КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2024, том 69, № 3, с. 375–381

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

К ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ ОГРАНИЧЕННЫХ ПУЧКОВ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ

© 2024 г. В. Г. Кон[1], И. А. Смирнова[2,*]

[1]Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия

[2]Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

*E-mail: irina@issp.ac.ru

Поступила в редакцию 25.08.2023 г.
После доработки 12.10.2023 г.
Принята к публикации 27.10.2023 г.

Теоретически исследованы особенности брэгговской дифракции когерентного синхротронного излучения на атомной решетке монокристалла в геометрии Лауэ при условии, что пучок излучения ограничен щелью относительно большого размера, установленной перед кристаллом. Использован метод численного моделирования и получены зависимости распределения интенсивности для разных толщин кристалла. Показано, что края щели вносят неоднородные искажения интенсивности внутри треугольников Бормана с углом $2\theta_B$, где θ_B – угол Брэгга. В области пересечения треугольников распределение интенсивности аналогично таковому при дифракции на щели в воздухе на определенном (большом) расстоянии. Получена формула соответствия расстояния и толщины кристалла, которая хорошо описывает результаты численных расчетов.

DOI: 10.31857/S0023476124030019, **EDN:** XPOYXQ

ВВЕДЕНИЕ

Дифракцию ограниченного пучка видимого света наблюдали еще первобытные люди, когда солнечный свет проникал в пещеру через отверстие в груде камней. На малых расстояниях свет распространяется прямолинейно, а пучок принимает поперечную форму отверстия. Позднее появилась теория распространения света, известная как геометрическая оптика. Однако при уменьшении размера щели эта теория перестает работать, и начинают проявляться волновые свойства света. В настоящее время принято выделять три области расстояний, в которых трансформация пучка света с увеличением расстояния z после щели шириной d происходит принципиально различным способом [1].

На малых расстояниях (ближнее поле) приближенно справедлива геометрическая оптика. На больших расстояниях (дальнее поле) при падении плоской волны на щель поперечный размер пучка примерно равен $\lambda z/d$ и увеличивается пропорционально расстоянию (λ – длина волны монохроматического света). В этом случае щель является как бы вторичным источником с ограниченной угловой расходимостью $\alpha = \lambda/d$. И есть переходная область, называемая областью дифракции Френеля с центром при расстоянии $z_d = d^2/2\lambda$, где увеличение размера пучка за счет угловой расходимости αz равно половине ширины щели d.

Для синхротронного излучения (**СИ**) с энергией фотонов E в диапазоне от 5 до 50 кэВ ситуация аналогична видимому свету с тем отличием, что при разумных расстояниях размер щелей должен быть намного меньше, чем для видимого света, а пучок должен быть когерентным на ширине щели, что не является простой задачей для лабораторных источников рентгеновского излучения. Например, $z_d = 25$ м при $d = 50$ мкм и $\lambda = 0.05$ нм ($E = 25$ кэВ). То есть для щелей относительно больших размеров волновые свойства излучения проявляются на очень больших расстояниях. Тем не менее волновые свойства СИ источников третьего поколения экспериментально наблюдались при дифракции на щелях размером от 10 до 100 мкм и использовались для измерения степени когерентности СИ [2–4].

Расходящиеся пучки от двух очень узких щелей, расположенных близко друг к другу, перекрываются и создают интерференционную картину простого типа в виде серии светлых и темных полос. В области видимого света такой эксперимент был впервые выполнен Томасом Юнгом в начале XIX века, а с когерентным СИ – в 2001 г. [5].

Тот факт, что интерференция жесткого СИ при его распространении в воздухе наблюдается на

относительно больших расстояниях, создает определенные неудобства для экспериментов. С другой стороны, для СИ существует эффект дифракции в монокристаллах, период кристаллической решетки которых лишь немного превосходит длину волны СИ. Первоначально, т.е. в первой половине XX века, теория дифракции СИ в монокристаллах была развита для плоской волны и формы кристалла с плоскими входной и выходной поверхностями. Затем, в 1961 г., была построена теория для сферической волны методом преобразования Фурье, а позднее и в общем случае на основе решения уравнений Такаги [6, 7].

Особенностью двухволновой рентгеновской дифракции сферической волны на кристаллической решетке является то, что излучение от вторичного источника (например, узкой щели) распределяется внутри треугольника Бормана с углом $2\theta_B$, где θ_B – угол Брэгга, который определяется из условия $2a\sin\theta_B = n\lambda$. Здесь a – межплосткостное расстояние для системы плоскостей, на которой происходит дифракция, n – целое число (порядок отражения). Угол Брэгга для типичных значений параметров дифракции имеет относительно большое значение и может быть равен десяти градусам и больше.

По этой причине два пучка от вторичных источников малого размера перекрываются очень быстро и могут создавать в кристалле интерференционную картину не хуже, чем при распространении в воздухе. Этот факт использовали при построении теории двухщелевого интерферометра для отраженного пучка при дифракции в монокристалле. Расчет был выполнен с использованием функции влияния (пропагатора) кристалла для уравнений Такаги. Главным результатом работы является формула для периода интерференционных полос [8].

Позднее было показано, что такого же типа интерференционную картину можно получить с одной щелью и двумя кристаллами, между которыми есть небольшой слой воздуха [9], а также с использованием билинзового интерферометра [10] на основе составных преломляющих линз [11]. При этом период интерференционных полос оказывается тем же самым. В этих работах было показано, что кристалл в условиях дифракции на кристаллической решетке и в отраженном пучке работает весьма аналогично воздуху. При этом роль расстояния после рассеивающего объекта берет на себя толщина кристаллической пластинки. То есть интерференционную картину можно получить практически на нулевом расстоянии.

Когерентная дифракция на щели конечных размеров в условиях дифракции на атомной решетке в монокристалле изучалась теоретически более 50 лет назад как с помощью решения уравнений Такаги [12], так и с помощью пропагатора кристалла [13, 14]. Решения носили формальный характер, аналогия с дифракцией на щели в воздухе детально не анализировалась, т.е. была представлена демонстрация только того факта, что задача имеет решение. Эксперименты для такой системы до сих пор не проводились по причине отсутствия когерентных пучков нужного размера и сложности постановки эксперимента без понимания цели и мотивации. Интересно, что в [12] впервые сформулирован метод численного расчета уравнений Такаги, в последующие годы широко используемый в большом числе публикаций при анализе изображений различных дефектов кристаллической решетки. Недавно этот метод получил дальнейшее развитие с целью использовать его для кристаллов произвольной формы [15].

Главный результат данной работы состоит в детальном анализе аналогии между двумя средами: воздухом и дифракцией на кристаллической решетке в отраженном пучке для относительно простого эффекта дифракции плоской волны на щели конечных размеров. Эта аналогия имеет большое практическое значение, так как очень многие интерференционные эффекты, которые относительно трудно наблюдать при регистрации в воздухе, могут быть использованы в условиях дифракции плоской волны в кристалле в отраженном пучке.

Указанные две среды все же не во всем совпадают. Среди различий самыми существенными являются следующие. Первое состоит в том, что при дифракции в кристалле возникают два поля с разными коэффициентами преломления, что приводит к мелким экстинкционным колебаниям интенсивности. Этот эффект нас интересовать не будет. Его нет при дифракции на щели в воздухе, а в кристалле в данном случае он не интересен. Второе различие приводит к тому, что нас будет интересовать лишь область дифракции Френеля. Область ближнего поля тривиальна, хоть и различается, а в области дальнего поля кристалл от воздуха отличается тем, что он поглощает излучение. Здесь главную роль играет эффект Бормана [6, 7], благодаря которому излучение остается лишь там, где поглощение минимально.

Все численные расчеты выполнены с помощью программы XRWP [16], разработанной для решения широкого круга задач рентгеновской оптики как с кристаллами, так и без них. Программа свободно распространяется в интернете и имеет подробное описание для самостоятельного обучения работы с ней. Все что требуется – это правильное понимание условий задачи и способность понять результаты расчетов.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД ЕЕ РЕШЕНИЯ

Часть возможной экспериментальной схемы, рассмотренной в данной работе, показана на рис. 1.

Излучение от источника СИ с малыми поперечными размерами, расположенного на достаточно большом расстоянии (не показан), проходит монохроматор (*1*), который не меняет пространственные свойства пучка СИ. Затем оно ограничивается щелью (*2*), далее стоит кристалл (*3*) в положении дифракционного отражения. Предполагается симметричный случай дифракции по Лауэ. При этом поверхности кристаллической пластинки составляют угол θ_B с направлением падающего на щель пучка СИ. Детектор (*4*) регистрирует отраженное излучение.

При дифракции на щели в воздухе кристалла нет, и детектор регистрирует прошедший через щель пучок на относительно большом расстоянии от щели. Предполагается, что монохроматор выделяет достаточно узкую линию в спектре СИ, и учет этого спектра не меняет результат расчета для монохроматического излучения. Но это не всегда так, поскольку в кристаллах весьма высока чувствительность дифракции СИ к изменению длины волны излучения. Однако учет спектра имеет смысл при детальном сравнении результатов расчета с экспериментом.

Формально высокая монохроматичность может быть достигнута за счет использования более высоких порядков отражения в монохроматоре по сравнению с кристаллом-образцом. Рекордом является монохроматизация с помощью дифракции в кристаллах до ширины спектра 5×10^{-7} кэВ, достигнутая при энергии 14.4 кэВ мессбауэровского ядерного перехода изотопа Fe^{57} [17]. Такого же уровня монохроматизация возможна для любой энергии фотонов.

Решение уравнений Максвелла для распространения СИ в воздухе в параксиальном приближении получается в виде свертки волновой функции СИ с пропагатором Френеля. Свертку наиболее быстро и просто вычислять методом двойного преобразования Фурье с применением метода быстрого преобразования Фурье [18]. В рассматриваемом случае дифракция происходит в плоскости (x, z), и от координаты y результат не зависит. Ось z совпадает с направлением распространения пучка, а ось x перпендикулярна оси z.

Расчет проводили в три этапа. Сначала вычисляли преобразование Фурье волновой функции после щели. Потом результат умножали на образ Фурье пропагатора (**ОФП**) Френеля:

$$P(q, z) = \exp(-i(\lambda z/4\pi)\, q^2), \qquad (1)$$

где $z = z_2 - z_1$, $z_{1,2}$ – начальное и конечное расстояния в пустом пространстве. В данном случае $z_1 = 0$. Затем вычисляли обратное преобразование Фурье.

Расчет дифракции в кристалле делали по такой же схеме, только ОФП Френеля заменили на

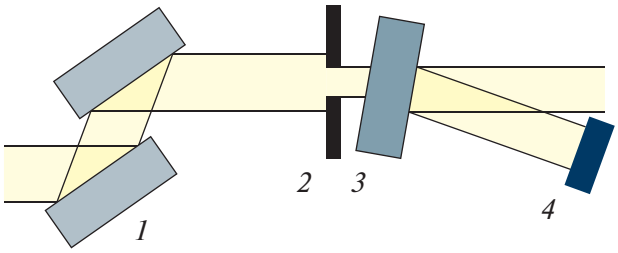

Рис. 1. Часть схемы эксперимента (без источника): *1* – монохроматор, *2* – щель, *3* – монокристалл, *4* – детектор.

решение дифракционной задачи для плоских волн при произвольном отклонении направления волнового вектора от точного направления, удовлетворяющего условию Брэгга. Это решение получено еще в начале XX века и подробно описано в учебниках [6, 7]. Как показано в [9, 10], разумно сразу рассматривать матрицу (2 × 2), так как волновая функция в кристалле имеет две компоненты соответственно для проходящего и отраженного пучков.

В данной работе рассмотрим только переход из падающего в отраженный пучок. Соответственно, ОФП кристалла для такого процесса имеет вид

$$P_c(q, t_c) = F(q)(X_h/2g)[\exp(i(A + G)) - \\ - \exp(i(A - G))], \qquad (2)$$

где

$$A = (X_0 + \alpha_q)t_c/2\gamma_0,\ g = (\alpha_q^2 + X^2)^{1/2}, \qquad (3)$$

$$G = gt_c/2\gamma_0,\ X = (X_h X_{-h})^{1/2},\ \alpha_q = (q - q_0)\sin(2\theta_B), \qquad (4)$$

$$F(q) = \exp(-iqt_c\sin\theta_B). \qquad (5)$$

Здесь t_c – толщина кристалла, $X_{0,h,-h} = K\chi_{0,h-h}$, $\chi_{0,h,-h}$ – параметры дифракции, т.е. компоненты Фурье поляризуемости кристалла на векторах обратной решетки $\mathbf{0}$, $\mathbf{h}$, $-\mathbf{h}$, $\gamma_0 = \cos\theta_B$, $q_0 = K\theta_0$, θ_0 – угол отклонения кристалла от точного брэгговского положения, $K = 2\pi/\lambda$ – волновое число. Функция $F(q)$ вводится для того, чтобы сместить начало координат в середину основания треугольника Бормана. Формулы выписаны для оси, перпендикулярной направлению отраженного пучка. Для удобства дальнейшего изложения предположим, что $\mathrm{Re}(X) > 0$.

Сам пропагатор кристалла вычисляется через обратное преобразование Фурье функции $P_c(q, t_c)$ (2). Он имеет аналитический вид через функцию Бесселя нулевого порядка [19, 20]. Однако для поставленных целей удобнее анализировать аналогию

между ОФП Френеля и ОФП кристалла. Процедура расчета в обоих случаях одна и та же, отличие заключается только в различии формул (1) и (2)–(5). В формуле (1) имеем экспоненту, аргумент которой пропорционален q^2. В формулах (2)–(5) такой аргумент тоже присутствует и симметричен, при $q_0 = 0$, но в ограниченной области значений q, когда $|\alpha_q| < \mathrm{Re}(X)$. Если плоская волна падает на щель, $q = 0$ до щели. После щели в интеграле появляется узкая область интегрирования по q, причем чем шире щель, тем меньше размер этой области. То есть для широкой щели малые значения q имеют приоритет.

Интересно сравнить коэффициенты перед q^2 в аргументе экспонент с тем, чтобы определить, какой параметр в ОФП кристалла является аналогом расстояния в ОФП Френеля. Расчет показывает, что в кристалле роль расстояния играет параметр

$$z_c = 2\sin^2\theta_B\cos\theta_B t_c/\mathrm{Re}(\chi),\ \chi = X/K. \qquad (6)$$

Эта формула получается из сравнения коэффициента при q^2 в аргументе экспоненты в (1) и коэффициента при q^2 в разложении параметра G в (4) в степенной ряд по q^2 при $q_0 = 0$. Определенное различие между средами все же есть, так как в кристалле пропагатор имеет две экспоненты, а не одну, как в воздухе. Соответственно, для плоской волны (очень широкая щель) квадрат модуля функции $P_c(q, t_c)$ (2) пропорционален множителю $\sin^2(G)$, который осциллирует при увеличении толщины t_c с периодом $\Lambda_c = \lambda\cos\theta_B/\mathrm{Re}(\chi)$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ АНАЛИЗ

Формулы предыдущего раздела записаны для плоской падающей волны. Известно, что для сферической волны от точечного источника, расположенного на расстоянии z_0 от щели, результат расчета фазового контраста [21] будет такой же, как и для плоской волны при расстоянии $z = z_0z_1/z_t$, где $z_t = z_0 + z_1$, z_1 – расстояние от щели до детектора, с тем отличием, что картина будет иметь ширину, увеличенную на коэффициент z_t/z_0. Видно, что при условии $z_0 \gg z_1$ параметр z слабо отличается от z_1. Такая же ситуация имеет место при дифракции на щели в воздухе, так как указанные формулы соответствуют геометрической оптике. По этой причине достаточно сделать расчет для падающей плоской волны.

Дифракцию в кристаллах будем анализировать по результатам расчетов для падающей плоской волны, точнее, при условии $z_0 >> z_1$, где расстояние z_1 пересчитывается из толщины кристалла по формуле (6). Практически такой случай можно реализовать, используя составную преломляющую линзу [22]. Для сферической волны в кристалле реализуется эффект дифракционной фокусировки [23], не имеющий аналога в воздухе. При некоторой комбинации параметров этот эффект может испортить аналогию кристалла с воздухом при дифракции на щели относительно большого размера.

Эффект дифракции плоской волны света на щели детально рассматривается во всех учебниках по оптике. Тем не менее полномасштабное численное моделирование до сих пор не обсуждалось, а для детального сравнения это необходимо. Для СИ формулы аналогичны видимому свету. Зависимость волновой функции СИ $\psi(x, z)$ от x находим как интеграл от пропагатора Френеля $P(x - x_1, z)$ по конечному интервалу переменной x_1. Эта зависимость симметричная, и наиболее интересной является интенсивность в точке $x = 0$ в зависимости от z. В этом случае волновая функция СИ имеет вид

$$\psi(0, z) = (2/i)^{1/2}[C(r) + iS(r)],\quad r = (z_d/z)^{1/2},\ z_d = d^2/2\lambda, \qquad (7)$$

где $C(r)$ и $S(r)$ – косинус- и синус-интегралы Френеля, т.е. интегралы по переменной s от 0 до r для функций $\cos(\pi s^2/2)$ и $\sin(\pi s^2/2)$.

Относительная интенсивность $I_R(0, z)/I_0$ равна сумме квадратов C и S, умноженной на 2. При $z = 0$ она равна единице, и с ростом z сначала осциллирует с мелким шагом и малой амплитудой. Постепенно шаг осцилляций увеличивается, амплитуда возрастает до максимума, а затем монотонно стремится к нулю. Параметр z_d называют дифракционной длиной, он соответствует точке максимума для вклада от косинуса интеграла Френеля, максимум интенсивности достигается примерно при $z_m = 0.7z_d$.

Функция $I_R(0, z)/I_0$ показана на рис. 2 (кривая *1*). Кривые *2*, *3* показывают вклады в эту функцию от косинус- и синус-интегралов Френеля. Расчет выполнен для ширины щели $d = 50$ мкм и энергии фотонов 25 кэВ ($\lambda = 0.0496$ нм). В этом случае $z_d = 25.2$ м, $z_m = 17.6$ м. Так как интегральная по x интенсивность не зависит от z, то увеличение максимума сопровождается сжатием пучка СИ. Этот факт демонстрирует рис. 3, где показана полная зависимость $I_R(x, z)/I_0$ в интервале расстояний от 0 до 40 м. На этом рисунке видно, что пучок начинает расширяться практически сразу, т.е. на малых расстояниях от щели, но интенсивность за пределами щели очень слабая.

Область ближнего поля, где пучок слабо меняется согласно геометрической оптике, имеет относительно малые размеры. В области дифракции Френеля имеет место сильная интерференция, источником которой являются края щели, где происходит резкая смена режимов однородности пространства. Наиболее интересным является эффект сжатия пучка с увеличением интенсивности

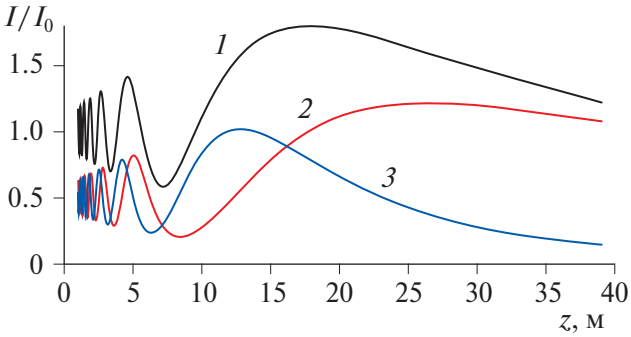

Рис. 2. Относительная интенсивность пучка СИ в центре щели в зависимости от расстояния до детектора (*1*) и вклады в нее от косинуса (*2*) и синуса (*3*) для $d = 50$ мкм и энергии фотонов 25 кэВ.

при $z = z_m$. При этом щель работает как слабо фокусирующий оптический прибор. Компьютерный расчет, представленный на рис. 3–5, выполнен по программе XRWP. Все детали расчета можно найти на сайте программы [16], включая теоретические формулы и примеры решения различных задач. Для расчета использовали сетку точек с шагом 0.1 мкм и числом $2^{15} = 32768$. Рисунок 3 выполнен по матрице с числом точек 401 × 401, а время расчета составило несколько секунд.

На рис. 4 представлено аналогичное распределение интенсивности, но для случая, когда сразу после щели пучок СИ попадает в монокристалл кремния, установленный в точном брэгговском положении для отражения 220. Поэтому вместо расстояния z по вертикальной оси показана толщина кристалла t_c. Параметры дифракции вычисляли с помощью онлайн-программы [24]. При этом $\theta_B = 7.42°$, $\mathrm{Re}(\chi) = 9.34 \times 10^{-7}$, $\Lambda_c = 52.7$ мкм. Из-за эффекта экстинкции картинка получается полосатой. Однако если следить за распределением интенсивности в максимумах экстинкционных биений, то можно заметить некоторую аналогию с дифракцией на щели в воздухе, показанной на рис. 3. Рисунок выполнен на матрице с числом точек 801 × 801. Время расчета соответственно увеличилось до некольких минут.

Наиболее полное соответствие толщины монокристалла t_c расстоянию в воздухе z наблюдается в области главного максимума. Согласно (6) для данного случая это соответствие определяется формулой $t_c = 2.82 \times 10^{-5}\, z$. Для $z = 17.6$ м получаем значение $t_c = 0.496$ мм, что полностью соответствует расчету. Максимальное значение t_c, однако, несколько меньше из-за поглощения СИ в монокристалле. В области малых толщин аналогия не полная по той причине, что в монокристалле изменения, связанные со скачком однородности пространства на краях щели, распространяются внутри треугольника Бормана с углом $2\theta_B$. Пока эти

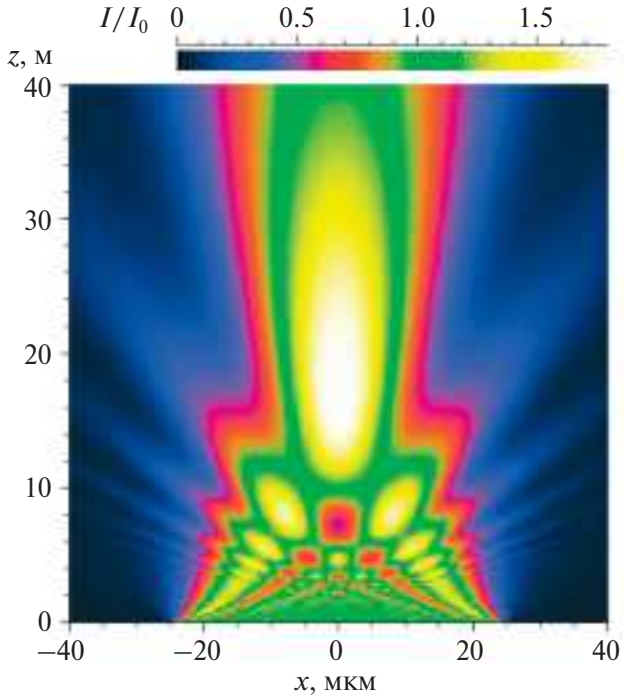

Рис. 3. Зависимость от x относительной интенсивности пучка СИ в области расстояний, соответствующей дифракции Френеля при $d = 50$ мкм и энергии фотонов 25 кэВ.

треугольники не пересекаются, никакой интерференции нет, и влияние щели никак себя не проявляет. В рассмотренном случае они пересекаются как раз перед главным максимумом.

На рис. 5 показан результат расчета для размера щели $d = 100$ мкм. Параметр z_m пропорционален d^2 и увеличился в 4 раза по сравнению с предыдущим вариантом. А толщина монокристалла, при которой пересекаются треугольники Бормана, увеличилась всего в 2 раза. Поэтому наблюдается не только главный максимум, но и несколько тех, которые ему предшествовали на рис. 3. Здесь картинка показана на матрице с числом точек 901 × 901. Отметим, что центральный максимум не соответствует наибольшей относительной интенсивности. Она наблюдается при меньших толщинах. Причина все та же – поглощение СИ в кристалле. Ослабление интенсивности из-за нормального поглощения для $t_c = 2$ мм равно $\exp(-\mu_0 t_c) = 0.367$. На самом деле значение в максимуме несколько выше, так как часть излучения слабо поглощается из-за эффекта Бормана.

Для размера щели 25 мкм и меньше, наоборот, даже главный максимум не попадает в область перекрытия треугольников Бормана с вершинами на краях щели, и в области интерференции сразу наблюдаются начало области дальнего поля

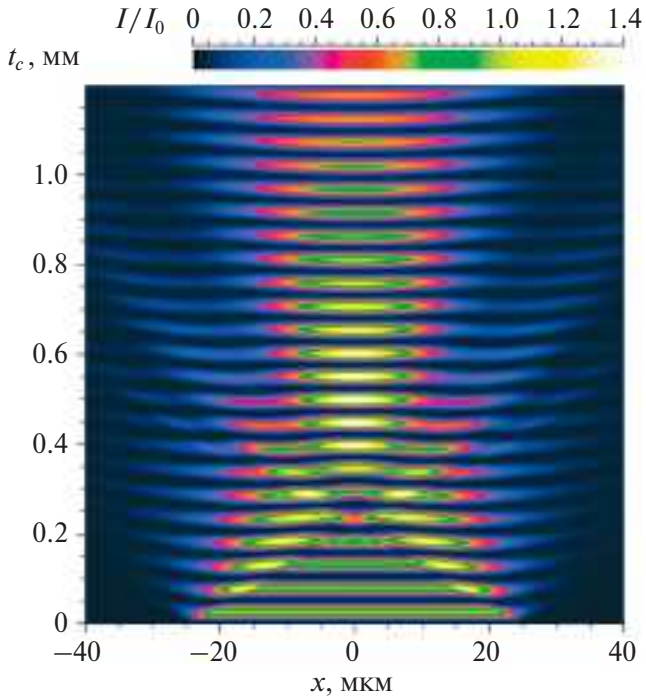

Рис. 4. Зависимость от x относительной интенсивности отраженного (220) пучка СИ при дифракции в монокристалле кремния для области толщин, соответствующей дифракции Френеля при $d = 50$ мкм и энергии фотонов 25 кэВ.

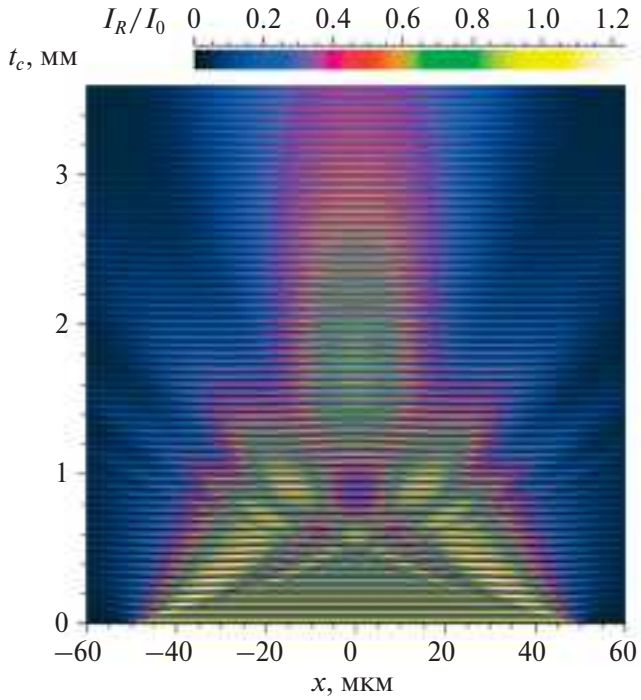

Рис. 5. Зависимость от x относительной интенсивности отраженного (220) пучка СИ при дифракции в монокристалле кремния для области толщин, соответствующей дифракции Френеля при $d = 100$ мкм и энергии фотонов 25 кэВ.

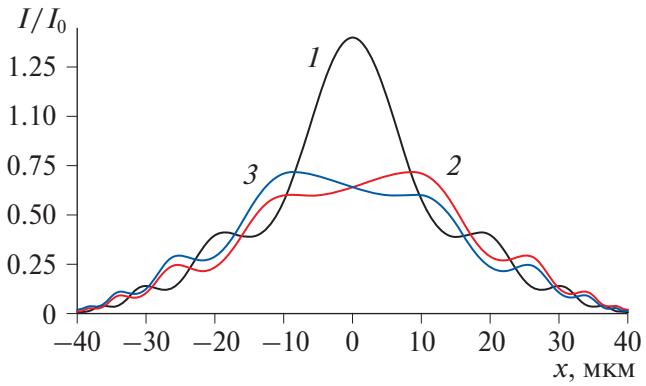

Рис. 6. Зависимость от x относительной интенсивности отраженного (220) пучка СИ при дифракции в монокристалле кремния при $d = 50$ мкм и энергии фотонов 25 кэВ, толщина кристалла 500 мкм; *1* – точное угловое положение, *2*, *3* – поворот кристалла из точного положения на угол 5×10^{-7} рад в разные стороны.

и расширение пучка СИ. То есть щель работает как вторичный источник, и результаты расчета близки к полученным Като еще в 1961 г. [25].

Результаты расчетов для других энергий фотонов показывают распределения весьма близкие к тем, что представлены на рис. 4 и 5, но для других толщин кристаллов. Дело в том, что коэффициент пропорциональности между расстоянием z и толщиной кристалла t_c в формуле (6) слабо зависит от энергии, так как $\sin\theta_B$ пропорционален λ, а $\mathrm{Re}(\chi)$ пропорциональна λ^2. Но дифракционная длина, т.е. расстояние, соответствующее центру области дифракции Френеля, обратно пропорциональна λ и уменьшается при уменьшении энергии фотонов. Поглощение в кристалле при этом, наоборот, возрастает. Но его роль не очень велика из-за эффекта Бормана.

До сих пор предполагалось, что кристалл выставлен в точном угловом положении для дифракции на кристаллической решетке. Естественно, возникает вопрос о том, с какой точностью это угловое положение должно быть выставлено для того, чтобы обсуждаемое соответствие не нарушалось. Получить аналитический ответ на этот вопрос пока не удалось, но численное моделирование способно дать ответ. На рис. 6 показаны три кривые для энергии фотонов 25 кэВ кристалла кремния толщиной 500 мкм и (220) отражения. Кривая *1* соответствует рис. 4 для указанной толщины, кривые *2*, *3* получены при повороте кристалла на угол 5×10^{-7} рад относительно точного угла, удовлетворяющего условию Брэгга, в разные стороны. Кривые становятся асимметричными и зеркально отражаются при смене знака угла поворота.

Как следует из расчетов, правильная дифракция происходит в очень узкой угловой области, которая уменьшается при увеличении энергии фотонов. Такая высокая чувствительность к угловому положению кристалла вообще характерна для лауэ-дифракции в относительно толстых кристаллах.

Работа В.Г. Кона выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, грант № 075-15-2021-1362. Работа И.А. Смирновой выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Born M., Wolf E.* Principles of Optics. 7th ed. Cambridge: University Press, 2002. 952 p.
2. *Kohn V., Snigireva I., Snigirev A.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 2745.
3. *Kohn V., Snigireva I., Snigirev A.* // Opt. Commun. 2001. V. 198. P. 293.
4. *Snigireva I., Kohn V., Snigirev A.* // Nucl. Instrum. Methods. A. 2001. V. 467–468. P. 925.
5. *Leitenberger W., Kuznetsov S.M., Snigirev A.* // Opt. Commun. 2001. V. 191. P. 91.
6. *Authier A.* Dynamical Theory of X-ray Diffraction. 3rd ed. Oxford University Press, 2005. 696 p.
7. *Pinsker Z.G.* Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals. Springer-Verlag, 1978. 390 p.
8. *Balyan M.K.* //Acta Cryst. A. 2010. V. 66. P. 660. https://doi.org/10.1107/S0108767310035944
9. *Кон В.Г., Смирнова И.А.* // Кристаллография. 2022. Т. 67. С. 185. https://doi.org/10.31857/S0023476122020084
10. *Kohn V.G., Smirnova I.A.* // Crystallography Reports. 2022. V. 67. P. 1068. https://doi.org/10.1134/S1063774522070446
11. *Snigirev A., Snigireva I., Kohn V. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. P. 064801. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.064801
12. *Authier A., Malgrange C., Tournarie M.* // Acta Cryst. A. 1968. V. 24. P. 126. https://doi.org/10.1107/S0567739468000161
13. *Слободецкий И.Ш., Чуховский Ф.Н.* // Кристаллография. 1970. Т. 15. С. 1101.
14. *Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н.* // Успехи физ. наук. 1972. Т. 107. С. 229.
15. *Кон В.Г.* // Кристаллография. 2023. Т. 68. С. 196. https://doi.org/10.31857/S002347612302008X
16. *Кон В.Г.* http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm
17. *Toellner T.S.* // Hyperfine Interact. 2000. V. 125. P. 3.
18. *Cooley J.W., Tukey J.W.* // Math. Comput. 1965. V. 19. P. 297.
19. *Слободецкий И.Ш., Чуховский Ф.Н., Инденбом В.Л.* // Письма в ЖЭТФ. 1968. Т. 8. С. 90.
20. *Authier A., Simon D.* // Acta Cryst. A. 1968. V. 24. P. 517.
21. *Kohn V.G., Argunova T.S., Je J.H.* // J. Phys. D. Appl. Phys. 2010. V. 43. P. 442002(3). https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/44/442002
22. *Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Lengeler B.* // Nature (London). 1996. V. 384. P. 49.
23. *Афанасьев А.М., Кон В.Г.* // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 1775.
24. *Кон В.Г.* // http://kohnvict.ucoz.ru/jsp/3-difpar.htm
25. *Kato N.* // Acta Cryst. 1961. V. 14. P. 627. https://doi.org/10.1107/S0365110X61001947

THE THEORY OF SYNCHROTRON RADIATION LIMITED BEAMS DIFFRACTION IN SINGLE CRYSTAL IN THE LAUE CASE

© 2024 V. G. Kohn[a], I. A. Smirnova[b,*]

[a] *National Research Centre "Kurchatov Institute," 123182 Moscow, Russia,*

[b] *Institute of Solid State Physics RAS, 142432 Chernogolovka, Russia*

**e-mail: irina@issp.ac.r*

The features of the Bragg diffraction of coherent synchrotron radiation on the atomic lattice of a single crystal in the Laue geometry are studied theoretically, provided that the radiation beam is limited by a relatively large slit placed in front of the crystal. The method of numerical simulation is used and dependences of the intensity distribution are obtained for various thicknesses of the crystal. It is shown that the slit edges introduce inhomogeneous intensity distortions inside the Bormann triangles with an angle of $2\theta_B$, where θ_B is the Bragg angle. In the area where the triangles intersect, the intensity distribution is similar to that for diffraction by a slit in air at a certain (large) distance. An equation for the correspondence between the distance and the thickness of the crystal is obtained, which describes well the results of numerical calculations.