

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ВОЛОКНИСТЫХ ВЕЩЕСТВАХ С УЧЕТОМ ТОЛЩИНЫ ВОЛОКОН

П. А. БЕЗИРГАНЯН, Ю. А. РАПЯН

Исследована интенсивность рассеяния рентгеновских лучей в волокнистых веществах с учетом различных расстояний отдельных цепочек от точки наблюдения.

Исследования проведены при плоской монохроматической падающей волне, когда падающий пучок перпендикулярен к оси волокна. Также рассмотрено распределение интенсивности в экваториальной плоскости, перпендикулярной к оси волокна и проходящей через ее центральную точку.

Исследования показали, что если пренебречь добавочными разностями фаз, возникающими из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами облучаемого объема в сторону точки наблюдения, нет необходимости учитывать конечную толщину волокон, так как этот учет ни к какому новому результату не приведет. Для оси волокон учет конечного размера толщины волокон не меняет направлений дифракционных максимумов и при этом не возникают новые или менее сильные максимумы.

Обычно в расчетах [1—3] интенсивности волн, рассеянных в волокнистых веществах, при нахождении среднего значения рассеянной интенсивности предполагается, что волокно бесконечно тонкое, т. е. предполагается, что все ряды, ориентированные по оси волокна, расположены на одинаковом расстоянии от точки наблюдения.

Однако нетрудно убедиться, что для очень длинных цепочек это приближение очень грубое [4—6].

Исследуем интенсивность рассеяния рентгеновских лучей в волокнистых веществах с учетом различия расстояний отдельных цепочек от точки наблюдения.

Допустим, что имеем цилиндрический образец, состоящий из очень большого числа совершенно одинаковых цепей. Пусть все эти цепи параллельны друг другу, но все ориентации относительно общего направления (относительно оси цилиндра) равновероятны.

Исследуем интенсивность рассеяния при плоской монохроматической падающей волне. Тогда для амплитуды рассеянной волны во втором приближении получим [4]

$$G = B \sum \exp \left\{ -ik \left[(\vec{s} \vec{r}) + \frac{r^2}{2(R - \rho \cos \varphi)} - \frac{(\vec{r} \vec{s}_1)^2}{2(R - \rho \cos \varphi)} \right] \right\}, \quad (1)$$

где

$$B = \frac{f}{R} \frac{e^2}{m_e c^0} P,$$

P —фактор поляризации, c_0 —скорость распространения электромагнитных волн, m_0 —масса электрона, R —расстояние центральной точки образца (цилиндра) от точки наблюдения, f —функция рассеяния атома, r —расстояние рассеивающего мотива от начала координат, ρ и φ —координаты центральной точки рассматриваемой цепочки (начало координат расположено в центре цилиндра рис. 1–3), $\vec{s} = \vec{s}_1 - \vec{s}_0$, где $\vec{s}_0$ и $\vec{s}_1$ —единичные векторы в направлениях падения и рассеяния соответственно.

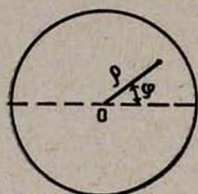


Рис. 1. Цилиндрический образец волокнистых веществ (вертикальный срез).

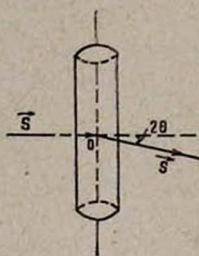


Рис. 2. Ход рентгеновских лучей в волокнистых веществах.

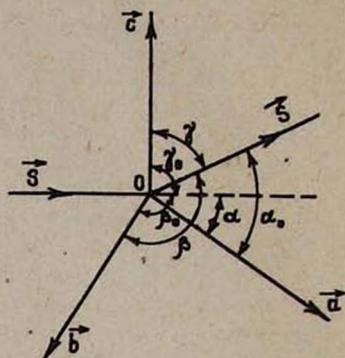


Рис. 3. К выводу формулы (2).

Исследуем случай, когда падающий пучок перпендикулярен к оси волокна. Тогда выражение (1) примет следующий вид:

$$G = B \sum_{m=0}^{N_1-1} \exp \{-imA_1\} \sum_{n=0}^{N_2-1} \exp \{-inA_2\} \sum_{l=-\frac{N_3-1}{2}}^{+\frac{N_3-1}{2}} \exp \{-i(lA_3 + l^2A_4)\}, \quad (2)$$

где

$$A_1 = ak(\cos \alpha - \cos \alpha_0), \quad A_2 = bk(\cos \beta - \cos \beta_0),$$

$$A_3 = kc \cos \gamma, \quad A_4 = \frac{c^2 k \sin^2 \gamma}{2(R - \rho \cos \varphi)},$$

N_1 , N_2 и N_3 —число мотивов в направлениях трансляций $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно, α , β и γ —углы между вектором $\vec{s}_1$ и трансляциями $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно, α_0 и β_0 —углы между векторами $\vec{a}$ и $\vec{b}$ и вектором $\vec{s}_0$ соответственно.

N_3 намного больше, чем N_1 и N_2 , т. е. кристалл удлинён в направлении трансляции $\vec{c}$ (направление оси волокна совпадает с направлением $\vec{c}$).

Распределение интенсивности в экваториальной плоскости

Рассмотрим распределение интенсивности в экваториальной плоскости, плоскости, перпендикулярной оси волокна и проходящей через ее центральную точку $\left(\gamma = \frac{\pi}{2}\right)$. На этой плоскости распределение интенсивности можно выразить формулой

$$J = B_1 \sum_{l=-\frac{N_1-1}{2}}^{\frac{N_1-1}{2}} \sum_{l'=-\frac{N_2-1}{2}}^{\frac{N_2-1}{2}} \exp \{-iA_1(l^2-l'^2)\} \frac{\sin^2\left(N_1 \frac{A_1}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{A_1}{2}\right)} \cdot \frac{\sin^2\left(N_2 \frac{A_2}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{A_2}{2}\right)}, \quad (3)$$

где

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

Если в облучаемом образце содержится очень большое число таких удлиненных кристаллов, то при учете толщины волокна мы должны иметь в виду, что:

а) различные удлиненные кристаллы расположены на различных расстояниях от точки наблюдения (различные кристаллики имеют различные ρ и φ).

б) у всех этих кристаллов оси s (ось волокна) строго параллельны одному общему направлению, но все ориентации относительно оси s (независимо от ρ и φ) равновероятны.

Следовательно, для нахождения средней интенсивности необходимо усреднить выражение (3) по α_0 , ρ и φ .

Вероятность того, что данный кристаллик имеет координаты ρ и φ в пределах от ρ до $\rho + d\rho$ и от φ до $\varphi + d\varphi$, равна

$$\frac{\rho d\rho d\varphi}{\pi \rho_0^2}, \quad (4)$$

ρ — радиус цилиндрического образца (рис. 1).

Вероятность того, что падающий пучок с вектором a составит угол внутри интервала α_0 и $\alpha_0 + d\alpha_0$, равна $\frac{d\alpha_0}{2\pi}$.

Имея в виду последнее и (4), для средней интенсивности получим

$$\bar{J} = B_1 \frac{1}{2\pi \cdot \pi \rho_0^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\rho} \sum_l \sum_{l'} A_5 A_6 A_7 d\rho d\varphi d\alpha_0, \quad (5)$$

где

$$A_5 = \frac{\sin^2 \left\{ N_1 \frac{ak}{2} [G_1 \cos(2\theta - \alpha_0) - \cos \alpha_0] \right\}}{\sin^2 \left\{ \frac{ak}{2} [G_1 \cos(2\theta - \alpha_0) - \cos \alpha_0] \right\}},$$

$$A_6 = \frac{\sin^2 \left\{ N_2 \frac{bk}{2} [G_1 \sin(2\theta - \alpha_0) + \sin \alpha_0] \right\}}{\sin^2 [bk [G_1 \sin(2\theta - \alpha_0) + \sin \alpha_0]]},$$

$$A_7 = \exp \{ -iA_4(l^2 - l'^2) \},$$

$$G_1 = \frac{R - \rho \cos \varphi}{\sqrt{l^2 c^2 + (R - \rho \cos \varphi)^2}},$$

2θ — угол рассеяния (угол между векторами $\vec{s}_1$ и $\vec{s}$) для средней точки цепочки, проходящей через начало координат ($\rho = 0$, $l = 0$, $G_1 = 1$).

Нетрудно убедиться в том, что, не совершая большой ошибки, мы можем в выражении G_1 под радикалом пренебречь членом $l^2 c^2$. Действительно, так как максимальное значение l порядка 10^4 (когда длина цепочки порядка 10^{-4} см), то максимальное значение величины $l^2 c^2$ равно 10^{-8} см и, имея в виду еще то, что в выражениях A_5 и A_6 величины N_1 и N_2 порядка единицы (число боковых мотивов цепочек мало), мы можем с достаточной точностью в выражении G_1 пренебречь $l^2 c^2$ и положить $G_1 = 1$.

Тогда выражение (5) средней интенсивности можем переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \bar{J} = & B_1 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \{ N_1 a k \sin 2\theta \sin(\theta - \alpha_0) \}}{\sin^2 \{ a k \sin 2\theta \sin(\theta - \alpha_0) \}} \times \\ & \times \frac{\sin^2 \{ N_2 b k \sin 2\theta \cos(\theta - \alpha_0) \}}{\sin^2 \{ b k \sin 2\theta \cos(\theta - \alpha_0) \}} d\alpha_0 \times \\ & \times \sum_l \sum_{l'} \frac{1}{\pi \rho_0^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\rho_0} \rho \exp \left\{ -i \frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2(R - \rho \cos \varphi)} \right\} d\varphi d\rho. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражение $A_8 = \exp \left\{ -i \frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2(R - \rho \cos \varphi)} \right\}$ с достаточной точностью можно привести к виду:

$$A_8 = \exp \left\{ -i \frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2R} \right\} \exp \left\{ -i \frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2R^3} \right\} \rho \cos \varphi.$$

Подставив последнее выражение A_8 в (6) и произведя интегрирование по φ , получим

$$\bar{J} = B_1 J_1 \sum_l \sum_{l'} \frac{2}{\rho_0^2} \int_0^{\rho_0} \rho \exp \left\{ -i \frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2R} \right\} J_0 \left\{ \frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2R^3} \right\} d\rho, \quad (7)$$

где

$$J_1 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \{N_1 a k \sin 2\theta \sin (\theta - \alpha_0)\}}{\sin^2 \{a k \sin 2\theta \sin (\theta - \alpha_0)\}} \cdot \frac{\sin^2 \{N_2 b k \sin 2\theta \cos (\theta - \alpha_0)\}}{\sin^2 \{b k \sin 2\theta \cos (\theta - \alpha_0)\}} d\alpha_0 \quad (8)$$

$$J_0 \left(\frac{k c^2 (l^2 - l'^2)}{2R^3} \right) - \text{функция Бесселя нулевого порядка.}$$

Как известно, функция Бесселя нулевого порядка принимает наибольшее максимальное значение при нулевом значении ее аргумента. Как видно из (7), аргумент функции Бесселя в рассматриваемом случае может принимать нулевое значение только при $l = l'$. Следовательно, так как $J_0(l = l') = 1$, то в (7), произведя интегрирование по ρ , для средней интенсивности получим

$$\bar{J} = B_1 J_1 N_3. \quad (9)$$

Обсуждение результатов и выводы

Необходимо отметить, что в первом приближении, т. е. когда пренебрегаются добавочные разности фаз, возникающие из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами облучаемого объема в сторону точки наблюдения, нет необходимости учитывать конечную толщину волокон, так как этот учет ни к какому новому результату не приведет.

Далее из вышеприведенных расчетов в рассматриваемом случае (предположение б) можно сделать следующие выводы:

1) для боковых мотивов учет толщины волокнистого образца с достаточной точностью новых результатов не дает. Действительно, боковыми мотивами обусловлен множитель J_1 (8) в выражении (7), который точно совпадает с аналогичным множителем, приведенным в [1]. Это вполне закономерно, так как число мотивов боковых ветвей мало.

2) для оси волокон учет конечного размера толщины волокна резко уменьшает интенсивность рассеяния. Без учета этой толщины в аналогичном случае интенсивность рассеянных волн (8) пропорциональна квадрату числа мотивов (N_3), расположенных по направлению оси волокна, однако в рассматриваемом случае эта интенсивность пропорциональна первой степени этого числа (9).

3) учет толщины волокон не меняет направлений дифракционных максимумов и при этом не возникают новые более или менее сильные максимумы.

Ереванский государственный
университет

Поступила 19 мая 1966

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, ИЛ, М., 1950.
2. А. Гинье. Рентгенография кристаллов, ИЛ, М., 1961.

3. Б. К. Вайнштейн. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах, М., 1963.
4. П. А. Безирганян, И. Б. Боровский. Известия АН АрмССР, серия физ.-мат. наук, 13, 121 (1960).
5. П. А. Безирганян, ЖТФ, 34, 110 (1964).
6. П. А. Безирганян. ЖТФ, 34, 562 (1964).

**ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՀԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ՄԱՆՐԱԹԵԼԱՅԻՆ
ՆՅՈՒԹԵՐՈՒՄ, ՄԱՆՐԱԹԵԼԻՐԻ ՀԱՍՏՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՐԲ**

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ, ՅՈՒ. Ա. ՌԱՓՅԱՆ

Ուսումնասիրված է ռենտգենյան ճառագայթների ցրման ինտենսիվությունը մանրաթելային նյութերում՝ հաշվի առնելով մանրաթելերի առանձին շղթաների հեռավորությունները դիտման կետից:

Քննարկված է ինտենսիվության բաշխումը հասարակածային հարթության մեջ՝ մանրաթելի առանցքին ուղղահայաց հարթության մեջ:

Ուսումնասիրությունները ցույց են տալիս, որ երբ հաշվի չեն առնվում փուլերի լրացուցիչ շարժումները, որոնք առաջանում են դիտման կետում ալիքների սֆերիկության պատճառով, հարկ չկա հաշվի առնել մանրաթելի վերջավոր հաստությունը, քանի որ դա չի հանգեցնում նոր արդյունքների:

Մյուս կողմից մանրաթելի հաստության վերջավոր լինելը կտրուկ փոքրացնում է ցրման ինտենսիվությունը, բայց այն չի առաջացնում նոր, ավելի կամ պակաս ուժեղ մաքսիմումներ:

X-RAY DIFFRACTION IN THE FIBER SUBSTANCES TAKING INTO ACCOUNT THE THICKNESS OF THE FIBERS

P. H. BESIRGANIAN and YU. A. RAPIAN

It is investigated the X-ray scattering intensity in the fiber substances taking into account the various distances of the separate chains from the point of observation.

Investigations are carried out for a monochromatic plane wave when the incident beam is perpendicular to the fiber axis. It is also considered the intensity distribution in the equatorial plane perpendicular to the fiber axis and passing through its central point.

The investigations show that if one neglects the additional differences of the phases arising due to the non-parallelism of the waves scattered by various atoms of the irradiated volume towards the observation point then it is not necessary to take into account the finite thickness of the fibers, because it does not bring to any new result. The account of the finite thickness of the fibers does not change the direction of the diffraction maxima, being not appeared new or less stronger maxima.