ЛИНИИ КОССЕЛЯ КАК НОВЫЙ ТИП ИСТОЧНИКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. М. Афанасьев^a, М. В. Ковальчук^b, М. А. Чуев^{a^*}, П. Г. Медведев^b

^а Физико-технологический институт Российской академии наук 117218, Москва, Россия

^b Институт кристаллографии Российской академии наук 117333, Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 февраля 2002 г.

Распределение интенсивности излучения внутри линии Косселя, соответствующей предельно асимметричной схеме дифракции рентгеновских лучей, имеет аномальную форму сильно выраженного пика, превышающего фоновую интенсивность в сотни раз. Проводится детальный теоретический анализ этого явления и предлагаются варианты экспериментального наблюдения аномальных линий Косселя. Обсуждается возможность использования этого эффекта для реализации нового типа источника узкоколлимированного по углам рентгеновского излучения.

PACS: 61.10.Dp

1. ВВЕДЕНИЕ

Хотя метод линий Косселя известен еще с 30-х годов [1], до настоящего времени не полностью изучены основные физические явления, имеющие место при выходе такого излучения из кристалла. Как было отмечено в недавнем кратком сообщении авторов [2], при дифракции рентгеновского пучка в предельно асимметричной схеме линии Косселя приобретают аномальную форму, сильно отличающуюся от стандартного вида. В такой схеме дифракции на некоторой глубине кристалла формируется сильно сжатый рентгеновский пучок, распространяющийся параллельно поверхности кристалла, и степень сжатия может достигать нескольких сотен раз [3]. Это предсказание нашло свое подтверждение при использовании метода стоячих рентгеновских волн с регистрацией фотоэлектронов [4,5] с помощью специально разработанного газового пропорционального счетчика [6]. Естественно ожидать, что сильное сжатие рентгеновского пучка должно сказаться и на распределении интенсивности излучения внутри линии Косселя. Как будет показано ниже, распределение интенсивности выходящего рентгеновского излучения в линии Косселя, соответствующей резко асимметричной дифракции, имеет форму ярко выраженного пика, в сотни раз превышающего фоновую интенсивность [2].

В разд. 2 подробно проанализирован процесс динамического рассеяния в предельно асимметричной схеме дифракции, когда наряду с дифракционным рассеянием необходимо учитывать и зеркальное отражение падающего или отраженного от кристалла пучка. В разд. 3 рассмотрены особенности динамической дифракции в окрестности так называемой вырожденной точки, когда корни дисперсионного уравнения оказываются трехкратно вырожденными. Именно в этой точке и происходит максимальное сжатие рентгеновского пучка в кристалле. В разд. 4 анализируются особенности углового распределения рентгеновского излучения внутри линии Косселя в окрестности вырожденной точки. В разд. 5 обсуждаются различные варианты экспериментального наблюдения эффекта, а также возможность использования линий Косселя для создания источников коллимированного по углам рентгеновского излучения.

2. УРАВНЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ С УЧЕТОМ ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ

Предельно асимметричная дифракция реализуется в так называемой геометрии Брэгга–Лауэ [7],

^{*}E-mail: chuev@ftian.oivta.ru



Рис. 1. Схема дифракции в предельно асимметричной геометрии Брэгга–Лауэ

когда дифрагированная волна распространяется под углом φ_h почти параллельно поверхности кристалла и небольшим изменением угла падения φ_0 рентгеновского пучка на кристалл можно изменить дифракцию пучка от геометрии Лауэ к геометрии Брэгга. Такие схемы с углами φ_0 порядка 1 и $\varphi_h \ll 1$ легко реализуются в эксперименте (см. рис. 1 и приведенную ниже таблицу).

Нахождение распределения волновых полей в кристалле в такой схеме дифракции требует наряду с дифракционным рассеянием учитывать и зеркальное отражение. Причем, так как $\varphi_0 \approx 1$, можно пренебречь зеркальным отражением падающей волны и проводить учет зеркального отражения только для дифрагированной волны. Волновые поля вне $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и внутри $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ кристалла будем искать в следующем виде:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{E}_h \exp(i\boldsymbol{\kappa}_h \cdot \mathbf{r}), \qquad (1)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{D}_h \exp(i\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}).$$
(2)

Здесь κ и \mathbf{k}_0 — волновые векторы падающей волны соответственно в вакууме и в кристалле, а \mathbf{k}_h — волновой вектор дифрагированной волны в кристалле:

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{K}_h, \tag{3}$$

где \mathbf{K}_h — вектор обратной решетки. Что касается вектора κ_h , то он определяется из условий

$$\boldsymbol{\kappa}_{h\parallel} = \boldsymbol{\kappa}_{\parallel} + \mathbf{K}_{h\parallel}, \quad \boldsymbol{\kappa}^2 = \boldsymbol{\kappa}_h^2, \quad (4)$$

где $\kappa_{h\parallel}$ и κ_{\parallel} — проекции соответствующих векторов на поверхность кристалла.

Амплитуды волновых полей в кристалле, D_0 и D_h , должны удовлетворять хорошо известной системе динамических уравнений [8]:

$$\frac{k_0^2 - \kappa^2}{\kappa^2} D_0 = \chi_0 D_0 + C \chi_{\bar{h}} D_h,
\frac{k_h^2 - \kappa^2}{\kappa^2} D_h = \chi_0 D_h + C \chi_h D_0,$$
(5)

где $\kappa = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны излучения, χ_0 , χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ — фурье-компоненты поляризуемости кристалла, соответствующие заданному отражению, C — множитель, определяемый векторами поляризации падающей и дифрагированной волн [7]. Волновой вектор падающей волны в кристалле, \mathbf{k}_0 , отличается от соответствующего вектора $\boldsymbol{\kappa}$ в вакууме, и его удобно искать в следующем виде:

$$\mathbf{k}_0 = \boldsymbol{\kappa} + \frac{\kappa \chi_0}{2\gamma_0} \,\mathbf{n} + \kappa y \mathbf{n},\tag{6}$$

где **n** — нормаль к поверхности кристалла. Здесь последние два члена описывают обычное преломление и поправку, обусловленную дифракцией, а

$$\gamma_0 = \sin \varphi_0.$$

С учетом равенства (6) система динамических уравнений (5) принимает вид

$$\left[(y + \chi_0/2\gamma_0)^2 + 2\gamma_0 y \right] D_0 + C\chi_{\bar{h}} D_h = 0, C\chi_h D_0 + \left[(y + \chi_0/2\gamma_0)^2 + (\gamma_0 - \tilde{\psi}) (y + \chi_0/2\gamma_0) + \alpha - \chi_0 \right] D_h = 0,$$

$$(7)$$

где

$$\alpha = -2\sin(2\theta_B)\Delta\theta, \quad \tilde{\psi} = 2\sin\psi\sin\theta_B,$$

 θ_B — угол Брэгга, $\Delta \theta$ — отклонение от угла Брэгга, ψ — угол между поверхностью кристалла и вектором \mathbf{K}_h .

Для стандартных (симметричных или слабо асимметричных) схем дифракции, когда углы падающей и отраженной волн достаточно велики, в уравнениях (7) можно пренебречь членами, квадратичными по параметру y, а сама система уравнений (7) сводится к форме, которая определяет два набора волновых полей, (1) и (2), в кристалле (см., например, [7]). В случае предельно асимметричной схемы угол $\varphi \approx 1$ и в первом уравнении (7) можно пренебречь квадратичными по y членами. В то же время, как следует из условий (4), отражающих факт сохранения тангенциальной составляющей волнового вектора при прохождении поверхности кристалла и упругий характер дифракционного рассеяния,

$$\varphi_h^2 = \left(\gamma_0 - \tilde{\psi}\right)^2 + 2\sin(2\theta_B)\Delta\theta,\tag{8}$$

причем $\varphi_h \ll 1$, т.е. во втором уравнении системы (7) уже нельзя пренебрегать квадратичными по *у* слагаемыми ввиду малости члена, содержащего $\gamma_0 - \tilde{\psi} \approx 0$. В результате система (7) приводится к более простому виду:

$$2\gamma_0 y D_0 + C\chi_{\bar{h}} D_h = 0, C\chi_h D_0 + \left[(y + \eta_h)^2 - \tilde{\varphi}_h^2 \right] D_h = 0,$$
(9)

где

$$\tilde{\varphi}_h = \sqrt{\varphi_h^2 + \chi_0}, \quad \eta_h = \gamma_0 - \tilde{\psi} + \frac{\chi_0}{2\gamma_0}.$$

Из условия существования решений однородной системы (9) получаем следующее дисперсионное уравнение:

$$y\left[(y+\eta_h)^2 - \tilde{\varphi}_h^2\right] - \delta_0^3 = 0,$$
 (10)

где

$$\delta_0^3 = \frac{C^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}}{2\gamma_0}.$$

Дисперсионное уравнение (10) имеет три корня, которые определяют возбуждаемые в кристалле экстинкционные моды волнового поля. Таким образом, количество мод, возбуждаемых в кристалле, в предельно асимметричной схеме дифракции увеличивается по сравнению со стандартными схемами с двух до трех.

В полубесконечном кристалле возбуждаются только моды, удовлетворяющие условию $\operatorname{Im}(y_{1,2} + \chi_0/2\gamma_0) > 0$, и результирующее волновое поле имеет вид

$$D(\mathbf{r}) =$$

$$= \sum_{j=1,2} \left[D_0^{(j)} \exp(i\mathbf{k}_{0j} \cdot \mathbf{r}) + D_h^{(j)} \exp(i\mathbf{k}_{hj} \cdot \mathbf{r}) \right]. \quad (11)$$

Амплитуды возбуждаемых в кристалле мод, $D_0^{(j)}$ и $D_h^{(j)}$, определяются из граничных условий непрерывности падающей волны на границе кристалла, а также из условия непрерывности поля и его производной для дифрагированной волны:

$$D_0^{(1)} + D_0^{(2)} = E_0,$$

$$D_h^{(1)} + D_h^{(2)} = E_h,$$

$$y_1 D_h^{(1)} + y_2 D_h^{(2)} = -(\eta_h + \varphi_h) E_h.$$
(12)

С помощью этих граничных условий и уравнений (9) для амплитуд волновых полей $D_0^{(j)}$ и $D_h^{(j)}$ легко находим

$$D_{h}^{(1)} = \frac{\varphi_{h} + \eta_{h} + y_{2}}{y_{2} - y_{1}} E_{h},$$

$$D_{h}^{(2)} = -\frac{\varphi_{h} + \eta_{h} + y_{1}}{y_{2} - y_{1}} E_{h},$$

$$D_{0}^{(j)} = \frac{C\chi_{\bar{h}}}{2\gamma_{0}y_{j}} D_{h}^{(j)},$$

(13)

где

$$E_h = \frac{C\chi_h}{y_3(\varphi_h - \eta_h - y_3)}E_0 \tag{14}$$

— амплитуда отраженной волны. Здесь y_3 — корень дисперсионного уравнения (10), имеющий отрицательную мнимую часть. Формулы (13) и (14) позволяют рассчитать волновые поля в кристалле и в вакууме.

3. ДИНАМИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В ОКРЕСТНОСТИ ВЫРОЖДЕННОЙ ТОЧКИ

Как видно из выражений (13), амплитуды $D_h^{(j)}$ волнового поля в кристалле намного превосходят амплитуду E_h отраженной волны, если корни дисперсионного уравнения (10) близки друг к другу. Интересно, что сама амплитуда выходящей из кристалла отраженной волны в соответствии с формулой (14) не имеет таких особенностей. Ясно, что случай, когда корни уравнения (10) совпадают, т.е. являются вырожденными, имеет особый интерес.

Нетрудно показать, что если пренебречь поглощением, то существуют такие направления падения рентгеновского пучка при

$$\varphi_0 = \arcsin\left(\tilde{\psi} - \frac{3}{2}\delta_0\right) \quad \mathbf{H} \quad \Delta\theta = \frac{\varphi_c^2 - 3\delta_0^2}{2\sin(2\theta_B)} \quad (15)$$

(здесь $\varphi_c = \sqrt{-\operatorname{Re}\chi_0}$ — угол зеркального отражения), для которых уравнение (10) имеет один трехкратно вырожденный корень:

$$y_1 = y_2 = y_3 = \delta_0. \tag{16}$$

При этом

$$\eta_h = -\frac{3}{2}\delta_0, \quad \varphi_h^2 = \varphi_c^2 - \frac{3}{4}\delta_0^2.$$
 (17)

В этом случае амплитуды волновых полей, $D_h^{(1)}$ и $D_h^{(2)}$, расходятся, однако полная амплитуда дифрагированной волны внутри кристалла,

$$D_h(z) = D_h^{(1)} \exp(i\kappa y_1 z) + D_h^{(2)} \exp(i\kappa y_2 z), \quad (18)$$

с учетом формул (13) остается всюду конечной, хотя и неограниченно возрастает по мере распространения в глубь кристалла:

$$D_h(z) = E_h + i \frac{C\chi_h}{\delta_0} \kappa z E_0.$$
(19)



Рис.2. Сжатие рентгеновского пучка в асимметричной схеме дифракции ($S_h = S_0/\beta$)

Как видно из этого результата, амплитуда дифрагированной волны, а следовательно, и плотность потока дифрагированной волны неограниченно увеличивается с ростом z. Рост плотности потока означает, что происходит неограниченное сжатие рентгеновского пучка внутри кристалла.

Сжатие пучка при дифракции в асимметричной схеме с параметром асимметрии

$$\beta = \frac{\gamma_0}{\gamma_h} = \frac{\sin \varphi_0}{\sin \varphi_h} > 1$$

легко понять из простых геометрических соображений. Как видно на рис. 2, поперечное сечение пучка отраженного излучения по отношению к сечению падающего пучка уменьшается при умеренных значениях параметра асимметрии ($\varphi_h \gg \varphi_c$) в β раз. При этом в силу равенства потоков отраженного и падающего пучков плотность потока излучения в отраженном пучке возрастает в β раз по сравнению с плотностью потока в падающем пучке. Это явление эффективно используется для получения рентгеновских пучков с поперечным сечением малого размера. По мере уменьшения угла φ_h начинает играть роль зеркальное отражение и все большая часть отраженного пучка уходит в глубь кристалла. При этом интенсивность отраженного пучка падает, и само явление дифракционного отражения, на первый взгляд, перестает представлять какой-либо физический интерес. Однако, как видно из формулы (19), по мере уменьшения φ_h происходит дальнейшее сжатие пучка с сохранением суммарного потока излучения, но не на поверхности, а в глубине кристалла. Именно это явление и лежит в основе аномального эффекта Косселя.

Проведем учет реального поглощения в кристалле. В большинстве случаев оно оказывается малым, так что

$$\operatorname{Im} \chi_0 < \delta_0^2. \tag{20}$$



Рис. 3. Распределение интенсивности дифрагированной волны по глубине кристалла германия, срезанного вдоль плоскости (111), для (220)-отражения излучения Ge K_{α} ($\psi = 54.74^{\circ}, \varphi_0 = 30.8^{\circ}$)

В этом случае корни уравнения (10) имеют вид

$$y_1 = \delta_0 \left(1 - i\eta a - \frac{\eta^2 a^2}{3} \right),$$

$$y_2 = \delta_0 \left(1 - i\eta^2 a - \frac{\eta a^2}{3} \right),$$

$$y_3 = \delta_0 \left(1 - ia - \frac{a^2}{3} \right),$$
(21)

где

$$\eta = e^{2\pi i/3}, \quad a = \left(\operatorname{Im} \chi_0 / \delta_0^2 \right)^{1/3}.$$
 (22)

При этом для амплитуды дифрагированной волны имеем

$$D_{h}(z) = \left[-\frac{2i}{\sqrt{3}} \frac{\varphi_{c}}{\delta_{0}a} \sin \frac{\sqrt{3}z}{L_{0}} + \cos \frac{\sqrt{3}z}{L_{0}} \right] \times \\ \times \exp\left(-\frac{z}{L_{0}}\right) E_{h}, \quad (23)$$

где

$$L_0 = \lambda / \pi a \delta_0. \tag{24}$$

Таким образом, учет эффекта поглощения приводит к снятию вырождения корней уравнения (10) и ограничению бесконечного роста амплитуды $D_h(z)$. Как следует из (23), максимум сжатия дифрагированной волны реализуется на глубине L_0 .

Распределение поля дифрагированной волны по глубине кристалла в случае (220)-отражения характеристического излучения GeK_{α} от кристалла германия и направления падающей волны, соответствующего вырожденной точке, которая определяется выражениями (15) и (17), с учетом всех реальных факторов, включая поглощение, представлено на рис. 3. Видно, что даже при учете всех реальных факторов в рассматриваемом случае плотность потока излучения увеличивается почти в 500 раз. Отметим, что для внешних отраженных пучков в асимметричных схемах дифракции реально достигается коэффициент сжатия всего лишь порядка 15–20.

4. АНОМАЛЬНЫЕ ЛИНИИ КОССЕЛЯ

Как видно из результатов предыдущего раздела и рис. 3, интенсивность поля на атомах на некоторой глубине кристалла при определенных направлениях падающего пучка, соответствующих предельно асимметричной брэгговской дифракции, может сильно превышать интенсивность поля при углах падения, далеких от угла Брэгга. В силу принципа взаимности следует ожидать, что при возбуждении атомов на малой глубине в кристалле должен возникать всплеск интенсивности излучения в направлениях, соответствующих предельно асимметричной дифракции. Это явление будем называть аномальным эффектом Косселя. Для определения распределения интенсивности излучения внутри линии Косселя прежде всего необходимо рассчитать интенсивность поля излучения на атомах кристалла в зависимости от направления падающего излучения. Эта задача решается на основе результатов предыдущих разделов. Для интенсивности поля излучения в местах расположения атомов кристалла имеем

$$I_{a}(z, \Delta \theta, \varphi) = \\ = \left| \sum_{j=1,2} \left[D_{0}^{(j)} + D_{h}^{(j)} \exp(i\mathbf{K}_{h} \cdot \boldsymbol{\rho}_{a}) \right] \times \right. \\ \left. \times \left. \exp\left[i \left(y_{j} + \frac{\chi_{0}}{2\gamma_{0}} \right) \kappa z \right] \right|^{2}, \quad (25)$$

где ρ_a определяет положение атомов группы *a* в элементарной ячейке. Используя формулы (10), (13) и (14), нетрудно провести конкретные расчеты этой интенсивности.

Согласно принципу взаимности [9], если падающее на кристалл под углами φ и θ рентгеновское излучение создает поле с интенсивностью (25) на атомах кристалла на глубине *z* с координатами ρ_a в элементарной ячейке, то возбужденный атом, расположенный внутри кристалла на той же глубине *z* и с



Рис.4. Аномальный эффект Косселя для (220)отражения излучения $\text{Ge}K_{\alpha}$ от кристалла германия, срезанного вдоль плоскости (111), для экспоненциального распределения возбужденных атомов по глубине при L = 60 нм, $\Delta \varphi = \varphi - \varphi_{B-L}$ (см. таблицу)

теми же координатами ρ_a , будет излучать в направлении (φ, θ) с интенсивностью I_a^{out} , которая связана с величиной (25) соотношением

$$I_a^{out}(z,\Delta\theta,\varphi) = \text{const} \cdot I_a(z,\Delta\theta,\varphi).$$
(26)

Если атомы в кристалле возбуждаются с распределением, определяемым функцией P(z), то для формы распределения интенсивности излучения имеем

$$Y(\Delta\theta,\varphi) = \frac{1}{A} \int_{0}^{\infty} dz P(z) I_{a}^{out}(z,\Delta\theta,\varphi), \qquad (27)$$

где

$$A = \int_{0}^{\infty} dz P(z) I_{a}^{out}(z, \Delta \theta \to \infty, \varphi) =$$
$$= E_{0}^{2} \int_{0}^{\infty} dz P(z) \exp\left(-\frac{\mu z}{\gamma_{0}}\right) \quad (28)$$

— коэффициент, обеспечивающий нормировку фоновой интенсивности, $Y(\Delta\theta \to \infty, \varphi) = 1$, при больших отклонениях от угла Брэгга, а $\mu = \kappa \operatorname{Im} \chi_0$ — линейный коэффициент поглощения излучения в кристалле.

На рис. 4 представлено распределение интенсивности излучения $\text{Ge}K_{\alpha}$ внутри линии Косселя для

Плоскость среза	Рефлекс	θ_B	ψ	φ^*_{B-L}	$\mathrm{FWHM}(\varphi)$	$\mathrm{FWHM}(\theta)$	Y_m
(111)	220	18.2°	54.7°	30.8°	17'	1″	200
	113	21.5°	60.5°	39.8°	12'	0.3"	200
	<u></u> 113	21.6°	46.9°	32.5°	14'	0.5''	170
(100)	220	18.2°	45.0°	26.3°	14'	1″	175
	113	21.6°	17.5°	12.8°	12'	0.5''	85
	111	11.1°	35.3°	12.8°	12'	1.5''	90
(110)	133	28.9°	40.4°	38.8°	14'	0.2''	160
	113	21.5°	25.2°	18.3°	15'	0.5'	120
	111	11.1°	54.7°	18.3°	12'	1.2"	120

Максимум интенсивности Y_m аномальной линии Косселя и ее угловая расходимость в предельно асимметричной схеме дифракции для различных отражений излучения Ge K_{α} от кристалла германия с разными плоскостями среза

Примечание. * $\varphi_{B-L} = \arcsin \tilde{\psi}$ соответствует переходу от геометрии Брэгга к геометрии Лауэ. В шестой и седьмой колонках приведены значения ширины на половине высоты для углов φ и θ .

(220)-отражения от кристалла германия, срезанного вдоль плоскости (111), которое рассчитано по формулам (25), (27) и (28) с экспоненциальным распределением возбужденных атомов по глубине,

$$P(z) = e^{-z/L}, (29)$$

при L = 60 нм. Такое распределение возбужденных атомов по глубине можно обеспечить с помощью характеристического излучения MoK_{α} , падающего на кристалл под малым углом, близким к углу зеркального отражения. При этом аномальное излучение в линии Косселя выходит из кристалла под углом $\varphi = 30.8^{\circ}$ к его поверхности (см. таблицу), и, следовательно, такое излучение несложно детектировать. Как видно на рис. 4, распределение интенсивности излучения внутри линии Косселя имеет резко выраженный пик, в сотни раз превышающий фоновую интенсивность. Глубина L = 60 нм экспоненциального спада распределения возбужденных атомов как раз и обеспечивает максимальное значение интенсивности излучения внутри линии Косселя, которая соответствует распределению поля, представленному на рис. 3. Существенное превышение интенсивности излучения над фоном в этом случае захватывает небольшую область углов в окрестности вырожденной точки — всего несколько угловых секунд по углу θ , тогда как по углу φ эта область значительно шире (порядка десяти угловых минут). Отметим, что распределение интенсивности в стандартных линиях Косселя имеет лишь незначительные отклонения относительно фона, но охватывает при этом всю область по углу φ .

В таблице представлены результаты соответствующих расчетов максимума интенсивности аномальной линии Косселя, Y_m , и ее угловых расходимостей по углам θ и φ для ряда отражений излучения $\mathrm{Ge}K_{\alpha}$ от кристалла германия, срезанного вдоль основных кристаллографических плоскостей. Как видно из этих данных, для любого кристалла существует множество направлений, вдоль которых должны наблюдаться аномальные линии Косселя, различающиеся по максимальным значениям и форме распределения интенсивности излучения с сохранением основной качественной особенности этих линий, представляющих собой узкоколлимированный пучок излучения с расходимостью по углу θ порядка нескольких угловых секунд, а по углу φ — порядка десяти угловых минут.

Наиболее простым способом обнаружения аномальных линий Косселя является использование кристаллического анализатора (рис. 5), который должен быть изготовлен из того же материала, что и исследуемый образец. При этом следует использовать то же отражение, для которого должен наблюдаться аномальный эффект Косселя, чтобы избежать необходимости учета дисперсии. Помимо этого, кристалл-анализатор должен быть ориентирован таким образом, чтобы векторы **К**_h



Рис. 5. Схема эксперимента для наблюдения аномального эффекта Косселя: X — рентгеновское излучение; 1 — исследуемый образец; 2 — кристалланализатор; 3 — детектор

обратной решетки исследуемого образца и кристалла-анализатора лежали в плоскости отражения. Вращая кристалл-анализатор вокруг вертикальной оси, в этой схеме можно измерить зависимость интенсивности отраженной волны от угла поворота кристалла-анализатора $\Delta \theta_A$. Расчет полученной в этом эксперименте кривой дифракционного отражения (rocking curve) сводится к вычислению свертки функции распределения интенсивности излучения в пределах линии Косселя (27) с кривой $P_R^A(\theta, \varphi)$ отражения кристалла-анализатора по угловому интервалу, который определяется системой щелей:

$$P_{R}(\Delta\theta_{A}) = \frac{1}{B} \iint Y(\Delta\theta,\varphi) P_{R}^{A}(\Delta\theta_{A} - \Delta\theta,\varphi) \, d\Delta\theta \, d\varphi, \quad (30)$$

где

$$B = \iint P_R^A(\Delta\theta,\varphi) \, d\Delta\theta \, d\varphi \tag{31}$$

— коэффициент, обеспечивающий нормировку на фоновую интенсивность. Для того чтобы избежать ослабления наблюдаемого эффекта за счет усиления фона, необходимо с помощью щели перед кристаллом-анализатором вырезать некоторую угловую область порядка десяти угловых минут по углу φ в окрестности максимума излучения в линии Косселя, а кроме того, подобрать в анализаторе предельно асимметричное отражение таким образом, чтобы коэффициент асимметрии β был достаточно большим, обеспечивая тем самым узкое приемное окно в кристалле-анализаторе по углу θ . Кроме того, угол выхода излучения из анализатора должен быть много больше угла зеркального отражения, чтобы обеспечить относительную простоту регистрации этого излучения при сохранении максимального значения коэффициента отражения.

На рис. 6а представлена собственная кривая отражения от кристалла-анализатора германия для асимметричного отражения (220) с коэффициентом асимметрии $\beta = 14$. Такую геометрию можно обеспечить выбором монокристалла германия, вырезанного таким образом, что поверхность кристалла составляет угол 16° к плоскостям (220). При этом угол φ_h^A выхода отраженной волны составляет приблизительно 2°. На рис. 66 показана кривая дифракционного отражения, соответствующая схеме эксперимента на рис. 5 и рассчитанная по формулам (30) и (31). Соответствующая кривая имеет резко выраженный пик с превышением интенсивности в максимуме над фоном более чем в 30 раз. Так как кривая отражения анализатора значительно шире, чем распределение в исходной линии Косселя (см. рис. 4), кривая дифракционного отражения на рис. 66 оказывается более размытой по сравнению с исходной аномальной линией Косселя, но тем не менее эффект остается достаточно большим и его несложно экспериментально обнаружить.

Для сравнения штриховой линией на рис. 66 также нарисован профиль кривой дифракционного отражения для стандартной линии Косселя, соответствующий симметричной схеме дифракции. В этом случае наблюдаются относительно небольшие изменения интенсивности излучения, когда максимум распределения всего в несколько раз превосходит фоновую интенсивность.

5. НОВЫЙ ТИП ИСТОЧНИКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Как видно на рис. 4, существенное превышение интенсивности излучения в линии Косселя над фоном захватывает лишь небольшую область углов θ — всего несколько угловых секунд. Однако это как раз та область углов, которая используется в дифракционных исследованиях кристаллов с хорошей степенью совершенства. В обычной рентгеновской трубке излучение довольно равномерно распределено по широкому угловому интервалу порядка нескольких градусов. Однако для исследования кристаллов приходится вырезать с помощью кристалла-монохроматора как раз угловой интервал порядка нескольких секунд, а остальная, подавляю-



Рис. 6. а) Кривая отражения излучения Ge K_{α} от плоскостей (220) кристалла-анализатора германия с коэффициентом асимметрии $\beta = 14$ ($\psi_A = 74^{\circ} -$ угол между нормалью к поверхности и отражающими плоскостями). δ) Кривые дифракционного отражения для аномальной линии Косселя, представленной на рис. 4, в схеме эксперимента, показанной на рис. 5 (сплошная линия) и для линии Косселя, соответствующей симметричной схеме дифракции (штриховая линия)

щая, часть излучения не используется. Более того, с помощью системы щелей кристалл обычно коллимируется по вертикальному углу φ в пределах градуса. В результате в каждом конкретном эксперименте используется ничтожная (порядка 10^{-7} – 10^{-6}) доля рентгеновского излучения трубки. В этом аспекте аномальные линии Косселя могут служить новым типом источника рентгеновского излучения, так как выходящее из кристалла излучение имеет угловое распределение, как раз соответствующее требованиям дифракционных экспериментов, но при этом фоновая интенсивность на два-три порядка меньше пиковой интенсивности. Иными словами, такой источник для обеспечения необходимой для проведения дифракционных исследований интенсивности рентгеновского излучения имел бы существенно меньшую мощность по сравнению со стандартной рентгеновской трубкой.

Возбудить линию Косселя в кристалле можно двумя способами, показанными на рис. 7. Первый способ — использование падающего под малым углом ϕ к поверхности кристалла рентгеновского излучения с энергией, превышающей энергию возбуждения соответствующей линии K_{α} . Этот путь



Рис.7. Два способа возбуждения атомов в тонком приповерхностном слое: рентгеновским излучением (X) и электронным пучком (e^-)

наиболее удобен для обнаружения самого эффекта аномальных линий Косселя. Второй путь — возбуждение электронным пучком, который обычно используется в экспериментах по наблюдению линий Косселя. В случае же рассматриваемого нами аномального эффекта Косселя необходимо обеспечить возбуждение атомов в узком слое вблизи поверхности кристалла. Этого можно легко добиться за счет выбора энергии электронного пучка, E_e . Энергия электронов E_e не должна сильно превышать энергию возбуждения атомов в кристалле. Так, для рассмотренного нами случая излучения Ge K_{α} , как показывают оценки, значение E_e лежит в интервале 13–15 кэВ. В стандартных рентгеновских трубках для получения энергий в этом интервале используется существенно более высокое напряжение порядка 40–60 кВ. Это обстоятельство позволяет надеяться, что на основе аномального эффекта Косселя можно создать компактный и маломощный источник рентгеновского излучения, обеспечивающий необходимую интенсивность для проведения дифракционных экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 99-02-16665) и Благотворительного фонда содействия отечественной науке.

ЛИТЕРАТУРА

 W. Kossel, V. Loeck, and H. Voges, Z. Phys. 94, 139 (1935).

- А. М. Афанасьев, М. В. Ковальчук, М. А. Чуев, Письма в ЖЭТФ 73, 309 (2001).
- A. M. Afanas'ev and A. V. Esayan, Phys. Stat. Sol. (a) 126, 303 (1991).
- 4. А. М. Афанасьев, Р. М. Имамов, Э. Х. Мухамеджанов и др., ФТТ **32**, 650 (1990).
- 5. А. М. Афанасьев, Р. М. Имамов, Э. Х. Мухамеджанов, Кристаллография 40, 567 (1995).
- N. Hertel, M. V. Kovalchuk, A. M. Afanas'ev, and R. M. Imamov, Phys. Lett. A 75, 501 (1980).
- А. М. Афанасьев, П. А. Александров, Р. М. Имамов, Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев, Наука, Москва (1989).
- 8. З. Г. Пинскер, Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах, Наука, Москва (1974).
- M. von Laue, Roentgenstrahlen-interferentzen, Academische Verlagsgesellschaft, Frankfurt (1960).