Изв. АН Армянской ССР, Физика, 1, 147—156 (1966)

ВЛИЯНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ ПРОХОДЯЩЕГО ПУЧКА РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ. 1

П. А. БЕЗИРГАНЯН, В. И. АВУНДЖЯН

В статье в рамках кинематической теории изучается влияние пьезоэлектрических колебаний на интенсивность проходящего пучка рентгеновских лучей. Рассматриваются случаи, когда направления колебаний перпендикулярны и параллельны первичному пучку.

Доказывается, что при плоской или сферической падающей волне, когда колебания параллельны первичному пучку, они на интенсивность проходящего пучка не влияют. Когда колебания перпендикулярны первичному пучку, при достаточно малых размерах кристаллов интенсивность уменьшается, а при достаточно больших кристаллах, если поглощением пренебречь, интенсивность увеличивается.

В работе [1] коротко сформулирована цель работ, посвященных исследованию влияния пьезоэлектрических колебаний кристаллической решетки на интенсивность рассеяния рентгеновских лучей. Там же (в первом приближении [2]) исследовано влияние пьезоэлектрических колебаний идеальной кристаллической решетки на интенсивность рассеяния рентгеновских лучей при плоской падающей волне. Нами теоретически и экспериментально исследован вопрос влияния пьезоэлектрических колебаний кристаллической решетки на интенсивность проходящего пучка рентгеновских лучей.

Исследование влияния пьезоэлектрических колебаний на интенсивность проходящего пучка оправдывается тем, что этот эффект, на наш взгляд, может быть использован наподобие аномального прохождения для выявления структурных дефектов кристаллических решеток. О степени разработанности этого вопроса можно судить хотя бы по тому, что из известных двух работ, посвященных этому вопросу, в одной [3] обнаружено усиление и расширение проходящего пучка из-за колебаний кристаллической решетки образца, а в другой [4] фотографическим и ионизационным методами опровергнут этот эффект. В этом сообщении излагается только теоретическое исследование, проведенное в рамках кинематической теории интерференции рентгеновских лучей.

Допустим, что плоская монохроматическая волна в направлении единичного вектора $\vec{s}_0$ падает на кристаллическую решетку, в которой в трех основных направлениях $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ установились ультразвуковые стоячие волны с основными резонансными частотами

$$\left.\begin{aligned} l_1 &= l_{10}\sin(k_{10}ma)\sin\omega_1 t,\\ l_2 &= l_{20}\sin(k_{20}nb)\sin\omega_2 t,\\ l_3 &= l_{30}\sin(k_{30}pc)\sin\omega_3 t, \end{aligned}\right\}, \tag{1}$$

где l_1, l_2 и l_3 — смещения в направлениях векторов $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно;

$l_{10}\sin(k_{10}ma)$, $l_{20}\sin(k_{20}nb)$ и $l_{30}\sin(k_{30}pc)$ — амплитуды смещений в направлениях $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно;

l_{10}, l_{20}, l_{30} — максимальные амплитуды смещений в этих же направлениях;

k_{10}, k_{20}, k_{30} — волновые векторы пьезоэлектрических колебаний, которые определяются соотношениями

$$k_{10} = \frac{\pi}{L_1}, \qquad k_{20} = \frac{\pi}{L_2}, \qquad k_{30} = \frac{\pi}{L_3},$$

где L_1, L_2 и L_3 размеры кристалла в направлениях $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно;

ω_1, ω_2, ω_3 — основные частоты пьезоэлектрических колебаний в основных трех направлениях.

Пусть точка наблюдения из начала координат видна в направлении единичного вектора $\vec{s}$ (рис. 1). Тогда для амплитуды рассеянной волны во втором приближении получим

$$A = B\sum\exp\left\{-ik\left[(\vec{s}-\vec{s}_0)\vec{r} + \frac{r^2}{2R} + \frac{(\vec{r}\vec{s})^2}{2R}\right]\right\}, \tag{2}$$

где $B = \frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{m_0c_0^2}p$,

R — среднее расстояние точки наблюдения от образца,

p — фактор поляризации,

r — расстояние рассеивающих точек от начала координат.

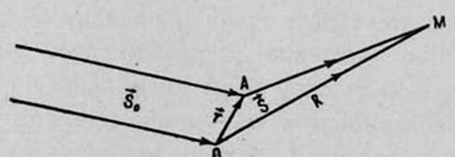

Рис. 1. Плоская падающая волна и сферическая рассеянная волна.

Последняя величина в рассматриваемом случае зависит от времени и определяется соотношением

$$r = r_{m,\,n,\,p} = [(ma + l_1)^2 + (nb + l_2)^2 + (pc + l_3)^2]^{1/2}. \tag{3}$$

Если интенсивность рассеянных волн в точке наблюдения определить певрвом приближении [2], то вместо (2) имеем

$$A = B \sum \exp \{ - ik [(\vec{s} - \vec{s}_0) \vec{r}], \tag{4}$$

и для амплитуды рассеяния в направлении падения из (4) сразу получим

$$A = BN_1 \cdot N_2 \cdot N_3, \tag{5}$$

где N_1, N_2 и N_3 — число рассеивателей в направлениях $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно.

Действительно, в направлении падения векторы $\vec{s}$ и $\vec{s}_0$ совпадают, т. е. $\vec{s} - \vec{s}_0 = 0$ и из (4) получим (5). Выражение для амплитуды (5) совпадает с аналогичным выражением для неколеблющейся решетки. Следовательно, в первом приближении пьезоэлектрические колебания рассеивающей идеальной решетки не влияют на интенсивность рассеяния в направлении падающего пучка.

Во втором приближении для рассеяния в направлении падающего пучка из (2) получим

$$A = B \sum \exp \left\{ - ik \left[\frac{r^2}{2R} - \frac{(\vec{r}\,\vec{s})^2}{2R} \right] \right\}. \tag{6}$$

Исследуем частный случай, когда пьезоэлектрические колебания установлены только в одном направлении, например в направлении трансляции $\vec{a}$.

Тогда выражение для амплитуды (6) примет следующий вид:

$$A = B \sum_{m,\,n,\,p} \exp \left\{ - ik \left[\frac{(ma + l_1)^2 + n^2 b^2 + p^2 c^2}{2R} - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \frac{[(ma + l_1) \cos \alpha + nb \cos \beta + pc \cos \gamma]^2}{2R} \right] \right\}, \tag{7}$$

где α, β и γ углы между вектором $\vec{s}$ и векторами $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$.

Как видно из (7), если пренебречь добавочными разностями фаз, возникающими из-за непараллельности волн, рассеянных различными точками облучаемого объема образца, то в общем случае интенсивность рассеяния в направлении падающего пучка зависит от пьезоэлектрических колебаний.

Можно показать, что если направление падения первичного пучка совпадает с направлением пьезоэлектрических колебаний, то даже во втором приближении интенсивность рассеяния на нулевой угол не зависит от этих колебаний рассеивающей решетки. Действительно, если $\vec{s} \parallel \vec{a}$ (пьезоэлектрические колебания установлены в направлении $\vec{a}$), то $\alpha = 0$, $\beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$ и из (7) получим

$$A = N_1 B \sum_n \exp\left(-ik\frac{n^2b^2}{2R}\right)\sum_p \exp\left(-ik\frac{p^2c^2}{2R}\right). \tag{8}$$

Исследование последнего выражения показывает, что когда первичный пучок падает в направлении пьезоэлектрических колебаний, то

а) интенсивность рассеяния на нулевой угол не зависит от этих колебаний;

б) эта интенсивность рассеяния прямо пропорциональна квадрату числа частиц в направлении падения;

в) зависимость интенсивности рассеяния (на нулевой угол) от числа частиц в направлениях, перпендикулярных к направлению падения, имеет характер интеграла Френеля — $\Big($суммы вида $\sum \exp\Big[-ik \times$ $\times \frac{n^2b^2}{2R}\Big]$ можно привести к виду интеграла Френеля$\Big)$. Эта зависимость подробно исследована в работе [5].

Теперь исследуем случай, когда падающий пучок перпендикулярен к направлению пьезоэлектрических колебаний. Тогда $\alpha = \frac{\pi}{2}$ и из (7) получим

$$A = B\sum_m \exp\left[-ik\frac{(ma+l_1)^2}{2R}\right] \times$$
$$\times \sum_{n,\,p} \exp\left(-ik\frac{n^2b^2\sin^2\beta + p^2c^2\sin^2\gamma - nbpc\sin 2\beta}{2R}\right). \tag{9}$$

В частном случае, когда первичный пучок падает в направлении трансляции $\vec{b}$ $\left(\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2},\ \beta = 0\right)$, получим

$$A = N_2 B\sum_m \exp\left[-ik\frac{(ma+l_1)^2}{2R}\right]\sum_p \exp\left(-ik\frac{p^2c^2}{2R}\right). \tag{10}$$

Как видно из (9) и (10), влияние пьезоэлектрических колебаний на интенсивность рассеяния выражается через сумму

$$\sum_m \exp\left[-ik\frac{(ma+l_1)^2}{2R}\right], \tag{11}$$

поэтому необходимо детально исследовать это выражение, которое для мгновенной интенсивности примет следующий вид:

$$I_1 = \sum_m\sum_{m'} \exp(-ikD_1)\exp\left[-ik\left(D_2\sin\omega t + D_3\sin^2\omega t\right)\right], \tag{12}$$

где

$$D_1 = \frac{a^2(m^2 - m'^2)}{2R},$$

$$D_2 = \frac{al_0}{R}\,[m \sin (k_{10}ma) - m' \sin (k_{10}m'a)],$$

$$D_3 = \frac{l_0^2}{2R}\,[\sin^2 (k_{10}ma) - \sin^2 (k_{10}m'a)].$$

Оценим величины D_1, D_2 и D_3. Как известно, реальный кристалл состоит из оптически независимых блоков. Поэтому расчеты интенсивности рассеянных волн должны быть произведены только для отдельных блоков. Размеры этих кристаллических блоков имеют порядок 10^{-4} *см*, следовательно, максимальное значение целого числа m будет 10^4, тогда для максимального значения D_1 получим $D_1 \sim 10^{-9}$ *см* (здесь имеется в виду, что $R = 10$ *см*). Максимальная амплитуда пьезоэлектрических смещений по оптическим измерениям [6] порядка $l_0 \sim 10^{-5}$ *см* — 10^{-6} *см*, откуда для D_2 и D_3 получим $D_2 \sim 10^{-10}$ *см*, $D_3 \sim 10^{-11}$ *см*.

Так как $kD_3 \ll \frac{\pi}{2}$, выражение (12) можно записать в виде

$$I_1 = \sum_m \sum_{m'} \exp(-ikD_1) \exp(-ikD_2 \sin \omega t). \tag{12a}$$

Для нахождения средней интенсивности необходимо усреднять члены, зависящие от времени, за период пьезоэлектрических колебаний.

Разумеется, средняя интенсивность за период пьезоэлектрических колебаний будет средней интенсивностью только в том случае, когда время экспозиции намного больше этого периода.

Имея в виду сказанное, для средней интенсивности рассеянных волн получим

$$\overline{I} = N_2^2 B_1 \sum_p \sum_{p'} \exp\left[-ik\,\frac{c^2(p^2 - p'^2)}{2R}\right] \sum_m \sum_{m'} \exp\left[-ik\,\frac{a^2(m^2 - m'^2)}{2R}\right] \times$$

$$\times \frac{1}{T}\int_0^T \exp(-ikD_2 \sin \omega t)\, dt,$$

где

$$B_1 = \frac{f^2}{R^2}\left(\frac{e^2}{m_0 c_0^2}\right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}.$$

Интеграл в последнем выражении дает функцию Бесселя нулевого порядка

$$\frac{1}{T}\int_0^T \exp(-ikD_2 \sin \omega t)\, dt = J_0(D_4),$$

где $D_4 = kD_2$.

Таким образом, для средней интенсивности рассеянных волн в направлении падения получим

$$\bar{I} = N_2^2 \frac{f^2}{R^2}\left(\frac{e^2}{m_0 c_0^2}\right)^2 \sum_{p=0}^{N_3-1}\sum_{p'=0}^{N_3-1} \exp\left[-ik\frac{c^2(p^2-p'^2)}{2R}\right] \times$$

$$\times \sum_{m=0}^{N_1-1}\sum_{m'=0}^{N_1-1} \exp\left[-ik\frac{a^2(m^2-m'^2)}{2R}\right] J_0(D_4). \qquad (13)$$

Теперь исследуем случай, когда падающая волна сферическая. Здесь следует различать случаи, когда рассеянную волну можно считать плоской (точка наблюдения достаточно далека) и когда рассеянная волна сферическая (точка наблюдения близка).

В первом случае, т. е. в случае, когда падающая волна сферическая, а волна, рассеянная в направлении падения, плоская (рис. 2), интенсивность рассеяния на нулевой угол можно выражать формулой (13), если только в выражениях величин D_1, D_2 и D_3 расстояние R точки наблюдения от образца заменить расстоянием источника от образца, а величину B_1 заменить величиной

$$B_1 = \frac{f^2}{R_1^2 R_2^2}\left(\frac{e^2}{m_0 c_0^2}\right)^2,$$

где R_1 и R_2 средние расстояния образца от источника и от точки наблюдения соответственно.

При сферической падающей волне под направлением падения подразумевается направление падения в начале координат (начало координат расположено в центре облучаемого объема образца). Поэтому, во избежание повторений, мы здесь не будем выводить формулу для средней интенсивности рассеяния на нулевой угол при сферической падающей волне, когда волны, рассеянные в направлении точки наблюдения, можно считать плоскими.

Здесь будем исследовать случай, когда нельзя пренебречь добавочными разностями фаз, возникающих из-за непараллельности волн, рассеянных различными точками облучаемого объема в направлении падения (рис. 3).

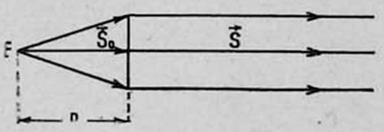

Рис. 2. Сферическая падающая волна и плоская рассеянная волна.

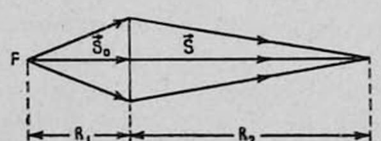

Рис. 3. Сферическая падающая и сферическая рассеянная волна.

Пусть источник и точка наблюдения расположены на расстояниях R_1 и R_2 от центра облучаемого объема (от начала координат) соответственно. Тогда в рассматриваемом случае амплитуда волны, рассеянной в направлении падения, будет (первичный пучок падает в направлении трансляции $\vec{b}$, а пьезоэлектрические колебания происходят в направлении $\vec{a}$)

$$A=N_2B_2\sum_m \exp\left[-ik\frac{(ma+l_1)^2}{2}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)\right]\times$$
$$\times\sum_p \exp\left[-ik\frac{p^2c^2}{2}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)\right], \tag{14}$$

где

$$B_2=\frac{f}{R_1R_2}\,\frac{e^2}{m_0c_0^2}\,p.$$

Из (14) для мгновенной интенсивности получим

$$I=N_2^2B_2^2\sum_p\sum_{p'}\exp\left[-ik\frac{c^2(p^2-p'^2)}{2}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)\right]\times$$
$$\times\sum_m\sum_{m'}\exp(-ikD_4)\exp\left[-ik(D_5\sin\omega t+D_6\sin^2\omega t)\right], \tag{15}$$

где

$$D_4=\frac{a^2(m^2-m'^2)}{2}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right),$$
$$D_5=al_0\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)[m\sin(k_{10}ma)-m'\sin(k_{10}m'a)],$$
$$D_6=l_0^2\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)[\sin^2(k_{10}ma)-\sin^2(k_{10}m'a)].$$

Пренебрегая членом D_6 и усредняя по $\sin\omega t$, для средней интенсивности получим следующее выражение:

$$\bar I=N_2^2B_2^2\sum_p\sum_{p'}\exp\left[-ik\frac{c^2(p^2-p'^2)}{2}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)\right]\times$$
$$\times\sum_m\sum_{m'}\exp\left[-ik\frac{a^2(m^2-m'^2)}{2}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)\right]J_0(D_7), \tag{16}$$

где $D_7=kD_5$.

Обсуждение результатов и выводы

Выражение (13) показывает, что при плоской падающей волне во втором приближении пьезоэлектрические колебания идеальной решетки в общем случае ослабляют (но в особых случаях могут и усиливать) интенсивность рассеяния в направлениях падения. Действительно, во втором приближении интенсивность неколеблющейся идеальной решетки определяется (в рамках кинематической теории) выражением

$$I=N_2^2B_1^2\sum_{p=0}^{N_3-1}\sum_{p'=0}^{N_3-1}\exp\left[-ik\frac{c^2(p^2-p'^2)}{2R}\right]\sum_{m=0}^{N_1-1}\sum_{m'=0}^{N_1-1}\exp\left[-ik\frac{a^2(m^2-m'^2)}{2R}\right]. \tag{17}$$

С другой стороны, имея в виду, что в (13) функция Бесселя нулевого порядка принимает наибольшее максимальное значение при $D_4=0$,

$J_0(D_4)=1$, а остальные максимумы быстро уменьшаются с увеличением аргумента, то, следовательно, выражение (13) может принимать наибольшее максимальное значение только при $D_4=0$.

Далее можно заметить, что D_4 принимает нулевое значение только при $m=m'$ и тогда (13) примет следующий вид

$$\overline{I}=B_1^2N_1N_2^2\sum_{p=0}^{N_3-1}\sum_{p'=0}^{N_3-1}\exp\left[-ik\frac{c^2(p^2-p'^2)}{2R}\right]. \tag{18}$$

Таким образом, влияние пьезоэлектрических колебаний сказывается тем, что сумма

$$I_2=\sum_{m=0}^{N_1-1}\sum_{m'=0}^{N_1-1}\exp\left[-ik\frac{a^2(m^2-m'^2)}{2R}\right] \tag{19}$$

заменяется множителем N_1. Таким образом, получается, что пьезоэлектрические колебания решетки ослабляют проходящий пучок, если $I_2>N_1$, а в противном случае ($I_2<N_1$) усиливают.

Как известно, сумму (19) можно привести к виду интеграла Френеля [5], величина которого в зависимости от N_1, колеблется, как показано на рис. 4. Когда размер облучаемого объема (размер кристалла) в направлении трансляции $\vec{a}$ меньше, чем размер первой зоны Френеля в соответствующем направлении, величина I_2 увеличивается с увеличением размера кристалла в этом направлении. Когда же размер облучаемого объема (число N_1) становится больше, чем размер первой зоны Френеля, с увеличением этого размера величина I_2 колеблется и при больших значениях N_1 стремится к постоянному значению. Следовательно, при малых N_1 $I_2>N_1$, а при больших N_1 может иметь место соотношение $I_2<N_1$. Из обсуждения полученных результатов можно сделать следующие выводы:

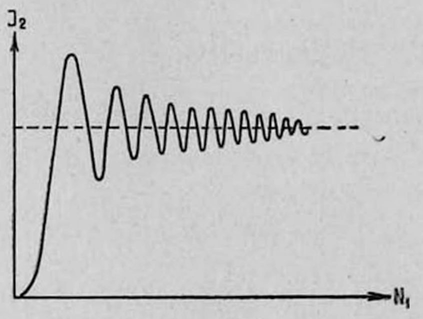

Рис. 4. Зависимость значения интеграла Френеля от числа рассеивающих частиц.

1. При плоской падающей волне в первом приближении пьезоэлектрические колебания идеальной кристаллической решетки не влияют на интенсивность проходящего пучка.

2. При плоской падающей волне во втором приближении, когда первичный пучок падает в направлении пьезоэлектрических колебаний, эти колебания не влияют на интенсивность проходящего пучка.

3. Когда первичная волна падает перпендикулярно к направлению колебаний, пьезоэлектрические колебания влияют на интенсивность рассеяния в направлении проходящего пучка: при достаточно малых кристаллах эта интенсивность из-за пьезоэлектрических колебаний уменьшается, а при достаточно больших кристаллах увеличивается.

4. При сферической падающей волне, когда рассеянную волну можно считать плоской, выводы о влиянии пьезоэлектрических колебаний решетки на интенсивность рентгеновского проходящего пучка совпадают с выводами, указанными в пунктах 2 и 3.

5. При сферической падающей волне, во втором приближении, так как размеры первой зоны увеличиваются [7], колебание величины I_2 начинается при сравнительно больших N_1 и, следовательно, усиление проходящего пучка в этом случае по сравнению со случаем плоской падающей волны имеет место при сравнительно больших N_1.

Результаты экспериментальных исследований теоретических выводов, полученных в настоящей работе, будут изложены во втором сообщении.

Ереванский государственный
университет

Поступила 21 октября 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. *П. А. Безирганян, В. И. Авунджян*, Кристаллография (в печати).
2. *П. А. Безирганян*, ЖТФ, **34**, 562 (1964).
3. *G. W. Fox, W. N. Fraser*, Phys. Rev., **47**, 889 (1935).
4. *G. E. M. Jauncey, N. T. Jacques*, Phys. Rev., **50**, 672 (1936).
5. *П. А. Безирганян, И. Б. Боровский*, Известия АН АрмССР, серия физико-математических наук, **13**, 121 (1960).
6. *M. Y. Colby, S. Harris*, Phys. Rev., **46**, 445 (1934).
7. *А. Г. Акритов, П. А. Безирганян*, Известия АН АрмССР, серия физико-математических наук, **15**, 99 (1962).

ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՑԱՆՑԻ ՊՅԵԶՈԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ՏԱՏԱՆՈՒՄՆԵՐԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆՆ ԱՆՑՆՈՂ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ՓՆՋԻ ՎՐԱ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ, Վ. Ի. ՀԱՎՈՒՆՋՅԱՆ

Հոդվածում կինեմատիկ տեսության շրջանակներում ուսումնասիրված է բյուրեղային ցանցի պյեզոէլեկտրական տատանումների ազդեցությունն անցնող ռենտգենյան ճառագայթների փնջի վրա։ Քննարկված են այն դեպքերը, երբ տատանումների ուղղությունը զուգահեռ և ուղղահայաց է առաջնային փնջին։

Ցույց է տրված, որ ընկնող հարթ կամ սֆերիկ ալիքի դեպքում երբ տատանումների ուղղությունը զուգահեռ է առաջնային փնջին, բյուրեղային ցանցի պյեզոէլեկտրական տատանումներն առաջնային փնջի ինտենսիվության փոփոխություն չեն առաջացնում, իսկ երբ տատանումների ուղղությունն ուղղահայաց է առաջնային փնջին և բավականաչափ փոքր բյուրեղների դեպքում ինտենսիվությունը փոքրանում է։ Մեծ բյուրեղների դեպքում, եթե կլանումը հաշվի չառնենք, ինտենսիվությունը պետք է աճի։

THE EFFECT OF PIEZOELECTRIC OSCILLATIONS OF THE CRYSTALLINE LATTICE ON THE PASSING BEAM OF X-RAYS

by P. H. BEZIRGANIAN, V. I. HAVOUNJIAN

The effect of piezoelectric oscillations of the crystalline lattice on the passing beam of X-rays, within the framework of kinetic theory, is studied in the paper. Cases are considered when the direction of the oscillations is parallel and perpendicular to the direction of the primary beam of X-rays.

It is shown that when the direction of the oscillations is parallel to the primary beam, the oscillation has no effect on the intensity of the primary beam, whereas when the direction of the oscillations is perpendicular to the primary beam, the oscillations may either decrease (when the blocks are very small) or increase (when the blocks are big enough) the intensity of the passing beam.