Изв. АН Армянской ССР, Физика, 1, 3—10 (1966)

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ РЕНТГЕНОВЫХ ЛУЧЕЙ ДЛЯ КРИСТАЛЛА КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

А. Г. АКРИТОВ, Д. А. БАДАЛЯН, П. А. БЕЗИРГАНЯН

В работе получено выражение для относительной интенсивности рентгеновых волн, отраженных от кристалла конечных размеров (непоглощающий кристалл). Получена теоретическая кривая зависимости максимальной относительной интенсивности от числа атомных плоскостей для кристалла кальцита. Показано, что полное отражение рентгеновых волн не происходит ни при каких углах падения.

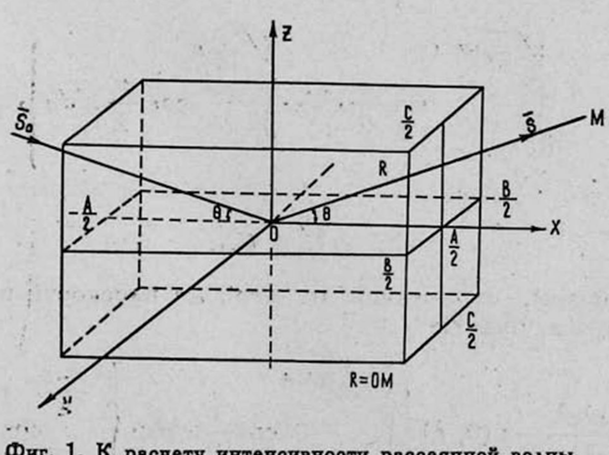
Как известно, в динамической теории интерференции рентгеновых лучей Дарвин рассматривает многократные отражения между неограниченными отражающими атомными плоскостями. Однако у реальных кристаллов ограничено не только число отражающих плоскостей (толщина кристаллов), но и размеры этих плоскостей (ширина и длина кристаллов).

В работах [1] и [2] рассмотрена задача динамической теории интерференции рентгеновых лучей для кристалла, ограниченного шириной и длиной, но не ограниченного толщиной (бесконечное число отражающих плоскостей с ограниченными размерами).

Рассмотрим задачу динамической теории интерференции рентгеновых лучей для кристаллов, ограниченных во всех трех направлениях (конечное число плоскостей с конечными размерами).

Пусть плоская монохроматическая волна падает на кристалл в направлении единичного вектора $\vec{S}_0$ (фиг. 1) и точка наблюдения из начала координат видна в направлении $\vec{S}$. Допустим, что векторы $\vec{S}_0$ и $\vec{S}$ имеют следующие направляющие косинусы:

$$\vec{S}_0 (\cos\theta,\ 0,\ -\sin\theta); \qquad \vec{S} (\cos\theta,\ 0,\ \sin\theta).$$



Фиг. 1. К расчету интенсивности рассеянной волны.

Отражающие плоскости кристалла параллельны плоскости XOY. Размеры кристалла в направлениях X, Y и Z соответственно равны A, B и C, периоды кристалла в направлениях X, Y и Z соответственно равны a, b и c. Если падающая волна в начале координат (0 0 0) имеет вид e^{ikct}, т. е. амплитуда волны в этой точке равна единице, то волна, отраженная от плоскости кристалла, совпадающей с плоскостью XOY, будет

$$G_0 = \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k) \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \exp\left(-i\frac{\pi}{2}x^2\right)dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \exp\left(-i\frac{\pi}{2}y^2\right)dy,$$

где n — число атомов на единицу площади плоскости,
e, m, c — фундаментальные постоянные,
λ — длина волны падающего рентгеновского излучения,
θ — угол скольжения, мало отличающийся от угла Вульфа-Брэгга,
$f(2\theta, k)$ — атомный фактор рассеяния.

В общем случае эта амплитуда комплексная, вещественная и мнимая части которой выражаются следующим образом:

$$G_0' = \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \cos\frac{\pi}{2}x^2 dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2 dy - \right.$$

$$\left. - \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \sin\frac{\pi}{2}x^2 dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2 dy \right\},$$

$$G_0'' = -\frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \cos\frac{\pi}{2}x^2 dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2 dy + \right.$$

$$\left. + \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \sin\frac{\pi}{2}x^2 dx \cdot \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2 dy \right\},$$

где

$$G_0 = G_0' + iG_0''.$$

Амплитуда волны, отраженной от этой же плоскости в направлении падающего пучка, будет:

$$\sum\nolimits_0' = \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(0, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \cos\frac{\pi}{2}x^2 dx \cdot \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2 dy - \right.$$

$$-\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \sin\frac{\pi}{2}x^2dx\cdot\int\limits^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2dy\Bigg\},$$

$$\sum\nolimits_0'' = -\frac{n\lambda^2e^2}{2mc^2\sin\theta}f(0,\ k)\Bigg\{\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \cos\frac{\pi}{2}x^2dx\cdot\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2dy +$$

$$+\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A} \sin\frac{\pi}{2}x^2dx\cdot\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2dy\Bigg\},$$

где $\sum_0'$ и $\sum_0''$ — вещественная и мнимая части амплитуды этой волны.

Разностные (рекуррентные) уравнения в рассматриваемом случае примут вид (случай непоглащающего кристалла):

$$\begin{aligned} S_r &= \alpha T_r + \beta\cdot\gamma\cdot S_{r+1}, \\ T_{r+1} &= \beta\cdot\gamma\cdot T_r + \alpha\cdot\gamma^2\cdot S_{r+1}, \\ T_r &= \beta\cdot\gamma\cdot T_{r-1} + \alpha\cdot\gamma^2\cdot S_r, \end{aligned} \tag{1}$$

где T_r — амплитуда волны, распространяющейся в направлении первичного пучка, над плоскостью r,

S_r — амплитуда волны, отраженной от плоскости r,

$$\alpha = G_0, \quad \beta = 1 + \sum\nolimits_0, \quad \gamma = \exp(-ikd\sin\theta),$$

где d — межплоскостное расстояние отражающих плоскостей. Из (1) получим

$$\beta\cdot\gamma\cdot(T_{r+1} + T_{r-1}) = T_r(1 - \alpha^2 + \beta^2\gamma^2). \tag{2}$$

Последнее можно решить подстановкой

$$T_r = T_0x^r, \quad \text{где} \quad |x| < 1, \tag{3}$$

Если число отражающих плоскостей конечно и равно m, то

$$S_0 \neq 0, \quad S_1 \neq 0 \cdots S_{m-1} \neq 0, \quad S_m = 0.$$

Из первого уравнения системы (1) для различных r имеем

$$\begin{aligned} S_0 &= \alpha T_0 + \beta\cdot\gamma\cdot S_1 \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ S_i &= \alpha\cdot T_i + \beta\cdot\gamma\cdot S_{i+1}, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ S_{m-2} &= \alpha\cdot T_{m-2} + \beta\cdot\gamma\cdot S_{m-1}, \\ S_{m-1} &= \alpha T_{m-1}, \end{aligned}$$

откуда, имея также ввиду (3), получим:

$$S_0 = T_0 \alpha \sum_{i=0}^{m-1} \beta^i \gamma^i x^i. \tag{4}$$

После суммирования по i последнее выражение примет следующий вид:

$$\frac{S_0}{T_0} = \alpha \frac{1 - \beta^m \cdot \gamma^m \cdot x^m}{1 - \beta \cdot \gamma \cdot x}, \tag{5}$$

Для определения x подставим в уравнение (2) значение T_r из (3). Тогда получим

$$\beta \cdot \gamma \cdot \left(x + \frac{1}{x} \right) = 1 - \alpha^2 + \beta^2 \gamma^2. \tag{6}$$

В общем случае x — комплексная величина и, как уже сказано, $|x| \leq 1$. Следовательно, можем обозначить:

$$x = (1 - \eta)\, e^{-i\nu\pi} = (1 - \eta' - i\eta'')\, e^{-i\nu\pi},$$

где ν — целое число.

Имея в виду последнее, из (6) пренебрегая членами, содержащими степени малых величин $\sum_0'$, $\sum_0''$, G_0', G_0'', η', η'', v выше второго [3], получим:

$$\eta = \pm \sqrt{(\Sigma_0 - iv)^2 - G_0^2},$$

$$\eta' = \pm \sqrt[4]{\varkappa^2 + \varepsilon^2} \cdot \cos \frac{\varphi}{2},$$

$$\eta'' = \pm \sqrt[4]{\varkappa^2 + \varepsilon^2} \cdot \sin \frac{\varphi}{2},$$

где

$$v = kd \cos \theta_0 (\theta - \theta_0),$$

$$\varkappa = G_0''^2 + \Sigma_0'^2 + 2\Sigma_0'' \cdot v - \Sigma_0''^2 - G_0'^2 - v^2,$$

$$\varepsilon = 2(\Sigma_0' \cdot \Sigma_0'' - \Sigma_0' \cdot v - G_0' \cdot G_0''),$$

$$\varphi = \operatorname{arc\,tg} \frac{\varepsilon}{\varkappa}.$$

Знаки величин η, η', η'' выбираются таким образом, чтобы имело место

$$\left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 \leq 1.$$

Подставляя в (5) значения величин α, β, x и имея в виду малость величин Σ_0', Σ_0'', G_0', G_0'', η', η'', v для относительной амплитуды отраженной волны, в рассматриваемом случае получим:

$$\frac{S_0}{T_0} = (G_0' + iG_0'') \frac{1 - \exp\{m(\Sigma_0' - \eta')\} \cdot \exp\{im(\Sigma_0'' - v - \eta'')\}}{1 - \exp\{\Sigma_0' - \eta'\} \cdot \exp\{i(\Sigma_0'' - v - \eta'')\}}, \tag{7}$$

откуда для относительной интенсивности волн, отраженных от ограниченного кристалла, получим:

$$\left|\frac{S_0}{T_0}\right|^2 = (G_0'^2 + G_0''^2)\,\frac{1 - 2\cos\{(v + \eta'' - \Sigma_0'')\,m\}\exp\{-m(\eta' - \Sigma_0')\} + \exp\{-2m(\eta' - \Sigma_0')\}}{1 - 2\cos\{v + \eta'' - \Sigma_0''\}\exp\{-(\eta' - \Sigma_0')\} + \exp\{-2(\eta' - \Sigma_0')\}}. \quad (8)$$

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Исследование выражения (8) показывает, что ни при каких углах не будет полного отражения. Действительно, разберем конкретный пример — вычислим интенсивность в дифракционном максимуме при отражении рентгеновых лучей $M_0 k_{\alpha_1}$ от плоскостей (211) кристалла кальцита. Структурный фактор вычислим так, как указано в работах [1] и [3].

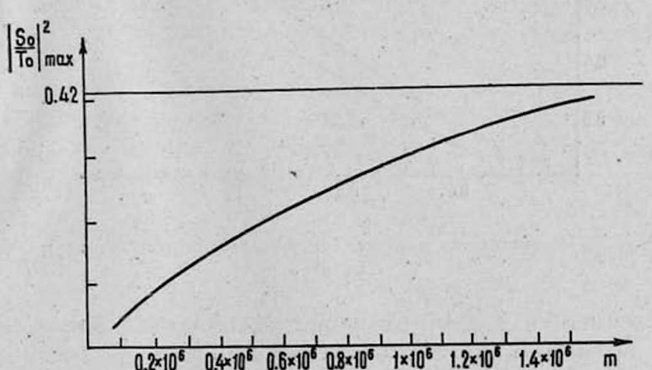
Вычислим амплитуды отраженной и рассеянных в направлении первичного пучка волн для данных размеров отражающих плоскостей и исследуем зависимость интенсивности отражения от числа отражающих атомных плоскостей.

Пусть размеры отражающих плоскостей будут $A = B = 10^{-4}$ см., а среднее расстояние облучаемого объема от точки наблюдения будет $R = 8$ *см.*

Максимальное значение относительной интенсивности отражения можно выразить следующим образом:

$$\left|\frac{S_0}{T_0}\right|^2_{\max} = M\left[1 - 2\cos\eta'' m\exp\left\{-m\left(\eta' - \Sigma_0'\right)\right\} + \exp\left\{-2m\left(\eta' - \Sigma_0'\right)\right\}\right].$$

Как видно из последнего выражения, с увеличением числа отражающих плоскостей, интенсивность отражения увеличивается, и в пределе при очень больших числах отражающих плоскостей относительная интенсивность стремится к предельному значению M (см. рис. 2). Величина M не зависит от числа отражающих плоскостей, а зависит от их размеров. В рассматриваемом случае ($A = B = 10^{-4}$ *см*) $M \simeq 0{,}42$, что соответствует случаю, рассмотренному в [1].



Фиг. 2. Зависимость максимального коэффициента отражения от числа отражающих атомных плоскостей.

Интересно сравнить результаты наших расчетов с результатами, полученными Дарвиным, для плоско-параллельной неограниченной кристаллической пластинки (кристалл ограничен двумя параллельными бесконечными плоскостями).

Для этого случая Дарвиным [4] получено следующее выражение для относительной амплитуды:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iq}{iv + \varepsilon \operatorname{ctgh} m\varepsilon}, \tag{9}$$

где iq — амплитуда отраженной волны от бесконечной атомной плоскости,

m — число отражающих плоскостей,

$$v = kd\cos\theta_1(\theta - \theta_1), \quad \varepsilon = \pm\sqrt{q^2 - v^2},$$

θ_1 — исправленный угол Вульфа-Брэгга.

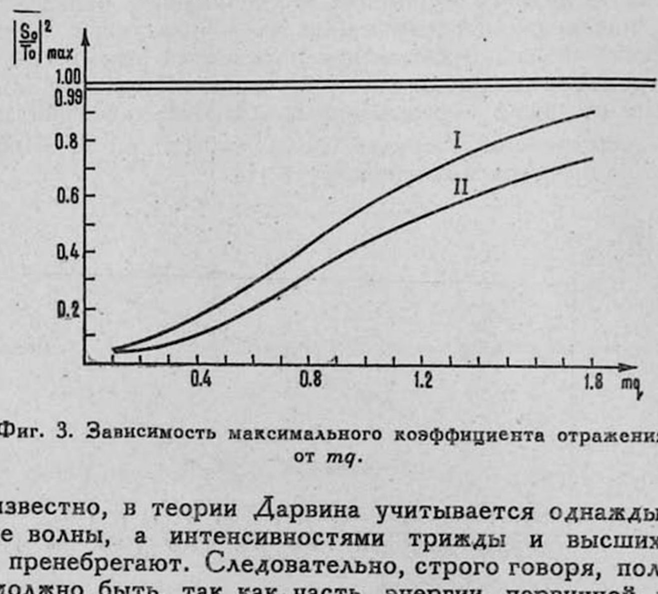
Максимальное значение выражения (9) можно привести к следующему виду

$$\frac{S_0}{T_0} = i \operatorname{tgh} mq. \tag{10}$$

Для максимального значения относительной интенсивности из (10) имеем

$$\left|\frac{S_0}{T_0}\right|^2_{max} = \operatorname{tgh}^2 mq.$$

Как видно из последнего (см. рис. 3, первая кривая), при бесконечно большом числе отражающих плоскостей получается полное отражение (непоглощающий кристалл).



Фиг. 3. Зависимость максимального коэффициента отражения от mq.

Как известно, в теории Дарвина учитывается однажды и дважды отраженные волны, а интенсивностями трижды и высших порядков отражений пренебрегают. Следовательно, строго говоря, полного отражения не должно быть, так как часть энергии первичной волны уходит в сторону с волнами высших порядков отражения.

Несмотря на это, теория Дарвина дает полное отражение, что объясняется тем, что Дарвиным получено неверное выражение для амплитуд отраженных и проходящих волн.

Амплитуда волны, рассеянной от одной плоскости, по Дарвину равна $-iq$, а амплитуда проходящей волны $|1-i\sigma|>1$, следовательно, получается, что интенсивность проходящей волны больше интенсивности падающей волны, когда отраженная волна уносит с собой часть энергии падающей волны.

Из (8) можно получить выражение для относительной интенсивности рентгеновских лучей, отраженных от неограниченной плоскопараллельной пластинки. Более точное выражение имеет следующий вид (см. [5]):

$$\left|\frac{S_0}{T_0}\right|^2 = q^2 \frac{1-2\cos\{(\sigma\sin\varphi+v+\eta'')\,m\}\exp m(\sigma\cos\varphi-\eta')\}+}{1-2\cos\{\sigma\sin\varphi+v+\eta''\}\exp(\sigma\cos\varphi-\eta')+}$$

$$\frac{+\exp\{2m(\sigma\cos\varphi-\eta')\}}{+\exp\{2(\sigma\cos\varphi-\eta')\}},$$

где $\sigma e^{i\varphi}$ — амплитуда рассеяннной в направлении первичного пучка волны, η' и η'', соответственно, действительная и мнимая части коэффициента экстинкции,

$$\cos\varphi = -\frac{\sigma^2+q^2}{2\sigma}.$$

Максимальное значение для относительной интенсивности можно привести к следующему виду

$$\left|\frac{S_0}{T_0}\right|^2_{\max} = \mu\left[1-2\exp(-mq)+\exp(-2mq)\right].$$

На рисунке 3 (вторая кривая) показано, как это последнее выражение при больших числах отражающих плоскостей стремится к своему предельному значению $\mu=0{,}99$.

Таким образом, из приведенных выше расчетов можно сделать следующие выводы:

1. При ограниченных отражающих плоскостях не будет полного отражения. Даже в случае больших чисел отражающих плоскостей относительная интенсивность отраженных волн значительно меньше единицы.

2. Более точные расчеты показывают, что при неограниченных отражающих плоскостях даже и тогда, когда их число бесконечно велико, полного отражения не будет (коэффициент отражения очень близок к единице, но меньше единицы).

Ереванский государственный
университет

Поступила 20 X—65

ЛИТЕРАТУРА

1. *П. А. Безирганян*, ДАН Арм.ССР, **29**, 315 (1959).
2. *П. А. Безирганян*, ДАН Арм.ССР, **33**, 236 (1960).
3. *А. Комптон* и *С. Алисон*, „Рентгеновские лучи, теория и эксперимент", ОГИЗ, 1941 г.
4. *C. G. Darwin*, Phil. Mag. **43**, 801 (1922).
5. *П. А. Безирганян*, ЖТФ (в печати).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԻՆՏԵՐՖԵՐԵՆՑԻԱՅԻ ԴԻՆԱՄԻԿ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆԸ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՎԵՐՋԱՎՈՐ ՉԱՓԵՐԻ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Ա. Գ. ԱԿՐԻՏՈՎ, Դ. Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ

Ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի դինամիկ տեսությունները քննարկում են կամ վերջավոր թվով անվերջ հարթություններ, կամ անվերջ թվով վերջավոր չափի հարթություններ։

Այս աշխատության մեջ խնդիրը լուծված է սահմանափակ չափերով և վերջավոր թվով ատոմային հարթություններ ունեցող բյուրեղի համար (չկլանող բյուրեղ)։

Ստացված են արտահայտություններ այդպիսի բյուրեղից անդրադարձած գումար ալիքի ամպլիտուդի և ինտենսիվության համար։

Կատարված են ավելի ճշգրիտ հաշվումներ հարթ-զուգահեռ անվերջ բյուրեղային թիթեղից անդրադարձած ռենտգենյան ճառագայթների հարաբերական ինտենսիվության համար։

Կարելի է անել հետևյալ հետևությունները.

1. Սահմանափակ բյուրեղից ռենտգենյան ճառագայթների լրիվ անդրադարձում չի ստացվում։ Անգամ շատ մեծ թվով անդրադարձնող հարթությունների դեպքում հարաբերական ինտենսիվությունն զգալիորեն փոքր է միավորից։

2. Ավելի ճշգրիտ հաշվումները ցույց են տալիս, որ անգամ անվերջ չափեր ունեցող բյուրեղից ռենտգենյան ճառագայթների լրիվ անդրադարձում չի ստացվում (անդրադարձման գործակիցը շատ մոտիկ է մեկի, սակայն մնում է մեկից փոքր)։

DYNAMIC THEORY OF X-RAY INTERFERENCE FOR THE CRYSTAL OF FINITE DIMENSIONS

by A. G. AKRITOV, D. A. BADALIAN, P. A. BEZIRGANIAN

The paper deals with an exression derved for the relative intensity of X-rays reflected from the crystal of finite dimensions (non-absorbing crystal). A theoretical curve is received for the maximum relative intensity versus the number of atomic planes for calcite. It is shown that no complete reflection of X-rays occurs in any case of incidence.