Изв. АН Армянской ССР, Физика, 2, 381—387 (1967)

ВЛИЯНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ РЕНТГЕНОВСКИХ ДИФФУЗНЫХ МАКСИМУМОВ

П. А. БЕЗИРГАНЯН, В. И. АВУНДЖЯН

Исследовано влияние пьезоэлектрических колебаний идеального кристалла на интенсивность рентгеновских диффузных максимумов в рамках кинематической теории.

Получены выражения для интенсивности селективных и диффузных максимумов и показано, что в общем случае интенсивность диффузных максимумов зависит от пьезоэлектрических колебаний.

В частности показано, что когда пьезоэлектрические колебания происходят в отражающих плоскостях, то они не влияют на интенсивность ни селективных, ни диффузных максимумов, а максимальное влияние наблюдается, когда колебания перпендикулярны отражающим плоскостям.

В работах [1—3] были исследованы влияния пьезоэлектрических колебаний идеальной кристаллической решетки на интенсивность селективных дифракционных максимумов и проходящего пучка при плоской и сферической падающих волнах в первом и во втором приближениях.

Исследуем влияние пьезоэлектрических колебаний рассеивающей решетки на интенсивность диффузных максимумов рентгеновских лучей.

Амплитуда волны, рассеянной идеальной совершенной решеткой, согласно кинематической теории в первом приближении будет [4]

$$A=\frac{f}{R}\left(\frac{e^2}{m_0c_0^2}\right)P\sum_{mnp}e^{-ik\vec{r}_{mnp}\left(\vec{s}-\vec{s}_0\right)},\tag{1}$$

где $\vec{s}_0$ и $\vec{s}$ — единичные векторы в направлениях падения и рассеяния соответственно,

$\vec{r}_{mnp}$ — радиус-вектор узла [[mnp]] в его идеальном положении,

R — среднее расстояние точки наблюдения от образца,

P — фактор поляризации.

При учете тепловых колебаний решетки выражение амплитуды рассеянной волны примет вид

$$A=\frac{f}{R}\left(\frac{e^2}{m_0c_0^2}\right)P\sum_{mnp}e^{-ik\left(\vec{r}_{mnp}+\vec{u}_{mnp}\right)\left(\vec{s}-\vec{s}_0\right)},\tag{2}$$

где u_{mnp} — тепловое смещение узла [[mnp]] из его идеального положения.

Теперь допустим, что в кристаллической решетке в направлении трансляции $\vec{a}$ установлена пьезоэлектрическая стоячая волна с основной резонансной частотой:

$$l_m = l_0 \sin(k_0 m a) \sin \omega t,$$

где l_m — смещение узла [[mnp]] в направлении вектора $\vec{a}$,
$l_0 \sin(k_0 m a)$ — амплитуда смещения,
l_0 — максимальная амплитуда,
$k_0 = \frac{\pi}{L}$ — волновой вектор пьезоэлектрических колебаний,
L — размер кристалла в направлении вектора $\vec{a}$,
ω — частота пьезоэлектрических колебаний.

Тогда для амплитуды волны, рассеянной решеткой, подвергнутой пьезоэлектрическим колебаниям, с учетом тепловых колебаний получим

$$A = \frac{f}{R}\left(\frac{e^2}{m_0 c_0^2}\right) P \sum_{mnp} \exp\{-ik[(\vec{r}_{mnp} + \vec{u}_{mnp} + \vec{l}_m)(\vec{s} - \vec{s}_0)]\}. \tag{3}$$

Откуда для мгновенной интенсивности найдем

$$I = B \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp\{ik[(\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}) + (\vec{u}_{mnp} - \vec{u}_{m'n'p'}) + (\vec{l}_m - \vec{l}_{m'})]\vec{S}\}, \tag{4}$$

где

$$B = \frac{f^2}{R^2}\left(\frac{e^2}{m_0 c_0^2}\right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \quad \text{и} \quad \vec{S} = \vec{s} - \vec{s}_0.$$

Как известно [5—7], если предполагать, что атомы колеблются независимо друг от друга и совершают простые гармонические колебания около положения равновесия, то учет тепловых колебаний приводит только к уменьшению интенсивностей селективных максимумов.

Однако в реальном кристалле мотивы связаны друг с другом межатомными силами. Учет этих сил приводит к значительному изменению диффузного рассеяния—возникают диффузные максимумы в направлениях селективных дифракционных максимумов.

Имея в виду малость величин u_{mnp}, $u_{m'n'p'}$, l_m и $l_{m'}$, мы можем среднему значению интенсивности (4) придать следующий вид:

$$\overline{I} = B \sum_{mnp} \sum_{m'n'p'} \exp[ik(\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'})\vec{S}] \times$$

$$\times \overline{\exp\left\{-\frac{1}{2}[k(\vec{u}_{mnp} - \vec{u}_{m'n'p'})\vec{S}]^2 - \frac{1}{2}[\vec{k}(\vec{l}_m - \vec{l}_{m'})\vec{S}]^2\right\}}. \tag{5}$$

При получении последнего выражения из (4) мы опустили двукратное произведение первого и второго членов в показателе второй экспоненты, так как фазы этих членов полностью независимы друг от друга и, следовательно, среднее значение этого произведения равно нулю.

Для усреднения выражения

$$\frac{1}{2}[k(\vec{u}_{mnp}-\vec{u}_{m'n'p'})\vec{S}]^2$$

применим метод нормальных координат [5].

В рассматриваемом случае тепловое смещение атомов решетки можно представить как сумму смещений, вызванных $3N$ упругими волнами, которые все полностью независимы друг от друга.

$N = N_1N_2N_3$ — полное число рассеивающих мотивов, где N_1, N_2 и N_3 — число атомов в направлениях трансляций $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ соответственно.

Суммарное тепловое смещение мотива, расположенного в узле [[mnp]] с помощью упругих волн решетки можно выразить следующим образом:

$$\vec{u}_{mnp}=\sum_{\sigma=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\vec{e}_{\sigma j}u_{\sigma j}(\omega_{\sigma j}t-mk_{\sigma_a}a-nk_{\sigma_b}b-pk_{\sigma_c}c-\delta_{\sigma j}), \tag{6}$$

где $\vec{e}_{\sigma j}$ — — единичный вектор в одном из трех независимых направлений решетки,

$u_{\sigma j}$ — амплитуда волны,

$\delta_{\sigma j}$ — фаза волны,

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

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

Имея в виду (5), (6) и соотношение между средней квадратичной амплитудой и температурой, для средней интенсивности найдем

$$\overline{I}=B\sum_{mnp}\sum_{m'n'p'}\exp[ik(\vec{r}_{mnp}-\vec{r}_{m'n'p'})\vec{S}]\times$$

$$\times\exp\{-\sum_{\sigma j}G_{\sigma j}[1-\cos(k_{\sigma a}a[m-m']+k_{\sigma b}b[n-n']+k_{\sigma c}c[p-p'])\}\times$$

$$\times\exp\left\{-\frac{1}{2}[k(\vec{l}_m-\vec{l}_{m'})\vec{S}]^2\right\}, \tag{7}$$

где

$$G_{\sigma j}=\frac{k_1T}{MN}\frac{1}{\omega_{\sigma j}^2}(k\vec{l}_{\sigma j}\vec{S})^2,$$

M — масса мотива, расположенного в узле решетки (при выводе формулы (7) предположено, что решетка образована из атомов одного сорта),

T — абсолютная температура,

k_1 — постоянная Больцмана.

Теперь перейдем к усреднению выражения

$$\frac{1}{2}\{k\vec{S}\vec{l}_0[\sin(k_0ma)-\sin(k_0m'a)]\sin\omega t\}^2.$$

Усреднение по $\sin^2\omega t$ дает

$$\frac{1}{4}\{k\vec{S}\,\vec{l}_0[\sin(k_0ma)-\sin(k_0m'a)]\}^2.$$

Таким образом, для средней интенсивности рассеянных волн с учетом тепловых и пьезоэлектрических колебаний окончательно получим

$$\bar{I}=B\sum_{mnp}\sum_{m'n'p'}I_1I_2I_3, \tag{8}$$

где

$$\left.\begin{aligned}
&I_1=\exp\left[ik\left(\vec{r}_{mnp}-\vec{r}_{m'n'p'}\right)\vec{S}\right],\\
&I_2=\exp\left\{-\sum_{\sigma=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}G_{\sigma j}[1-\cos(k_{\sigma a}a[m-m']+k_{\sigma b}b[n-n']+k_{\sigma c}c[p-p'])]\right\}\\
&I_3=\exp\left\{-\frac{1}{4}\left[k\vec{S}\,\vec{l}_0(\sin[k_0ma]-\sin[k_0m'a])\right]^2\right\}.
\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

Обсуждение результатов и выводы

Итак, в формуле средней интенсивности (8) выражением I_1, обусловлены интенсивности обычных селективных дифракционных максимумов, величиной I_2 выражается влияние тепловых колебаний на интенсивность селективных максимумов и диффузного рассеяния—возникновения диффузных максимумов, а I_3 показывает влияние ультразвуковых колебаний на интенсивность как селективного, так и диффузного рассеяния. Так как I_1 и I_2 хорошо исследованы, мы здесь исследуем выражение I_3.

Как видно из (9), I_3—величина следующего вида:

$$I_3=\exp\left(-\frac{1}{4}x^2\right),$$

где

$$x^2=\{k\vec{S}\,\vec{l}_0[\sin(k_0ma)-\sin(k_0m'a)]\}^2>0. \tag{10}$$

Следовательно, с увеличением абсолютного значения x величина I_3 быстро (экспоненциально) уменьшается. Максимальное значение I_3 равно единице, которое достигается при $x=0$.

Как видно из (10), величина x принимает нулевое значение, а I_3 — максимальное значение в следующих случаях:

а) $(\vec{S}\,\vec{l}_0)=0$,
б) $m=m'$.

При условии а), т. е. при $\vec{S}\perp\vec{l}_0$, средняя интенсивность $\bar{I}$ принимает значение

$$\bar{I}=BI_1I_2.$$

Таким образом, мы приходим к следующему выводу.

Когда пьезоэлектрические колебания происходят в отражающих плоскостях, то они не влияют на интенсивность ни селективных, ни диффузных максимумов, обусловленных этими плоскостями.

В частности, когда $\vec{s}_0 \perp \vec{l}_0$ и $\vec{s} \perp \vec{l}_0$, т. е. когда пьезоэлектрические колебания перпендикулярны к плоскости падения, то они не влияют на интенсивность указанных максимумов.

При условии $m = m'$ пьезоэлектрические колебания максимально влияют как на интенсивность селективных, так и диффузных максимумов.

Действительно, высота дифракционного пика при нулевых пьезоэлектрических колебаниях равна [5]:

$$BN_1^2 N_2^2 N_3^2\, e^{-2M} = BN^2 e^{-2M},$$

где $M = \frac{1}{2}\sum_{\sigma=1}^{N}\sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j}$, а при условии $m = m'$ она принимает значение $BN_1^2 N_2^2 N_3^2 e^{-2M}$, т. е. в этом случае пьезоэлекрические колебания идеальной решетки резко уменьшают интенсивность селективных максимумов (ширина селективных максимумов не меняется).

Для исследования влияния пьезоэлектрических колебаний на интенсивность диффузного рассеяния выражение (8) с достаточной точностью приводим к следующему виду:

$$\bar{I} = B\left(\sum_{mnp}\sum_{m'n'p'} I_4 + \sum_{mnp}\sum_{m'n'p'} I_5\right),$$

где

$$I_4 = \exp\left[ik\left(\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}\right)\vec{S}\right]\cdot\exp(-2M)\times$$

$$\times\exp\left\{-\frac{1}{4}\left[k\vec{S}\vec{l}_0\left(\sin\left[k_0 ma\right] - \sin\left[k_0 m'a\right]\right)\right]^2\right\}, \tag{11}$$

$$I_5 = \exp(-2M)\sum_{\sigma=1}^{N}\sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j}\exp\left[ik\left(\vec{r}_{mnp} - \vec{r}_{m'n'p'}\right)\vec{S}\right]\times$$

$$\times\cos\left[k_{\sigma a}\, a\,(m - m') + k_{\sigma b}\, b\,(n - n') + k_{\sigma c}\, c\,(p - p')\right]\times \tag{12}$$

$$\times\exp\left\{-\frac{1}{4}\left[k\vec{S}\vec{l}_0\left(\sin\left[k_0 ma\right] - \sin\left[k_0 m'a\right]\right)\right]^2\right\}.$$

Как видно, $B\Sigma\Sigma\, I_4$ является интенсивностью селективных максимумов, а $B\Sigma\Sigma I_5$ — интенсивностью диффузного рассеяния. Из (11) видно, что интенсивность селективных максимумов уменьшается как за счет тепловых колебаний, так и за счет пьезоэлектрических.

Выражение (12) показывает, что интенсивность диффузных максимумов в общем случае также зависит от пьезоэлектрических колебаний.

При $m = m'$ интенсивность диффузного рассеяния принимает следующий вид:

$$I_6 = B\sum\sum I_5 = BN_1\sum_{np}\sum_{n'p'}\exp(-2M)\times$$

$$\times \sum_{\sigma=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j} \exp\left[ik\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\vec{S}\right] \cos\left[k_{\sigma b}\, b(n-n') + k_{\sigma c} c(p-p')\right],$$

где

$$\vec{r}_{np} = n\vec{b} + p\vec{c}, \quad \vec{r}_{n'p'} = n'\vec{b} + p'\vec{c}.$$

Выражение

$$I_7 = \exp\left[ik\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\vec{S}\right] \cos\left[k_{\sigma b}\, b\,(n-n') + k_{\sigma c}\, c\,(p-p')\right]$$

приводится к виду

$$I_7 = \exp\left[i\left(k\vec{S} + \vec{k}_\sigma\right)\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right] + \exp\left[i\left(k\vec{S} - \vec{k}_\sigma\right)\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right],$$

где k_σ — волновой вектор упругой волны номера σ.

Таким образом, для интенсивности диффузного рассеяния получим

$$I_6 = BN_1 \sum_{np} \sum_{n'p'} \exp(-2M) \sum_{\sigma=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j} \exp\left[i\left(k\vec{S} + \vec{k}_\sigma\right)\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right] +$$

$$+ BN_1 \sum_{np} \sum_{n'p'} \exp(-2M) \sum_{\sigma=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j} \exp\left[i\left(k\vec{S} - \vec{k}_\sigma\right)\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right].$$

Окончательно, для полной средней максимальной ($m = m'$) интенсивности рассеяния получим

$$\bar{I} = B\left[I_0\left(\frac{\vec{S}}{\lambda}\right) + I_0\left(\frac{\vec{S}}{\lambda} + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi}\right) + I_0\left(\frac{\vec{S}}{\lambda} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi}\right)\right], \tag{13}$$

где

$$I_0\left(\frac{\vec{S}}{\lambda}\right) = N_1 \exp(-2M) \sum_{np} \sum_{n'p'} \exp\left[i2\pi \frac{\vec{S}}{\lambda}\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right],$$

$$I_0\left(\frac{\vec{S}}{\lambda} + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi}\right) = N_1 \exp(-2M) \sum_{np} \sum_{n'p'} \sum_{\sigma=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j} \exp\left[i2\pi\left(\frac{\vec{S}}{\lambda} + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi}\right) \times \right.$$

$$\left. \times \left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right],$$

$$I_0\left(\frac{\vec{S}}{\lambda} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi}\right) = N_1 \exp(-2M) \sum_{np} \sum_{n'p'} \sum_{\sigma=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} G_{\sigma j} \exp \times$$

$$\times \left[i2\pi\left(\frac{\vec{S}}{\lambda} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi}\right)\left(\vec{r}_{np} - \vec{r}_{n'p'}\right)\right].$$

Сравнивая выражение (13) средней полной интенсивности с аналогичным выражением, полученным в (5), мы видим, что влияние пьезоэлектрических колебаний решетки как на интенсивность селективных максимумов, так и на интенсивность диффузных максимумов сказывается одинаково и тем, что двойные суммы

$$\sum_m \sum_{m'} \exp\left[i2\pi \frac{\vec{S}}{\lambda} (\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}) \right], \quad \sum_m \sum_{m'} \exp\left[i2\pi \left(\frac{\vec{S}}{\lambda} + \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right) (\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}) \right]$$

и

$$\sum_m \sum_{m'} \exp\left[i2\pi \left(\frac{\vec{S}}{\lambda} - \frac{\vec{k}_\sigma}{2\pi} \right) (\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}) \right],$$

заменены через величину N_1.

Таким образом, мы приходим к следующему выводу: пьезоэлектрические колебания идеальной решетки в первом приближении (падающие и рассеянные волны плоские) уменьшают интенсивность как селективных, так и диффузных максимумов.

Ереванский государственный
университет

Поступила 26 декабря 1966

ЛИТЕРАТУРА

1. *П. А. Безирганян, В. И. Авунджян*, Изв. АН АрмССР, Физика, в печати.
2. *П. А. Безирганян, В. И. Авунджян*, Изв. АН АрмССР, Физика, 1, 147 (1966).
3. *П. А. Безирганян, В. И. Авунджян*, Изв. АН АрмССР, Физика, 1, 127 (1966).
4. *П. А. Безирганян*, ЖТФ, 34, 562 (1964).
5. *Р. Джеймс*. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, Изд. ИЛ, М., 1950.
6. *А. Гинье*, Рентгенография кристаллов, Гос. изд. физ. мат. лит., М., 1961.
7. *У. Вустер*, Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах, Изд. ИЛ, М., 1963.

ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ՑԱՆՑԻ ՊՅԵԶՈԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ՏԱՏԱՆՈՒՄՆԵՐԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԴԻՖՈՒԶԻՈՆ ՄԱՔՍԻՄՈՒՄՆԵՐԻ ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅԱՆ ՎՐԱ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ, Վ. Ի. ՀԱՎՈՒՆՋՅԱՆ

Կինեմատիկ տեսության շրջանակներում ուսումնասիրված է իդեալական բյուրեղի պյեզոէլեկտրական տատանումների ազդեցությունը ռենտգենյան դիֆուզիոն մաքսիմումների վրա։ Ստացված են արտահայտություններ սելեկտիվ և դիֆուզիոն մաքսիմումների ինտենսիվության համար։ Ցույց է տրված, որ պյեզոէլեկտրական տատանումները դիֆուզիոն մաքսիմումների ինտենսիվության վրա ընդհանրապես ազդում են։ Ազդեցությունն ամենամեծն է, երբ տատանումները տեղի են ունենում անդրադարձնող հարթության ուղղահայաց ուղղությամբ, իսկ երբ տատանումները տեղի են ունենում անդրադարձնող հարթության մեջ, նրանք դիֆուզիոն մաքսիմումների վրա չեն ազդում։

INFLUENCE OF THE PIEZOELECTRICAL OSCILLATIONS OF A CRYSTALLINE LATTICE ON THE INTENSITY OF X-RAY DIFFUSE PEAKS

P. H. BEZIRGANIAN and V. I. HAVOUNDJIAN

The paper deals with the influence of piezoelectrical oscillations of an ideal crystalline lattice on the intensity of X-ray diffuse peaks. Expressions are obtained for the intensity of selective and diffuse peaks. It is shown that the oscillations must in general influence the intensity of both diffuse and selective peaks with the exception of the case when the reflecting planes are parallel to the direction of the oscillations.