

ЗАВИСИМОСТЬ ДИФFUЗНОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ОТ РАЗМЕРОВ РАССЕИВАЮЩЕГО МОНОКРИСТАЛЛА

П. А. БЕЗИРГАНЯН, А. Г. АКРИТОВ

Исследована зависимость интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей от размеров рассеивающего кристалла. Показано, что интенсивность как селективных, так и диффузных максимумов с увеличением рассеивающего объема кристалла увеличивается, а потом уменьшается и, совершая затухающие колебания, принимает практически постоянное значение.

В работах [1]—[3] исследовано диффузное рассеяние в первом приближении—пренебрегалось добавочной разностью фаз, возникающих из-за непараллельности волн, рассеянных различными точками облучаемого объема в точке наблюдения. Однако это первое приближение для реальных кристаллов является недостаточным [4].

Исследуем интенсивность диффузного рассеяния во втором приближении. Амплитуда волны, рассеянной идеальной совершенной решеткой во втором приближении при плоской падающей волне, будет (рис. 1)

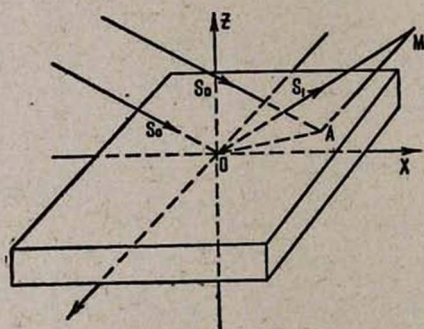


Рис. 1. К расчету интенсивности рассеяния при плоской падающей волне.

(рис. 1)

$$A = B \sum_{mnp} \exp \left\{ -ik \left[(\vec{s}_1 - \vec{s}_0) \vec{r}_{mnp} + \frac{r_{mnp}^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_{mnp} \vec{s}_1)^2}{2R} \right] \right\}. \quad (1)$$

Учет тепловых колебаний приведет к следующему виду последнее выражение

$$A = B \sum_{mnp} \exp \left\{ -ik \left[(\vec{s}_1 - \vec{s}_0) \vec{R}_{mnp} + \frac{R_{mnp}^2}{2R} - \frac{(R_{mnp} s_1)^2}{2R} \right] \right\}. \quad (2)$$

В этих двух выражениях

$$B = \frac{1}{R} \frac{e^2}{m_0 c_0^2} p,$$

где p —фактор поляризации, $\vec{s}_0$ и $\vec{s}_1$ —единичные векторы в направлениях падения и рассеяния соответственно (из начала координат источник и точка наблюдения видны в направлениях $-\vec{s}_0$ и $\vec{s}_1$ соответственно).

R — среднее расстояние образца от точки наблюдения, $\vec{R}_{mnp} = \vec{r}_{mnp} + \vec{U}_{mnp}$, где $\vec{U}_{mnp}$ тепловое смещение мотива $[mnp]$ от его идеального положения, $\vec{r}_{mnp}$ — радиус-вектор узла $[mnp]$. Для мгновенной интенсивности рассеянной волны из (2) получим

$$J = B_1 \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ ik \left[(\vec{R}_{mnp} - \vec{R}_{m'n'p'}) \vec{s} + \frac{R_{mnp}^2 - R_{m'n'p'}^2}{2R} - \frac{(\vec{R}_{mnp} \vec{s}_1)^2 - (\vec{R}_{m'n'p'} \vec{s}_1)^2}{2R} \right] \right\}, \quad (3)$$

$$B_1 = \frac{f^2}{R^2} \left(\frac{e^2}{m_0 c_0^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}, \quad \vec{s} = \vec{s}_1 - \vec{s}_0,$$

2θ — угол рассеяния.

Имея в виду малость тепловых смещений, мы можем (3) привести к виду

$$J = B_1 \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ ik \left[(\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}) \vec{s} + \frac{r_{mnp}^2 - r_{m'n'p'}^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_{mnp} \vec{s}_1)^2 - (\vec{r}_{m'n'p'} \vec{s}_1)^2}{2R} \right] \right\} \exp \{ -ik [\vec{U}_{mnp} - \vec{U}_{m'n'p'}] \vec{s} \}. \quad (4)$$

При выводе последнего выражения мы в экспоненте пренебрегли членами типа

$$U_{mnp}^2 \text{ и } r_{mnp} \cdot U_{mnp}. \quad (5)$$

Это приближение оправдывается тем, что $U_{mnp} \sim 10^{-8}$ см и добавочные разности, обусловленные членами (5), малы по сравнению с $\pi/2$. Действительно, максимальное значение (максимальные размеры кристаллических блоков) порядка $10^{-4} - 10^{-3}$ см. Тогда для максимальных разностей фаз, возникающих из-за смещений (5), получим $kU_{mnp}^2 \sim 10^{-8}$ рад., $kr_{mnp} \cdot U_{mnp} \sim 10^{-4} - 10^{-3}$ рад., чем вполне можно пренебречь, так как в аргументе тригонометрических функций можно пренебречь членами, малыми по сравнению с $\pi/2$. Для получения среднего значения интенсивности мы должны в выражении (4) усреднить множитель

$$J_1 = \exp \{ ik [\vec{U}_{mnp} - \vec{U}_{m'n'p'}] \vec{s} \},$$

среднее значение которого с достаточной точностью можно привести к виду

$$J_1 = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[k (\vec{U}_{mnp} - \vec{U}_{m'n'p'}) \right]^2 \right\}.$$

Усреднение выражения

$$J_2 = [k (\vec{U}_{mnp} - \vec{U}_{m'n'p'}) \vec{s}]^2$$

можем провести методом нормальных координат, описанным в [1]. Таким образом, для $\bar{J}_1$ получим [5]

$$J_1 = \exp \left\{ - \sum_{\sigma j} G_{\sigma j} \left[1 - \cos \left(k_{\sigma a} a (m - m') + k_{\sigma b} b (n - n') + k_{\sigma c} c (p - p') \right) \right] \right\}, \quad (6)$$

где

$$G_{\sigma j} = \frac{k_1 T}{MN} \frac{1}{\omega_{\sigma j}^2} [k s e_{\sigma j}]^2,$$

e — единичный вектор в одном из трех независимых направлений решетки,

$\omega_{\sigma j}$ — циклическая частота волны индекса σ ,

$k_{\sigma a}$, $k_{\sigma b}$ и $k_{\sigma c}$ — проекции волнового вектора упругой волны индекса σ на направления $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно,

k и T — постоянная Больцмана и абсолютная температура соответственно.

Тогда средняя интенсивность определяется выражением

$$\bar{J} = J_3 \cdot J_4, \quad (7)$$

где

$$J_3 = B_1 \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ ik \left[(\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}) \cdot \vec{s} \right] \bar{J}_1 \right\},$$

$$J_4 = \exp \left\{ ik \left[\frac{r_{mnp}^2 - r_{m'n'p'}^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_{mnp} \cdot \vec{s}_1)^2 - (\vec{r}_{m'n'p'} \cdot \vec{s}_1)^2}{2R} \right] \right\}.$$

Как видно из (7), J_3 выражает среднюю интенсивность рассеяния в первом приближении. Это выражение можно привести к следующему виду (см. [5]):

$$\begin{aligned} J_3 = & B_1 \exp \{ -2M \} \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ ik [\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}] \cdot \vec{s} \right\} + \\ & + B_1 \exp \{ -2M \} \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \sum_{\sigma=1}^N \sum_{j=1}^3 G_{\sigma j} \exp \left\{ i \left[k \vec{s} + \frac{k_{\sigma}}{2\pi} \right] [\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}] \right\} + \\ & + B_1 \exp \{ -2M \} \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \sum_{\sigma=1}^N \sum_{j=1}^3 G_{\sigma j} \exp \left\{ i \left[k \vec{s} - \frac{k_{\sigma}}{2\pi} \right] [\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}] \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

где $\vec{k}_{\sigma}$ — волновой вектор упругой волны номера σ ,

N — полное число рассеивающих атомов ($N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$).

Здесь N_1 , N_2 и N_3 — числа рассеивающих атомов в направлениях $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно.

Из (7) и (8) видно, что интенсивность второго приближения отличается от интенсивности первого приближения на множитель J_4 .

Исследуем этот множитель. В частном случае, когда $\vec{s}_1 \parallel \vec{a}$, выражение J_4 можно переписать в следующем виде:

$$J_4 = \exp \left\{ ik \left[-\frac{b^2 (n^2 - n'^2)}{2R} + \frac{c^2 (p^2 - p'^2)}{2R} \right] \right\}. \quad (9)$$

Имея в виду условие $\vec{s}_1 \parallel \vec{a}$, мы можем полное выражение средней интенсивности J привести к следующему виду:

$$J = J_5 + J_6 + J_7, \quad (10)$$

где

$$J_5 = B_2 \frac{\sin^2 \left[N_1 \frac{\vec{ka} \cdot \vec{s}}{2} \right]}{\sin^2 \left[\frac{\vec{ka} \cdot \vec{s}}{2} \right]} \sum_{np} \sum_{n'p'} \exp \left\{ ik [\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}] \cdot \vec{s} \right\} J_4,$$

$$J_6 = B_2 \sum_{\sigma=1}^N \sum_{j=1}^3 G_{\sigma j} \frac{\sin^2 N_1 \frac{\vec{ka} \cdot \left[\vec{s} + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right]}{2}}{\sin^2 \vec{ka} \cdot \frac{\left[\vec{s} + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right]}{2}} \sum_{np} \sum_{n'p'} \exp \left\{ i \left[\vec{k}_\sigma + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right] [\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}] \right\},$$

$$J_7 = B_2 \sum_{\sigma=1}^N \sum_{j=1}^3 G_{\sigma j} \frac{\sin^2 N_1 \vec{ka} \cdot \left[\vec{s} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right]}{\sin^2 \vec{ka} \cdot \left[\vec{s} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right]} \sum_{np} \sum_{n'p'} \exp \left\{ i \left[\vec{k}_\sigma - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right] (\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}) \right\},$$

$$B_2 = B_1 \exp \{-2M\}, \quad \vec{r}_{np} = n\vec{b} + p\vec{c}, \quad \vec{r}_{n'p'} = n'\vec{b} + p'\vec{c}.$$

В случае сферической падающей волны для амплитуды рассеянной волны вместо (2) получим

$$A = B_3 \sum_{mnp} \exp \left\{ -ik \left[(\vec{s}_1 - \vec{s}_0) \cdot \vec{r}_{mnp} + \frac{r_{mnp}^2}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) - \frac{(\vec{r}_{mnp} \cdot \vec{s}_0)^2}{2R_1} - \frac{(\vec{r}_{m'n'p'} \cdot \vec{s}_1)^2}{2R_2} \right] \right\}, \quad (11)$$

где $B_3 = \frac{f}{R_1 R_2} \cdot \frac{e^2}{m_0 c_0^2} p$, R_1 и R_2 — расстояния точки наблюдения и источника от начала координат соответственно (см. рис. 2).

Тогда выражение J_4 , которое мы теперь обозначим через J_4^1 , примет следующий вид:

$$J_4^1 = \exp \left\{ ik [r_{mnp}^2 - r_{m'n'p'}^2] \left[\frac{1}{2R_1} + \frac{1}{2R_2} \right] - \frac{(\vec{r}_{mnp} \vec{s}_0)^2 - (r_{m'n'p'} \vec{s}_1)^2}{2R_1} - \frac{(\vec{r}_{mnp} \vec{s}_0)^2 - (r_{m'n'p'} \vec{s}_1)^2}{2R_2} \right\}. \quad (12)$$

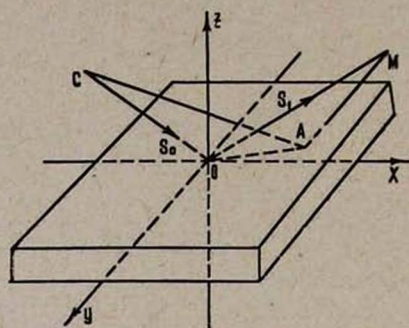


Рис. 2. К расчету интенсивности рассеяния при сферической падающей волне.

Следовательно, в рассматриваемом случае (сферическая падающая волна) выражение средней интенсивности рассеяния примет следующий вид:

$$J = J_5' + J_6' + J_7', \quad (13)$$

где

$$J_5' = B_4 \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ ik [\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}] \right\} J_4;$$

$$J_6' = B_4 \sum_{\sigma=1}^N \sum_{j=1}^3 G_{\sigma j} \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ i \left[k \vec{s} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right] [\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}] \right\} J_4;$$

$$J_7' = B_4 \sum_{\sigma=1}^N \sum_{j=1}^3 G_{\sigma j} \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp \left\{ i \left[k \vec{s} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right] [\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}] \right\} J_4;$$

$$B_4 = \exp \{-2M\} B_3.$$

Обсуждение результатов и выводы

Как видно из (7) и (13), во втором приближении зависимости интенсивностей селективных и диффузных максимумов в рамках кинематической теории интерференции имеют одинаковый характер. Они для обоих типов максимумов выражаются через J_4 или J_4' в зависимости от фронта падающей волны.

Как известно [6], величина J_4 или J_4' увеличивается с увеличением размеров кристалла пока эти размеры меньше, чем размеры пер-

вой зоны Френеля. С дальнейшим увеличением размеров кристалла частота колебаний быстро увеличивается, максимумы уменьшаются, а минимумы увеличиваются, т. е. кривая, выражающая эту зависимость, сглаживается (см. рис. 3). В конце концов, когда линейные размеры кристалла много превышают размеры первой зоны Френеля, эта величина практически становится равной одной четверти той величины, которую она принимала, когда размеры кристалла точно совпадали с размерами первой зоны Френеля.

Таким образом, в рамках кинематической теории интерференции рентгеновских лучей мы приходим к следующим важным выводам:

1. Интенсивность как селективных, так и диффузных максимумов с увеличением размеров рассеивающего объема кристалла сначала увеличивается (размеры кристалла меньше размеров первой зоны Френеля), а потом уменьшается и, совершая затухающие колебания, принимает практически постоянное значение когда размеры кристалла намного превышают размеры первой зоны Френеля.

2. Как видно из (10), при плоской падающей волне интенсивность селективных и диффузных максимумов даже во втором приближении непрерывно увеличивается с увеличением размера облучаемого объема (кристалла) в направлении рассеяния этих (селективных) максимумов.

Действительно, (10) выражает интенсивность рассеяния, когда $\vec{s} \parallel \vec{a}$ (направление рассеяния совпадает с направлением вектора $\vec{a}$) и содержит интерференционные множители первого (лауэвского) приближения, зависящие только от N_1 и $\vec{a}$. Величины этих множителей

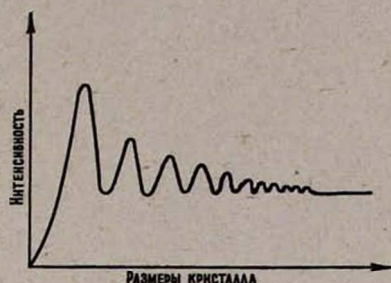


Рис. 3. Зависимость интенсивности рассеяния от размеров рассеивающего кристалла.

$$\sin^2 \left[N_1 \frac{\vec{k} \vec{a} \vec{s}}{2} \right]; \quad \frac{\sin^2 \left[N_1 \frac{\vec{k} \vec{a} \left(\vec{s} + \frac{\vec{k}_0}{2\pi} \right)}{2} \right]}{\sin^2 \left[\frac{\vec{k} \vec{a} \left(\vec{s} + \frac{\vec{k}_0}{2\pi} \right)}{2} \right]}; \quad \frac{\sin^2 \left[N_1 \vec{k} \vec{a} \left(\vec{s} + \frac{\vec{k}_0}{2\pi} \right) \right]}{\sin^2 \left[\vec{k} \vec{a} \left(\vec{s} + \frac{\vec{k}_0}{2\pi} \right) \right]}$$

непрерывно растут с ростом N_1 . Их максимальное значение равно N_1^2 . В частном случае, при нулевом угле рассеяния ($\vec{s}_1 \parallel \vec{s}_0$), интенсивность рассеяния также растет с ростом облучаемого объема кристалла в направлении падения.

3. При сферической падающей волне во втором приближении увеличение размеров кристалла может привести к непрерывному увеличению интенсивности рассеяния (12) только при нулевых углах рассеяния.

Ереванский государственный
университет

Поступила 5 мая 1966

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Р. Джеймс, Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, ИЛ., М., 1950.
2. А. Гинье, Рентгенография кристаллов, М., 1961.
3. У. Вустер, Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах, ИЛ., М., 1963.
4. П. А. Безиргиян, ЖТФ, 17, 93 (1964).
5. П. А. Безиргиян, В. И. Авунджян, Кристаллография (в печати).
6. П. А. Безиргиян, И. Б. Боровский, Изв. АН АрмССР, 13, 121 (1960).

ՌԵՏԳԵՆՅԱՆ ՀԱՌԱԳԱՅՔՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՏԻՈՆ ՑՐՄԱՆ ԿԱԽՈՒՄԸ ՑՐՈՂ ՄԻԱՔՅՈՒՐԵՂԻ ՉԱՓԵՐՆԻՑ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԻԱՆՅԱՆ, Ա. Գ. ԱԿՐԻՏՈՎ

Հետազոտված է ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակտոն ցրման ինտենսիվության կախումը ցրող միաբյուրեղի չափերից երկրորդ մոտավորությամբ:

Ցույց է տրված, որ ինչպես սելեկտիվ, այնպես էլ դիֆրակտոն մաքսիմումների ինտենսիվությունը բյուրեղի ցրող ծավալի մեծացմամբ սկզբում մեծանում է քանի դեռ բյուրեղի չափերը փոքր են Ֆրենելի առաջին զոնայի չափերից, իսկ հետո փոքրանում է և տատանվելով ընդունում է դործնականորեն հաստատուն արժեք, երբ բյուրեղի չափերը շատ մեծ են դառնում առաջին զոնայի չափերից:

Ընկնող հարթ ալիքի դեպքում սելեկտիվ և դիֆրակտոն մաքսիմումների ինտենսիվությունը, նույնիսկ երկրորդ մոտավորությամբ անընդհատ մեծանում է այդ մաքսիմումների ցրման ուղղությամբ ճառագայթվող ծավալի չափերի մեծացմամբ: Ընկնող սֆերիկ ալիքի դեպքում, երկրորդ մոտավորությամբ, բյուրեղի չափերի մեծացումը կարող է բերել ցրման ինտենսիվության անընդհատ մեծացման միայն զերոական անկյան տակ ցրման դեպքում:

DEPENDENCE OF THE DIFFUSIVE X-RAY SCATTERING UPON THE SIZES OF THE SCATTERING MONOCRYSTAL

P. H. BEZIRGANIAN and A. G. AKRITOV

It is investigated the dependence of the intensity of the diffusive X-ray scattering upon the sizes of the scattering crystal.

It is shown that as the scattering volume of the crystal grows the intensity of the both selective and diffusive maxima increases, then decreases and after damping oscillations gets practically a constant value.