

## ĐẶC ĐIỂM PHỔ VÀ PHÂN BỐ GÓC CỦA BỨC XẠ TIA X THAM SỐ (PXR) TRONG TINH THỂ MỎNG

Nguyễn Quang San<sup>1\*</sup>, Lê Đại Vương<sup>1</sup>, Võ Quang Nhã<sup>1</sup>, Hồ Việt<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Đại học Huế

<sup>2</sup> Trường Cao đẳng Công nghiệp Huế

\*Email: [nguyenquangsan@hueuni.edu.vn](mailto:nguyenquangsan@hueuni.edu.vn)

Ngày nhận bài: 8/02/2026; ngày hoàn thành phản biện: 9/3/2026; ngày duyệt đăng: 14/3/2026

### TÓM TẮT

Bài báo tập trung nghiên cứu lý thuyết về đặc điểm phổ và phân bố góc của bức xạ tia X tham số (PXR) phát sinh khi các hạt tích điện chuyển động cực nhanh qua tinh thể mỏng. Dựa trên lý thuyết nhiễu xạ động học, chúng tôi thiết lập các biểu thức giải tích cho cường độ bức xạ và mật độ photon. Kết quả cho thấy trong tinh thể mỏng, cường độ PXR tỷ lệ thuận với bình phương độ dày tinh thể ( $L^2$ ) và có sự tương đồng sâu sắc với bức xạ Vavilov-Cherenkov. Đặc biệt, phân bố góc của PXR bộc lộ một cực tiểu tại tâm vết nhiễu xạ, với các cực đại phân bố theo dạng hình elip. Bằng cách so sánh định lượng với các nguồn tia X truyền thống (như ống RU-1500), bài báo chỉ ra rằng cường độ PXR cao hơn khoảng 4 bậc độ lớn ( $10^4$  lần). Ưu thế vượt trội này giúp rút ngắn đáng kể thời gian ghi nhận, mở ra triển vọng ứng dụng trong phân tích cấu trúc tinh thể và nghiên cứu động lực học cấu trúc vật liệu.

**Từ khóa:** Bức xạ tia X tham số, tinh thể mỏng, lý thuyết nhiễu xạ động học, phân bố góc, photon ảo, nhiễu xạ Bragg.

### 1. MỞ ĐẦU

Phát triển nguồn tia X đơn sắc, độ chói cao và điều khiển được bước sóng là nhiệm vụ then chốt trong tinh thể học, sinh học phân tử và khoa học vật liệu (Pellegrini, 2012). Bên cạnh bức xạ hãm hay synchrotron, tương tác giữa chùm hạt năng lượng cao và tinh thể tuần hoàn mở ra hướng chế tạo các nguồn tia X nhỏ gọn (Qingwei et al., 2025), trong đó nổi bật là Bức xạ tia X tham số (PXR). PXR, được dự báo bởi Baryshevsky và Feranchuk (Baryshevsky & Feranchuk, 1983), thực chất là sự nhiễu xạ Bragg của các photon ảo trên lưới tinh thể (Nitta, 1991). PXR ưu việt nhờ tính đơn sắc cao, mật độ phổ lớn và góc phát xạ rộng, giúp dễ dàng tách biệt tín hiệu khỏi nền nhiễu (Caticha, 1989).

Về mặt lý thuyết, nghiên cứu PXR gồm hai hướng chính: lý thuyết động học áp dụng cho tinh thể mỏng hoặc không hoàn hảo (Feranchuk & Ivashin, 1985) và lý thuyết động lực học (dựa trên phương trình Takagi-Taupin) áp dụng cho tinh thể dày, hoàn hảo (Takagi, 1969; Feranchuk et al., 2000). Thực nghiệm tại Tomsk năm 1985 đã xác nhận tiềm năng ứng dụng to lớn của hiện tượng này (Adishchev, 1985).

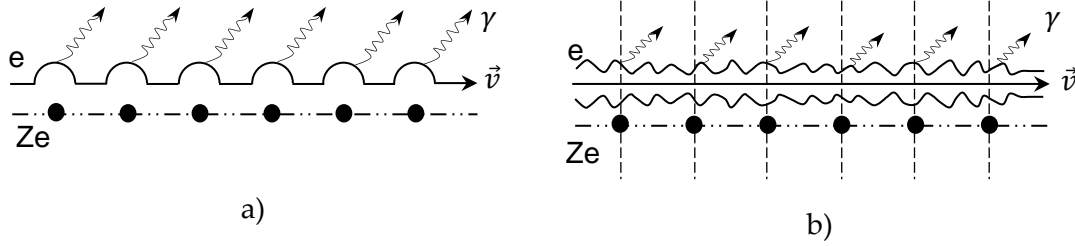
Hiện nay, sử dụng tinh thể mỏng đang trở thành xu hướng tất yếu trong các ứng dụng thực tiễn. Tuy nhiên, việc phân tích phổ năng lượng trong giới hạn tinh thể mỏng vẫn rất cấp thiết do sự giao thoa phức tạp giữa độ dài tương tác và độ dài hình thành bức xạ (Alexander, 2001). Đặc biệt, các hiệu ứng giao thoa với bức xạ chuyển tiếp nhiều xạ (Chesnokov et al., 2014) cùng sự phụ thuộc của cường độ vào  $L^2$  cần được làm rõ để tối ưu hóa hiệu suất nguồn tia X.

Trong bài báo này, chúng tôi thiết lập mô hình toán học và phân tích phổ PXR từ tinh thể mỏng bằng phương pháp photon ảo (Ахмезер & Берестецкий, 1969). Nghiên cứu tập trung khảo sát ảnh hưởng của độ dày, năng lượng electron và điều kiện hình học, đồng thời so sánh định lượng hiệu suất với các nguồn truyền thống như máy RU-1500 (Rigaku Technology, 2026). Kết quả nghiên cứu góp phần làm rõ bản chất các hiệu ứng động lực học và cung cấp cơ sở lý thuyết cho các thiết kế thực nghiệm tương lai.

Nội dung bài báo gồm: Phần 2 trình bày cơ sở lý thuyết và phương trình trường bức xạ; Phần 3 phân tích phổ, phân bố góc và so sánh định lượng với ống tia X truyền thống; cuối cùng là các kết luận và triển vọng ứng dụng.

## 2. TƯƠNG TÁC ĐIỆN TỪ CỦA MỘT HẠT MANG ĐIỆN VỚI MỘT TINH THỂ

Cấu trúc tuần hoàn của tinh thể ảnh hưởng đến tương tác điện từ qua hai cơ chế: (i) sự biến dạng quỹ đạo hạt gây giao thoa sóng và (ii) sự tán xạ kết hợp trường điện từ của hạt trên mạng tinh thể (Hình 1). Cơ chế đầu tiên tạo ra bức xạ hãm kết hợp (Ter-Mikaelian & Mikhail, 1969). Cơ chế thứ hai, phát sinh từ sự biến thiên tuần hoàn độ thẩm thấu điện môi, tồn tại ngay cả khi hạt chuyển động đều, tương tự bức xạ chuyển tiếp hoặc Cherenkov (Yuval et al., 2023; Zhaoyun et al., 2017; Xiao et al., 2021; Xiaoqiuyan et al., 2025). Trong môi trường tuần hoàn một chiều, hiện tượng này gọi là bức xạ tham số Vavilov-Cherenkov (Franca & Buhmann, 2024). Ter-Mikaelian (Ter-Mikaelian & Mikhail, 1969) từng sử dụng lý thuyết nhiễu loạn để xác định cường độ vi phân của loại bức xạ này trong tinh thể mỏng. Tại đây, chúng tôi phân tích chi tiết PXR nhằm làm rõ cơ chế phát sinh cùng ảnh hưởng của điều kiện thực nghiệm và tính không lý tưởng của tinh thể đối với phổ bức xạ.



Hình 1. Hai cơ chế chính gây phát xạ của điện tích trong tinh thể:

a) Bức xạ hãm kết hợp; b) Bức xạ tham số Vavilov-Cherenkov

Việc giải thích bản chất vật lý của các cơ chế bức xạ khác nhau từ một hạt mang điện tương đối tính trong tinh thể trở nên trực quan hơn khi sử dụng khái niệm photon ảo đây là một khái niệm mà chúng tôi sẽ thường xuyên đề cập đến trong các phần tiếp theo. Liên quan đến vấn đề này, hãy cùng nhắc lại một số kết quả dẫn đến sự hình thành khái niệm photon ảo (Ахизер & Берестецкий, 1969). Để thực hiện điều đó, chúng ta xem xét phép khai triển tích phân Fourier của trường điện từ tạo bởi một hạt mang điện  $e$ , chuyển động đều với vận tốc  $\vec{v}$  (Landau & Lifshitz, 1984) (lưu ý rằng từ đây về sau, nếu không có chỉ dẫn gì thêm, chúng ta sẽ sử dụng hệ đơn vị trong đó  $(\hbar = c = 1)$ ):

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \frac{ie}{2\pi^2} \int d\vec{k} \frac{\vec{v}(\vec{k}\vec{v}) - \vec{k}}{k_{\perp}^2 + k_z^2(1-v^2)} e^{i(\vec{k}\vec{r} - k_z vt)}; \\ \vec{H}(\vec{r}, t) &= \frac{ie}{2\pi^2} \int d\vec{k} \frac{[\vec{k}\vec{v}]}{k_{\perp}^2 + k_z^2(1-v^2)} e^{i(\vec{k}\vec{r} - k_z vt)},\end{aligned}\quad (2.1)$$

trong đó trục  $z$  trong các tích phân (2.1) hướng dọc theo vector vận tốc  $\vec{v}$ .

Đối với một hạt siêu tương đối tính có năng lượng  $E$  lớn hơn nhiều so với khối lượng nghỉ  $m$ , bất đẳng thức sau đây được thỏa mãn:

$$1 - v^2 = \frac{m^2}{E^2} \ll 1 \quad (2.2)$$

Trong điều kiện này, các thành phần Fourier trong phép khai triển (2.1) đạt cực đại nhọn trong khoảng xung lượng ngang:

$$k_{\perp} = k \sin \theta \lesssim \frac{m}{E} k \quad (2.3)$$

hệ quả là sự phụ thuộc vào thời gian của các hàm mũ trong khoảng tích phân trọng yếu trở nên gần như tương đồng với trường điện từ tự do, và biên độ đứng trước hàm mũ gần như là biên độ ngang (vuông góc):

$$\begin{aligned}\omega &= k_z v = kv\sqrt{1 - \sin^2 \theta} \approx k; \\ \epsilon_{kz} &\approx \frac{m}{E} \epsilon_{kx} \approx \frac{m}{E} \epsilon_{ky}.\end{aligned}$$

Dẫn đến việc trường điện từ của hạt siêu tương đối tính, với độ chính xác đến các số hạng cỡ  $\sim m/E$ , được biểu diễn dưới dạng một tập hợp các sóng phẳng không tương tác:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \int d\vec{k}_\perp d\omega \vec{E}(\vec{k}_\perp, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}; \\ \vec{H}(\vec{k}_\perp, \omega) &= [\vec{v}\vec{E}(\vec{k}_\perp, \omega)],\end{aligned}\quad (2.4)$$

mỗi sóng trong số đó mô tả trạng thái của một photon ảo với xung lượng  $\vec{k}$ , tần số  $\omega$  và biên độ điện trường:

$$\vec{E}(\vec{k}_\perp, \omega) = -\frac{ie\vec{v}}{2\pi^2 k_\perp^2 v^2 + \omega^2(1-v^2)} \vec{k}_\perp.$$

Như vậy, tương tác điện từ của điện tích tương đối tính với tinh thể có thể được xem như sự tán xạ của một chùm photon ảo, với hướng của các vectơ xung lượng tập trung trong một hình nón có góc mở:

$$\Delta\theta \sim \frac{m}{E} \ll 1,$$

trong khi đó, sự phân bố phổ của các photon ảo được xác định bằng cách tích phân theo  $k_\perp^2$  dựa trên mật độ dòng năng lượng của trường (2.4):

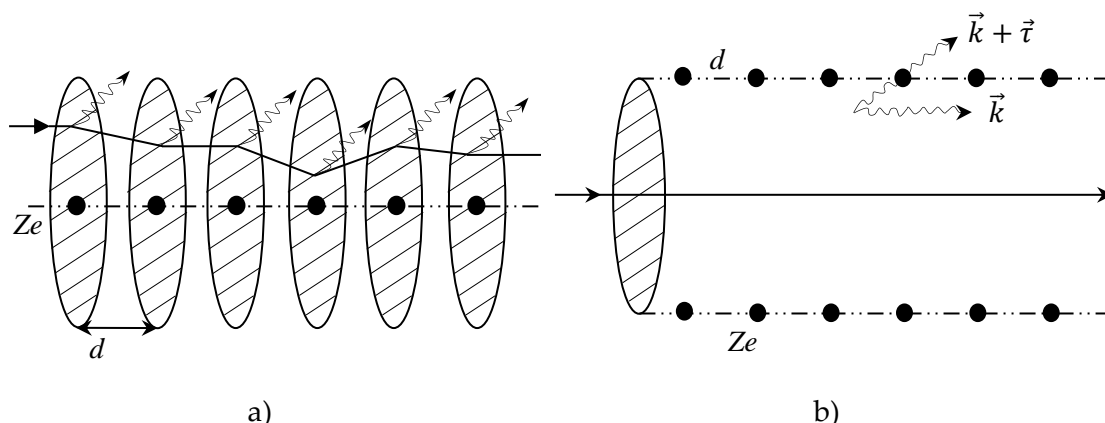
$$n_\omega d\omega = \frac{2z^2 e^2}{\pi v^2} \frac{d\omega}{\omega} \ln \frac{\rho_{max}}{\rho_{min}}. \quad (2.5)$$

Lưu ý rằng, sự phân bố không gian của photon ảo với một tần số nhất định được xác định bởi một gói sóng có kích thước ngang tập trung gần quỹ đạo của hạt (Landau & Lifshitz, 1984).

$$\Delta\rho \approx \frac{1}{\omega} \frac{E}{m},$$

Các giá trị của tham số va chạm tối thiểu  $\rho_{min}$  và tối đa  $\rho_{max}$  phụ thuộc vào bối cảnh cụ thể của từng bài toán. Điều quan trọng là trong trường điện từ của một hạt mang điện tương đối tính luôn chứa các photon ảo ở mọi bước sóng với trọng số  $\sim \omega^{-1}$ . Xét từ quan điểm này, quá trình bức xạ tương ứng với sự tán xạ Compton của các photon ảo trên các hạt mang điện khác và sự chuyển hóa của chúng thành các photon thực. Từ đó, có thể đưa ra giải thích vật lý cho hai cơ chế bức xạ trong tinh thể đã đề cập ở trên như sau:

- Cơ chế thứ nhất: Trong hệ quy chiếu mà hạt mang điện đứng yên và các nguyên tử tinh thể bay tới với vận tốc tương đối tính, trường điện từ của tinh thể được biểu diễn dưới dạng các bó photon ảo sắp xếp tuần hoàn. Các bó này sẽ tán xạ trên hạt điện tích đang đứng yên. Trong hệ quy chiếu phòng thí nghiệm, quá trình này tương ứng với việc hạt mang điện đánh bật các photon thực ra khỏi các bó photon ảo bao quanh các electron và hạt nhân tinh thể. Hiện tượng này chính là bức xạ hãm kết hợp khi các điều kiện về xung lượng và tần số của photon phát ra được thỏa mãn (Hình 2a).



Hình 2. Bức xạ trong tinh thể dưới dạng tán xạ của các photon ảo:

a) Bức xạ hãm kết hợp; b) Bức xạ tham số

- Cơ chế thứ hai: Quá trình ngược lại cũng có thể xảy ra, khi các photon ảo thuộc trường riêng của chính hạt mang điện đang bay vào tinh thể bị tán xạ kết hợp bởi mạng tinh thể (Hình 2b). Cơ chế chuyển đổi các photon ảo này thành trường bức xạ chính là bức xạ Vavilov-Cherenkov tham số. Trường hợp tinh thể mỏng tương ứng với phép xấp xỉ động học trong lý thuyết nhiễu xạ, khi mà sự khúc xạ của photon và ảnh hưởng ngược của sóng nhiễu xạ lên sóng tới là không đáng kể.

Dựa trên mô hình ở Hình 2, có thể thấy rõ rằng hai cơ chế bức xạ này khác biệt đáng kể về cả phân bố phổ-góc lẫn sự phụ thuộc của tần số đặc trưng vào năng lượng hạt. Thật vậy, sự cộng kết hợp của các photon phát ra khi hạt va chạm với hai nguyên tử kề nhau trong chuỗi tinh thể (cách nhau một khoảng  $d$ ) chỉ có thể xảy ra khi thỏa mãn hệ thức sau (Ter-Mikaelian & Mikhail, 1969):

$$\frac{d}{v} - d \cos \theta = \frac{2\pi n}{\omega}, \quad (2.6)$$

trong đó  $n$  là một số nguyên khác không. Từ động học của tán xạ Compton (Rybicki, 2003), chúng ta biết rằng khi va chạm với một điện tích tương đối tính, photon sẽ bay ra dưới một góc  $\theta \lesssim m/E$  so với hướng chuyển động của hạt. Khi đó, từ hệ thức (2.6), tần số đặc trưng của các photon phát ra được xác định bởi công thức:

$$\omega_n \approx \frac{2\pi n}{d} \left(\frac{E}{m}\right)^2 \quad (2.7)$$

Ở điều kiện  $E \gg m$ , tần số này nằm trong vùng phổ cứng hơn nhiều so với tia X và phụ thuộc rất mạnh vào năng lượng của hạt.

Ngược lại, sự tán xạ kết hợp của chùm photon ảo trong trường hợp Hình 2b cũng tương tự như khi một chùm photon thực đi qua tinh thể: nó sẽ trở nên đáng kể đối với các bước sóng có độ dài tương đương với chu kỳ mạng tinh thể (Vladimir Baryshevsky

, Ilya Feranchuk & Alexander Ulyanenko, 2005) và do đó nằm trong dải tia X. Sự tán xạ kết hợp của các photon ảo có xung lượng  $\vec{k}$ , thỏa mãn điều kiện nhiễu xạ Wulf-Bragg:

$$(\vec{k} + \vec{\tau})^2 \approx k^2 \quad (2.8)$$

với  $\vec{k}$  là một trong các vectơ mạng đảo của tinh thể, dẫn đến sự nhiễu xạ của chúng và hình thành các photon thực với xung lượng  $\vec{k} + \vec{\tau}$ , hướng của xung lượng này được xác định bởi góc giữa vector vận tốc của hạt và hệ các mặt tinh thể xảy ra sự nhiễu xạ của các photon ảo. Vì lý do đó, đối với các hạt siêu tương đối tính ( $E \gg m$ ), góc phát xạ của các photon hầu như không phụ thuộc vào năng lượng  $E$  mà được quyết định bởi cấu trúc của tinh thể (xem Hình 3). Đặc biệt, bức xạ có thể phát ra theo hướng ngược lại với vận tốc của hạt. Việc phát xạ các photon tia X ở các góc lớn so với hướng vận tốc của hạt là dấu hiệu đặc trưng nhất của bức xạ Vavilov-Cherenkov tham số. Điều này là do trong bất kỳ quá trình tương tác nào khác của hạt mang điện siêu tương đối tính với vật chất, các hạt thứ cấp (electron, photon, v.v.) đều lan truyền dưới một góc rất nhỏ  $\Delta\theta \lesssim m/E$  so với hướng chuyển động của hạt sơ cấp.

Các đặc tính cơ bản của phân bố phổ-góc trong bức xạ tham số có thể dễ dàng xác định được khi phân tích điều kiện nhiễu xạ của các photon ảo (2.8). Thật vậy, nếu ta chọn trục  $z$  của hệ tọa độ dọc theo vận tốc  $\vec{v}$  và thay vào phương trình này xung lượng của photon ảo  $\vec{k} = (\vec{k}_\perp, \frac{\omega}{v})$ , ta sẽ có:

$$2(\vec{k}_\perp \vec{\tau}_\perp) + \frac{2\omega}{v} \tau_z + \tau^2 \approx 0 \quad (2.9)$$

Do đối với các hạt siêu tương đối tính, tỷ số  $|\vec{k}_\perp|/\omega \sim m/E \ll 1$ , nên phương trình (2.9) sẽ xác định tần số của bức xạ được tạo ra từ sự nhiễu xạ của các photon ảo trên hệ các mặt tinh thể tương ứng với vectơ mạng đảo  $\vec{\tau}$ :

$$\omega_\tau = \frac{\tau^2}{2|\tau_z|} = \frac{\tau}{2 \sin \theta_b} = \frac{\pi n}{d \sin \theta_b}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

trong đó, các ký hiệu về góc được mô tả chi tiết trong Hình 3. Rõ ràng, đại lượng  $2(\vec{k}_\perp \vec{\tau})$  dẫn đến sự tán rộng của tần số các photon phát ra trong khoảng:

$$\frac{\Delta\omega_\tau}{\omega_\tau} \lesssim \frac{m}{E} \quad (2.11)$$

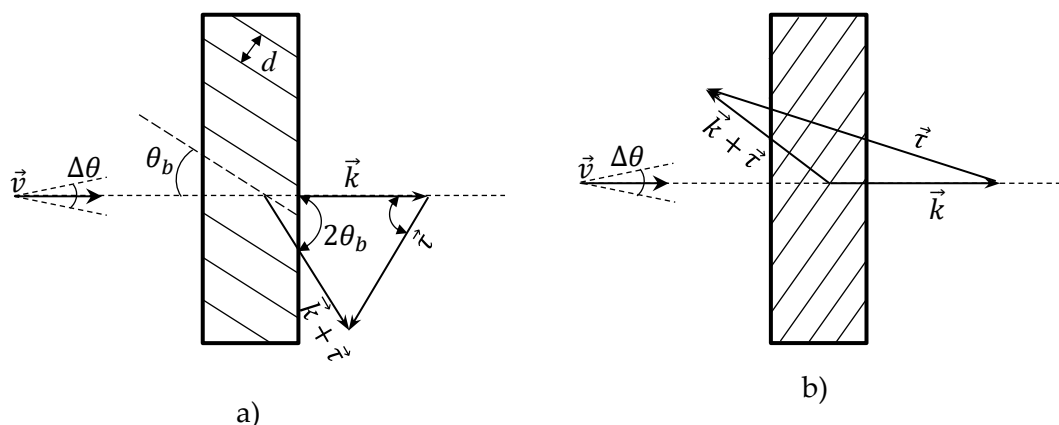
Các photon với tần số (2.10) được phát ra trong một hình nón hẹp với góc mở:

$$\Delta\theta \lesssim m/E \quad (2.12)$$

hình nón này kéo dài dọc theo hướng:

$$\omega_\tau \vec{v} + \vec{\tau}, \quad (2.13)$$

hướng này trùng với hướng nhiễu xạ  $\vec{k} + \vec{\tau}$  của photon ảo có tần số  $\omega_\tau$  (xem Hình 3).



Hình 3. Động học của bức xạ tham số:

a) Trường hợp Laue; b) Trường hợp Bragg

Vì trường điện từ của hạt chứa một phổ tần số liên tục (2.5), nên đối với mỗi vector  $\vec{\tau}$  bất kỳ, luôn tồn tại các photon ảo thỏa mãn điều kiện nhiễu xạ trên hệ mặt tinh thể tương ứng. Điều này dẫn đến một kết luận quan trọng: bức xạ tham số trong tinh thể mỏng tạo ra một hình ảnh nhiễu xạ hoàn toàn tương tự như hình ảnh thu được khi cho một chùm tia X có phổ liên tục nhiễu xạ trên chính tinh thể đó (2.5).

Việc phân tích cường độ của bức xạ tham số đòi hỏi một mô tả định lượng chính xác về quá trình nhiễu xạ của các photon ảo. Cần lưu ý rằng, tương tự như các bài toán tán xạ trên nhiều tâm (Ta-You & Ohmura, 2014), việc nghiên cứu độc lập các cơ chế bức xạ khác nhau trong tinh thể chỉ khả thi khi tương tác của cả hạt mang điện và bức xạ với tinh thể có thể được mô tả trong khuôn khổ của lý thuyết nhiễu loạn. Điều này chỉ đúng đối với các tinh thể có độ dày  $L$  đủ nhỏ (giới hạn định lượng của  $L$  sẽ được thảo luận ở phần sau). Ngoài ra, vì chúng ta đang xét dải tần số  $\omega \ll E$ , quá trình bức xạ này có thể được mô tả một cách hiệu quả dựa trên các định luật của điện động lực học cổ điển.

### 3. PHỔ PXR TRONG TINH THỂ MỎNG

Cường độ bức xạ từ một hạt chuyển động theo một quỹ đạo bất kỳ  $\vec{r}_1 = \vec{r}_1(t)$  có thể được tính toán bằng công thức đã biết (Landau & Lifshitz, 2011):

$$W_{\vec{n}\omega} = \frac{r^2}{4\pi^2} |\vec{E}(\vec{r}, \omega)|^2; \quad \vec{n} = \frac{\vec{r}}{r},$$

trong đó trường  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$  ở khoảng cách lớn  $r$  so với điện tích là nghiệm của các phương trình Maxwell sau đây (Alexandrov, Bogdankevich & Rukhadze, 2013):

$$[-\text{rot rot} \vec{E}(\vec{r}, \omega) + \omega^2 \vec{E}]_{\alpha} + 4\pi i \omega \sigma_{\alpha\beta} \epsilon_{\beta} = -4\pi i \omega j_{\alpha}(\vec{r}, \omega), \quad (3.1)$$

Ở đây,  $\sigma_{\alpha\beta}$  là tensor độ dẫn của tinh thể, trong phép xấp xỉ tuyến tính nó xác định tương tác của bức xạ với môi trường;  $j_{\alpha}(\vec{r}, \omega)$  là ảnh Fourier của dòng hạt:

$$\vec{j}(\vec{r}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \vec{j}(\vec{r}, t) dt ; \vec{j}(\vec{r}, \omega) = e\vec{v}(t)\delta[\vec{r} - \vec{r}_1(t)].$$

Việc giải các phương trình không thuần nhất (3.1) có thể được đưa về việc giải các phương trình Maxwell thuần nhất bằng cách sử dụng phương pháp đã được xem xét trong tài liệu (Baryshevsky, 2012). Để thực hiện điều này, ta biểu diễn trường  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$  qua hàm Green  $G_{\alpha\beta}(\vec{r}\vec{r}'\omega)$  của vế trái phương trình (3.1):

$$\vec{E}_{\alpha}(\vec{r}, \omega) = \int G_{\alpha\beta}(\vec{r}\vec{r}'\omega) i\omega j_{\beta}(\vec{r}'\omega) d\vec{r}' \quad (3.2)$$

Vì chúng ta quan tâm đến trường ở khoảng cách lớn (vùng xa) so với điện tích, nên trong công thức (3.2) có thể sử dụng biểu thức tiệm cận của hàm Green khi  $r \gg r'$ :

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}\vec{r}'\omega) \approx \frac{e^{ikr}}{r} \sum_s e_{\alpha}^{(s)} \varepsilon_{\vec{k}\beta s}^{(-)*}(\vec{r}'\omega); \vec{k} = \omega \frac{\vec{r}}{r} \quad (3.3)$$

Trong đó,  $\vec{e}^{(s)}$  là các vectơ đơn vị đại diện cho trạng thái phân cực của trường, còn hàm  $\vec{E}_{\vec{k}s}^{(-)}$  là nghiệm của các phương trình Maxwell thuần nhất, thỏa mãn điều kiện biên sau đây tại vô hạn:

$$\begin{aligned} (-rot rot \vec{E}^{(-)} + \omega^2 \vec{E}_{\vec{k}}^{(-)})_{\alpha} - 4\pi i\omega \sigma_{\alpha\beta}^* \varepsilon_{\beta\vec{k}}^{(-)} &= 0 \\ \vec{E}_{\vec{k}s}^{(-)} \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \vec{e}^{(s)} e^{i\vec{k}\vec{r}} + const \frac{e^{-ikr}}{r}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

nghĩa là tại  $r \rightarrow \infty$ , trường chứa một sóng cầu hội tụ. Cần lưu ý rằng các biểu thức tiệm cận (3.3) và tính chất của hàm  $\vec{E}_{\vec{k}s}^{(-)}$  sẽ được thảo luận chi tiết trong các công trình sau này; ở đây, chúng tôi chỉ đưa ra một hệ thức giúp đơn giản hóa việc tính toán hàm  $\vec{E}_{\vec{k}s}^{(-)}$  như sau:

$$\left(\vec{E}_{\vec{k}s}^{(-)}\right)^* = \vec{E}_{-\vec{k}s}^{(+)} \quad (3.5)$$

trong đó,  $\vec{E}_{\vec{k}s}^{(+)}$  là nghiệm của các phương trình Maxwell thuần nhất (3.4), mô tả sự nhiễu xạ của bức xạ tia X từ bên ngoài vào tinh thể, và là nghiệm của bài toán nhiễu xạ thông thường.

Sử dụng các công thức từ (3.3) đến (3.5) và biểu thức tường minh của dòng điện, chúng ta thu được công thức tổng quát cho mật độ phổ năng lượng bức xạ của hạt trong tinh thể:

$$\begin{aligned} W_{\vec{n}\omega} &= \frac{e^2 \omega^2}{4\pi} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_s e^{i\omega t} \vec{v}_1(t) \vec{E}_{\vec{k}s}^{(-)*}(\vec{r}_1(t), \omega) \right|^2 \\ &= \frac{e^2 \omega^2}{4\pi} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_s e^{i\omega t} \vec{v}_1(t) \vec{E}_{-\vec{k}s}^{(+)*}(\vec{r}_1(t), \omega) \right|^2, \end{aligned} \quad (3.6)$$

công thức này là sự tổng quát hóa của công thức kinh điển trong điện động lực học đã được biết đến rộng rãi:

$$W_{\vec{n}\omega} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_s (\vec{e}_s \cdot \vec{v}_1(t)) e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}_1(t)} \right|^2$$

Tiếp theo, chúng ta xem xét bức xạ trong tinh thể mỏng dựa trên công thức (3.6). Ở phép xấp xỉ bậc không, khi sự thay đổi quỹ đạo của hạt và trường điện từ trong tinh thể bị bỏ qua, ta có:

$$\vec{r}_1(t) = \vec{v}_0 t; \quad \vec{v}_0 = \text{const}; \quad \vec{E}_{\vec{k}s}^{(\pm)} = \vec{e}^{(s)} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

và như thường lệ, cường độ bức xạ từ một điện tích chuyển động thẳng đều trong chân không sẽ bằng không. Tuy nhiên, nếu chúng ta xét đến sự thay đổi quy luật chuyển động của hạt do tương tác với các nguyên tử sắp xếp tuần hoàn trong tinh thể:

$$\vec{r}_1(t) = \vec{v}_0(t) + \vec{r}^{(l)}(t); \quad |\vec{r}^{(l)}| \ll v_0 t$$

$$m \frac{d}{dt} \frac{\vec{r}^{(l)}}{\sqrt{1 - v_0^2}} = \sum_i \vec{F}(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad ,$$

cũng như sự nhiễu xạ của trường điện từ trong tinh thể:

$$\vec{E}_{\vec{k}s} = \vec{e}^{(s)} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \vec{E}_{\vec{k}s}^{(l)}; \quad |\vec{E}_{\vec{k}s}^{(l)}| \ll 1 \quad ,$$

thì mật độ phổ bức xạ trong phép xấp xỉ bậc nhất theo  $\vec{r}^{(l)}$  và  $\vec{E}_{\vec{k}s}^{(l)}$  sẽ có dạng:

$$W_{\vec{n}\omega} = W_{\vec{n}\omega}^{(1)} + W_{\vec{n}\omega}^{(2)} \quad (3.7)$$

Trong đó, số hạng thứ nhất:

$$W_{\vec{n}\omega}^{(1)} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_s \vec{e}^{(s)} [i\vec{v}_0(\vec{k}\vec{r}^{(l)}) - \vec{v}^{(l)}] e^{i(\omega - \vec{k}\vec{v}_0)t} \right|^2$$

mô tả bức xạ hãm kết hợp, số hạng thứ hai:

$$W_{\vec{n}\omega}^{(2)} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_s \vec{v}_0 \vec{E}_{\vec{k}s}^{(l)}(\vec{v}_0 t, \omega) e^{i\omega t} \right|^2 \quad (3.8)$$

xác định bức xạ tham số trong tinh thể mỏng. Kết quả này có thể so sánh với các biểu thức về cường độ bức xạ cộng hưởng trong môi trường tuần hoàn ba chiều (Ter-Mikaelian & Mikhail, 1969) và các công thức về cường độ của các đỉnh phụ của bức xạ tia X thu được trong công trình (Garibyan & Yan Shi, 1971). Như vậy, loại bức xạ này được gây ra bởi sự khác biệt giữa trường trong tinh thể và sóng phẳng, và nó phát sinh ngay cả khi hạt chuyển động thẳng đều. Cần lưu ý rằng trong công thức (3.7), chúng ta bỏ qua sự giao thoa giữa hai cơ chế bức xạ này vì chúng tập trung ở các khoảng tần số khác nhau:

Bức xạ hãm kết hợp trong tinh thể mỏng đã được nghiên cứu chi tiết trong cuốn sách của Ter-Mikaelian (Ter-Mikaelian & Mikhail, 1969), do đó chúng ta sẽ chuyển sang phân tích PXR dựa trên công thức đơn giản (3.8), vì nhiều tính chất quan trọng của PXR

đã bộc lộ ngay cả trong trường hợp tinh thể mỏng. Trong (3.8), cần thay thế trường  $\vec{E}_{-\vec{k}s}^{(+)}$  được tìm thấy dựa trên lý thuyết nhiễu loạn theo tensor độ dẫn của tinh thể từ phương trình (3.4). Phép xấp xỉ này cho hàm  $\vec{E}_{\vec{k}s}^{(+)}$  tương ứng với lý thuyết nhiễu xạ động học đã rất quen thuộc (xem ví dụ (Waseda, Matsubara & Shinoda, 2011; Giovazzino et al., 2011)). Cần lưu ý rằng tương tác kết hợp của bức xạ tia X dẫn đến hiện tượng nhiễu xạ, tùy thuộc vào tần số bức xạ, sẽ được xác định bởi tán xạ Compton trên các electron, hoặc tán xạ cộng hưởng của bức xạ trên các nguyên tử hoặc hạt nhân của tinh thể. Chúng ta sẽ xem xét từng quá trình này một cách riêng biệt. Trường điện từ phát sinh khi tán xạ kết hợp bức xạ tia X bởi các electron trong tinh thể có dạng như sau:

$$\vec{E}_{-\vec{k}s}^{(+)} = \text{rot rot} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} n(\vec{r}') \vec{e}^{(s)} e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \frac{e^2}{m\omega^2} \quad (3.9)$$

ở đây  $n(\vec{r})$  là mật độ electron trong tinh thể, được lấy trung bình theo trạng thái cơ học lượng tử của các electron và hạt nhân. Cần lưu ý rằng khi xác định mật độ này, ta không sử dụng việc lấy trung bình theo các phần tử thể tích nhỏ về mặt vật lý như trong lý thuyết vĩ mô. Mật độ electron này là một hàm tuần hoàn theo tọa độ, và do đó có thể được khai triển thành chuỗi theo các vectơ mạng đảo của tinh thể:

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{\tau}} n_{\vec{\tau}} e^{i\vec{\tau}\vec{r}}. \quad (3.10)$$

Vectơ  $\vec{e}^{(s)}$  trong công thức (3.9) xác định trạng thái phân cực được ghi nhận bởi máy dò bức xạ, còn vectơ  $\vec{k}$  được xác định bởi hướng tới điểm quan sát:

$$\vec{k} = \omega \vec{n}.$$

Thay (3.9) và (3.10) vào công thức (3.8), ta tìm được:

$$W_{\vec{n}\omega} = \frac{e^2\omega^2}{4\pi^2} \left| \frac{e^2}{m\omega^2} \sum_{\vec{\tau}} n_{\vec{\tau}} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{[\vec{p}\vec{v}_0][\vec{p}\vec{e}^{(s)}]}{(p^2-\omega^2-i\epsilon)} \times \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega-\vec{p}\vec{v}_0)t} \int_V d\vec{r}' e^{i(\vec{p}-\vec{k}+\vec{\tau})\vec{r}'} \right|^2 \quad (3.11)$$

Một công thức tương tự như (3.11) cho cường độ bức xạ cộng hưởng trong tinh thể đã được Ter-Mikaelian (Ter-Mikaelian, 1972) thu được lần đầu tiên, sau đó tác giả đã xem xét giới hạn  $V \rightarrow \infty$  ( $V$  là thể tích tinh thể). Cách tiếp cận như vậy xác định chính xác hướng của các cực đại bức xạ, tuy nhiên nó không cho phép nghiên cứu sự phân bố của bức xạ ở vùng lân cận các cực đại này và, như chúng ta sẽ thấy ở phần dưới, nó không mô tả chính xác bức xạ dọc theo hướng chuyển động của hạt.

Khi thực hiện tích phân theo thể tích tinh thể trong công thức (3.11), kết quả thu được khác không đáng kể chỉ khi các điều kiện sau được thỏa mãn:

$$\vec{p} \approx \vec{k} - \vec{\tau} ; \quad p^2 \approx \omega^2$$

Trong khoảng giữa các giá trị này, cường độ bức xạ thực tế bằng không, điều này cho phép chúng ta xem xét một cách độc lập các cực đại cường độ bức xạ tương ứng với các vectơ mạng đảo  $\vec{\tau}$  khác nhau. Kết quả là, ta thu được biểu thức sau cho cường độ bức xạ:

$$W_{\vec{n}\omega} = \sum_{\vec{\tau}, s} W_{\vec{\tau}}^s ;$$

$$W_{\vec{\tau}}^s = e^2 \omega^2 \left( \frac{e^2}{m\omega^2} \right)^2 \frac{|n_{\vec{\tau}}|^2}{(2\pi)^2} \times \frac{(\vec{v}[\vec{p}[\vec{p}\vec{e}^{(s)}]])^2}{\left[ (\vec{k}_{\perp} - \vec{\tau}_{\perp})^2 \frac{\omega^2}{v^2} (1-v^2) \right]^2} \left| \int_0^L dz e^{i(\frac{\omega}{v} - k_z + \tau_z)z} \right|^2 \quad (3.12)$$

$$\vec{p}_{\perp} = \vec{k}_{\perp} - \vec{\tau}_{\perp} ; p_z = \frac{\omega}{v} ; \vec{v} = \vec{v}_0 ,$$

Trong đó  $L$  là độ dài của tinh thể dọc theo hướng vận tốc  $\vec{v}$ . Khi xây dựng công thức (3.12), giả thiết rằng kích thước tinh thể theo phương vuông góc với  $\vec{v}$  là vô hạn, do đó trong tích phân (3.11) ta có  $\vec{p}_{\perp} \rightarrow \vec{k}_{\perp} - \vec{\tau}_{\perp}$  trục  $z$  được chọn dọc theo  $\vec{v}$ . Khi ghi nhận photon mà không phân biệt trạng thái phân cực, cường độ bức xạ có dạng:

$$W_{\vec{\tau}} = \sum_s W_{\vec{\tau}}^s = e^2 \omega^2 \left( \frac{e^2}{m\omega^2} \right)^2 \frac{|n_{\vec{\tau}}|^2}{(2\pi)^2} \left| \int_0^L dz e^{i(\frac{\omega}{v} - k_z + \tau_z)z} \right|^2 \times \frac{p^2 [\vec{p}\vec{v}]^2 - ([\vec{p}\vec{n}][\vec{p}\vec{v}])^2}{\left[ (\vec{k}_{\perp} - \vec{\tau}_{\perp})^2 + \frac{\omega^2}{v^2} (1-v^2) \right]^2} \quad (3.13)$$

Các công thức (3.12) và (3.13) cho thấy sự tương đồng chặt chẽ giữa bức xạ đang xét và bức xạ Vavilov-Cherenkov trong môi trường đồng nhất. Thật vậy, trong trường hợp môi trường đồng nhất, chỉ cần tính đến thành phần bậc không của mật độ, và cường độ bức xạ sẽ được quyết định bởi nhân tử:

$$\left| \int_0^L e^{i(\frac{\omega}{v} - k_z)z} dz \right|^2 = 4 \frac{\sin^2 \frac{\omega}{2v} L (1-v \cos \theta)}{\left[ \frac{\omega}{v} (1-v \cos \theta) \right]^2} \quad (3.14)$$

Từ đây có thể thấy rằng đối với một lớp mỏng vật chất đồng nhất có độ dày  $L < \frac{1}{\omega(1-v \cos \theta)}$ , sự bức xạ của điện tích chuyển động thẳng đều là khả thi và cường độ bức xạ tỷ lệ thuận với  $L^2$ . Đồng thời, từ công thức (3.14) suy ra rằng khi  $L \rightarrow \infty$ , cường độ bức xạ trở nên nhỏ đáng kể. Tuy nhiên, trong một lớp vật chất dày, một kênh bức xạ mới xuất hiện từ hạt chuyển động thẳng đều, đó là bức xạ Vavilov-Cherenkov, vốn không được mô tả bởi công thức (3.13) mà đòi hỏi phải tính đến sự khúc xạ của các photon phát ra trong môi trường mà không sử dụng lý thuyết nhiễu loạn. Tình trạng tương tự cũng xảy ra khi xem xét bức xạ tham số Vavilov-Cherenkov, bởi vì công thức (3.13) chỉ áp dụng được cho các tinh thể có độ dày  $L$ :

$$L < \left[ \omega \left( \frac{e^2 n_0}{m\omega^2} \right) \right]^{-1} , \quad (3.15)$$

nghĩa là khi biên độ của sóng tán xạ trong tinh thể còn rất nhỏ so với sóng tới. Ta xét trường hợp tinh thể Germani (Ge) với mật độ electron  $n_0 \approx 4.47 \times 10^{25} \text{cm}^{-3}$ . Với năng lượng photon đặc trưng  $\omega \approx 1.9 \text{keV}$ , khi đó giá trị giới hạn độ dày tinh thể theo bất đẳng thức (3.15) được xác định vào khoảng  $L_{gh} \approx 12 \mu\text{m}$ . Việc chuyển sang giới hạn  $L \rightarrow \infty$

trong công thức này mà không tính đến sự khúc xạ và nhiễu xạ của photon một cách chính xác sẽ không mô tả đúng các đặc tính của PXR. Cụ thể, trong công trình (Garibyan & Yan Shi, 1971), dựa trên việc chuyển giới hạn nêu trên, đã đưa ra kết luận sai lầm về sự vắng mặt của các đỉnh nhiễu xạ trong bức xạ dọc theo hướng chuyển động của hạt. Trong khi đó, việc nghiên cứu các cực đại phụ của bức xạ khi  $\vec{\tau} \neq 0$  theo công thức (3.13) là khả thi cho cả đơn tinh thể mỏng và tinh thể khảm dày, tương tự như trong lý thuyết nhiễu xạ động học (Waseda, Matsubara & Shinoda, 2011; Giovazzino et al., 2011). Ngoài ra, công thức đơn giản (3.13) cho phép nghiên cứu sự phụ thuộc của bức xạ vào độ tán xạ góc và năng lượng của hạt, vào hình dạng tinh thể, v.v. Do đó, chúng ta sẽ xem xét chi tiết hơn các biểu thức thu được cho bức xạ trong tinh thể mỏng. Trước hết, rõ ràng là khi  $1 - v^2 \ll 1$ , bức xạ tập trung xung quanh vectơ  $\vec{k}$  thỏa mãn các điều kiện:

$$|\vec{k}_\perp - \vec{\tau}_\perp| \lesssim \frac{\omega}{v} \frac{m}{E}; \quad |k_z - \tau_z - \frac{\omega}{v}| \lesssim \frac{1}{L}; \quad |\vec{k}| = \omega \quad (3.16)$$

Để mô tả phân bố góc của các photon gần hướng này, ta đưa vào vectơ:

$$\vec{k}_0 = \omega_b \frac{\vec{v}}{v} + \vec{\tau}; \quad \omega_b = -\frac{\tau^2}{2\tau_z}, \quad (3.17)$$

là nghiệm chính xác của hệ phương trình (3.16). Ta cũng ký hiệu  $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$  và thiết lập hệ tọa độ như được mô tả trong Hình 4.

Hệ tọa độ để mô tả phân bố góc của PXR gần cực đại: Trục  $x$  nằm trong mặt phẳng tạo bởi các vectơ  $\vec{v}$  và  $\vec{\tau}$ . Trong hệ tọa độ này, từ (3.12) và (3.13), chúng ta tìm được các công thức sau cho phân bố phổ-góc của bức xạ:

$$\frac{\partial^3 W}{\partial \theta_x \partial \theta_y dU} = \frac{e^2 r_0^2 |n_\tau|^2}{2\pi^2 \tau^2} |R|^2 \frac{(\theta_x \cos \varphi \cos 2\theta_b + \theta_y \sin \varphi)^2}{[\theta_x^2 + \theta_y^2 + (1-v^2)]^2} \quad (3.18)$$

khi ghi nhận bức xạ với một phân cực xác định. Trong đó:  $\theta_b$  là góc Bragg giữa các mặt tinh thể (tương ứng với  $\vec{\tau}$ ) và vận tốc  $\vec{v}$ ;  $\theta_{x,y} = \frac{K_{x,y}}{\omega_b}$  là các góc ghi nhận photon trong mặt phẳng quan sát vuông góc với  $\vec{v}$ ;  $\varphi$  là góc giữa phương phân cực của máy dò và mặt phẳng nhiễu xạ (xác định bởi  $\vec{v}$  và  $\vec{\tau}$ );  $r_0 = e^2/m$  là bán kính điện từ cổ điển của electron; tham số  $U = \frac{2 \sin^2 \theta_b}{\cos 2\theta_b} \left( \frac{\omega}{v} - \omega_b \right)$  xác định độ lệch của tần số photon so với tần số Bragg  $\omega_b$ . Đại lượng  $|R|^2$  có dạng:

$$|R|^2 = \left| \int_0^L dz e^{i[U + \omega_b \theta_x \sin 2\theta_b]z} \right|^2 \quad (3.19)$$



0, sau đó đạt đến cực đại với biên độ  $\approx \frac{e^2 r_0^2 |n_\tau|^2}{2\pi \tau^2} L \left(\frac{E}{m}\right)^2$  tại các điểm của vết nhiễu xạ có tọa độ góc thỏa mãn phương trình elip:

$$\theta_y^2 (2 - \cos^2 2\theta_b) + \theta_x^2 \cos^2 2\theta_b = (1 - v^2) \cos^2 2\theta_b$$

và sau đó giảm nhanh về không khi  $\theta_{x,y} > m/E$ .

Năng lượng bức xạ toàn phần rơi vào vết nhiễu xạ khi một electron xuyên qua tinh thể được xác định bằng cách tích phân theo các góc trong công thức (3.22). Kết quả là, với  $\gamma = E/m \gg 1$ , ta tìm được:

$$W_\tau = e^2 r_0^2 \frac{|n_\tau|^2}{\tau^2} (1 + \cos^2 2\theta_b) L \ln \gamma \quad (3.23)$$

Một đặc tính quan trọng khi ghi nhận trên phim là mật độ photon rơi trên một đơn vị diện tích phim. Đại lượng này dễ dàng tìm được từ công thức (3.23):

$$I_s = e^2 r_0^2 \frac{|n_\tau|^2}{\tau^3} \sin \theta_b (1 + \cos^2 2\theta_b) \frac{L \ln \gamma}{S_0 + R^2 \gamma^{-2}} \quad (3.24)$$

trong đó  $S_0$  là diện tích tiết diện ngang của chùm electron,  $R$  là khoảng cách từ tinh thể đến phim.

Cường độ của vết nhiễu xạ PXR tỷ lệ thuận với bình phương thành phần Fourier của mật độ electron, và do đó, nó chứa đựng cùng một thông tin về cấu trúc tinh thể như thông tin thu được từ việc nghiên cứu sự nhiễu xạ của bức xạ tia X từ nguồn bên ngoài. Vì vậy, rõ ràng là PXR có thể được sử dụng trong phân tích cấu trúc tia X, dựa trên các phương pháp ghi nhận và giải mã phim chụp X-quang truyền thống (Glusker, Pickworth & Trueblood 2020; Hammond, 2015). PXR cho phép thu nhận đồng thời toàn bộ tập hợp các vết nhiễu xạ của tinh thể nghiên cứu và điều quan trọng nhất là, thời gian ghi nhận ngắn hơn đáng kể so với việc sử dụng các ống tia X hiện đại. Thật vậy, hãy ước tính số lượng photon theo công thức (3.24), biểu diễn nó qua các thông số của tinh thể đối với một phản xạ nhất định có các chỉ số Miller ( $hkl$ ):

$$I_s = \frac{e^2 r_0^2}{\Omega_0^2} e^{-2W} \frac{\sin \theta_b (1 + \cos^2 2\theta_b)}{(2\pi)^3} |S(hkl)|^2 |F(hkl)|^2 \frac{L d_{hkl}^3 \ln \gamma}{S_0 + R^2 \gamma^{-2}} \quad (3.25)$$

trong đó:  $\Omega_0$  là thể tích của ô đơn vị tinh thể,  $S(hkl)$  và  $F(hkl)$  lần lượt là thừa số cấu trúc của ô đơn vị và biên độ cấu trúc cho phản xạ đang xét;  $d_{hkl}$  là khoảng cách giữa các mặt phẳng tinh thể ( $hkl$ );  $e^{-2W}$  là hệ số Debye-Waller.

Ví dụ, đối với tinh thể Germani (Ge) có độ dày  $L = 10^{-3}$  cm;  $\gamma = 10^3$ ;  $S_0 = 10^{-2}$  cm<sup>2</sup>;  $R = 10^2$  cm;  $(hkl) \rightarrow (111)$ ;  $\theta_b = 30^\circ$  ta tìm được  $|S(111)|^2 = 64$ ;  $|F(111)|^2 = 625$ ;  $e^{-2W} \approx 0.8$ ;  $\Omega_0 = (5.72)^3 10^{-24}$  cm<sup>3</sup>;  $d_{111}^3 = \frac{1}{3\sqrt{3}} \Omega_0$ ;  $\omega_b = 1.9$  keV và

$$I_c \approx 1.6 \cdot 10^{-7} \frac{kV}{\text{electron.cm}^2}$$

Đồng thời, theo dữ liệu từ các công trình (Rossa et al., 1984; Otsuki et al., 1983), một ống tia X công suất lớn loại RU-1500 tạo ra trong cùng một vết nhiễu xạ này một lượng photon thấp hơn  $I_s \approx 10^{-11} \frac{kV}{\text{electron.cm}^2}$ , và do đó, có hiệu suất kém hơn đáng kể. Cường độ cao của PXR cho phép rút ngắn đáng kể thời gian thu nhận phim chụp X-quang, tạo điều kiện cho việc nghiên cứu động lực học của các quá trình biến đổi cấu trúc trong tinh thể.

Bây giờ, chúng ta hãy xem xét phổ tần số của PXR, phổ này có thể thu được bằng một máy dò ghi nhận tất cả các photon của một vết nhiễu xạ nhất định nhưng có khả năng chọn lọc theo năng lượng. Phổ này thu được bằng cách tích phân công thức (3.20) theo các góc với một giá trị cố định:

$$\frac{\partial W}{\partial U} = \frac{e^2 |n_\tau|^2}{2 \tau} L \cos \theta_b \frac{2u^2 \cos^2 2\theta_b + \gamma^{-2} \tau^2 \cos^2 \theta_b}{(U^2 + \gamma^{-2} \tau^2 \cos^2 \theta_b)^{3/2}} \quad (3.26)$$

Hàm số này đạt cực đại tại điểm:

$$U = \begin{cases} 0; 2\theta_b > \frac{\pi}{6}; \\ \frac{\tau \cos \theta_b}{\gamma \cos 2\theta_b} \sqrt{\frac{4 \cos^2 2\theta_b - 3}{2}}; 2\theta_b < \frac{\pi}{6} \end{cases}$$

với mật độ năng lượng tại cực đại:

$$\frac{e^2 |n_\tau|^2 E}{2 \tau^2 m}$$

Độ rộng của phổ được xác định bởi công thức:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_b} = \frac{m \cot \theta_b}{E \cos 2\theta_b},$$

Từ đó suy ra rằng việc nghiên cứu phổ tần số của PXR chỉ có thể thực hiện được bằng các máy dò có độ phân giải năng lượng cao, thỏa mãn điều kiện  $\frac{\Delta\omega}{\omega} < \frac{m}{E}$ .

#### 4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã thực hiện phân tích chi tiết các đặc tính vật lý của PXR phát sinh từ sự tương tác giữa hạt tích điện năng lượng cao và cấu trúc tuần hoàn của tinh thể mỏng. Thông qua việc áp dụng lý thuyết nhiễu xạ động học, chúng tôi đã trình bày đầy đủ một bức tranh toàn diện về cơ chế hình thành và tính chất của loại bức xạ này. Các kết quả nghiên cứu dẫn đến một số kết luận quan trọng sau: thứ nhất, bài báo đã khẳng định tính tương đồng về mặt bản chất giữa PXR trong tinh thể và bức xạ Vavilov-Cherenkov trong môi trường đồng nhất. Tuy nhiên, sự tuần hoàn của mật độ electron trong tinh thể đã tạo ra các kênh bức xạ mới dọc theo các vectơ mạng đảo, cho phép điều khiển hướng và năng lượng của photon thông qua việc thay đổi góc Bragg. Thứ hai, đặc điểm phổ-góc của PXR trong tinh thể mỏng thể hiện tính chất độc

đảo với sự xuất hiện cực tiểu cường độ tại tâm của vết nhiễu xạ. Sự phụ thuộc của cường độ vào bình phương độ dày tinh thể ( $L^2$ ) cho thấy tiềm năng to lớn trong việc tối ưu hóa hiệu suất nguồn bức xạ bằng cách điều chỉnh kích thước tinh thể trong giới hạn của độ dài dập tắt. Thứ ba, các tính toán so sánh cho thấy PXR có mật độ photon và cường độ tích hợp lớn hơn so với các nguồn tia X thương mại mạnh nhất hiện nay như RU-1500. Khả năng thu nhận đồng thời toàn bộ hệ thống các vết nhiễu xạ với thời gian phơi sáng cực ngắn là một ưu thế đột phá, cho phép chuyển từ các phép đo cấu trúc tinh sang nghiên cứu động lực học của các quá trình chuyển pha hoặc biến dạng mạng tinh thể trong thời gian thực.

Mặc dù xấp xỉ nhiễu xạ động học đã cung cấp những mô tả chính xác cho tinh thể mỏng, các nghiên cứu tiếp theo cần mở rộng sang lý thuyết nhiễu xạ động lực học để xem xét đầy đủ các hiệu ứng khúc xạ và hấp thụ photon trong các tinh thể có độ dày lớn hơn. Kết quả của bài báo không chỉ đóng góp nền tảng lý thuyết về bức xạ của các hạt chuyển động nhanh mà còn đặt nền móng kỹ thuật cho việc hiện thực hóa các nguồn tia X thế hệ mới, nhỏ gọn và hiệu quả cao tại các phòng thí nghiệm nghiên cứu vật liệu tiên tiến.

## LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Đại học Huế trong đề tài mã số DHH2025-18-05.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. C . Pellegrini (2012). The history of X-ray free-electron lasers, *The European Physical Journal H*, Vol. 37, pp. 659-708.
- [2]. Qingwei Zhai, Nikhil Pramanik, Ruihuan Duan, et al (2025). Enhanced tunable X-rays from bulk crystals driven by table-top free electron energies, *Nature Communications*, Vol. 16, pp. 11218.
- [3]. V. G. Baryshevsky, I. D. Feranchuk (1983). Parametric X-rays from ultrarelativistic electrons in a crystal : theory and possibilities of practical utilization, *J. Phys. France*, Vol. 44, pp. 913-922.
- [4]. H. Nitta (1991). Kinematical theory of parametric X-ray radiation, *Physics Letters A*, Vol. 158, pp. 270-274.
- [5]. A. Caticha (1989). Transition-diffracted radiation and the Čerenkov emission of x rays, *Phys. Rev. A*, Vol. 40, 8, pp. 4322-4329.
- [6]. YuN. Adishchev, et al (1985). Experimental observation of parametric x-ray emission, *JETP Letters*, Vol. 41, pp. 295-297.

- [7]. I.D. Feranchuk, A.V. Ivashin (1985). Theoretical investigation of the parametric X-ray features, *Journal de Physique*, Vol. 46, pp. 1981-1986.
- [8]. S. Takagi (1969). A Dynamical Theory of Diffraction for a Distorted Crystal, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 26, pp. 1239-1253.
- [9]. I.D. Feranchuk, A. Ulyanenko, J. Harada, C. H. Spence (2000). Parametric x-ray radiation and coherent bremsstrahlung from nonrelativistic electrons in crystals, *Physical Review E*, Vol. 62, pp. 4225.
- [10]. V.S. Alexander (2001). Current status of parametric X-ray radiation research, *Radiation Physics and Chemistry*, Vol. 61, pp. 283-291.
- [11]. Yu A. Chesnokov, et al (2014). Spectral distribution in the reflection of parametric X-rays, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 517, pp. 012018.
- [12]. A. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий (1969). Квантовая электродинамика (Lượng tử điện động lực học), Nhà xuất bản Hayka.
- [13]. Rigaku Corporation (2026). "Technology Timeline: X-ray Analysis Innovation", Website: <https://rigaku.com/about/technology-timeline>. [Truy cập ngày 26/03/2026].
- [14]. Ter-Mikaelian, L. Mikhail (1969). "Vliianie Sredy na Elektromagnitnye Protsessy pri Vysokikh Energiikh", *Publishing House of the Academy of Sciences of the Armenian SSR*. [In Russian].
- [15]. Yuval Adiv, Hao Hu, Shai Tsesses (2023). Observation of 2D Cherenkov Radiation, *Physical Review X*, Vol.13, pp. 011002.
- [16]. Zhaoyun Duan, Xianfeng Tang, Zhanliang Wang, et al (2017). Observation of the reversed Cherenkov radiation, *Nature Communications*, Vol. 8, pp. 14901.
- [17]. Xiao Lin, Hao Hu, Sajan Easo, et al (2021). A Brewster route to Cherenkov detectors, *Nature Communications*, Vol. 12, pp. 5554.
- [18]. Xiaoqiuyan Zhang, Sunchao Huang, Tianyu Zhang, et al (2025). Reverse Smith-Purcell radiation in photonic crystals, *Photonics Research*, Vol. 13, 4, pp. 1060-1066.
- [19]. O. J. Franca, Stefan Yoshi Buhmann (2024). Vavilov-Cherenkov radiation for parallel motion in three-dimensional topological insulators, *Physical Review B*, Vol. 110, pp. 195150.
- [20]. L. D. Landau and E. M. Lifshitz (1984). "Electrodynamics of Continuous Media", 2nd ed. Vol. 8 of *Course of Theoretical Physics*. Oxford: Pergamon Press.
- [21]. George B. Rybicki (2003). A New Kinetic Equation for Compton Scattering, *The Astrophysical Journal*, Vol. 584, 1, pp. 528.
- [22]. Vladimir Baryshevsky, Ilya Feranchuk, Alexander Ulyanenko (2005). "Parametric X-Ray Radiation in Crystals", *Springer Tracts in Modern Physics*, Springer Berlin, Heidelberg.
- [23]. Wu Ta-You, Takashi Ohmura (2014). "Quantum Theory of Scattering", Dover Publications.
- [24]. L. D. Landau and E. M. Lifshitz (2011). "The Classical Theory of Fields", Translated by Morton Hamermesh. 4th rev. English ed. Vol. 2 of *Course of Theoretical Physics*, Oxford: Pergamon Press.

- [25]. Andrej F Alexandrov, L. S. Bogdankevich, A. A. Rukhadze (2013). "Principles of Plasma Electrodynamics", Springer Berlin, Heidelberg.
- [26]. Baryshevsky Vladimir G (2012). "High-Energy Nuclear Optics of Polarized Particles", World Scientific.
- [27]. G. M. Garibyan, Yan Shi (1971). Quantum Microscopic Theory of Radiation by a Linearly Moving Charged Particle in a Crystal, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, Vol. 61, 9, pp. 930-943 [In Russian].
- [28]. Yoshio Waseda, Eiichiro Matsubara, Kozo Shinoda (2011). "X-Ray Diffraction Crystallography: Introduction", *Examples and Solved Problems*, Springer Berlin, Heidelberg.
- [29]. Giacovazzo, Carmelo, et al. "Fundamentals of Crystallography", 3rd edn. *International Union of Crystallography Texts on Crystallography*, (Oxford, 2011; online edn, Oxford Academic, 17 Dec. 2013).
- [30]. M. L. Ter-Mikaelian (1972). "High-Energy Electromagnetic", *Processes in Condensed Media*. Publisher, John Wiley & Sons.
- [31]. Glusker, Jenny Pickworth, Kenneth N Trueblood (2020). "Crystal Structure Analysis: A Primer", (Oxford, 2010; online edn, Oxford Academic, 12 Nov. 2020).
- [32]. Hammond, Christopher (2015). "The Basics of Crystallography and Diffraction", 4th edn (Oxford, 2015; online edn, Oxford Academic, 20 Aug. 2015).
- [33]. L. A. Rossa, M. Ianuzzi, La Monaca A (1984). An X-ray diffractometer for synchrotron radiation. *Nuclear Instruments and Methods*, Vol. 219, 1, pp. 227-232.
- [34]. Y. H. Otsuki, Y. Yamamura, M. Yoshimatsu (1983). Axial-channeling radiation of 5MeV electrons in high-Z materials.- *Physical Review B*, Vol. 28, 7, pp. 3718-3724.

## SPECTRAL CHARACTERISTICS AND ANGULAR DISTRIBUTION OF PARAMETRIC X-RAY (PXR) RADIATION IN THIN CRYSTALS

Nguyen Quang San<sup>1\*</sup>, Le Dai Vuong<sup>1</sup>, Vo Quang Nha<sup>1</sup>, Ho Viet<sup>2</sup>

<sup>1</sup>School of Engineering and Technology, Hue University

<sup>2</sup>Hue Industrial College

\*Email: [nguyenquangsan@hueuni.edu.vn](mailto:nguyenquangsan@hueuni.edu.vn)

### ABSTRACT

This paper investigates the spectral characteristics and angular distribution of Parametric X-ray Radiation (PXR) generated by ultra-relativistic charged particles traversing thin crystals. Based on kinematic diffraction theory, we derive analytical expressions for radiation intensity and photon density. The results demonstrate that in thin crystals, PXR intensity is proportional to the square of the crystal thickness ( $L^2$ ) and exhibits a close formal analogy to the Vavilov-Cherenkov radiation. Notably, the angular distribution of PXR reveals a central minimum within the diffraction spot, with maxima distributed in an elliptical pattern. Through quantitative comparison with traditional X-ray sources (such as the RU-1500), the study demonstrates that PXR intensity is approximately four orders of magnitude ( $10^4$ ) higher. This superior performance significantly reduces acquisition time, suggesting substantial potential for applications in crystal structure analysis and structural dynamics of materials.

**Keywords:** Parametric X-ray Radiation (PXR), thin crystal, kinematic diffraction theory, angular distribution, virtual photon, Bragg diffraction.