_0) l_0)^{1/2} < 1$ дается выражением

$$\delta E_1(x, z, z_0) \approx$$
$$\approx (\chi l_0/2) \exp[-i(\alpha/4)(z - z_0 - x)]\{iE_0^{(0)}(z_0, 0) J_0(\chi[(z-z_0)^2-x^2]^{1/2}/2) -$$
$$- (2/\chi l_0) E_1^{(0)}(z_0, 0)[\theta(x + l_0 + z - z_0) - \theta(x - l_0 + z - z_0)] +$$
$$+ E_1^{(0)}(z_0, 0)[(z - z_0 - x)/(z - z_0 + x)]^{1/2} J_1(\chi[(z - z_0)^2 - x^2]^{1/2}/2)\}, \quad (3.10)$$

а в проходящую волну — выражением

$$\delta E_0(x, z, z_0) \approx$$
$$\approx (\chi l_0/2) \exp[-i(\alpha/4)(z - z_0 - x)]\{iE_1^{(0)}(z_0, 0) J_0(\chi[(z-z_0)^2-x^2]^{1/2}/2) -$$
$$- (2/\chi l_0) E_0^{(0)}(z_0, 0)[\theta(x + l_0 - z + z_0) - \theta(x - l_0 - z + z_0)] +$$
$$+ E_0^{(0)}(z_0, 0)[(z - z_0 + x)/(z - z_0 - x)]^{1/2} J_1(\chi[(z - z_0)^2 - x^2]^{1/2}/2)\}$$

(для простоты принято $\chi_1 = \chi_{-1} = -\chi$ и $C = 1$).

Если на опыте используется широкая щель и включение находится в полностью освещенной области (область *II* на рис. 5, *б*), то функции $E_j^{(0)}(z_0, 0)$ находятся из решения обычной динамической задачи для плоских волн (см. (2.3), (2.14)).

Контраст изображения зависит от расстояния включения до входной грани кристалла. В случае слабо поглощающих кристаллов контраст периодическим образом зависит от расстояния z_0 в соответствии с формулами (2.13), (2.14) для амплитуд $E_j^{(0)}(z_0)$. В случае аномального прохождения $z_0 > l_1$ зависимость контраста от z_0 исчезает, но остается зависимость от расстояния включения до выходной грани, причем осцилляции в изображении дефекта сохраняются, пока остаются осцилляции в функциях влияния, т. е. пока расстояние до выходной грани в свою очередь не превышает l_1.

Если на опыте используется узкая щель (*секционная топография*), изображение дефекта зависит от его положения в дельте Бормана, образованной щелью. В качестве функции $E^{(0)}{}_j(z_0, 0)$ нужно в этом случае использовать функции $\int_{-a}^{a} G_{j0}(-x_0 - x', z_0)\, dx'$, где x_0 — координата центра щели, a — полуширина щели. С точностью до деталей протяженностью больше a и l_0 вклад включения в дифрагированную волну дается формулой

$$\delta E_1(x, z, z_0, x_0) \approx -\mathscr{E}(\chi^2 a l_0/4) \exp[-i(\alpha/4)(z + x_0 - x)] \times$$
$$\times \{(4i/\chi)\delta(z + x - z_0) J_0(\chi(z_0^2 - x_0^2)^{1/2}/2) -$$
$$- i[(z - z_0 - x)/(z - z_0 + x)]^{1/2} J_0(\chi(z_0^2 - x_0^2)^{1/2}/2) J_1(\chi[(z - z_0)^2 - x^2]^{1/2}/2) +$$
$$+ (4i/\chi)\delta(z_0 + x_0) J_0(\chi[(z - z_0)^2 - x^2]^{1/2}/2) -$$
$$- i[(z_0 - x_0)/(z_0 + x_0)]^{1/2} J_0(\chi[(z - z_0)^2 - x^2]^{1/2}/2) J_1(\chi(z_0^2 - x_0^2)^{1/2}/2)\}. \quad (3.11)$$

Заметим, что функция $\delta E_1(x, z, z_0, x_0)$ с точностью до фазы инвариантна относительно подстановки $x \rightleftarrows x_0$, $z - z_0 \rightleftarrows z_0$, т. е. вклад включения в изображение не меняется при замене местами центра входной щели и точки наблюдения (*принцип взаимности*).

Если размеры включения или пóры не малы по сравнению с экстинкционной длиной, то поле на контуре включения нельзя считать заданным. В этом случае применение теоремы Грина к двусвязной области, окружающей включение, дает по аналогии с (3.6) соотношение, связывающее в интегральной форме значения поля в кристалле со значениями поля на контуре включения. Определение значений поля на контуре включения требует исследования характера распространения волнового поля внутри включения. В случае каверны (а также в случае сильно искаженной области типа ядра дислокации, где дифракционное рассеяние можно не учитывать [27а]) амплитуды E_0 и E_1 внутри «включения» переносятся вдоль соответствующих характеристик. В результате задача об определении поля на контуре включения сводится к последовательному решению интегральных уравнений для участков, на которых известно значение одной из амплитуд, E_0 или E_1.

Полученные результаты непосредственно переносятся на случай дефектов, ось которых пересекает плоскость рассеяния в одной точке. Изображение дефекта на выходной грани будет заполнять треугольную область с вершиной P в точке выхода дефекта на поверхность кристалла и боковыми сторонами PQ и PR, образованными характеристиками, опирающимися на ось дефекта. В симметричном случае Лауэ угловые коэффициенты лучей PQ и PR составляют соответственно $(\cos^2\psi - \sin^2\varphi)^{1/2}/(\sin\psi \pm \sin\varphi \operatorname{tg}\theta)$, где ψ и φ — углы, которые ось дефектов составляет с отражающей плоскостью и с выходной гранью кристалла. Угол QPR имеет максимальный раствор в случае $\psi = 0$.

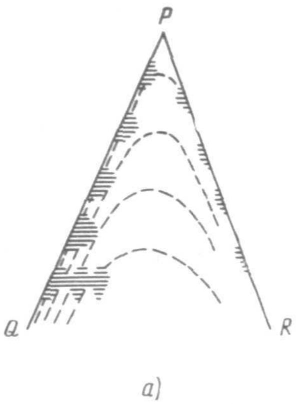
Подставляя уравнение оси дефекта $(x_0 - x_P)\operatorname{cosec}\psi = (y_0 - y_P)/(\cos^2\psi - \sin^2\varphi)^{1/2} = (z_0 - z_P)\operatorname{cosec}\varphi$ в выражение (3.10) или (3.11), находим изображение дефекта на выходной грани $z = z_P$ кристалла. Из (3.10) следует, в частности, что в случае $z_0 < l_1$ должно наблюдаться общее периодическое изменение контраста изображения, связанное с экстинкционной периодичностью амплитуд $E_j^{(0)}$. Благодаря фактору

$$\{[z_P - z_0 - (x - x_0)\operatorname{ctg}\theta]/[z_P - z_0 + (x - x_0)\operatorname{ctg}\theta]\}^{1/2}$$

наиболее интенсивное изображение в дифрагированной волне возникает в области, примыкающей к кинематическому изображению дефекта PQ, и определяющее влияние на характер контраста оказывает функция J_1. Наложение осцилляций $E_0^{(0)}$ на осцилляции J_1 приводит к прерывистой экстинкционной штриховке изображения: полосы гиперболической формы, соответствующие максимумам и минимумам J_1, модулируются с периодом

$$\Delta y = 2l\operatorname{cosec}\varphi\,(\cos^2\psi - \sin^2\varphi)^{1/2}. \qquad (3.12)$$

В случае $z_0 > l_1$, соответствующем наблюдению дефекта по методу Бормана, в области $z_P - z_0 < l_1$ также возникает экстинкционная штриховка, связанная с интерференцией $E_j^{(0)}(z_0)$ и $E_j^{(0)}(z_P)$. Модулированные с периодом (3.12) интерференционные полосы снова образуют контуры в виде гипербол. Наиболее яркие полосы, как и в случае $z_0 < l_1$, возникают вблизи кинематического изображения дефекта: общая картина изображения в этой области близка к рассмотренному выше случаю $z_0 < l_1$. При $z_P - z_0 > l_1$ экстинкционная штриховка исчезает, картина изображения дефекта постепенно приобретает простой вид и слагается из тени дефекта, окаймленной полосами повышенной интенсивности (черно-белочерный контраст [10б]; см. также п. а) гл. 5). При глубине залегания дефекта $z_P - z_0 > l_2$ изображение окончательно размывается и исчезает. Схематически разобранные особенности изображения линейного дефекта иллюстрируются рис. 7. Ось дефекта пересекает выходную грань в точке P, прямая PQ соответствует кинематическому изображению. Области повышенной интенсивности изображения отмечены штриховкой. Положения максимумов функций $|J_1(0{,}5\chi((z^2 - x^2)^{1/2})|$ показаны штриховой линией (*а* — тонкий кристалл ($z_P < l_1$); *б* — толстый кристалл ($z_P \gg l_1$); изображение на участке $z_P - z_0 < l_1$ похоже на случай *а*). На рис. 8 приведена типичная фотография наклонной дислокации с характерной экстинкционной штриховкой картины изображения в области, примыкающей к прямому изображению дефекта (кристалл Si, отражение (220), Mo K_α).



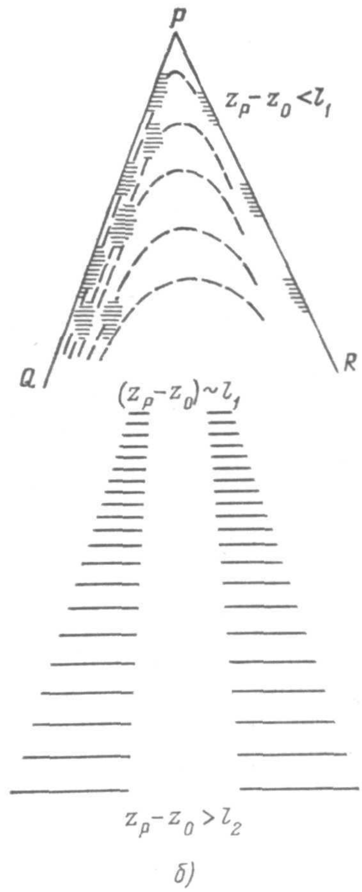


Рис. 7. Схема изображения прямолинейного дефекта, построенная с помощью функций влияния.

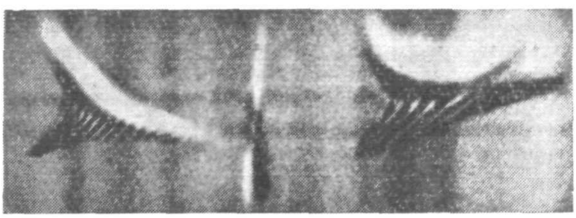


Рис. 8. Фотография наклонной 72°-дислокации в кремнии [28].

Проведенное рассмотрение относилось к случаю, когда дефект вызывает локальное возмущение одного знака. Если возмущение на фронте волны слагается из двух соседних пиков разного знака, общая картина изображения в первом приближении передается производными по x от функций влияния (3.8). Наклонная или параллельная поверхности кристалла краевая дислокация вызывает изображение первого или второго типа в зависимости от того, параллелен или перпендикулярен ее вектор Бюргерса вектору отражения.

4. ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ В НЕОДНОРОДНОМ КРИСТАЛЛЕ

В реальном кристалле поляризуемость $\chi(\mathbf{r})$ благодаря искажениям решетки перестает быть строго периодической функцией координат и зависит от поля смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Для плавного поля смещений дисторсии $\partial u_i/\partial x_k$ малы и можно считать, что внутренние электронные оболочки, ответственные за рассеяние рентгеновских лучей, остаются не искаженными и лишь смещаются вместе с атомами, т. е. изменение поляризуемости сводится к изменению аргумента функции $\chi(\mathbf{r})$ на величину вектора смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. В этом случае χ_h в правой части (2.2) переходит в $\chi_h \exp[-i\mathbf{K}_h\mathbf{u}(\mathbf{r})]$, а уравнение (3.2) принимает вид

$$\begin{pmatrix} 2i\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)+\chi_0 & \chi_{-1}Ce^{-i\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r})} \\ \chi_1 Ce^{-i\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r})} & 2i\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\right)+\chi_0-\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix}=0. \qquad (4.1)$$

Подстановка $E_0 \to E_0 e^{i\chi_0 z/2}$, $E_1 \to E_1 e^{i(\chi_0 z/2)-i\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r})}$ приводит (4.1) к канонической форме

$$\begin{pmatrix} 2i\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right) & \chi_{-1}C \\ \chi_1 C & 2i\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\right)-\alpha(\mathbf{r}) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix}=0, \qquad (4.2)$$

которая впервые была указана Такаги [29a] и отличается от (3.3) зависимостью параметра α от координат:

$$\alpha(\mathbf{r})=\alpha-2\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial x}\right)\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r}). \qquad (4.3)$$

Использованная при выводе (4.2) подстановка не влияет на граничные условия для амплитуд E_0 и E_1, которые сохраняют тот же вид, что и в случае идеального кристалла.

Влияние поля искажений на волновое поле определяется согласно (4.3) только смещениями отражающих плоскостей. Поэтому, в частности, не дают рентгеновского изображения краевые дислокации, параллельные вектору отражения, и винтовые дислокации, перпендикулярные к этому вектору.

Уравнение (4.2) эквивалентно телеграфным уравнениям с переменными коэффициентами для амплитуд E_0 и E_1:

$$\hat{D}_0[E_0]\equiv\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{i\alpha(\mathbf{r})}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{\chi^2}{4}\right]E_0=0, \qquad (4.4)$$

$$\hat{D}_1[E_1]\equiv\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{i\alpha(\mathbf{r})}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)+\frac{i}{2}\left(\frac{\partial\alpha(\mathbf{r})}{\partial z}+\frac{\partial\alpha(\mathbf{r})}{\partial x}\right)+\frac{\chi^2}{4}\right]E_1=0.$$

Общее решение этих уравнений [20], как и в случае постоянных коэффициентов, имеет вид, сходный с (3.6), где, однако, функции Римана $G_0(z, x, z', x')$ и $G_1(z, x, z', x')$ являются соответственно функциями Грина для сопряженных уравнений

$$\hat{D}_0^*[G_0]\equiv\left[\frac{\partial^2}{\partial z'^2}-\frac{\partial^2}{\partial x'^2}-\frac{i\alpha(\mathbf{r}')}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z'}+\frac{\partial}{\partial x'}\right)-\right.$$

$$\left.-\frac{i}{2}\left(\frac{\partial\alpha(\mathbf{r}')}{\partial z'}+\frac{\partial\alpha(\mathbf{r}')}{\partial x'}\right)+\frac{\chi^2}{4}\right]G_0=-\delta(x-x')\,\delta(z-z'),$$

$$\hat{D}_1^*[G_1]\equiv\left[\frac{\partial^2}{\partial z'^2}-\frac{\partial^2}{\partial x'^2}-\frac{i\alpha(\mathbf{r}')}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z'}+\frac{\partial}{\partial x'}\right)+\frac{\chi^2}{4}\right]G_1=-\delta(x-x')\,\delta(z-z').$$

Как и в случае (3.8), функции влияния отличны от нуля лишь в треугольной области (дельте Бормана), ограниченной характеристиками $z \pm x = \mathrm{const}$.

Представление волнового поля в неоднородном кристалле с помощью функций Римана подробно обсуждалось в работе [296]. Это представление

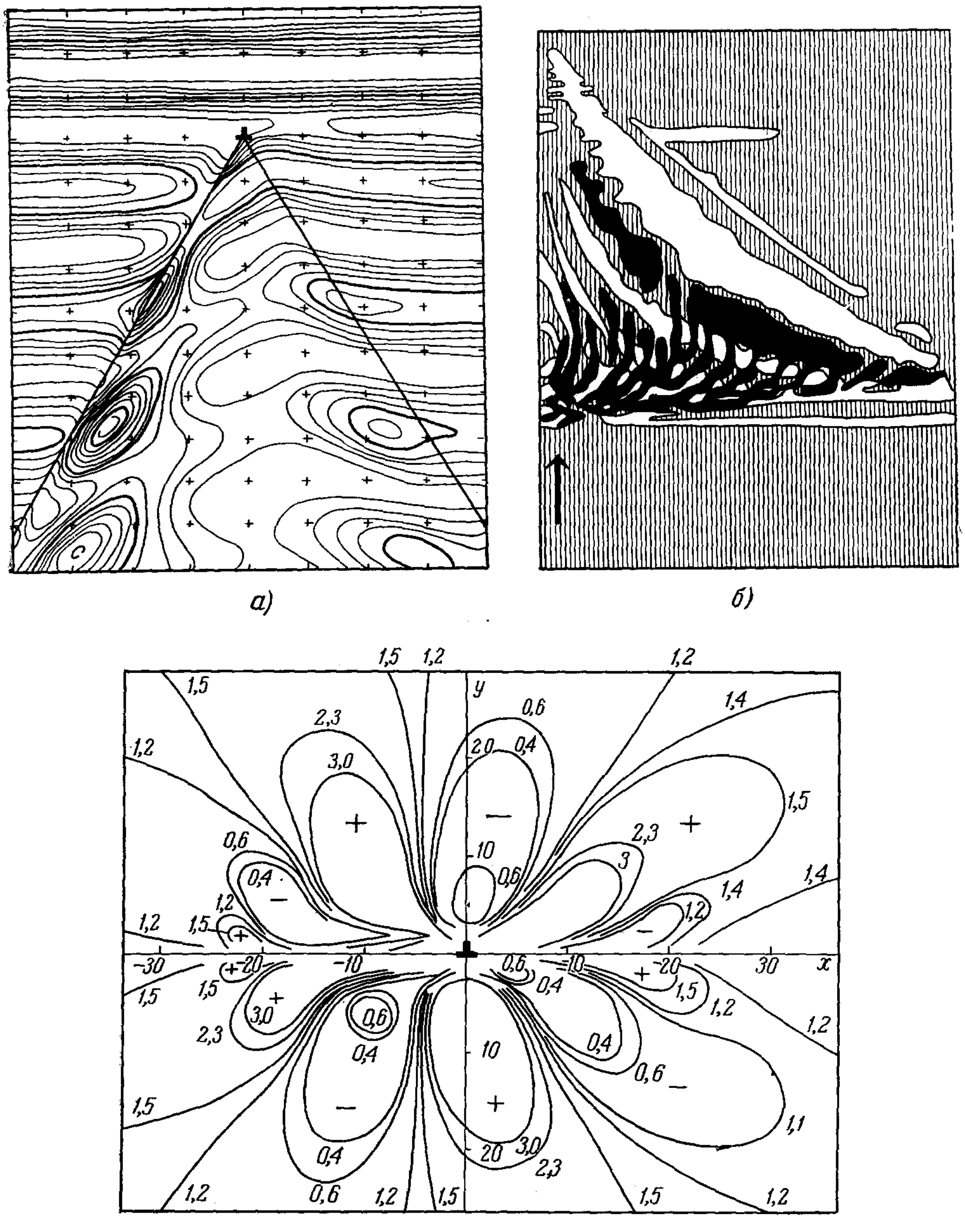


Рис. 9. Примеры расчетного изображения дислокаций.

является, однако, лишь формальной записью решения, поскольку функция Римана в неоднородном кристалле уже не обладает трансляционной симметрией и сложным образом зависит от всех четырех аргументов x, x', z, z'. Этим и объясняется тот факт, что ни в одном из исследованных практических случаев до сих пор не удалось установить явный вид функций Римана.

Ряд примеров рентгеновского изображения дефектов кристалла, вызывающих известное поле искажений, был рассчитан численно по уравнениям Такаги с помощью ЭВМ. Топэн [30] и Отье с сотрудниками [28, 31] рассчитали различные случаи изображения винтовых и краевых дислокаций, расположенных параллельно и наклонно к поверхности кристалла. В работе [32] было рассчитано изображение краевой дислокации, перпендикулярной к поверхности образца. На рис. 9 приведены характерные примеры рассчитанной картины изображения для краевых дислокаций различной ориентировки (*а* — краевая дислокация, параллельная поверхности кристалла [30]; *б* — смешанная дислокация, наклоненная к поверхности кристалла [28], *в* — краевая дислокация, перпендикулярная к поверхности кристалла [32]). Показаны линии уровня для распределения интенсивности изображения в дифрагированной волне соответственно в плоскости, параллельной (*а*) и перпендикулярной (*б* и *в*) плоскости рассеяния. На рис. 9, *а* координатная сетка нанесена в единицах $2\,\Lambda/\pi$. Сопоставляя рис. 9, *а* и *б* с рис. 7, можно убедиться, что основные детали изображения зачастую слабо зависят от типа наблюдаемого линейного дефекта и задаются в основном функциями влияния. Общим для рис. 9, *а*, *б* и *в* является выброс дифрагированного излучения из сильно искаженной области на расстояния, намного превышающие размеры этой области и определяемые сечением дельты Бормана. Этот эффект хорошо заметен на фотографиях краевых дислокаций, перпендикулярных к поверхности кристалла (рис. 10).

Рис. 10. Фотография краевой дислокации, перпендикулярной к поверхности кристалла кремния [33].

По аналогии с атласами электронномикроскопических изображений типа [16, 34] путем численного расчета могут быть, повидимому, составлены атласы рентгенотопографического изображения характерных дефектов для различных случаев ориентации и различных значений параметров динамической задачи. Из-за многообразия различных случаев трудно судить, насколько этот путь окажется эффективным по сравнению с полукачественным аналитическим исследованием изображения путем приближенного решения уравнений (4.2).

Можно указать некоторые частные случаи, облегчающие аналитическое решение уравнений Такаги. В симметричном случае дифракции Лауэ при $\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r}) = f(z)$ и однородном освещении кристалла волновое поле перестает зависеть от переменной x и система (4.2) сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{pmatrix} 2i\dfrac{\partial}{\partial z} & \chi_{-1}C \\ \chi_1 C & 2i\dfrac{\partial}{\partial z}-\alpha(z) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix}=0,$$

совпадающих с уравнениями колонкового приближения в теории электронномикроскопического изображения [16]. Для анализа изображения в этом случае можно использовать результаты исследования электронномикроскопических изображений дефектов решетки с соответствующим пересчетом коэффициентов задачи. В частности, эти результаты можно использовать для анализа изображения дислокаций, параллельных вектору отражения (особое положение дефекта по Елистратову [8] и Шульпиной [35]).

Исследование дислокаций, параллельных вектору отражения, позволяет, в частности, применить для определения знака дислокаций правила, разработанные в дифракционной электронной микроскопии [16] и основанные на различии изображений для отражений (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$. Эти отражения отличаются знаком вектора $\mathbf{K}_1$, что соответствует согласно (4.3) изменению знака переменной части параметра $\alpha(\mathbf{r})$ или изменению знака дислокации для съемки в одном и том же рефлексе. Благодаря этому, сопоставляя в отражениях (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ контраст рентгеновского изображения по обе стороны дислокации, вызываемый в данном случае областями с разными знаками искажений, можно определить знак вектора Бюргерса дислокации [36]. Изображение дислокаций, параллельных вектору отражения, в случае секционной топографии также может быть получено по аналогии с расчетом электронномикроскопического изображения. Раскладывая волновое поле на поверхности кристалла в интеграл Фурье, мы можем каждую гармонику $E(\alpha)\exp(-i\alpha x/4)$ интерпретировать как результат падения плоской волны с измененным волновым вектором и соответствующим параметром α (ср. п. б) гл. 3). Как и в случае электронной микроскопии, такая волна дает плоское (не зависящее от координаты x) волновое поле и некоторое отражение дислокации на выходной грани кристалла $E_j(y, \alpha)$, которое можно трактовать как фурье-компоненту изображения в секционной топографии. Фактически секционная топография позволяет провести интерферометрию поля искажений. Синтез Фурье позволяет восстановить искомое изображение

$$E_j(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha x/4} E_j(y, \alpha)\, d\alpha, \qquad (4.5)$$

и, наоборот, фурье-анализ секционного изображения $E_j(x, y)$ дает изображение дефекта в особом положении в случае освещения широкими параллельными пучками с различными волновыми векторами.

Другим особым случаем является поле искажений, не меняющееся вдоль направления дифрагированного пучка, т. е. случай $\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r}) = f(z + x)$, когда согласно (4.3) величина α оказывается постоянной и поле искажений не изменяет условия Брэгга и не влияет на волновое поле ни в проходящей, ни в дифрагированной волне, так что изображение дефекта полностью исчезает.

Наконец, в случае $\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r}) = f(z - x)$ подстановка $E_j \to E_j e^{i\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r})}$ приводит систему (4.2) к виду (3.3) и решение находится в явном виде при произвольных граничных условиях. Если $E_0(x, y, 0) = \mathcal{E}(x, y)$, то $E_1(x, y, z) = i(\chi_{-1}C/2)\exp[i(\chi_0/2)z - i(\alpha/4)z + i\mathbf{K}_1\mathbf{u}(z - x)] \times$

$$\times \int_{-z+x}^{z+x} J_0\left(\chi[z^2 - (x - x')^2]^{1/2}/2\right)\exp[i(\alpha_0/4)(x - x') - i\mathbf{K}_1\mathbf{u}(-x')]\, dx'.$$

В частности, дислокации, расположенные вдоль направления дифрагированной волны, не дают контраста, а для изображения дислокаций, расположенных вдоль направления падающей волны, (4.5) дает строгое аналитическое выражение. Схематически рассмотренные три случая особых положений дефектов иллюстрируются рис. 11 ($\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r}) = f(z)$ (рисунок *а*), $= f(z + x)$ (рисунок *б*) и $= f(z - x)$ (рисунок *в*).

Для очень плавных полей искажений функция $\alpha(\mathbf{r})$ слабо зависит от координат. Полагая $\alpha(\mathbf{r}) = \alpha_0 + \alpha_1(\mathbf{r})$, где $|\alpha_1(\mathbf{r})| \ll |\alpha_0|$, можно перенести связанные с α_1 члены в уравнениях (4.4) в правую часть и рассматривать их как возмущение. Решение телеграфного уравнения (3.4) с правой частью

$$\hat{D}\,[E_j] = -F_j\,(x, z)$$

выражается согласно [20] через функцию Римана (3.5) следующим образом:

$$E_j(x, z) = \int\limits_L (dx' - dz')\,\frac{i\alpha_0}{2}E_j(x', z')\,G(x-x', z-z') +$$
$$+\int\limits_L dl\left[\left(\frac{dz'}{dl}\right)^2-\left(\frac{dx'}{dl}\right)^2\right]\left[\frac{\partial E_j(x', z')}{\partial n}G(x-x', z-z')-\right.$$
$$\left.-E_j(x', z')\frac{\partial G(x-x', z-z')}{\partial n}\right]+2\int\limits_L dl\,\frac{dx'}{dl}\frac{dz'}{dl}\times$$
$$\times\left[\frac{\partial E_j(x', z')}{\partial l}G(x-x', z-z')-F_j(x', z')\frac{dG(x-x', z-z')}{\partial l}\right]+$$
$$+\iint dx'\,dz' G(x-x', z-z')\,F_j(x', z'). \qquad (4.6)$$

Здесь новый по сравнению с (3.6) член представляет интеграл по области влияния функции Римана, т. е. по треугольнику, образованному контуром L и характеристиками, проходящими через точку наблюдения (x, z).

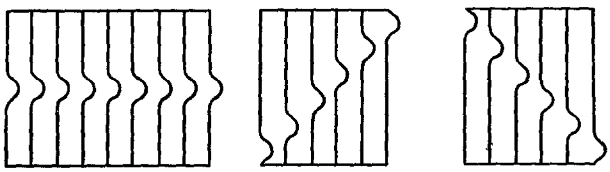


Рис. 11. Особые положения дефектов, упрощающие расчет изображения.

В нашем случае функция Римана определяется формулой (3.5) с заменой α на α_0, а правая часть дается выражениями

$$F_0(x, z) = \frac{i\alpha_1(\mathbf{r})}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)E_0, \quad F_1(x, z) = \frac{i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\right)[\alpha_1(\mathbf{r})\,E_1],$$

так что формула (4.6) дает интегральное уравнение для искомой функции $E_j\,(x, z)$. В первом приближении (см. [21]), заменяя в $F_j\,(x, z)$ функцию $E_j\,(x, z)$ ее невозмущенным значением $E_j^{(0)}\,(x, z)$, соответствующим решению уравнений (4.2) при $\alpha = \text{const}$ (см. (2.13), (2.14)), получаем приближенное решение $E_j^{(1)}$, соответствующее известному борновскому приближению в теории рассеяния. Заменяя E_j в F_j функцией $E_j^{(1)}$, получаем второе приближение и т. д. Другой вариант построения приближенного решения уравнений Такаги с помощью формулы (4.6) был указан в работе [26a], в которой предлагается использовать в качестве нулевого приближения для функций E_j решение Като — Камбе [34] (см. ниже гл. 5).

В случае резко локализованных полей искажений из-за знака двойного интеграла в (4.6) можно вынести произведение функций влияния (3.8) на амплитуду волнового поля в точке дефекта. Если, пренебрегая самодействием и взаимодействием возмущений, вызванных дефектами, положить амплитуду поля в точке дефекта равной ее значению при отсутствии дефектов, мы снова приходим к приближению, рассмотренному в п. в) гл. 3.

Если, наконец, локализованное поле искажений оказывается настолько сильным, что в близкой к дефекту области $|\alpha| \gg |\chi|$, то в уравнении

(4.1) можно пренебречь величиной χ_{-1} по сравнению с величиной α. При этом обратное влияние волны E_1 на волну E_0 исчезнет и изображение в дифрагированной волне будет определяться кинематическим рассеянием проходящей волны. В результате фаза волны E_1 возрастет на $\mathbf{K}_1\delta\mathbf{u}$, где $\delta\mathbf{u}$ — скачок смещения, вызываемый локальным искажением. [В уравнении (4.1) прохождение через область локального возмущения не меняет обеих компонент волнового поля.] Начальная форма локальных искажений волнового поля, вызываемых малыми дефектами, сводится в этом приближении к возмущению $E_1^{(0)}$ [$\exp(i\mathbf{K}_1\delta\mathbf{u}) - 1$] в дифрагированной волне при отсутствии возмущения в проходящей волне. Соответственно изображение возмущения определяется функциями влияния G_{01} в проходящей и G_{11} в дифрагированной волне.

Характерным примером может служить задача об изображении дефекта упаковки [95, 25]. В этом случае изменение поля смещений точно сводится к скачку смещений $\delta\mathbf{u}$ на дефекте упаковки; $\alpha(\mathbf{r})$ описывается соответственно граничной δ-функцией, вызывающей скачок фазы E_1 на $\mathbf{K}_1\delta\mathbf{u}$. Изображение уже не приближенно, а точно дается функциями влияния G_{01} и G_{11}. Если дефект упаковки пересекает дельту Бормана, суперпозиция вкладов каждого участка этого дефекта в рентгеновское изображение приводит к появлению экстинкционной штриховки изображения, сходной с полосами равной толщины.

Существенно подчеркнуть принципиальное отличие характера изображения областей с сильными локализованными искажениями и областей со слабыми и плавно меняющимися искажениями. В первом случае происходит выброс дифрагированного излучения из искаженной области. Контраст изображения определяется характером функций влияния. Многие детали изображения слабо зависят от характера источника возмущения. В частности, протяженность изображения в направлении вектора отражения определяется глубиной залегания дефекта и углом дифракции, а не размерами дефекта. Во втором случае рентгеновский контраст является прямым отображением поля деформаций в данной области. Линии равной интенсивности изображения и интерференционные полосы непосредственно передают распределение искажений. Если к тому же параметр $\alpha(\mathbf{r})$ слабо меняется по толщине образца, интерференционные полосы соответствуют согласно п. б) гл. 3 линиям $|\Delta\mathbf{k}| = \mathrm{const}$ и могут быть интерпретированы как полосы равного наклона или равной деформации [37].

5. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ОПТИКА РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Математические трудности, возникающие при построении рентгеновского поля в неоднородных кристаллах, аналогичны известным трудностям построения электромагнитного поля при прохождении световых и радиоволн через неоднородные среды. В оптике для сред с плавно меняющимися характеристиками (размеры неоднородностей L должны намного превышать длину волны λ) широко используется лучевое приближение. Понятие о лучах и их траекториях может быть введено и в случае рентгеновского поля, однако критерий применимости геометрической оптики здесь будет уже не $L \gg \lambda$ (что всегда выполнено), а более жесткое условие $L \gg \Lambda$, где Λ — экстинкционная длина.

Поступая по аналогии с геометрической оптикой, выделим в амплитудах E_0 и E_1 быстро меняющиеся фазовые множители

$$\hat{E} \equiv \begin{pmatrix} E_0 \\ E_1 \end{pmatrix} = e^{iS^{(\mathrm{I})}(x,\, z)}\, \hat{E}^{(\mathrm{I})}(x,\, z) + e^{iS^{(\mathrm{II})}(x,\, z)}\, \hat{E}^{(\mathrm{II})}(x,\, z). \qquad (5.1)$$

В отличие от обычной оптики, мы ввели сразу две фазы (два эйконала), $S^{(\mathrm{I})}$ и $S^{(\mathrm{II})}$, соответствующие разным листам дисперсионной поверхности. Подставляя (5.1) в уравнении Такаги (4.2), получаем уравнение для определения амплитуд $\hat{E}^{(\mathrm{I})}$ и $\hat{E}^{(\mathrm{II})}$

$$(D_S + D)\,\hat{E} = 0, \qquad (5.2)$$

где

$$D_S = \begin{pmatrix} -\left(\frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial z}\right) & \frac{1}{2}\chi_{-1}C \\ \frac{1}{2}\chi_1 C & \left(\frac{\partial S}{\partial x} - \frac{\partial S}{\partial z}\right) - \frac{\alpha(\mathbf{r})}{2} \end{pmatrix}, \qquad (5.3)$$

$$D = \begin{pmatrix} i\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\right) & 0 \\ 0 & i\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right) \end{pmatrix}. \qquad (5.4)$$

Для существования нетривиального нулевого приближения, удовлетворяющего уравнению $D_S\hat{E} = 0$, детерминант матрицы D_S должен обращаться в нуль. В развернутом виде это условие дает для эйконалов $S^{(\mathrm{I})}$ и $S^{(\mathrm{II})}$ уравнение в частных производных первого порядка:

$$\{H - [\alpha(\mathbf{r})/4]\}^2 - \{P - [\alpha(\mathbf{r})/4]\}^2 = \chi^2/4; \qquad (5.5)$$

здесь введены обозначения $H = -\partial S/\partial z$ и $P = \partial S/\partial x$, позволяющие трактовать полученное уравнение по аналогии с классическими уравнениями для действия, энергии и обобщенного импульса. В отличие от обычной оптики, уравнение (5.5) соответствует уравнению Гамильтона — Якоби для частиц с неравной нулю массой покоя. Траектории лучей, ортогональные поверхностям волновых фронтов $S = \mathrm{const}$, аналогичны, например, траекториям заряженных частиц с массой $\chi/2$, испытывающих одномерное движение вдоль оси x в некотором электрическом поле. Заметим, что уравнение (5.5) содержит комплексный коэффициент χ и, следовательно, представляет собой, строго говоря, систему двух уравнений относительно действительной и мнимой частей функции $S = S' + iS''$. Однако малость мнимой части χ обеспечивает малость мнимой части эйконала S'' по сравнению с его действительной частью S'. В результате уравнения траекторий лучей для эйконалов S' и S'' совпадают, и учет комплексности поляризуемости сводится к учету затухания амплитуды вдоль траектории лучей.

Если положить для простоты коэффициент χ в уравнении (5.5) действительным, можно интерпретировать это уравнение как уравнение дисперсионной поверхности для поправки к волновому вектору блоховских волн. В разных местах кристалла эта поверхность, сохраняя неизменную ориентацию, занимает различное положение в соответствии с локальным значением параметра $\alpha(\mathbf{r})$: центр гипербол смещается вдоль прямой $P = H$, располагаясь в точке с координатами $(\alpha/4,\ \alpha/4)$. Иллюстрацией могут служить разбираемые ниже рис. 12, *б* и рис. 15. Каждому значению P на дисперсионной поверхности соответствуют два значения H:

$$H = (\alpha/4) \pm \{(\chi^2/4) + [P - (\alpha/4)]^2\}. \qquad (5.6)$$

Верхний знак соответствует верхним листам дисперсионной поверхности на рис. 12, *б* и рис. 15. Сохраняя нумерацию листов дисперсионной поверхности, принятую в гл. 2, будем считать первым верхний лист и сопоставлять ему эйконал $S^{(\mathrm{I})}$. При учете в параметре χ мнимой части $\chi'' < 0$, первый лист соответствует сильно поглощающимся, а второй (нижний) — слабо поглощающимся блоховским волнам.

а) Траектории лучей. Вытекающие из (5.5) уравнения траекторий лучей могут быть записаны в форме, аналогичной классическим уравнениям движения Гамильтона — Якоби:

$$\frac{dx}{dz}=\frac{\partial H}{\partial P}, \tag{5.7}$$

$$\frac{dP}{dz}=-\frac{\partial H}{\partial x}. \tag{5.8}$$

Из (5.7) и (5.8), как обычно, следует закон изменения энергии вдоль траектории

$$\frac{dH}{dz}=\frac{\partial H}{\partial z}+\frac{\partial H}{\partial P}\frac{dP}{dz}+\frac{\partial H}{\partial x}\frac{dx}{dz}=\frac{\partial H}{\partial z}. \tag{5.9}$$

Соотношения (5.7) — (5.9) устанавливают простую связь траектории луча в координатном пространстве x, z и траектории волнового вектора в фазовом пространстве P, H. Если расположить оси координат так, как это

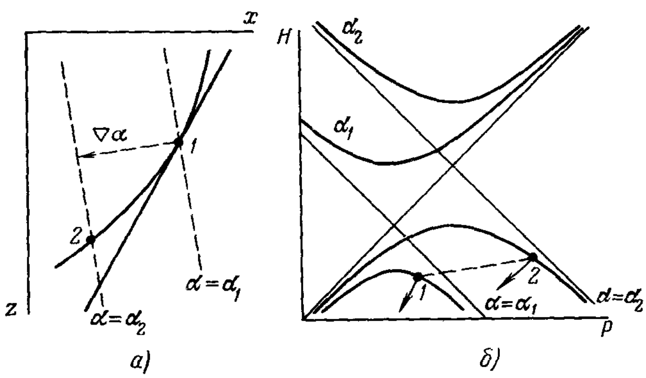


Рис. 12. Ход слабо поглощающегося луча в координатном (a) и фазовом ($б$) пространствах.

показано на рис. 12 (ось P параллельна оси x, а ось H антипараллельна оси z), то траектория луча в координатном пространстве оказывается параллельной нормали к дисперсионной поверхности (5.5), а траектория волнового вектора в фазовом пространстве — антипараллельной градиенту H и, следовательно, градиенту α (г). Переход луча с линии уровня $\alpha=\alpha_1$ на линию $\alpha=\alpha_2$ соответствует переходу волнового вектора с дисперсионной поверхности $\alpha=\alpha_1$ на поверхность $\alpha=\alpha_2$. В качестве примера на рис. 12, a показан участок траектории слабо поглощающегося луча, продвигающегося по участку с возрастающим значением α (г). Как видно из рис. 12, $б$, волновой вектор при этом увеличивает свою компоненту, параллельную вектору отражения.

Используя указанную выше аналогию траектории рентгеновского луча с траекторией заряженной частицы, можно записать уравнение траектории в форме, сходной с уравнением движения релятивистского электрона [38]. Из соотношений (5.6) и (5.7) следует связь «скорости» dx/dz и обычного импульса $p=P-(\alpha/4)$

$$p=\pm(\chi/2)\,(dx/dz)/[1-(dx/dz)^2]^{1/2} \tag{5.10}$$

(угловые коэффициенты характеристик в нашем случае равны ±1, что соответствует единичной «скорости света»). Уравнение (5.8), переписанное для обычного импульса, задает траекторию в форме

$$dp/dz=\mathscr{E}\,(x,z), \tag{5.11}$$

где сила $\mathscr{E}(x, z)$, эквивалентная внешнему электрическому полю в случае движения заряженной частицы с единичным зарядом, определяется соотношением

$$\mathscr{E}(x,\ z) = -\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\right)\alpha(x,\ z). \qquad (5.12)$$

С учетом (4.3) получаем из (5.10) — (5.12) уравнение траектории в форме [246]

$$\pm\frac{\chi}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{dx/dz}{[1-(dx/dz)^2]^{1/2}}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\mathbf{K}_1\mathbf{u}(\mathbf{r}) \qquad (5.13)$$

(верхний знак соответствует верхнему листу дисперсионной поверхности, т. е. сильно поглощающимся лучам). При $\mathscr{E} > 0$, т. е. при спадании $\alpha(\mathbf{r})$ вдоль направления проходящей волны, слабо поглощающиеся лучи отклоняются в сторону вектора отражения, а сильно поглощающиеся — в обратную сторону. В случае $\alpha = \alpha(x)$ участки с отрицательной кривизной функции $\alpha(x)$ влияют на слабо поглощающиеся лучи наподобие собирающих линз, а на сильно поглощающиеся лучи — наподобие рассеивающих линз (подобные линзы могут быть реализованы путем регулирования дислокационной структуры образца). Участки с положительной кривизной $\alpha(x)$ оказывают на ход лучей обратное влияние. В результате для поглощающих кристаллов в условиях эффекта Бормана на участках первого типа возникает положительный, а на участках второго типа — отрицательный контраст по отношению к общему фону изображения. Это правило знаков может быть использовано для определения знака полей искажений и соответственно типа включений, знака вектора Бюргерса дислокаций и т. д.

Если компонента u_x поля смещений в направлении вектора отражения является квадратичной функцией координат, сила $\mathscr{E}$ не зависит от координат, что эквивалентно известному случаю движения заряженной частицы в постоянном электрическом поле [38]. Пусть, например, кубический кристалл испытывает температурный изгиб, вызываемый однородным градиентом температур вдоль оси x. Тогда отражающие плоскости приобретают сферическую форму и

$$u_x = (1/2R)(z^2 + y^2 - x^2), \qquad (5.14)$$

где R — радиус кривизны отражающих плоскостей. Согласно (5.13) для поля (5.14) сила $\mathscr{E} = -K_1R^{-1}/2\varkappa^2 = \text{const}$. Другим примером служит круговой изгиб образца вокруг оси y, когда отражающие плоскости приобретают цилиндрическую форму, и $u_x = (1/2R)(z^2 + Ax^2)$, где коэффициент A зависит от ориентации нейтральной плоскости и упругих постоянных кристалла. В этом случае $\mathscr{E} = -K_1R^{-1}/2\varkappa^2(\cos^2\theta - A\sin^2\theta)$.

Из (5.11) видно, что при $\mathscr{E} = \text{const}$ импульс p линейно нарастает по глубине кристалла:

$$p = p_0 + \mathscr{E}z. \qquad (5.15)$$

Для углового коэффициента луча из (5.7) следует уравнение

$$dx/dz = \pm p/[p^2 + (\chi^2/4)]^{1/2},$$

интегрирование которого с учетом (5.15) дает

$$\mathscr{E}(x - x_0) = \pm\{[(p_0 + \mathscr{E}z)^2 + (\chi^2/4)]^{1/2} - [p_0^2 + (\chi^2/4)]^{1/2}\},$$

т. е. траектории лучей представляют собой гиперболы с асимптотами $x = \pm z + \text{const}$. Слабо поглощающиеся лучи изгибаются в ту же сторону, что и отражающие плоскости, а сильно поглощающиеся — в обратную сторону. При этом кривизна лучей вблизи вершины гиперболы в случае (5.14) в $2\,\mathrm{tg}^2\,\theta/\chi$ раз, т. е. на 4—5 порядков, превышает кривизну отражающих плоскостей.

Экспериментальное исследование эффекта искривления рентгеновских лучей в кристаллах, испытывающих упругий или температурный изгиб, было проведено в работах ряда авторов [25г, 39] и продемонстрировало хорошее согласие опытных данных с предсказаниями теории.

Если сила $\mathscr{E}$ не зависит от z (например, поле деформаций является плоским и зависит только от координат x и y), из (5.9) следует сохранение «энергии» (5.6) вдоль траектории луча. В этом случае уравнение траектории луча приобретает простой вид

$$(dx/dz)^2 = 1 - \{\chi^2/4\,[H - (\alpha/4)]^2\}.$$

В точках $\alpha(x) = 4H \mp 2X$, соответствующих точкам поворота при движении заряженной частицы, луч меняет знак углового коэффициента («отражается»). Благодаря подобным отражениям полосы с повышенным значением $\alpha(x)$ могут служить волноводами для слабо поглощающихся лучей,

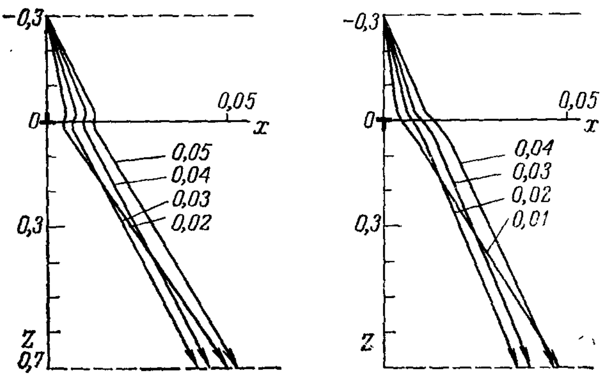


Рис. 13. Отклонение лучей слабо поглощающейся волны вблизи краевых дислокаций [40а].

а полосы с пониженным значением $\alpha(x)$ — волноводами для сильно поглощающихся лучей. В случае эффекта Бормана это приводит к возникновению положительного контраста участков с повышенным значением $\alpha(x)$.

Если искаженная область с любым распределением α (с) мала по сравнению с толщиной кристалла, то лучи, отклонившиеся в этой области, приведут к возникновению на изображении тени, окруженной более ярким ореолом. Рис. 13 иллюстрирует подобный случай на примере дислокации, параллельной поверхности кристалла (случай аномального прохождения, $\mu t = 35$; цифры на лучах соответствуют начальному наклону луча по отношению к оси z). Толщина образца предполагается настолько большой, чтобы можно было учитывать лишь слабо поглощающиеся лучи. На рис. 14 приведена типичная рентгеновская фотография кристалла, полученная в условиях аномального прохождения рентгеновских лучей. Участки дислокаций, удаленные от выходной грани на расстояние, превышающее длину фотоэлектрического поглощения, изображаются в виде теней со светлой каймой, что объясняется ходом лучей, показанным на рис. 13 (ср. также рис. 7, *б*).

б) Отражение и преломление рентгеновских лучей. Исследование хода лучей в случае скачкообразного изменения параметра α (r) нельзя рассматривать как предельный случай искривления траектории под действием сосредоточенной силы, поскольку при этом необходимо учитывать возможность возникновения на границе раздела сразу двух волн, что соответствует расщеплению луча.

Чтобы вывести условия преломления и отражения рентгеновских лучей на внутренней границе, разделяющей области с разными значениями параметра α (**r**) (например, α_1 и α_2), сопоставим дисперсионные

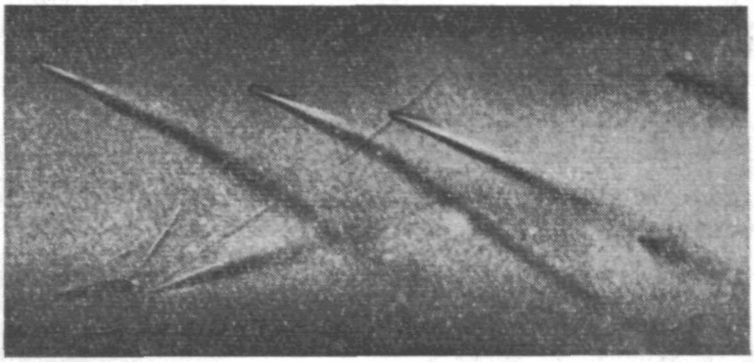


Рис. 14. Рентгеновское изображение дислокаций, наблюдаемых в условиях аномального прохождения [35].

поверхности для этих значений α (рис. 15). Из условия непрерывности эйконала на границе раздела следует, что волновые векторы отраженных и преломленных волн аналогично случаю (2.10) испытывают по сравнению с волновым вектором падающей волны скачок лишь в направлении нормали **n** к границе раздела. Соответственно на дисперсионных поверхностях могут возбуждаться лишь те точки, которые лежат на прямой, параллельной **n**. Каждая такая прямая, вообще говоря, пересекает дисперсионные поверхности с $\alpha = \alpha_1$ и $\alpha = \alpha_2$ в четырех точках. Одна из этих точек соответствует заданной падающей волне; из трех остальных одна соответствует второй возможной падающей волне, а две — реально возникающим преломленным (в случае, когда нормаль лежит внутри дельты Бормана) или преломленной и отраженной волнам (если нормаль лежит вне дельты Бормана). Оба возможных варианта иллюстрируются рис. 15 случаи A и B). В том случае, когда параллельная **n** прямая пересекает лишь одну дисперсионную поверхность, происходит полное внутреннее отражение и возникает лишь одна отраженная волна. В отличие от световой оптики, в рентгеновской оптике возможно полное внутреннее отражение с обеих сторон поверхности раздела (случаи C и D на рис. 15). Рис. 16 иллюстрирует ход лучей для всех перечисленных случаев. Номера лучей соответствуют номерам точек на рис. 15, направления лучей

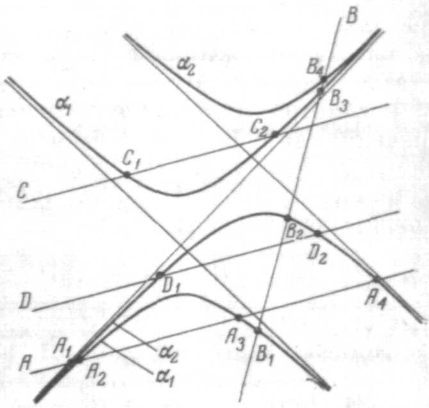


Рис. 15. Отражение и преломление рентгеновских волн на внутренней поверхности раздела сред с разными значениями параметра α.

параллельны построенным в соответствующих точках нормалям к дисперсионным поверхностям.

При заданной ориентации $\mathbf{n}$ поверхности раздела области, в которой реализуются различные частные случаи отражения и преломления рентгеновских лучей, разделяются на фазовых диаграммах типа рис. 15 касательными к дисперсионным поверхностям, проведенным параллельно вектору $\mathbf{n}$ (в случае, когда нормаль $\mathbf{n}$ лежит вне дельты Бормана), и параллельными $\mathbf{n}$ прямыми, проходящими через вершины гипербол (в случае, когда нормаль лежит внутри дельты Бормана). Во всех случаях точки на пограничных прямых соответствуют слиянию направлений пары лучей.

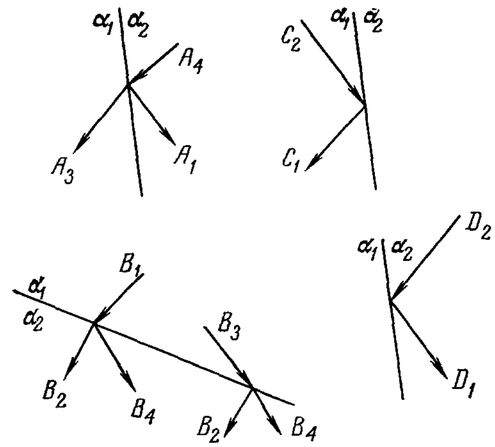


Рис. 16. Ход лучей при переходе границы раздела двух сред.

Связь амплитуд падающих, отраженных и преломленных волн на границе раздела, которая описывается в случае обычной оптики формулами Френеля, для рентгеновской оптики устанавливается из условия непрерывности электромагнитного поля. На плоскости E_0, E_1 это условие соответствует равенству векторной суммы амплитуд волн, родившихся на границе раздела, векторной амплитуде падающей волны. Поскольку соотношение между амплитудами E_0 и E_1 для каждой волны однозначно определяется по (2.11) ее волновым вектором, задача сводится к разложению известной векторной амплитуды падающей волны на две компоненты по заданным направлениям.

Рассмотрим в качестве примера отражение и преломление на границе, перпендикулярной к вектору отражения ($\mathbf{n} \parallel \mathbf{K}_1$). В этом случае на границе раздела испытывают скачок лишь P-компонента волнового вектора, а компонента H сохраняется. Пусть падающий луч имеет положительный угловой коэффициент

$$k = dx/dz = [P - (\alpha_1/4)]/[H - (\alpha_1/4)];$$

тогда отраженный луч с $P_1 = (\alpha_1/2) - P$ имеет отрицательный угловой коэффициент $k_1 = -k$. Для преломленной волны из (5.5) следует

$$P_2 = (\alpha_2/4) + \{[H - (\alpha_2/4)]^2 - (\chi/2)^2\}^{1/2} =$$
$$= (\alpha_2/4) + \{[(\alpha_1 - \alpha_2)/4) + (\chi/2)\,(1 - k^2)^{-1/2}]^2 - (\chi/2)^2\}^{1/2}. \qquad (5.16)$$

В случае $H < (\alpha_2/4) - (\chi/2)$ возникает слабо поглощающаяся, а в случае $H > (\chi/2) + (\alpha_2/4)$ — сильно поглощающаяся преломленная волна с положительным угловым коэффициентом

$$k_2 = [P_2 - (\alpha_2/4)]/[H - (\alpha_2/4)] = \{1 - [((\alpha_1 - \alpha_2)/2\chi) + (1 - k^2)^{-1/2}]^{-2}\}^{1/2}. \qquad (5.17)$$

В случае $|H - (\alpha_2/4)| < \chi/2$ из (5.16) для P_2 следует комплексное значение, что соответствует полному внутреннему отражению (прямые $H = \mathrm{const}$ на рис. 12, *б* проходят между вершинами гипербол $\alpha = \alpha_2$). По мере удаления от границы раздела волновое поле затухает по экспоненциальному закону с показателем

$$\operatorname{Im} P_2 = \{(\chi/2)^2 - [((\alpha_1 - \alpha_2)/4) + (\chi/2)(1 - k^2)^{-1/2}]^2\}^{1/2}.$$

Для отношения амплитуд E_0 и E_1 в каждой волне из (2.11) после перехода к безразмерным координатам и переменным H и P следует

$$E_0/E_1 = \chi_{-1}C/2\,(P - H). \tag{5.18}$$

Пусть амплитуды E_0 в падающей, отраженной и преломленной волнах относятся как $1 : A_1 : A_2$. Из условия непрерывности волнового поля на границе раздела следует

$$\begin{pmatrix} \chi_{-1}C/2 \\ P - H \end{pmatrix} + A_1 \begin{pmatrix} \chi_{-1}C/2 \\ P_1 - H \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} \chi_{-1}C/2 \\ P_2 - H \end{pmatrix},$$

откуда

$$A_1 = (P_2 - P)/(P_1 - P_2), \quad A_2 = (P_1 - P)/(P_1 - P_2). \tag{5.19}$$

Выражения (5.16), (5.17) и (5.19) позволяют полностью проанализировать задачу об отражении и преломлении рентгеновских лучей при произвольных значениях параметров k, α_1 и α_2.

Отражение и преломление рентгеновских лучей на внутренних границах, разделяющих области с различными значениями параметров χ_1 и χ_{-1} (домены, двойники, в частности двойники инверсии), можно свести к рассмотренному выше случаю путем сшивания решений из условия непрерывности полного волнового поля на границе раздела.

6. ФОРМИРОВАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ В ДВУХЛУЧЕВОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКЕ

Построение траекторий рентгеновских лучей и соответствующих им траекторий для волновых векторов позволяет в принципе восстановить эйконалы $S^{(\mathrm{I})}$ и $S^{(\mathrm{II})}$ для обеих систем лучей и перейти к определению амплитуд волнового поля $\hat{E}^{(\mathrm{I})}$ и $\hat{E}^{(\mathrm{II})}$. Поскольку эти амплитуды меняются медленно, распределение интенсивности в рентгеновском изображении вначале определяется разностью эйконалов $S^{(\mathrm{I})}$ и $S^{(\mathrm{II})}$, т. е. фазовыми соотношениями волн, отвечающих обеим системам лучей,— возникает чисто фазовый контраст. По мере углубления в кристалл изменение амплитуд $\hat{E}^{(\mathrm{I})}$ и $\hat{E}^{(\mathrm{II})}$ оказывает все большее влияние на интенсивность суммарного поля. Наконец, сильно поглощающееся поле практически исчезает и перестает вносить вклад в рентгеновское изображение. Здесь контраст не зависит от величины эйконала и определяется амплитудой слабо поглощающейся волны — имеет место чисто амплитудный контраст.

Намеченная общая картина формирования рентгеновского изображения существенно осложняется, если лучи, принадлежащие одной и той же системе, пересекаются и возникают каустики. В этом случае определение каждого волнового поля требует учета интерференции всех лучей, пришедших в данную точку, так что даже в случае полного исчезновения сильно поглощающегося поля интенсивность изображения продолжает зависеть от эйконала, являющегося неоднозначной функцией координат.

а) Определение амплитуд волнового поля методом последовательных приближений. Используя общий метод [20], решение уравнения (5.2) можно искать путем последовательных приближений [32]. Положим для каждого волнового поля

$$\hat{E} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{E}^{(n)}, \tag{6.1}$$

где член нулевого приближения $\hat{E}^{(0)}$ удовлетворяет уравнению

$$D_S\,[\hat{E}^{(0)}] = 0, \tag{6.2}$$

а следующие члены — уравнению

$$D_S\,[\hat{E}^{(n+1)}] + D\,[\hat{E}^{(n)}] = 0. \tag{6.3}$$

Введем левый $\hat{l} = (\chi_1 C/2,\ P - H)$ и правый $\hat{r} = (\chi_{-1}C/2,\ P - H)$ нуль-векторы матрицы D_S [соотношение компонент вектора $\hat{E}^{(0)}$ выше уже использовалось в (2.11) и (5.18)]. Согласно (6.2) вектор $\hat{E}$ (0) может отличаться от $\hat{r}$ лишь некоторым скалярным множителем. Полагая $\hat{E}^{(0)} = \sigma(x, z)\,\hat{r}$ и умножая уравнение (6.3) для $n = 0$ слева на вектор $\hat{l}$, получаем «уравнение переноса»

$$\hat{l}D\,[\sigma\hat{r}] = 0, \tag{6.4}$$

позволяющее однозначно определить в нулевом приближении изменение амплитуды поля вдоль траектории, если известны начальные значения E_0 и E_1 на входной поверхности кристалла. Далее, уравнение (6.3) позволяет последовательно определять все члены разложения (6.1).

«Уравнение переноса» (6.4) для амплитуды поля в нулевом приближении полностью эквивалентно закону сохранения потока энергии волнового поля в непоглощающем кристалле, впервые полученное Като и Камбе [25в, 40б]:

$$\operatorname{div}\mathbf{J} = 0, \quad \mathbf{J} = \varkappa E_0^2 + (\varkappa + \mathbf{K}_1)\,E_1^2.$$

Из уравнения переноса следует, что плотность потока энергии в поле, соответствующем каждому из эйконалов $S^{(\mathrm{I})}$ и $S^{(\mathrm{II})}$, меняется вдоль траекторий обратно пропорционально расстоянию между соседними траекториями. В частности, в случае аномального прохождения рентгеновских лучей интенсивность изображения в неискаженных областях кристалла существенно определяется плотностью траекторий лучей (см. рис. 13).

В общем случае реализация метода последовательных приближений (6.1) — (6.3) при выборе эйконала в форме (5.5) встречает значительные трудности из-за необходимости учета криволинейности лучей. В слабоискаженных кристаллах эту трудность можно преодолеть, выбирая эйконал в форме, отвечающей прямолинейным лучам. В частности, полагая $S = \pm i\chi z/2$, что соответствует лучам $x = \mathrm{const}$, получаем для амплитуд $\hat{E}^{(n)}$ систему типа (6.2), (6.3), где, в отличие от (5.3), (5.4),

$$D_S = \begin{pmatrix} \pm\chi/2 & \chi_{-1}C \\ \chi_1 C & \pm\chi/2 \end{pmatrix},$$

$$D = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial z} + \dfrac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \dfrac{\partial}{\partial z} - \dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{i\alpha}{2} \end{pmatrix}.$$

Уравнение переноса (6.4) приобретает простой вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + i\,\frac{\alpha}{4}\right)\sigma = 0,$$

откуда

$$\hat{E}^{(0)} = 0{,}5\ (\mp\chi_{-1}C/\chi)\ \exp\left[-\left(\frac{i}{4}\right)\int_0^z \alpha\,(x, z)\,dz\right]. \tag{6.5}$$

В работе [32] для случая $\alpha = \alpha\,(x)$ был вычислен также следующий член ряда (6.1):

$$\hat{E}^{(1)} = e^{-i\alpha z/2}\left[-\frac{i}{4\chi}P_1(\alpha, z)\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix} - \frac{1}{\chi}\begin{pmatrix}\pm 1\\ 0\end{pmatrix}P_2(\alpha, z)\right], \tag{6.6}$$

где

$$P_1(\alpha, z) = (\alpha^2 z/8) + \alpha'_x z\,[(\alpha z/8) + (\alpha'_x z^2/24) + i] + (i\alpha''_{xx} z^2/4), \qquad (6.7)$$

$$P_2(\alpha, z) = (\alpha + \alpha'_x z)/2$$

(для простоты принято $C = 1$, $\chi_1 = \chi_{-1} = -\chi$). Формулы (6.5) — (6.7) позволяют в явном виде рассчитать контраст изображения для любой плавной функции $\alpha(x, y)$, мало меняющейся на расстояниях порядка толщины кристалла. Применение этих формул для расчета изображения краевой дислокации, перпендикулярной к поверхности кристалла, показало удовлетворительное согласие с результатами численного решения уравнения Такаги (см. рис. 9, *в*) и качественное согласие рассчитанного распределения интенсивности с рентгеновскими фотографиями дислокаций [33].

б) Асимптотическое решение для волнового поля рентгеновских лучей в кристаллах с двумерным полем искажений. Случай $\alpha = \alpha(x, y)$ вызывает значительные трудности при построении волнового поля методами геометрической оптики в связи с непрерывным нарастанием разности фаз на соседних участках кристалла и возникновением волноводных эффектов типа указанных в конце п. а) гл. 5. С другой стороны, при $\alpha = \alpha(x, y)$ коэффициенты в уравнении Такаги (4.2) не зависят от переменной z, что позволяет искать решение этого уравнения с помощью интегральных преобразований по этой переменной. В работе [41] с целью исследования асимптотического поведения волнового поля в толстых кристаллах было использовано преобразование Лапласа, ставящее в соответствие искомым функциям $E_0(x, z)$ и $E_1(x, z)$ их изображения $F_0(x, p)$ и $F_1(x, p)$ по правилам

$$\hat{F}(x, p) = \int_0^\infty e^{-pz}\hat{E}(x, z)\,dz$$

(или в сокращенном обозначении $\hat{E}(x, z) \div \hat{F}(x, p)$). Для производных по x и по z соответственно следует

$$\frac{\partial \hat{E}(x, z)}{\partial x} \div \frac{\partial F(x, p)}{\partial x}, \qquad \frac{\partial \hat{E}(x, z)}{\partial z} \div p\hat{F}(x, p) - \hat{E}(x, 0).$$

Уравнение Такаги при переходе к функциям F_0 и F_1 сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\begin{pmatrix} 2i\left(p + \frac{\partial}{\partial x}\right) & \chi_{-1}C \\ \chi_1 C & 2i\left(p - \frac{\partial}{\partial x}\right) - \alpha(x) \end{pmatrix} \hat{F} = 2i\hat{E}(x, 0), \qquad (6.8)$$

эквивалентной обыкновенным дифференциальным уравнениям второго порядка для F_0 и F_1. Так, для поля дифрагированной волны имеем

$$\frac{\partial^2 F_1}{\partial x^2} - \frac{i\alpha}{2}pF_1 - \frac{i}{2}\frac{\partial \alpha F_1}{\partial x} - \left(p^2 + \frac{\chi^2}{4}\right)F_1 = -\frac{i\chi_1 C}{2}E_0(x, 0) - pE_1(x, 0). \qquad (6.9)$$

Применение к решению системы (6.8) обратного преобразования Лапласа

$$\hat{E}(x, z) = (1/2\pi i)\int_{p_0 - i\infty}^{p_0 + i\infty} e^{pz}\hat{F}(x, p)\,dp,$$

где p_0 лежит правее всех особых точек $\hat{F}(x, p)$, дает искомое волновое поле. Асимптотическое поведение волнового поля при больших значениях z определяется поведением функций F_0 и F_1 около ближайших к линии интегрирования особых точек.

В качестве примера в работе [41] было рассмотрено изображение бикристалла, когда $\alpha(x, y) = \alpha(y)\,\theta(-x)$. В этом случае при равномерном освещении образца ($E_0(x, 0) = 1$, $E_1(x, 0) = 0$) уравнение (6.9) для дифрагированной волны приобретает вид

$$F''_{xx} - (i\alpha/2)\,\theta(-x),$$
$$F'_x - [p^2 + i(\alpha/2)\,\theta(-x)\,p + (\chi^2/4) - (\alpha/2)\,\delta(x)]\,F = -i\chi/2.$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее условию ограниченности на бесконечности, имеет вид

$$\begin{aligned}F(x, p) = (i\chi/2)\,\{&[p^2 + (\chi/2)^2 + ip(\alpha/2)\,\theta(-x)]^{-1} -\\ &-\exp[i(\alpha/4)\,x\theta(-x) - |x|\,\{[p + i(\alpha/4)\,\theta(-x)]^2 + (\chi^2/4)\}^{1/2}] \times\\ &\times([p^2 + (\chi/2)^2 + ip(\alpha/2)\,\theta(-x)]^{-1} +\\ &+[p^2 + (\chi/2)^2]^{-1}\,[i(\alpha/4) - \{[p + i(\alpha/4)]^2 + (\chi^2/4)\}^{1/2}]^{-1})\}. \end{aligned} \qquad (6.10)$$

Обратное преобразование Лапласа для изображения (6.10) в явном виде провести не удается, однако все характерные черты волнового поля можно выяснить с помощью соответствующих асимптотических решений. С этой целью в работе развит метод нахождения асимптотики оригинала, близкий к обычному методу разложения изображения в степенной ряд вблизи особых точек (см., например, [42]). Анализ был выполнен для случая непоглощающего кристалла — наиболее трудный для расчета случай, так как при этом необходимо было учитывать все особые точки $F(x, p)$ в плоскости комплексного переменного p. Для определенности полагалось $\alpha > 0$. Из (6.10) видно, что $F(x, p)$ имеет простые полюсы $p = \pm i\chi/2$, $p = -i(\alpha/4) \pm i\,[(\chi^2/4) + (\alpha^2/16)]^{1/2}$ и корневые ветвления $p = \pm i\chi/2$, $p = -i(\alpha/4) \pm i(\chi/2)$. Действительная часть всех особых точек равна нулю (непоглощающий кристалл), поэтому для асимптотики оригинала все они существенны. При $|\alpha| \ll \chi$, $|\alpha z| \gg 1$ и $|x| \ll z/(\chi z)^{1/4}$ поле дифрагированной волны имеет вид

$$E_1(x, z) \approx i\,\mathrm{Im}\,[e^{i\chi z/2}\Phi(x(i\chi/4z)^{1/2})], \quad x > 0, \qquad (6.11)$$

$$\begin{aligned}E_1(x, z) \approx\, &(i/2)\,e^{-i\alpha z/2}(1 - e^{i\alpha x/2})\sin[(\chi z/2) + (\alpha^2 z/16\chi)] +\\ &+(i/2)\,e^{-i\alpha z/2}\,\mathrm{Im}\,\{e^{iz[(\chi/2)+(\alpha^2/16\chi)]}\,\Phi((i\alpha^2 z/16\chi)^{1/2} - (i\chi/4z)^{1/2}x)\} -\\ &-(i/2)\,e^{-i(\alpha/4)z+i(\alpha/2)x}\,\mathrm{Im}\,\{e^{iz[(\chi/2)+(\alpha^2/16\chi)]}\Phi((i\alpha^2 z/16\chi)^{1/2} + (i\chi/4z)^{1/2}x)\},\\ &\qquad x < 0,\end{aligned}$$

где $\Phi(t)$ — интеграл вероятности.

Согласно (6.11) в области $x > 0$ интенсивность $I_1(x, z)$ возрастает по параболическому закону на отрезке $0 \leqslant x \leqslant z/(\chi z/4)^{1/2}$ и, далее, осциллируя с уменьшающейся амплитудой, стремится к значению, соответствующему решению (2.14) при $\alpha = 0$. В области $x < 0$ и $\alpha^2 z/16\chi \ll 1$ интенсивность осциллирует на отрезке $-\alpha z/2\chi \leqslant x \leqslant 0$ с амплитудой порядка единицы, а затем стремится к значению, соответствующему решению (2.14) при $\alpha \neq 0$.

В случае сильно разориентированного бикристалла, когда $|\chi| \ll \alpha$, асимптотическое решение в области $\alpha z \gg 1$ имеет следующий вид: в области $x \leqslant -z$ обычное решение (2.14) при $\alpha \neq 0$, в области $0 \leqslant (x + z)\,\alpha/4 \ll 1$

$$E_1(x, z) \approx (2\chi/\alpha)(1 - e^{-i\alpha z/4}) - (\alpha\chi/8)(x + z)^2\,e^{-i\alpha z/2},$$

в области $(x+z)\,\alpha/4 \gg 1$ при $x<0$

$$E_1(x, z) \approx (i\chi/2)(z+x)\,e^{i\alpha x/2}\{J_0(\chi(z+x)/2) + (\pi/2)[J_1(\chi(z+x)/2)\times \times \mathbf{H}_0(\chi(z+x)/2) - J_0(\chi(z+x)/2)\,\mathbf{H}_1(\chi(z+x)/2)]\}, \quad (6.12)$$

где $\mathbf{H}_\nu(t)$ — функции Струве. В частности,

$$E_1(x, z) = \begin{cases} i(\chi/2)(z+x)\,e^{i\alpha x/2}, & \chi(z+x) \ll 1, \\ ie^{i\alpha x/2}, & \chi(z+x) \gg 1. \end{cases} \quad (6.13)$$

В соответствии с (6.12), (6.13) интенсивность при $x<0$ практически не осциллирует, оставаясь по порядку величины близкой к единице в интервале $(-z+(2/\chi), 0)$ и спадая по параболе в интервале $(-z+(4/\alpha), -z+(2/\chi))$.

В области $0 < x \ll z/(\chi z)^{1/4}$ асимптотика $E_1(x, z)$ имеет такой вид:

$$E_1(x, z) = i\cdot\sqrt{2}\,\{\sin[(\chi(z/2) + (\pi/4)]\,C(x^2\chi/4z) - -\cos[(\chi z/2) + (\pi/4)]\,S(x^2\chi/4z)\} + \{i\alpha\chi\exp[-i(\alpha/4)z + +iz[(\alpha^2/16) + (\chi^2/4)]^{1/2} - x\{(\alpha/2)[(\alpha^2/16) + (\chi^2/4)]^{1/2} - (\alpha^2/8)\}^{1/2}]\times \times \{2(\alpha^2+4\chi^2)^{1/2}[(\alpha/2)[(\alpha^2/16) + (\chi^2/4)]^{1/2} - (\alpha^2/8)]^{1/2}\}^{-1}, \quad (6.14)$$

где $C(t)$, $S(t)$ — функции Френеля. Формула (6.14) справедлива и в случае $\alpha \sim \chi$ при $x>0$. При $\alpha \gg \chi$ в области $x>0$ интенсивность рентгеновского изображения экспоненциально спадает на отрезке $0 \leqslant x\chi/2 \leqslant \leqslant 1$ (полное внутреннее отражение!), а затем возрастает по параболе на участке $(2/\chi, z/(\chi z/2)^{1/2})$, а далее, осциллируя с уменьшающейся амплитудой, стремится к значению, соответствующему решению (2.14) при $\alpha = 0$. Проведенное в работе [41] исследование показывает, что отклонения от геометрической оптики даже в условиях полного внутреннего отражения существенны только в областях $\chi(z+x)/2 \ll 1$ и $1 \leqslant \chi x/2 \leqslant (\chi z)^{1/2}$.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По сравнению с теорией электронномикроскопического дифракционного изображения теория рентгеновского изображения делает лишь первые шаги. Ряд приемов анализа изображения, используемых в электронной микроскопии, не имеет еще аналога в рентгеновской топографии. Многообразие возможных случаев и громоздкость численных методов расчета изображения затрудняет составление атласов изображений типичных дефектов решетки. Однако большинство задач допускает эффективное качественное и даже количественное исследование, решающее проблему анализа изображения в практических случаях.

Выброс излучения из областей с локальными искажениями хорошо передается функциями влияния: анализ условий рождения и затухания блоховских волн первого и второго типа определяет условия возникновения и исчезновения экстинкционных полос; поддается простым оценкам ход рентгеновских лучей в слабо искаженных кристаллах, включая отражение и преломление лучей на внутренних гранях раздела. Наибольшие трудности возникают при анализе изображения полей искажений, простирающихся вдоль отражающих плоскостей, когда облегчается образование каустик и возможно возникновение волноводных эффектов, эффекта полного внутреннего отражения и других подобных явлений, затрудняющих использование геометрической оптики. В этом случае наиболее перспективно использование асимптотических методов исследования волнового поля.

Единообразный подход к анализу рентгеновского изображения оказывается невозможным. В зависимости от конкретной задачи эффективными могут быть весьма различные методы. Можно надеяться, что в ходе экспериментальной апробации указанных в настоящей работе приемов анализа изображения арсенал методов рентгеновской топографии подвергнется дальнейшему расширению. Представляет, в частности, интерес проверка качественных предсказаний о связи знака контраста с простыми характеристиками полей искажений, количественная проверка выражений, описывающих в явной форме изображение слабо искаженных областей кристалла, теоретических выводов об отображении локальных искажений функциями влияния и о форме начальных возмущений волнового поля в сильно искаженных областях, количественное исследование изображений для особых положений дефектов, интерферометрия полей искажений с помощью секционных топограмм и фурье-анализ таких топограмм, исследование экстинкционных эффектов на изображениях, полученных в условиях аномального прохождения рентгеновских лучей, количественная проверка теории преломления и отражения рентгеновских лучей на внутренних границах раздела, исследование волноводных эффектов и эффекта полного внутреннего отражения, реализация рентгенооптических устройств типа линзы Френеля и различных дислокационных линз. Можно надеяться, что от пассивного исследования различных явлений, осложняющих анализ рентгеновского изображения, по мере прогресса в понимании механизма этих явлений, начнется переход к сознательному их использованию в различных рентгенооптических устройствах.

Заслуживает упоминания также ряд вопросов теории рентгеновского изображения, не вошедших в данный обзор. Сюда относится анализ изображения в отраженных пучках (дифракция по Брэггу) *), явление рентгеновского муара, учет угловой расходимости и некогерентности падающего на кристалл излучения, анализ вклада тепловых колебания и диффузного рассеяния.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность З. Г. Пинскеру, И. Л. Шульпиной, В. И. Никитенко, советы и замечания которых стимулировали написание настоящей статьи.

Институт кристаллографии АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Г. С. Жданов, Основы рентгеновского структурного анализа. М.— Л., Гостехиздат, 1940; А. И. Китайгородский, Рентгеноструктурный анализ, М., Гостехиздат, 1950.
2. М. А. Кривоглаз, Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами, М., «Наука», 1967, ч. I.
3. А. Гинье, Рентгенография кристаллов. Теория и практика, М., Физматгиз, 1961, ч. 4, гл. 8, § 3; Д. М. Васильев, Б. И. Смирнов, УФН 73, 503 (1961).
4. М. А. Блохин, Физика рентгеновских лучей, 2-е изд., М., Гостехиздат, 1957, стр. 8—10.
5. У. Вустер, Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах, М., ИЛ, 1963, гл. II.
6. C. C. Darvin, Phil. Mag. 27, 315, 675 (1924); P. P. Evald, Ann. d. Phys. 54, 519 (1917); Zs. Phys. 2, 332 (1920); 30, 1 (1924).

*) В недавно опубликованных работах [27] достигнут существенный прогресс в решении пространственно-неоднородной задачи дифракции в брэгговском случае. В частности, в этих работах получены функция влияния точечного источника и выражения для волнового поля в кристалле [ср. (3.8), (3.9)] с граничным условием $E_1(x, z)_{z=t} = 0$ при значении z, равном толщине образца t.

7. S. Amelinckx, The Direct Observation of Dislocation (Solid State Physics, Suppl. 6), N.Y., Academic Press, 1964; G. Hildebrandt,— Reinstoffprobleme, hrsg. von E. Rexer, B., Akademie-Verlag, 1967, S. 151.
8. А. М. Елистратов, Послесловие к сборнику «Прямые методы исследования дефектов в кристаллах», М., «Мир», 1965, стр. 268.
9. A. Authier, a) Adv. X Ray Anal. **10**, 9 (1967); б) Phys. Stat. Sol. **27**, 77 (1968).
10. G. Borrmann, a) Zs. Phys. **42**, 157 (1941); **127**, 197 (1950);— Beitarge zur Chemie und Physik des 20. Jahrhunderts — Lise Meitner, Otto Hahn, Max von Laue zum 80. Geburtstag, hrsg. von O. R. Frisch u.a., Braunschweig, F. Vieweg und Sohn, 1959, S. 262; б) Phys. Blätter **11**, 508 (1959).
11. О. Н. Ефимов, А. М. Елистратов, ФТТ **4**, 2908 (1967).
12. А. М. Афанасьев, Ю. Каган, ЖЭТФ **52**, 191 (1967); Acta Cryst. **A24**, 163 (1968).
13. Е. А. Тихонова, ФТТ **9**, 516 (1967); A. M. Afanas'ev, Yu. Kagan, F. N. Chukhovskiĭ, Dynamical Treatment of the X Ray Thermal Diffuse Scattering. I. V. Kurchatov Institute of Atomic Energy Preprint ИАЭ-1476, Moscow, 1967; Phys. Stat. Sol. **28**, 287 (1968).
14. А. Зоммерфельд, Оптика, М., ИЛ, 1953.
15. Л. Г. Орлов и др., УФН **76**, 109 (1962); В. Н. Рожанский, Зав. лаб. **32**, 170 (1962).
16. P. B. Hirsch et al., Electron Microscopy of Thin Crystals, L., Butterworths, 1965, ch. 11 (см. также перевод: П. Хирш и др., Электронная микроскопия тонких кристаллов, М., «Мир», 1968, гл. 11).
17. Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, М., «Мир», 1966, гл. 3.
18. M. von Laue, a) Acta Cryst. **2**, 106 (1949); **5**, 619 (1952); б) Röntgenstrahlinterferenzen, 3. Aufl., Frankfurt/a. Main, Akademische Verlagsges., 1960; W. H. Zachariasen, Theory of X Ray Diffraction in Crystals, N.Y., J. Wiley, 1945; W. Battermann, H. Cole, Rev. Mod. Phys. **36**, 681 (1964).
19. A. Authier, A. R. Lang, J. Appl. Phys. **35**, 1956 (1964).
20. Р. Курант, Уравнения с частными производными, М., «Мир», 1964, гл. V, § 5.
21. И. Ш. Слободецкий, Ф. Н. Чуховский, В. Л. Инденбом, Письма ЖЭТФ 8, 90 (1968).
22. И. Ш. Слободецкий, Ф. Н. Чуховский, Кристаллография **15**, 1101 (1970).
23. Э. В. Суворов и др., ФТТ **13**, 2692 (1971).
24. M. Hart, A. D. Milne, Acta Cryst. **A25**, 134 (1969); **A26**, 223 (1970).
25. N. Kato, ibid. a) **14**, 526, 627 (1961); б) **A25**, 119 (1969); J. Phys. Soc. Japan в) **18**, 1785 (1963); **19**, 67, г) 971 (1964); д) **20**, 1047 (1965); **21**, 160, 1772, (1966); е) J. Appl. Phys. **39**, 2225, 2231 (1968).
26. A. Authier, D. Simon, Acta Cryst. **A24**, 517 (1968).
27. А. М. Афанасьев, В. Г. Кон, а) Динамическая теория рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами. Препринт ИАЭ им. И. В. Курчатова ИАЭ-1890, 1969; б) Acta Cryst. **A27**, 421 (1971); T. Uragami, J. Phys. Soc. Japan **27**, 147 (1969); 28, 1508 (1970).
28. F. Balibar, A. Authier, Phys. Stat. Sol. **21**, 413 (1967).
29. S. Takagi, a) Acta Cryst. **15**, 1131 (1962); б) J. Phys. Soc. Japan **26**, 1239 (1969).
30. D. Taupin, Bull. Soc. Fr. Miner. Cryst. **87**, 469 (1964); Acta Cryst. **23**, 25 (1967).
31. A. Authier, et. al., ibid. **A24**, 126 (1968).
32. F. N. Chukhovskiĭ, A. A. Schtolberg, Phys. Stat. Sol. **41**, 815 (1970).
33. В. Ф. Миусков, П. С. Милевский, Изв. АН СССР (Неорганические материалы) **1**, 1267 (1965).
34. A. K. Head, Austr. J. Phys. **20**, 557 (1967); P. Humble, ibid. **21**, 325 (1968); A. R. Thölen, Phil. Mag. **22**, 175 (1970).
35. И. Л. Шульпина, Канд. диссертация (ИП АН СССР, Ленинград, 1968).
36. A. R. Lang, Acta Cryst. **12**, 249 (1959); J. Appl. Phys. **30**, 1748 (1959); Zs. Naturforsch. **20a**, 636 (1965).
37. N. Kato, Y. Ando, J. Phys. Soc. Japan **21**, 964 (1966); J. R. Patel, N. Kato, Appl. Phys. Lett. **13**, 40 (1968).
38. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теория поля, М., «Наука», 1967, § 17.
39. P. Penning, D. Polder, Philips Res. Rept. **16**, 499 (1961); B. Okkerse. P. Penning, ibid. **18**, 82 (1963); H. Cole, G. E. Brock, Phys. Rev. **116**, 268 (1959).
40. K. Kambe, Zs. Naturforsch. a) **18a**, 1010 (1963); б) **20a**, 770 (1965).
41. Г. Н. Дубнова, В. Л. Инденбом, С. А. Пикин, Ф. Н. Чуховский, Кристаллография **16**, 18 (1971).
42. Г. Дёч, Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования, М., «Наука», 1971, § 34—35.