

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ МЕТОД РАСЧЁТА ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛЕ: СКАЛЯРНАЯ ТЕОРИЯ

С.И. Харитонов^{1,2}, С.Г. Волотовский¹, С.Н. Хонина^{1,2}, Н.Л. Казанский^{1,2}

¹Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия,

²Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет) (СГАУ), Самара, Россия

Аннотация

Вводная часть статьи содержит исторический обзор и направления развития основных экспериментальных и теоретических разработок в области рентгеноструктурного анализа. В основной части в рамках скалярной теории рассмотрен дифференциальный подход решения задачи дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. Приведены примеры численного моделирования для базовых типов кристаллических решёток.

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, дифракция на кристалле, дифференциальный метод, базовые типы кристаллических решёток.

Цитирование: Харитонов, С.И. Дифференциальный метод расчёта дифракции рентгеновских лучей на кристалле: скалярная теория / С.И. Харитонов, С.Г. Волотовский, С.Н. Хонина, Н.Л. Казанский // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. – С. 469-479. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-469-479.

Введение

Кристаллы могут быть найдены в природе повсюду. Как правило, мы представляем их себе в виде минералов (драгоценных камней, графита и т.д.), однако примерами кристаллов являются снежинки, лёд и кусочки соли. С древних времен кристаллы интригуют людей своей красотой – симметричной формой и разнообразием цвета, им приписываются магические свойства.

Однако только в начале 20-го века были сделаны открытия, позволившие «увидеть» внутреннюю структуру кристаллов через дифракционную картину рентгеновских лучей.

В 2014 году международное научное сообщество отметило 100-летие кристаллографии [1].

Ещё в 1611 году немецкий математик и астроном Иоганн Кеплер, наблюдая симметричную форму снежинок, озадачился объяснением их внутренней структуры.

Лишь почти 200 лет спустя французский минералог Рене Джюст Гаюи вывел геометрический закон кристаллизации [2], из которого следовала периодичность кристаллической структуры. Закон Гаюи разрешал только 2-, 3-, 4- и 6-кратную симметрию вращения. На основе этих ограничений Мориц Франкенгейм (в 1826 году) и Иоганн Хессел (в 1830 году) пришли к выводу, что возможны 32 типа кристаллов.

Однако в 1850 году Август Бравэ на основе представлений Людвиг Зеебера (в 1824 году) и Габриэля Делафосса (в 1840 году) о кристалле как массиве точек получил только 14 возможных типов решёток [3].

Это противоречие разрешил Леонард Зонке, введя 65 пространственных групп в 1879 году. Через несколько лет русский учёный Евграф Степанович Федоров обобщил этот результат до 230 пространственных групп [4, 5]. Нужно ли было столько групп? Чья концепция правильнее? На эти вопросы удалось ответить только после экспериментальных исследований.

Открытие рентгеновских лучей Вильгельмом Конрадом Рентгеном в 1895, награждённым в 1901 году первой Нобелевской премией по физике, и эксперименты по дифракции рентгеновских лучей на кри-

сталлах, проведённые немецкими физиками М. Лауэ, В. Фридрихом и П. Книппингом в 1912 году, явились основополагающими событиями для развития такой области научных исследований, как кристаллография.

Не менее важным было открытие Уильяма Генри Брэгга и Уильяма Лоуренса Брэгга в 1913, что рентгеновские лучи могут быть использованы для определения положения атомов внутри кристалла и расшифровки его трёхмерной структуры [6–9]. Известное как закон Брэгга, это открытие в значительной степени способствовало современному развитию всех естественных наук, поскольку атомная структура определяет химические и биологические свойства материи, а кристаллическая структура – физические свойства вещества.

Макс фон Лауэ получил Нобелевскую премию по физике в 1914 году, а отец и сын Брэгги были удостоены этой премии в 1915 году. Разработанная ими теория получила название геометрической или кинематической теории.

Кинематическая теория рассеяния была впоследствии дополнена более правильными расчётами интенсивностей и атомных амплитуд с учётом влияния тепловых колебаний, определения фаз структурных амплитуд на основе аномальной дисперсии и других усовершенствований. Большой обзор по истории развития кристаллографии до 70-х годов имеется в монографии З.Г. Пинскера [10].

Характерной чертой кинематической теории является учёт взаимодействия каждого атома только с первичной волной в кристалле. При этом не учитывается многоволновое рассеяние, которое является актуальным при исследовании структуры белковых кристаллов. Также недостатком кинематической теории является пренебрежение законом сохранения энергии, так как энергия проходящей через кристалл первичной волны считается неизменной, хотя часть её сообщается рассеянными волнам.

Глубокий анализ явлений, протекающих при распространении рентгеновских волн в кристаллах, был

проведён Эвальдом. Основы динамической теории Эвальда изложены в книге Р. Джеймса [11]. В этой теории кристалл рассматривался как периодическая структура, состоящая из точечных резонаторов, или диполей. Теория Эвальда включала дисперсию падающей волны внутри кристалла и естественный переход к многоволновому рассеянию, что позволило предугадать аномальное прохождение в поглощающих кристаллах; симметричное и асимметричное отражения; отражение по Лауэ; а также основные интерференционные эффекты при рассеянии в идеальных кристаллах.

В конце двадцатых годов Бете по аналогии с динамической теорией рассеяния рентгеновских лучей Эвальда предложил динамическую теорию рассеяния электронов, что послужило открытию дифракции электронов в 1927 г. Аналогичный подход с ясным и кратким объяснением динамического рассеяния рентгеновских лучей рассмотрен в монографии В. Захариасена [12]. Последующие формы теории Эвальда получили широкое распространение [13].

Основные различия между кинематической и динамической теорией рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах можно свести к двум пунктам: 1) направления и угловая ширина дифрагированных пучков, 2) величины интегрального отражения.

Однако в результате множества экспериментальных исследований было показано [10] лишь небольшое отличие результатов, полученных в рамках динамической теории, от значений углов, предсказываемых кинематической теорией (порядка нескольких угловых секунд). Это привело к мысли о том, что динамическая теория имеет весьма узкую и специальную область применения. Что касается интенсивностей, значения которых различаются в некоторых случаях больше, чем на порядок величин, то и это различие не играет существенной роли, так как имеет место лишь для редчайших экземпляров кристаллов.

В период между 20-ми и 60-ми на основе рентгеновской кристаллографии удалось узнать многое о строении живых организмов, что имело очень важное значение для здравоохранения. Были выяснены структуры множества биологических молекул, включая холестерин, пенициллин, витамин В12 и инсулин. После первых исследований в 1962 году были определены кристаллические структуры 90 000 белков, нуклеиновых кислот и других биологических молекул. Одной из самых больших вех 20-го столетия было открытие структуры ДНК на основе дифракционных эффектов. Белковая кристаллография является основным инструментальным средством современных биологической и медицинских наук.

В послевоенный период были достигнуты большие успехи в технологии получения сверхчистых полупроводниковых материалов и в особенности в изготовлении довольно совершенных монокристаллов, таких как Ge, Si и GaAs. Большое практическое значение в квантовой электронике и радиотехнике также приобрели монокристаллы кварца и других веществ. Это послужило новым толчком к развитию методов

исследования подобных монокристаллов, в частности, в динамическом рассеянии рентгеновских лучей, как к одному из основных методов исследования и контроля степени совершенства кристаллов.

Важным этапом в разработке динамической теории было рассмотрение случая поглощающего кристалла и вывод формул для коэффициентов и интегральных величин отражения и прохождения. Одним из важнейших эффектов, наблюдаемых при динамическом рассеянии в идеальных кристаллах, является явление аномального прохождения в области максимума. Этот эффект был обнаружен чисто экспериментально и назван эффектом Бормана, по имени автора этих работ [14–16]. Фактически в работе М. Лауэ [17] эффект Бормана показан как очевидный вывод из динамической теории.

Аномальное прохождение рентгеновских лучей в толстом поглощающем кристалле имеет важное принципиальное и практическое значение. В основе динамической теории Эвальда–Лауэ лежит квазиклассическое уравнение Максвелла, решением которого является так называемая блоховская волна, которая в двухволновом приближении аппроксимируется двумя плоскими волнами. Эффект Бормана заключается в том, что для одного из полей поглощение резко возрастает, а для другого – резко снижается против нормального, что и приводит для этого поля к аномальному прохождению. Аномальное прохождение одного поля и поглощение другого отражаются в своеобразных формах максимумов прохождения при различных условиях эксперимента.

Интересный и важный класс явлений, обнаруженных сначала экспериментально [18–19], а впоследствии исследованных теоретически Эвальдом и другими авторами [20–22], относится к динамическому рассеянию с учётом нескольких взаимодействующих волн в кристалле. При этом наблюдается заметное изменение характера и величины эффектов аномального прохождения в поглощающих кристаллах.

Существенную роль в рассеянии рентгеновских лучей в кристаллах, в том числе и в динамическом рассеянии, играют тепловые движения атомов, а также диффузное рассеяние, частично также зависящее от тепловых колебаний [23–24].

Динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами начала разрабатываться с 60-х годов. По аналогии с геометрической оптикой было развито лучевое приближение теории Эвальда–Лауэ и были получены удовлетворительные результаты в построении динамической теории рассеяния в упруго-деформированных кристаллах [25–27]. Более общей и строгой является теория, основанная на уравнениях С. Такаги, выведенных из уравнений Максвелла, в которых волновое поле в кристалле зависит от двух переменных x и z , отвечающих плоскости, образованной векторами преломленной и дифрагированной волн [28–29]. Этот результат можно рассматривать, в частности, как доказательство эквивалентности двух форм динамической теории для иде-

ального кристалла: Эвальда–Лауэ и обобщённой. Вместе с тем эта последняя имеет по меньшей мере два существенных преимущества. Прежде всего, она непосредственно позволяет перейти от приближения плоской падающей волны к общему случаю падающего волнового пакета, возбуждающего в кристалле пространственно неоднородное волновое поле [30–31]. Схема построения обобщённой теории применительно к идеальному кристаллу изложена в обзоре [32].

В настоящее время увидеть строение веществ в наномасштабе можно средствами сканирующих туннельных или атомно-силовых микроскопов [33, 34]. Наномасштабные изображения позволяют изучать свойства наноматериалов на основе анализа их атомарной структуры [35]. Трёхмерная кристаллическая решётка является математической моделью, которая не только позволяет описать структуру любого кристаллического вещества, но и определяет его основные физико-химические свойства. Задача структурной идентификации кристаллических решёток по сей день остаётся одной из основных задач рентгеноструктурного анализа [36].

С точки зрения обрабатываемого образца могут быть идентифицированы два метода рентгеновской кристаллографии, а именно: 1) монокристаллической рентгеновской дифракции; 2) порошковой рентгеновской дифракции.

Метод монокристаллической дифракции использует относительно крупные кристаллы и даёт набор разрозненных данных, с помощью которых можно определить структуру. Тем не менее, большинство материалов, используемых в технической сфере, не могут использовать крупные кристаллы, так что приходится прибегать к методу порошковой дифракции с использованием материалов в форме очень небольших кристалликов. Обе технологии хорошо дополняют друг друга, имея свои сильные и слабые стороны и области применения.

Извлечение структурной информации из дифракционной картины представляет собой решение так называемой обратной задачи дифракции в особой постановке. Чтобы её решить, необходимо сначала в рамках той или иной структурной модели кристалла сформулировать прямую задачу дифракции и связать данные измерений с электронной плотностью и параметрами атомного теплового движения.

В данной работе дифракция рентгеновских лучей на идеальном кристалле рассмотрена в рамках скалярной волновой теории. На основе решения уравнения Гельмгольца получены асимптотические выражения, справедливые в случае облучения кристалла жёстким рентгеновским излучением. Данная работа является первой из серии планируемых публикаций, посвящённых анализу дифракции рентгеновских лучей в рамках электромагнитной теории.

1. Приближение однократного рассеяния

В рамках скалярной теории распространение излучения в декартовой системе координат описывается уравнением [33]:

$$\frac{\partial^2 W(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W(x, y, z)}{\partial z^2} +$$

$$+ k^2 \varepsilon(x, y, z) W(x, y, z) = 0,$$

$$\text{где } \varepsilon(x, y, z) = 1 + 4\pi\chi(x, y, z),$$

$\chi(x, y, z)$ – пропорциональна электронной плотности, мала по сравнению с единицей.

С учётом (2) перепишем (1), опустив координатную зависимость, в виде:

$$\nabla^2 W + k^2 W = -4\pi k^2 \chi W.$$

Решение (3) представим в виде суммы падающего и рассеянного поля

$$W = E_0 + E.$$

Падающее поле удовлетворяет однородному уравнению Гельмгольца

$$\nabla^2 E_0 + k^2 E_0 = 0,$$

а рассеянное поле удовлетворяет неоднородному уравнению Гельмгольца

$$\nabla^2 E + k^2 E = -4\pi k^2 \chi E_0.$$

Таким образом, вместо (4) получим уравнение

$$\nabla^2 E_0 + k^2 E_0 + \nabla^2 E + k^2 E = -4\pi k^2 \chi E_0.$$

Обозначим

$$\rho(x, y, z) = k^2 \chi(x, y, z) E_0(x, y, z),$$

тогда из (6) получаем:

$$\nabla^2 E + k^2 E = -4\pi \rho.$$

Решение (9) имеет вид:

$$E(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\xi, \eta, \sigma) \frac{\exp(ikR)}{R} d\xi d\eta d\sigma,$$

$$\text{где } R = \sqrt{(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2 + (z - \sigma)^2}.$$

1.1. Представление поля в дальней зоне

Пусть электронная плотность имеет вид

$$\rho(\xi, \eta, \sigma) = \sum_{n,m,l} \rho_{nml} \exp[i(n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{b}_1 + l\mathbf{c}_1)\mathbf{r}_c],$$

где $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \mathbf{c}_1$ – вектора обратной решётки кристалла, $\mathbf{r}_c = \xi\mathbf{e}_x + \eta\mathbf{e}_y + \sigma\mathbf{e}_z$ – вектор произвольной точки внутри кристалла.

Пусть плоская волна падает на структуру с распределением электронной плотности (12). Согласно принципу Гюйгенса–Френеля каждая точка электронного облака излучает сферическую волну с амплитудой, пропорциональной плотности электронного облака, и начальной фазой, равной фазе падающей плоской волны:

$$E(x, y, z) = \int_V \rho(\xi, \eta, \sigma) \times \exp[ik(\alpha_0 \xi + \beta_0 \eta + \gamma_0 \sigma)] \frac{\exp(ikR)}{R} d\xi d\eta d\sigma.$$

Интегрирование производится по всему объёму кристалла.

После известных преобразований выражение в дальней зоне приобретает следующий вид:

$$E(x, y, z) = \frac{\exp(ikR_0)}{R_0} \times \int_V \rho(\xi, \eta, \sigma) \exp(ik(\alpha_0\xi + \beta_0\eta + \gamma_0\sigma)) \times \exp((-ik/R_0)(x\xi + y\eta + z\sigma)) d\xi d\eta d\sigma, \quad (14)$$

где $R_0 = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

1.2. Представление решения в точках обратной решётки

Преобразуем выражение для амплитуды дифрагированного света в виде

$$E(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) = \frac{\exp(ikR_0)}{R_0} \int_V \rho(\xi, \eta, \sigma) \times \exp\{-ik[(\alpha - \alpha_0)\xi + (\beta - \beta_0)\eta + (\gamma - \gamma_0)\sigma]\} d\xi d\eta d\sigma, \quad (15)$$

где $(\alpha, \beta, \gamma) = \left(\frac{x}{R_0}, \frac{y}{R_0}, \frac{z}{R_0}\right)$.

Из (15) очевидно, что амплитуда есть Фурье-преобразование от плотности электронного облака в рассматриваемой системе

$$E(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) = \frac{\exp(ikR_0)}{R_0} \times \int_V \rho(\xi, \eta, \sigma) \exp(-ik(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) \mathbf{r}_e) d\xi d\eta d\sigma. \quad (16)$$

Интегрирование по всему объёму кристалла заменим интегрированием по элементарной ячейке V_e :

$$\mathbf{r}_e = \mathbf{r}_e + n\mathbf{a} + m\mathbf{b} + l\mathbf{c}, \quad (17)$$

где $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ – вектора кристаллической решётки.

$$E(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) = \frac{\exp(ikR_0)}{R_0} \sum_{n,m,l} \int_{V_e} \rho(\xi, \eta, \sigma) \times \exp[-ik(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0)(\mathbf{r}_e + n\mathbf{a} + m\mathbf{b} + l\mathbf{c})] d\xi d\eta d\sigma. \quad (18)$$

Пусть теперь точки наблюдения находятся в точках обратной решётки

$$\mathbf{a} - \mathbf{a}_0 = p\mathbf{a}_1 + s\mathbf{b}_1 + q\mathbf{c}_1. \quad (19)$$

Амплитуда рассеянного сигнала в точках (19) будет равна:

$$E_{psq} = \frac{\exp(ikR_0)}{R_0} \left(\sum_{n,m,l} 1\right) \times \int_{V_e} \rho(\xi, \eta, \sigma) \exp[-ik(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) \mathbf{r}_e] d\xi d\eta d\sigma = \frac{\exp(ikR_0)}{R_0} \left(\sum_{n,m,l} 1\right) \int_{V_e} \rho(\xi, \eta, \sigma) \times \exp[-ik(p\mathbf{a}_1 + s\mathbf{b}_1 + q\mathbf{c}_1) \mathbf{r}_e] d\xi d\eta d\sigma. \quad (20)$$

Выражение $(\sum_{n,m,l} 1)$ означает, что интенсивность пропорциональна количеству элементарных ячеек. Анализируя выражение (20), видим, что амплитуда рассеянного сигнала в определённой точке обратной решётки есть соответствующий коэффициент в разложении ряда Фурье электронной плотности.

2. Приближение многократного рассеяния

В рамках многократного рассеяния дифракция рентгеновских лучей также описывается уравнением Гельмгольца (1). Запишем его в декартовой системе координат (x^1, x^2, x^3) :

$$\frac{\partial^2 W(x^1, x^2, x^3)}{\partial (x^1)^2} + \frac{\partial^2 W(x^1, x^2, x^3)}{\partial (x^2)^2} + \frac{\partial^2 W(x^1, x^2, x^3)}{\partial (x^3)^2} + k^2 \varepsilon(x^1, x^2, x^3) W(x^1, x^2, x^3) = 0. \quad (21)$$

$$+ k^2 \varepsilon(x^1, x^2, x^3) W(x^1, x^2, x^3) = 0.$$

В пространственно-частотном представлении:

$$W(x^1, x^2, x^3) = \int_{-\infty}^{\infty} E(\alpha_1, \alpha_2, x^3) \times \exp(ik(\alpha_1 x^1 + \alpha_2 x^2)) d\alpha_1 d\alpha_2, \quad (22)$$

$$\varepsilon(x^1, x^2, x^3) = \int_{-\infty}^{\infty} e(\alpha_1, \alpha_2, x^3) \times \exp(ik(\alpha_1 x^1 + \alpha_2 x^2)) d\alpha_1 d\alpha_2. \quad (23)$$

Подставляя эти выражения, получаем уравнение (21) в пространственно-частотном представлении:

$$-k^2((\alpha_1)^2 + (\alpha_2)^2) E(\alpha_1, \alpha_2, x^3) + \frac{\partial^2 E(\alpha_1, \alpha_2, x^3)}{\partial (x^3)^2} + k^2 \int_{-\infty}^{\infty} e(\alpha_1 - \omega_1, \alpha_2 - \omega_2, x^3) \times E(\omega_1, \omega_2, x^3) d\omega_1 d\omega_2 = 0. \quad (24)$$

Рассмотрим частный случай кристаллического тела. В случае монокристалла диэлектрическая проницаемость представляется следующим образом

$$\varepsilon(x^1, x^2, x^3) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3} \exp[i(n_1 \mathbf{B}_1 + n_2 \mathbf{B}_2 + n_3 \mathbf{B}_3) \mathbf{R}], \quad (25)$$

где $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \mathbf{B}_3$ – вектора обратной решётки в произвольной системе координат,

$$\mathbf{R} = x^1 \mathbf{e}_1 + x^2 \mathbf{e}_2 + x^3 \mathbf{e}_3. \quad (26)$$

Поперечные вектора в ортогональной декартовой системе имеют вид:

$$\mathbf{r} = (R_1, R_2, 0), \quad \mathbf{b}_i = (b_{i1}, b_{i2}, 0), \quad \mathbf{a} = (\alpha_1, \alpha_2, 0).$$

Представим выражение для диэлектрической проницаемости в виде:

$$\varepsilon(x^1, x^2, x^3) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3} (x^3) \exp[i(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3) \mathbf{r}], \quad (27)$$

где

$$\varepsilon^{n_1 n_2 n_3} (x^3) = \varepsilon^{n_1 n_2 n_3} \exp[i(n_1 b_{13} + n_2 b_{23} + n_3 b_{33}) x^3]. \quad (28)$$

Из (23) и (27) с точностью до коэффициента имеем:

$$\begin{aligned}
 e(\alpha_1, \alpha_2, x^3) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(x^1, x^2, x^3) \times \\
 &\times \exp[-ik(\alpha_1 x^1 + \alpha_2 x^2)] dx^1 dx^2 = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3}(x^3) \exp[i(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3) \mathbf{r}] \times \\
 &\times \exp[-ik(\alpha_1 x^1 + \alpha_2 x^2)] dx^1 dx^2 = \\
 &= \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3}(x^3) \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ik \left(n_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + n_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + n_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} - \mathbf{a} \right) \mathbf{r} \right] d\mathbf{r}.
 \end{aligned}$$

Из вышеприведённых выкладок следует, что

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} e(\alpha_1 - \omega_1, \alpha_2 - \omega_2, x^3) E(\omega_1, \omega_2, x^3) d\omega &= \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3}(x^3) \delta \left[\mathbf{a} - \omega - \left(n_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + n_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + n_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right) \right] \sum_{m_1, m_2, m_3} E^{m_1 m_2 m_3}(x^3) \delta \left[\omega - \left(\mathbf{a}_0 + m_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + m_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + m_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right) \right] d\omega = \\
 &= \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3}(x^3) \sum_{m_1, m_2, m_3} E^{m_1 m_2 m_3}(x^3) \delta \left[\mathbf{a} - \left(n_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + n_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + n_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right) - \left(\mathbf{a}_0 + m_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + m_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + m_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right) \right] = \\
 &= \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{n_1, n_2, n_3} E^{m_1 m_2 m_3}(x^3) \varepsilon^{n_1 n_2 n_3} \exp\left[i(n_1 b_{13} + n_2 b_{23} + n_3 b_{33}) x^3 \right] \delta \left\{ \mathbf{a} - \left[\mathbf{a}_0 + (m_1 + n_1) \frac{\mathbf{b}_1}{k} + (m_2 + n_2) \frac{\mathbf{b}_2}{k} + (m_3 + n_3) \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right] \right\} = \\
 &= \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{p_1, p_2, p_3} E^{m_1 m_2 m_3}(x^3) \varepsilon^{p_1 - m_1, p_2 - m_2, p_3 - m_3} \times \\
 &\times \exp\left\{ i \left[(p_1 - m_1) b_{13} + (p_2 - m_2) b_{23} + (p_3 - m_3) b_{33} \right] x^3 \right\} \delta \left\{ \mathbf{a} - \left[\mathbf{a}_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Подставляя выражение для поля и диэлектрической проницаемости в пространственно-частотном представлении в интегральное уравнение, получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для $E^{p_1, p_2, p_3}(x^3)$:

$$\begin{aligned}
 -k^2 \left(\mathbf{a}_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right)^2 \times \\
 \times E^{p_1, p_2, p_3}(x^3) + \frac{d^2 E^{p_1, p_2, p_3}(x^3)}{d(x^3)^2} + \\
 + k^2 \sum_m \varepsilon^{p_1 - m_1, p_2 - m_2, p_3 - m_3}(x^3) E^{m_1, m_2, m_3}(x^3) = 0.
 \end{aligned} \tag{31}$$

Выражение (31) можно переписать в более компактном виде:

$$\frac{d^2 E^{p_1, p_2, p_3}}{d(x^3)^2} + k^2 H_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} E^{m_1 m_2 m_3} = 0, \tag{32}$$

где

$$\begin{aligned}
 H_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} &= \varepsilon^{p_1 - m_1, p_2 - m_2, p_3 - m_3} \exp\left\{ i \left[(p_1 - m_1) b_{13} + \right. \right. \\
 &+ \left. (p_2 - m_2) b_{23} + (p_3 - m_3) b_{33} \right] x^3 \left. \right\} - \\
 &- \delta_{m_1}^{p_1} \delta_{m_2}^{p_2} \delta_{m_3}^{p_3} \left[\mathbf{a}_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right]^2 = \\
 &= \delta_{m_1}^{p_1} \delta_{m_2}^{p_2} \delta_{m_3}^{p_3} \left\{ 1 - \left[\mathbf{a}_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right]^2 \right\} + \\
 &+ 4\pi \chi^{p_1 - m_1, p_2 - m_2, p_3 - m_3} \times \exp\left\{ i \left[(p_1 - m_1) b_{13} + \right. \right. \\
 &+ \left. (p_2 - m_2) b_{23} + (p_3 - m_3) b_{33} \right] x^3 \left. \right\}.
 \end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
 e(\alpha_1, \alpha_2, x^3) &= \frac{k^2}{4\pi^2} \times \\
 &\times \sum_{n_1, n_2, n_3} \varepsilon^{n_1 n_2 n_3}(x^3) \delta \left[\mathbf{a} - \left(n_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + n_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + n_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{29}$$

Пусть поле в пространственно-частотном представлении имеет вид

$$\begin{aligned}
 E(\omega_1, \omega_2, x^3) &= \sum_{m_1, m_2, m_3} E^{m_1 m_2 m_3}(x^3) \times \\
 &\times \delta \left[\omega - \left(\mathbf{a}_0 + m_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + m_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + m_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{30}$$

Тогда интегральное слагаемое в (24) можно записать в виде:

3. Теория возмущений для решения системы уравнений

Матрицу (32) системы дифференциальных уравнений можно представить в виде

$$H_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} = I_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} + 4\pi \Delta_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3}. \tag{34}$$

Пусть теперь поле внутри кристаллической решётки представляется в виде суммы падающего поля и поля, рассеянного кристаллической решёткой:

$$E^{p_1 p_2 p_3} = E_0^{p_1 p_2 p_3} + E_s^{p_1 p_2 p_3}. \tag{35}$$

Подставляя это представление для поля в систему дифференциальных уравнений (32), получаем:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \left(E_0^{p_1 p_2 p_3} + E_s^{p_1 p_2 p_3} \right)}{d(x^3)^2} + \\
 + k^2 \left(I_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} + 4\pi \Delta_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} \right) \left(E_0^{m_1 m_2 m_3} + E_s^{m_1 m_2 m_3} \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{36}$$

После раскрытия скобок и пренебрегая слагаемым $4\pi k^2 \Delta_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} E_s^{m_1 m_2 m_3}$, получим:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 E_0^{p_1 p_2 p_3}}{d(x^3)^2} + \frac{d^2 E_s^{p_1 p_2 p_3}}{d(x^3)^2} + k^2 I_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} E_0^{m_1 m_2 m_3} + \\
 + k^2 I_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} E_s^{m_1 m_2 m_3} + 4\pi k^2 \Delta_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} E_0^{m_1 m_2 m_3} = 0.
 \end{aligned} \tag{37}$$

Полагая, что диэлектрическая проницаемость приблизительно равна единице, и учитывая малость амплитуды рассеянной волны по сравнению с падающей, запишем отдельно для каждой составляющей поля:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{d^2 E_0^{p_1 p_2 p_3}}{d(x^3)^2} + k^2 \left(1 - \left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right)^2 \right) \times \\ & \times E_0^{p_1 p_2 p_3} = 0, \\ & \frac{d^2 E_s^{p_1 p_2 p_3}}{d(x^3)^2} + k^2 \left(1 - \left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right)^2 \right) \times \\ & \times E_s^{p_1 p_2 p_3} = -4\pi k^2 \Delta_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} E_0^{m_1 m_2 m_3}, \end{aligned} \right. \quad (38)$$

где

$$\Delta_{m_1 m_2 m_3}^{p_1 p_2 p_3} = \chi^{p_1 - m_1, p_2 - m_2, p_3 - m_3} \times \exp\{i[(p_1 - m_1)b_{13} + (p_2 - m_2)b_{23} + (p_3 - m_3)b_{33}]\} x^3.$$

Решение первого уравнения в (37) имеет вид:

$$E_0^{p_1 p_2 p_3} = A_0^{p_1 p_2 p_3} \times \exp\left\{ik\sqrt{1 - \left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k}\right)^2} x^3\right\}. \quad (39)$$

В случае, если падает плоская волна, то

$$E_0^{000} = \delta_0^{p_1} \delta_0^{p_2} \delta_0^{p_3} \times \left\{ A_0^{+p_1 p_2 p_3} \exp\left\{ik\sqrt{1 - \left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k}\right)^2} x^3\right\} + A_0^{-p_1 p_2 p_3} \exp\left\{-ik\left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k}\right)^2 x^3\right\} \right\} = A_0^+ \exp\left\{ik\sqrt{1 - (\alpha_0)^2} x^3\right\} + A_0^- \exp\left\{-ik\sqrt{1 - (\alpha_0)^2} x^3\right\}.$$

Тогда уравнение для рассеянной волны имеет вид:

$$\frac{d^2 E_s^{p_1 p_2 p_3}}{d(x^3)^2} + k^2 \left(1 - \left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right)^2 \right) \times E_s^{p_1 p_2 p_3} = -4\pi k^2 \Delta_{000}^{p_1 p_2 p_3} E_0^{000}. \quad (40)$$

Для того, чтобы в выбранном направлении происходило усиление волн, необходимо выполнение условия:

$$\left[\alpha_{03} + (p_1 b_{13} + p_2 b_{23} + p_3 b_{33}) \right]^2 = 1 - \left(\alpha_0 + p_1 \frac{\mathbf{b}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{b}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{b}_3}{k} \right)^2, \quad (41)$$

из которого можно получить окончательное условие:

$$\left(\alpha_0 + \left(p_1 \frac{\mathbf{B}_1}{k} + p_2 \frac{\mathbf{B}_2}{k} + p_3 \frac{\mathbf{B}_3}{k} \right) \right)^2 = 1. \quad (42)$$

Это уравнение представляет собой известное в кристаллографии уравнение Лауэ, которое определяет направление на максимумы дифракционной картины. В данном разделе это уравнение было получено на основе решения уравнения Гельмгольца, что не является классическим подходом. Разработанный метод ориентирован на использование высокопроизводительных вычислительных средств.

4. Моделирование дифракции для базовых типов кристаллических решёток

При рентгенографических методах исследования строения твёрдых тел применяется жёсткое рентгеновское излучение с длинами волн от 0,2 Å до 2,5 Å. Для анализа монокристаллов, как правило, используют излучения с непрерывным спектром.

В данном разделе рассмотрено моделирование дифракции рентгеновского излучения на монокристаллах с базовыми типами решёток (рис. 1) при различных соотношениях длины волны излучения и расстояниями между атомами (размеры рёбер решёток).

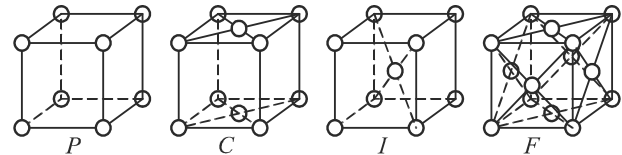


Рис. 1. Типы решёток: примитивная (P), базоцентрированная (C), объёмноцентрированная (I), гранецентрированная (F)

Для примитивной решётки в декартовой системе координат: вектора равны $\mathbf{a} = (1, 0, 0)$, $\mathbf{b} = (0, 1, 0)$, $\mathbf{c} = (0, 0, 1)$, вектора обратной решётки равны $\mathbf{a}_1 = (1, 0, 0)$, $\mathbf{b}_1 = (0, 1, 0)$, $\mathbf{c}_1 = (0, 0, 1)$.

Для объёмноцентрированной решётки вектора равны $\mathbf{a} = (1, 1, 0)$, $\mathbf{b} = (0, 1, 1)$, $\mathbf{c} = (1, 0, 1)$, вектора обратной решётки равны $\mathbf{a}_1 = (1, 1, -1)$, $\mathbf{b}_1 = (-1, 1, 1)$, $\mathbf{c}_1 = (1, -1, 1)$.

Для гранецентрированной решётки вектора равны $\mathbf{a} = (1, 1, -1)$, $\mathbf{b} = (-1, 1, 1)$, $\mathbf{c} = (1, -1, 1)$, вектора обратной решётки равны: $\mathbf{a}_1 = (1, 1, 0)$, $\mathbf{b}_1 = (0, 1, 1)$, $\mathbf{c}_1 = (1, 0, 1)$.

Моделирование выполнялось для плоской волны, распространяющейся вдоль оси Z, с диапазоном приведённых длин волн $\zeta \in [\lambda_{\min}/a, \lambda_{\max}/a]$, где a – расстояние между узлами кристаллической решётки.

На рис. 2 показаны результаты моделирования для рассматриваемых трёх типов решёток для $\chi \in [0,2, 0,25]$. В первом столбце приведены картины распределения возможных максимумов, вычисленных из условия Лауэ (42), а во втором столбце – с уменьшенным в 10 раз диапазоном приведённых длин волн. Картины представляют собой плоские проекции с полусферы единичных направлений с максимальным углом θ_{\max} с осью z, близким к 90 градусам.

Как видно из приведённых на рис. 2 результатов, картина дифракции существенно зависит от структуры элементарной ячейки кристалла. Сужение диапазона длин позволяет выделять только определённые дифракционные порядки из возможного набора максимумов.

В табл. 1 приведены результаты моделирования для рассматриваемых трёх типов решёток с различными диапазонами приведённых длин волн.

Как видно из результатов расчётов, увеличение относительной длины волны рентгеновского излучения приводит к увеличению радиуса концентрации дифракционных порядков на полусфере регистрации. Если длина волны слишком мала по сравнению с расстояниями между атомами, то картина дифракции становится очень сложной. Поэтому оптимальным для анализа считается излучение, длины волн которого составляют от единиц до десятых долей межатомных расстояний.

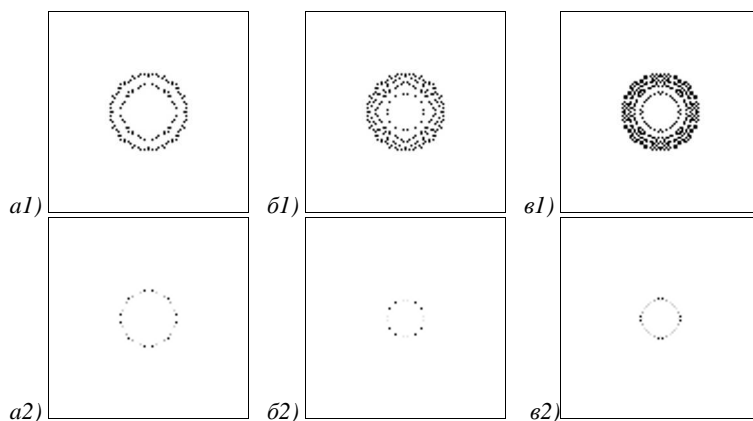


Рис. 2. Результаты моделирования для примитивной (а), объёмноцентрированной (б) и гранецентрированной (в) решёток для $\chi \in [0, 2, 0, 25]$: картины распределения максимумов Лауэ (42) (первая строка) и с уменьшенным диапазоном длин волн (вторая строка)

Табл. 1. Моделирование для примитивной, объёмноцентрированной и гранецентрированной решёток для различных диапазонов длин волн (картины распределения дифракционных порядков)

Диапазоны приведённых длин волн и область обзора	Примитивная	Объёмноцентрированная	Гранецентрированная
$\zeta \in [0,9, 1,1],$ $\sin \theta_{\max} = 0,999$			
$\zeta \in [0,5, 0,55],$ $\sin \theta_{\max} = 0,999$			
$\zeta \in [0,05, 0,0503],$ $\sin \theta_{\max} = 0,2$			
$\zeta \in [0,05, 0,0503],$ $\sin \theta_{\max} = 0,4$			

Заключение

В данной работе приведён обзор основных исторических экспериментальных и теоретических разработок в области рентгеноструктурного анализа, позволяющий получить представление о перспективных направлениях дальнейшего развития.

В основной части рассмотрен дифференциальный подход решения задачи дифракции рентгеновских лучей в рамках скалярной теории. На основе этого

подхода были получены классические формулы Лауэ, используемые в рентгеноструктурном анализе кристаллов. В дальнейшем разработанный подход можно применить для получения приближённых решений задачи дифракции. Разработанный метод ориентирован на использование высокопроизводительных вычислительных средств.

Примеры численного моделирования для базовых типов кристаллических решёток иллюстрируют раз-

личие в дифракционных картинах и позволяют понять стратегию выбора диапазона длин волн рентгеновского излучения.

Приложения

А. Вычисление коэффициентов ряда Фурье

Пусть электронная плотность имеет вид

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \rho^{nm} \exp(i(n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{b}_1 + l\mathbf{c}_1)\mathbf{r}). \quad (A1)$$

Для того, чтобы найти коэффициенты этого ряда, умножим это выражение на $\exp(-i(p\mathbf{a}_1 + s\mathbf{b}_1 + q\mathbf{c}_1)\mathbf{r})$ и проинтегрируем по объёму элементарной ячейки:

$$\int_{V_E} \rho(\mathbf{r}) \exp(-i(p\mathbf{a}_1 + s\mathbf{b}_1 + q\mathbf{c}_1)\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \sum \rho^{nm} \int_{V_E} \exp[i((n-p)\mathbf{a}_1 + (m-s)\mathbf{b}_1 + (l-q)\mathbf{c}_1)\mathbf{r}] d^3\mathbf{r}. \quad (A2)$$

Далее, вычисляя интеграл

$$\int_{V_E} \exp[i((n-p)\mathbf{a}_1 + (m-s)\mathbf{b}_1 + (l-q)\mathbf{c}_1)\mathbf{r}] d^3\mathbf{r} = V_E \delta_n^p \delta_m^s \delta_l^q, \quad (A3)$$

получаем:

$$\rho^{psq} = \frac{1}{V_E} \int_{V_E} \rho(\mathbf{r}) \exp(-i(p\mathbf{a}_1 + s\mathbf{b}_1 + q\mathbf{c}_1)\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (A4)$$

Б. Решение дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами

Пусть дано дифференциальное уравнение

$$a \frac{d^2 y}{dx^2} + b \frac{dy}{dx} + cy = f(x). \quad (B1)$$

Представим решение в виде

$$y(x) = c_1(x)y_1(x) + c_2(x)y_2(x), \quad (B2)$$

где $y_1(x), y_2(x)$ – решения однородного уравнения. После подстановки выражения (B2) в (B1) и преобразования получим:

$$a \left(\frac{d^2 c_1}{dx^2} y_1 + 2 \frac{dc_1}{dx} \frac{dy_1}{dx} + \frac{d^2 c_2}{dx^2} y_2 + 2 \frac{dc_2}{dx} \frac{dy_2}{dx} \right) + b \left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) + c_1 \left(a \frac{d^2 y_1}{dx^2} + b \frac{dy_1}{dx} + cy_1 \right) + c_2 \left(a \frac{d^2 y_2}{dx^2} + b \frac{dy_2}{dx} + cy_2 \right) = f(x). \quad (B3)$$

Учитывая, что

$$a \frac{d^2 y_i}{dx^2} + b \frac{dy_i}{dx} + cy_i = 0, \quad (B4)$$

выражение (B3) можно упростить

$$a \left(\frac{d^2 c_1}{dx^2} y_1 + 2 \frac{dc_1}{dx} \frac{dy_1}{dx} + \frac{d^2 c_2}{dx^2} y_2 + 2 \frac{dc_2}{dx} \frac{dy_2}{dx} \right) + b \left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) = f(x). \quad (B5)$$

Представим уравнение (B5) в виде

$$a \left[\left(\frac{d^2 c_1}{dx^2} y_1 + \frac{dc_1}{dx} \frac{dy_1}{dx} + \frac{d^2 c_2}{dx^2} y_2 + \frac{dc_2}{dx} \frac{dy_2}{dx} \right) + \left(\frac{dc_1}{dx} \frac{dy_1}{dx} + \frac{dc_2}{dx} \frac{dy_2}{dx} \right) \right] + b \left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) = f(x), \quad (B6)$$

$$+ b \left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) = f(x),$$

$$a \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) + \left(\frac{dc_1}{dx} \frac{dy_1}{dx} + \frac{dc_2}{dx} \frac{dy_2}{dx} \right) \right] + b \left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) = f(x). \quad (B7)$$

Пусть теперь функции $c_1(x), c_2(x)$ удовлетворяют уравнению

$$\left(\frac{dc_1}{dx} y_1 + \frac{dc_2}{dx} y_2 \right) = 0. \quad (B8)$$

Тогда исходное уравнение (B1) сводится к следующему:

$$a \left(\frac{dc_1}{dx} \frac{dy_1}{dx} + \frac{dc_2}{dx} \frac{dy_2}{dx} \right) = f(x). \quad (B9)$$

Тогда для определения функций получим систему уравнений

$$\begin{cases} y_1 \frac{dc_1}{dx} + y_2 \frac{dc_2}{dx} = 0, \\ \frac{dy_1}{dx} \frac{dc_1}{dx} + \frac{dy_2}{dx} \frac{dc_2}{dx} = \frac{f(x)}{a}, \end{cases} \quad (B10)$$

которую запишем в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} y_1 & y_2 \\ \frac{dy_1}{dx} & \frac{dy_2}{dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dc_1}{dx} \\ \frac{dc_2}{dx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{f(x)}{a} \end{pmatrix}. \quad (B11)$$

Систему (B10) решаем методом Крамера

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 0 & y_2 \\ \frac{f(x)}{a} & \frac{dy_2}{dx} \end{vmatrix} = -\frac{y_2 f(x)}{a}, \quad (B12)$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} y_1 & 0 \\ \frac{dy_1}{dx} & \frac{f(x)}{a} \end{vmatrix} = \frac{y_1 f(x)}{a}.$$

В результате получаем

$$\frac{dc_1}{dx} = \frac{-y_2 f(x)}{a \Delta(x)}, \quad (B13)$$

$$\frac{dc_2}{dx} = \frac{y_1 f(x)}{a \Delta(x)},$$

где $\Delta(x) = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ \frac{dy_1}{dx} & \frac{dy_2}{dx} \end{vmatrix} = y_1 \frac{dy_2}{dx} - y_2 \frac{dy_1}{dx}.$

Общее решение имеет вид

$$y(x) = \left(a_1 + \int_0^x \frac{-y_2(t)f(t)dt}{a\Delta(t)} \right) y_1(x) + \left(a_2 + \int_0^x \frac{y_1(t)f(t)dt}{a\Delta(t)} \right) y_2(x). \quad (\text{B14})$$

Пример

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \omega^2 y = f(x). \quad (\text{B15})$$

В этом случае

$$\begin{cases} y_1(x) = \exp(i\omega x), \\ y_2(x) = \exp(-i\omega x). \end{cases} \quad (\text{B16})$$

Общее решение имеет вид

$$y(x) = \frac{1}{-2i\omega} \times \left[\left(a_1 + \int_0^x \exp(-i\omega(t-x)) f(t) dt \right) + \left(a_2 + \int_0^x \exp(i\omega(t-x)) f(t) dt \right) \right]. \quad (\text{B17})$$

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации.

Литература

- Nature Milestones in Crystallography [Электронный ресурс]. – 2014. – URL: <http://www.nature.com/milestones/milecrystal/index.html> (дата обращения 06.08.2014).
- Найю, Р.Д.** Essai d'une Théorie sur la Structure des Crystaux // Gougué et Née de La Rochelle, 1784.
- Бравais, А.** Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace / A. Bravais // Journal de l'École Polytechnique. – 1850. – Vol. 19. – P. 1.
- Фёдоров, Е.С.** Начала учения о фигурах / Е.С. Фёдоров. – СПб.: Типография Императорской Академии наук, 1885. – 279 с.
- Фёдоров, Е.С.** Симметрия правильных систем фигур / Е.С. Фёдоров. – Записки имп. СПб. минералогического общества, 2-я сер., 1891. – С. 1-146.
- Bragg, W.L.** The specular reflection of X-rays / W.L. Bragg // Nature. – 1912. – Vol. 90. – P. 410.
- Bragg, W.L.** The structure of crystals as indicated by their diffraction of X-rays / W.L. Bragg // Proceedings of the Royal Society of London A. – 1913. – Vol. 89. – P. 248-277.
- Bragg, W.H.** The structure of the diamond / W.H. Bragg, W.L. Bragg // Nature. – 1913. – Vol. 91. – P. 557.
- Bragg, W.H.** The X-ray spectrometer / W.H. Bragg, W.L. Bragg // Nature. – 1914. – Vol. 94. – P. 199-200.
- Пинскер, З.Г.** Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. – М.: Наука, 1974.
- Джеймс, Р.** Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей / Р. Джеймс; пер. с англ.; под ред. В.И. Ивероновой. – М.: Издательство иностранной литературы, 1950.
- Zachariasen, W.H.** Theory of X-ray Diffraction in Crystals / W.H. Zachariasen. – Mineola, N.Y.: Dover, 2004.
- James, R.W.** The Dynamical Theory of X-Ray Diffraction / R.W. James // Solid State Physics. – 1963. – Vol. 15. – P. 53-220.
- Borrmann, G.** Über Extinktionsdiagramme der Röntgenstrahlen von Quarz / G. Borrmann // Zeitschrift für Physik. – 1941. – Vol. 42. – P. 157-162.
- Borrmann, G.** Die Absorption von Röntgenstrahlen in Fall der Interferenz / G. Borrmann // Zeitschrift für Physik. – 1950. – Vol. 127. – P. 297-323.
- Borrmann, G.** Der kleinste Absorptionskoeffizient interferierender Röntgenstrahlung / G. Borrmann // Zeitschrift für Kristallographie. – 1954. – Vol. 106. – P. 109-121.
- Laue, M.** Die Absorption der Röntgenstrahlen in Kristallen im Interferenzfall / M. Laue // Acta Crystallographica. – 1949. – Vol. 2. – P. 106-113.
- Renninger, M.** Verstärkung schwacher und Vortäuschung verbotener Röntgenreflexe durch „Umweganregung“ / M. Renninger // Naturwissenschaften. – 1937. – Vol. 25, Issue 3. – P. 43. – DOI: 10.1007/BF01492117.
- Borrmann, G.** Die Absorption der Röntgenstrahlen im Dreistrahlfall der Interferenz / G. Borrmann, W. Hartwig // Zeitschrift für Kristallographie. – 1965. – Vol. 121. – P. 401-409.
- Ewald, P.P.** X-ray diffraction in the case of three strong rays. I. Crystal composed of non-absorbing point atoms / P.P. Ewald, Y. Héno // Acta Crystallographica Section A. – 1968. – Vol. 24, Issue 1. – P. 5-15. – DOI: 10.1107/S0567739468000033.
- Héno, Y.** Diffraction des rayons X dans le cas de trois rayons forts. II. Influence de l'absorption et du facteur de diffusion atomique / Y. Héno, P.P. Ewald // Acta Crystallographica Section A. – 1968. – Vol. 24, Issue 1. – P. 16-42. – DOI: 10.1107/S0567739468000045.
- Hildebrandt, G.** Röntgenwellenfelder in einem Dreistrahlfall / G. Hildebrandt // Physica Status Solidi (b). – 1967. – Vol. 24, Issue 1. – P. 245-261.
- Afanasiev, A.M.** The Role of Lattice Vibration in Dynamical Theory of X-Rays / A.M. Afanasiev, Yu. Kagan // Acta Crystallographica. – 1968. – Vol. A24, Issue 2. – P. 163-170.
- Вустер, У.А.** Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах / У.А. Вустер; пер. с англ. – М.: Издательство иностранной литературы, 1963. – 287 с.
- Penning, P.** Anomalous transmission of X-rays in elastically deformed crystals / P. Penning, D. Polder // Philips Research Reports. – 1961. – Vol. 16. – P. 419-440.
- Kato, N.** Pendellösung fringes in distorted crystals. I. Fermat's principle for Bloch waves / N. Kato // Journal of the Physical Society of Japan. – 1963. – Vol. 18. – P. 1785-1791.
- Kato, N.** Pendellösung fringes in distorted crystals iii. application to homogeneously bent crystals / N. Kato // Journal of the Physical Society of Japan. – 1964. – Vol. 19(67). – P. 971-985.
- Takagi, S.** Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion / S. Takagi // Acta Crystallographica. – 1962. – Vol. 15. – P. 1311-1312.
- Takagi, S.** A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal / S. Takagi // Journal of the Physical Society of Japan. – 1969. – Vol. 26. – P. 1239-1253.
- Слободецкий, И.Ш.** Дифракция рентгеновских лучей в условиях пространственно-неоднородной динамической задачи / И.Ш. Слободецкий, Ф.Н. Чуковский, В.Л. Инденбом // Письма в ЖЭТФ. – 1968. – Т. 8, № 2. – С. 90-94.
- Authier, A.** Application de la théorie dynamique de S. Takagi au contraste d'un défaut plan en topographie par rayons X. I. Faute d'empilement / A. Authier, D. Simon // Acta Crystallographica. – 1968. – Vol. A24. – P. 517-526.
- Инденбом, В.Л.** Проблема изображения в рентгеновской оптике / В.Л. Инденбом, Ф.Н. Чуковский. – Препринт. Ин-т кристаллографии АН СССР. – М.: 1971. – 47 с.
- Landau, J.** Visualizing Nanotechnology: The Impact of Visual Images on Lay American Audience Associations with Nanotechnology / J. Landau, C.R. Groscurth, L. Wright, C.M. Condit // Public Understanding of Science. – 2009. – Vol. 18(3). – P. 325-337.
- Milburn, C.** Nanovision: Engineering the Future / C. Milburn // Durham: Duke University Press, 2008.
- Сойфер, В.А.** Анализ и распознавание наномасштабных изображений: Традиционные подходы и новые постановки задач / В.А. Сойфер, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 136-144.
- Куприянов, А.В.** О наблюдаемости кристаллических решёток по изображениям их проекций / А.В. Куприянов, В.А. Сойфер // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 2. – С. 249-256.

37. Борн, М. Основы оптики. Изд. 2-е. Перевод с английского / М. Борн, Э. Вольф. – М.: Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1973. – 713 с.

References

- [1] Nature Milestones in Crystallography. Source: (<http://www.nature.com/milestones/milecrystal/index.html>).
- [2] Haüy RJ. Essai d'une Théorie sur la Structure des Crystaux. Goué et Née de La Rochelle, 1784.
- [3] Bravais A. Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace. J l'École Polytechnique 1850 ; 19 : 1.
- [4] Fedorov ES. The elements of the study of configurations (in Russian). Trans Mineral Soc 1885; 21: 240.
- [5] Fedorov ES. The symmetry of real systems of configurations (in Russian). Trans Mineral Soc Vol. 1891; 28: 1-146.
- [6] Bragg WL. The specular reflection of X-rays. Nature 1912; 90: 410.
- [7] Bragg WL. The structure of crystals as indicated by their diffraction of X-rays. Proc Royal Soc Lond A 1913; 89: 248-77.
- [8] Bragg WH, Bragg WL. The structure of the diamond. Nature 1913; 91: 557.
- [9] Bragg WH, Bragg WL. The X-ray spectrometer. Nature 1914; 94: 199-200.
- [10] Pinsker ZG. Dynamic X-ray scattering in perfect crystals (in Russian). Moscow: "Nauka" Publisher, 1974.
- [11] James RW. The optical principles of the diffraction of x-rays. London: G. Bell & Sons, 1948.
- [12] Zachariasen WH. Theory of X-ray Diffraction in Crystals. Mineola, N.Y.: Dover, 2004.
- [13] James RW. The Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Solid State Physics 1963; 15: 53-220.
- [14] Borrmann G. Über Extinktionsdiagramme der Röntgenstrahlen von Quarz. Zeitschrift für Physik 1941; 42: 157-62.
- [15] Borrmann G. Die Absorption von Röntgenstrahlen in Fall der Interferenz. Zeitschrift für Physik 1950; 127: 297-323.
- [16] Borrmann G. Der kleinste Absorptionskoeffizient interferierender Röntgenstrahlung. Zeitschrift für Kristallographie 1954; 106: 109-21.
- [17] Laue M. Die Absorption der Röntgenstrahlen in Kristallen im Interferenzfall. Acta Crystallographica 1949; 2: 106-13.
- [18] Renninger M. Verstärkung schwacher und Vortäuschung verbotener Röntgenreflexe durch „Umweganregung“. Naturwissenschaften 1937; 25(3): 43. DOI: 10.1007/BF01492117.
- [19] Borrmann G, Hartwig W. Die Absorption der Röntgenstrahlen im Dreistrahlfall der Interferenz. Zeitschrift für Kristallographie 1965; 121: 401-9.
- [20] Ewald PP, Héno Y. X-ray diffraction in the case of three strong rays. I. Crystal composed of non-absorbing point atoms. Acta Crystallographica Section A 1968; 24(1): 5-15. DOI: 10.1107/S0567739468000033.
- [21] Héno Y, Ewald PP. Diffraction des rayons X dans le cas de trois rayons forts'. II. Influence de l'absorption et du facteur de diffusion atomique. Acta Crystallographica Section A 1968 ; 24(1) : 16-42. DOI: 10.1107/S0567739468000045.
- [22] Hildebrandt G. Röntgenwellenfelder in einem Dreistrahlfall. Physica status solidi (b) 1967 ; 24(1) : 245-61.
- [23] Afanasiev AM, Kagan Yu. The Role of Lattice Vibration in Dynamical Theory of X-Rays. Acta Crystallographica 1968; A24(2): 163-70.
- [24] Wooster WA. Diffuse X-Ray reflections from crystals. Oxford: Clarendon Press, 1962.
- [25] Penning P, Polder D. Anomalous transmission of X-rays in elastically deformed crystals. Philips Research Reports 1961; 16: 419-40.
- [26] Kato N. Pendellösung fringes in distorted crystals i. fermat's principle for bloch waves. Journal of the Physical Society of Japan 1963; 18: 1785-91.
- [27] Kato N. Pendellösung fringes in distorted crystals iii. application to homogeneously bent crystals. Journal of the Physical Society of Japan 1964; 19(67): 971-85.
- [28] Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion. Acta Crystallographica 1962; 15: 1311-2.
- [29] Takagi S. A Dynamical theory of diffraction for a distorted crystals. Journal of the Physical Society of Japan 1969; 26: 1239-53.
- [30] Slobodetskii Ish, Chukhovskii FN, Indenbom TL. X-ray Diffraction Under Conditions of the Spatially-inhomogeneous Dynamic Problem. JETP Letters 1968; 8(2): 55-8.
- [31] Authier A. Application de la theorie dynamique de S. Takagi au contraste d'un défaut plan en topographie par rayons X. I. Faute d'empilement. Acta Crystallographica 1968; A24: 517-26.
- [32] Indenbom TL, Chukhovskii FN. The problem of the imaging in X-ray optics – Preprint (in Russian). Moscow: Institute of Crystallography, USSR Academy of Sciences, 1971.
- [33] Landau J, Groscurth CR, Wright L, Condit CM. Visualizing Nanotechnology: The Impact of Visual Images on Lay American Audience Associations with Nanotechnology. Public Understanding of Science 2009; 18(3): 325-37.
- [34] Milburn C. Nanovision: Engineering the Future. Durham: Duke University Press, 2008.
- [35] Soifer VA, Kupriyanov AV. Analysis and recognition of the nanoscale images: conventional approach and novel problem statement (in Russian). Computer Optics 2011; 35(2): 136-44.
- [36] Kupriyanov AV, Soifer VA. On the observability of the crystal lattice with the images of their projections (in Russian). Computer Optics 2012; 36(2): 249-56.
- [37] Born M, Wolf E. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light (4th Edition). New York: Pergamon Press, 1969.

A DIFFERENTIAL METHOD FOR CALCULATING X-RAY DIFFRACTION BY CRYSTALS: THE SCALAR THEORY

S.I. Kharitonov^{1,2}, S.G. Volotovskiy¹, S.N. Khonina^{1,2}, N.L. Kazanskiy^{1,2}

¹Image Processing Systems Institute, Russian Academy of Sciences,

²Samara State Aerospace University

Abstract

In the Introduction section, we offer a historical overview of main experimental and theoretical developments in the field of X-ray crystal analysis. The main part contains a differential approach to solving the problem of diffraction of X-rays by crystals within the scalar theory. Examples of numerical simulation for the basic types of crystal lattices are included.

Keywords: X-ray diffraction, diffraction by crystals, differential method, the basic types of crystal lattices.

Citation: Kharitonov SI, Volotovskiy SG, Khonina SN, Kazanskiy NL. A differential method for calculating x-ray diffraction by crystals: the scalar theory. Computer Optics 2015; 39(4): 469-79. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-469-479.

Сведения об авторах

Харитонов Сергей Иванович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории прорывных технологий дистанционного зондирования Земли в СГАУ, ведущий научный сотрудник лаборатории дифракционной оптики Института систем обработки изображений РАН. 1984 г. – окончил физический факультет Самарского государственного университета. 1993 г. – защитил кандидатскую диссертацию на тему «Асимптотические методы дифракционного расчёта фокусаторов лазерного излучения». 2010 г. – защитил докторскую диссертацию на тему «Асимптотические методы расчёта дифракции когерентного электромагнитного излучения на дифракционных оптических элементах». Область научных интересов: дифракционная, квантовая оптика, физика плазмы. В списке научных работ С.И. Харитонова 87 статей, 5 авторских свидетельств и патентов.

E-mail: prognoz2007@gmail.com.

Sergey Ivanovich Kharitonov, leading researcher of Diffractive Optics laboratory of the Image Processing Systems Institute of RAS, leading researcher at the Breakthrough Technologies for Earth's Remote Sensing laboratory in S.P. Korolyov Samara State Aerospace University (National Research University). Doctor of Physical and Mathematical Sciences. 1984 – graduated from Physics department of Samara State University. 1993 – defended his dissertation "Asymptotic methods of calculation of the diffraction of laser radiation Focuser". 2010 – defended his doctoral thesis on "Asymptotic methods for calculating the diffraction of coherent electromagnetic radiation in diffractive optical elements". Research interests: diffraction, quantum optics, plasma physics. The list of scientific papers S.I. Kharitonov's 87 articles, 5 patents.

Волотовский Сергей Геннадьевич, 1959 года рождения, в 1984 году окончил Куйбышевский авиационный институт имени академика С.П. Королёва (КуАИ) по специальности «Прикладная математика», работает ведущим программистом в Учреждении Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН. Область научных интересов: разработка программного обеспечения расчёта и моделирования работы элементов дифракционной оптики.

E-mail: sv@smr.ru.

Sergey Gennadjevich Volotovskiy (b. 1959) graduated from Kuibyshev Aviation Institute named after academician S.P. Korolyov (KuAI) on a specialty "Applied Mathematics", works as the leading programmer in the Image Processing Systems Institute of the RAS. Research interests: software design, modeling of systems with diffractive optical elements.

Хонина Светлана Николаевна, доктор физико-математических наук, профессор Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королёва; ведущий научный сотрудник Института систем обработки изображений РАН. Область научных интересов: дифракционная оптика, сингулярная оптика, модовые и поляризационные преобразования, оптическое манипулирование, оптическая и цифровая обработка изображений.

E-mail: khonina@smr.ru.

Svetlana Nikolaevna Khonina, Doctor of Physical and Mathematical Sciences; Professor of Samara State Aerospace University named after S.P. Korolyov. Leading researcher of the Image Processing Systems Institute of the RAS. Research interests: diffractive optics, singular optics, mode and polarization transformations, optical manipulating, optical and digital image processing.

Казанский Николай Львович, 1958 года рождения. В 1981 году с отличием окончил Куйбышевский авиационный институт (КуАИ), ныне – Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва – СГАУ) по специальности «Прикладная математика». Доктор физико-математических наук (1996 год), профессор. Врио директора Института систем обработки изображений РАН (ИСОИ РАН), профессор кафедры технической кибернетики СГАУ. Руководитель научно-образовательного центра компьютерной оптики, созданного совместно ИСОИ РАН и СГАУ, заведующий базовой (СГАУ в ИСОИ РАН) кафедрой высокопроизводительных вычислений. Является членом международных научных обществ OSA, SPIE и IAPR. Н.Л. Казанский – специалист в области дифракционной оптики, математического моделирования, обработки изображений и нанопластики. В списке научных работ Н.Л. Казанского 240 статей, 7 монографий, 35 авторских свидетельств и патентов.

Homepage: <http://www.ipsi.smr.ru/staff/kazansky.htm>.

E-mail: kazansky@smr.ru.

Nikolay Lvovich Kazanskiy (b. 1958) graduated with honors (1981) from S. P. Korolyov Kuibyshev Aviation Institute (presently, S. P. Korolyov Samara State Aerospace University (SSAU)), majoring in Applied Mathematics. He received his Candidate in Physics & Maths (1988) and Doctor in Physics & Maths (1996) degrees from Samara State Aerospace University. He is the director at the Samara Image Processing Systems Institute of the Russian Academy of Sciences (IPSI RAS), holding a part-time position of professor at SSAU's Technical Cybernetics sub-department. He is the manager of the Research & Education Center of Computer Optics established jointly by SSAU and IPSI RAS, holding the chair of SSAU's base sub-department of High-Performance Computing at IPSI RAS. He is a OSA-, SPIE- and IAPR-member. He is co-author of 240 scientific papers, 7 monographs, and 35 inventions and patents. His current research interests include diffractive optics, mathematical modeling, image processing, and nanophotonics.

*Поступила в редакцию 16 сентября 2015 г.
Окончательный вариант – 6 октября 2015 г.*