Изв. АН Армянской ССР, Физика, 3, 180—188 (1968)

К ВОПРОСУ О ЗАКОНЕ СОХРАНЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

П. А. БЕЗИРГАНЯН, Л. Г. ГАСПАРЯН

Исследован закон сохранения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей. Показано, что этот закон в общем случае не выполняется. Он справедлив при коротких длинах падающих волн (λ значительно меньше, чем размеры атома) и легких атомах.

Как известно [1, 2], закон сохранения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей гласит: интерференция между рассеянными волнами не изменяет суммарной интенсивности рассеяния, а лишь перераспределяет ее. На основании этого закона выражение интенсивности рассеяния

$$J(\vec{S}) = \sum_{n=1}^{N} f_n^2 - \sum_{n \neq m}^{N} \sum_{m}^{N} f_n f_m \exp\left[k\left(\vec{S}\,\vec{r}_{mn}\right)\right] \tag{1}$$

в работе [2] приводится к виду

$$J(\vec{S}) = M + \sum_{p \neq p'}^{M} \sum \exp\left\{-ik\left(\vec{S}\,\vec{a}_{pp'}\right)\right\} \tag{2}$$

и доказывается, что

$$\overline{J(\vec{S})} \to M, \tag{3}$$

т. е. получается, что средняя рассеянная интенсивность в электронных единицах равна общему числу электронов облучаемого объема.

Величины, входящие в выражения (1—3) имеют следующий смысл:

N — число рассеивающих мотивов (атомов),

$M = N\dot{Z}$ — общее число электронов в N мотивах (атомах),

Z — число электронов мотива (атома),

f_n — функция рассеяния мотива (атома) с номером n,

$\vec{S} = \vec{s}_1 - \vec{s}_0$, где $\vec{s}_0$ и $\vec{s}_1$ — единичные векторы в направлениях падения и рассеяния соответственно,

$k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ — волновое число рентгеновских лучей.

Однако можно показать, что закон сохранения интенсивности рассеяния имеет очень ограниченное применение: он справедлив только в особых частных случаях, а в общем случае выражение (3) неверно.

Действительно, с точки зрения закона сохранения интенсивности суммарная энергия, рассеянная атомом с номером $\dot{Z}$ в Z раз больше, чем энергия, рассеянная одним изолированным электроном. Но из эксперимента известно [3], что коэффициент рассеяния зависит от

длины волны и, в частности, для тяжелых элементов он оказывается большим, чем это следует из рассеяния изолированными электронами. В зависимости от степени концентрации электронов около центра атома, т. е. в зависимости от порядкового номера рассеивающего атома, коэффициент рассеяния может изменяться в Z раз. На рис. 1 приведены величины коэффициентов рассеяния для различных атомов в зависимости от длины волны,

σ_0 — коэффициент рассеяния по теории Томсона,

σ_s — измеренный коэффициент рассеяния.

Как видно, в области длин волн от 0,1 до 1,0 Å для легких элементов наблюдается приблизительное согласие эксперимента с теорией, но для тяжелых элементов с увеличением длины волны коэффициент рассеяния быстро увеличивается [3]. Следовательно, для электронов, принадлежащих одному и тому же атому закон сохранения интенсивности рассеяния в общем случае не имеет места, т. е. выражение (3) неверно.

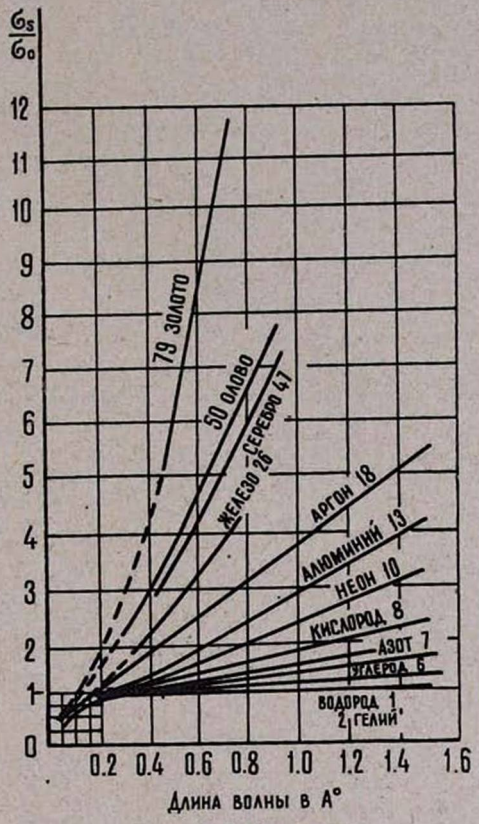

Рис. 1.

С увеличением длины волны увеличение коэффициента рассеяния атома объясняется тем, что когда расстояния между электронами малы по сравнению с длиной рассеиваемой волны, то все электроны данного атома действуют как бы совместно — воздействуют друг на друга. Ведь в оптике известны [4] кажущиеся парадоксы в явлениях интерференции: когда расстояние между двумя когерентными источниками меньше, чем половина длины волны, то общая энергия испускания этих источников благодаря воздействию их друг на друга резко увеличивается. Ясно, что в таких случаях не может быть и речи о законе сохранения интенсивности рассеяния. Такое условие как раз осуществляется внутри атомов между электронами и даже между рядом расположенных (соседних) атомов внутри жидкостей, аморфных твердых тел и кристаллов. Разумеется, что нарушение закона сохранения интенсивности рассеянных волн не противоречит закону сохранения энергии.

Закон сохранения интенсивности рассеяния для совокупности атомов

Итак, мы уже видели, что для электронов, принадлежащих одному и тому же атому, закон сохранения интенсивности рассеяния в общем случае не существует и, следовательно, выражение (3) в общем случае неверно.

Теперь мы исследуем условия выполнения закона сохранения интенсивности рассеяния для совокупностей атомов, в частности, для атомов кристалла.

В этом случае закон сохранения интенсивности рассеяния формулируется следующим образом: суммарная энергия (по всем направлениям) рассеянная N атомами N раз больше, чем энергия, рассеянная одним изолированным атомом.

Для исследования справедливости этого предположения сначала проведем расчет потока энергии, рассеянной двумя атомами, через замкнутую поверхность, внутри которой расположены эти атомы.

Допустим два атома внутри сферической поверхности радиуса R расположены симметрично относительно центра этой сферы (см. рис. 2). Расстояние между этими атомами равно d. Пусть плоская монохроматическая волна в направлении перпендикулярном к d падает на эти атомы и мы наблюдаем интенсивность рассеянных волн в точке P на поверхности сферы, которая из центра этой сферы видна под углом θ относительно d. Тогда для амплитуды волны, рассеянной этими двумя атомами, в точке наблюдения получим

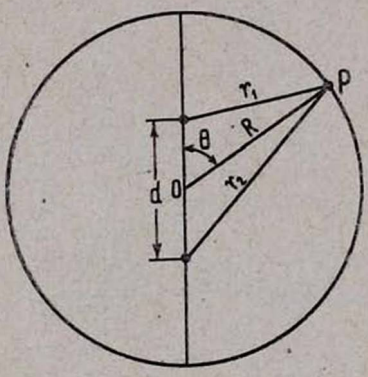

Рис. 2.

$$A_0 = f\,\frac{e^2}{mc^2}\left\{\frac{1}{r_1}\,e^{-ikr_1} + \frac{1}{r_2}\,e^{-ikr_2}\right\}, \qquad (4)$$

где f — функция рассеяния атомов,
r_1 и r_2 — расстояния атомов от точки наблюдения,
m и e — масса и заряд электрона,
c — скорость света.

Для интенсивности суммарной рассеянной волны в точке наблюдения из (4) получим

$$|A_\theta|^2 = B\left[\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} + \frac{2}{r_1 r_2}\cos\psi\right], \qquad (5)$$

где $\psi = k\,(r_2 - r_1)$, $B = f^2\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 A_0^2$, A_0 — амплитуда падающей волны.

Величины r_1 и r_2 через радиус сферы R выражаются следующим образом:

$$r_1 = R\left\{1 + \frac{\left(\frac{d}{2}\right)^2 + Rd\cos\theta}{2R^2} - \frac{1}{8}\left[\frac{\left(\frac{d}{2}\right)^2 + Rd\cos\theta}{R^2}\right]^2 + \cdots\right\}.$$

$$r_2 = R\left\{1 + \frac{\left(\frac{d}{2}\right)^2 + Rd\cos\theta}{2R^2} - \frac{1}{8}\left[\frac{\left(\frac{d}{2}\right)^2 + Rd\cos\theta}{R^2}\right]^2 + \cdots\right\}.$$

Имея в виду, что $d \sim 10^{-8}$ *см*, из последних выражений с достаточной точностью получим $\psi = k(r_2 - r_1) = kd\cos\theta$, тогда с той же точностью выражение (5) примет следующий вид:

$$|A_\theta|^2 = \frac{2B}{R^2}[1 + \cos(kd\cos\theta)]. \tag{6}$$

Для определения интегральной интенсивности суммарной рассеянной волны (рассеянной по всем направлениям) мы должны найти поток рассеянной энергии через сферу радиуса R.

$$Y = \int |A_\theta|^2 . ds = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |A_\theta|^2 R^2 \sin\theta d\theta d\varphi = 4\pi\int_0^{\pi} B[1 + \cos(kd\cos\theta)]\cdot\sin\theta d\theta, \tag{7}$$

где $ds = R^2\sin\theta d\theta d\varphi$ — элемент поверхности сферы.

Если пренебречь зависимостью B от угла θ, что верно только для точечных рассеивателей (электронов), то окончательно для интегральной интенсивности рассеяния получим

$$Y = 8\pi B\left(1 + \frac{\sin kd}{kd}\right). \tag{8}$$

В случае оптически независимых рассеивателей получим

$$Y = 8\pi B. \tag{9}$$

Таким образом, закон сохранения интенсивности справедлив для двух атомов только в том случае, если в (8) можно пренебречь членом $\frac{\sin kd}{kd}$.

Как видно из (8) и (9), при очень малых d (расстояние между рассеивателями) и больших λ отношение $Y/Y_1 \to 2$, т. е. закон сохранения интенсивности не соблюдается. При больших d отношение $Y/Y_1 \to 1$ и этот закон имеет место. Ясно, что для электронов одного и того же атома и для рядом расположенных атомов жидкостей, аморфных твердых тел и кристаллов при достаточной величине длины падающей волны выражение $\sin kd/kd$ может значительно отличаться от нуля и, следовательно, закон сохранения интенсивности может нарушаться.

Теперь исследуем закон сохранения интенсивности рассеяния для одномерной атомной решетки.

Допустим плоская монохроматическая волна перпендикулярно падает на линейную решетку и мы исследуем интенсивность рассеяния в точке наблюдения P, которая из средней точки решетки видна под углом θ относительно решетки.

В рассматриваемом случае для амплитуды волны, рассеянной этой решеткой, можно написать следующее выражение:

$$A_0 = f \frac{e^2}{mc^2} \sum_{n=-N}^{N} \frac{1}{r_n} e^{-ikr_n}, \tag{10}$$

откуда для интенсивности получим

$$|A_0|^2 = B \left\{ \sum_{n=-N}^{N} \frac{1}{r_n^2} + \sum_{n \neq n'} \sum \frac{1}{r_n r_{n'}} \cos [k (r_n - r_{n'})] \right\}. \tag{11}$$

Для нахождения интегральной интенсивности суммарной волны необходимо последнее выражение проинтегрировать по поверхности сферы радиуса R.

Если длина решетки не больше 10^{-5} *см*, , то с достаточной точностью выражение $(r_n - r_{n'})$ можно привести к следующему виду:

$$(r_n - r_{n'}) = c\,(n - n') \cos \theta,$$

где c — трансляция решетки.

Пренебрегая, как и в случае двух рассеивателей, зависимостью величины B от θ, для интегральной интенсивности рассеянного излучения с достаточной точностью (с точностью до 10^{-3}) получим

$$Y = 8\pi B \left\{ N + \sum\sum_{n \neq n'} \frac{\sin kc\,(n - n')}{kc\,(n - n')} \right\}, \tag{12}$$

где $2N$ — число атомов в линейной решетке.

В случае, когда первичный пучок падает не перпендикулярно к атомной решетке, выражение интенсивности примет следующий (для двух частиц) вид:

$$Y = 8\pi B \left\{ 1 + \cos \varphi_1 \frac{\sin ka}{ka} \right\},$$

где

$$\varphi_1 = k (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \cdot \vec{S}_0.$$

Аналогично для $2N$ частиц оно имеет вид:

$$J = 8\pi B \left[N + \sum_{n \neq n'} \sum \cos \varphi_n \frac{\sin kc\,(n - n')}{kc\,(n - n')} \right],$$

где

$$\varphi_n = k (\vec{r}_n - \vec{r}_{n'}) \cdot \vec{s}_0.$$

Во всех наших вычислениях мы пренебрегали зависимостью от θ, однако в B входит функция атомного рассеяния (см. (5)), которая с увеличением угла рассеяния быстро падает и, следовательно, этой зависимостью нельзя пренебречь. Но легко убедиться в том, что учет ее не меняет общего характера зависимости рассеянной интегральной интенсивности от расстояния между рассеивателями. Действительно, предполагая, что плотность электронных зарядов атома обладает сферической симметрией для функции рассеяния получим

$$f = \int_0^\infty 4\pi a^2 \rho(a) \frac{\sin \mu_a}{\mu_a} da, \quad \text{где} \quad \mu = \frac{4\pi \sin \theta_0}{\lambda},$$

Таким образом, с учетом атомного фактора выражение интенсивности для двух частиц примет вид:

$$J = J_1 + J_2 + J_{\text{интерф.}} = F^2 f^2 \left[\frac{R^2}{r_1^2} + \frac{R^2}{r_2^2} + 2 \cdot \frac{R^2}{r_1 r_2} \cos k (r_2 - r_1) \right],$$

где

$$F^2 = \frac{B}{f^2}; \; J_{\text{интерф.}} = 2F^2 f^2 \frac{R^2}{r_1 \cdot r_2} \cos (r_2 - r_1) k.$$

С достаточной точностью можно принять, что $J_1 = J_2$, следовательно,

$$J = 2J_1 + J_{\text{интерф}}.$$

Имея в виду соотношения

$$\cos 2\theta_0 = \sin \theta \cdot \cos \varphi; \quad \sin \theta_0 = \sqrt{\frac{1 - \sin \theta \cos \varphi}{2}}$$

и то, что с точностью 10^{-6} радиана $2\theta_{01} = 2\theta_{02} = 2\theta_0$ (см. рис. 3) получим

$$J_1 = F^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \cdot d\varphi \left[\int_0^{\infty} 4\pi a^2 \rho (a) \frac{\sin \mu a}{\mu a} da \right]^2.$$

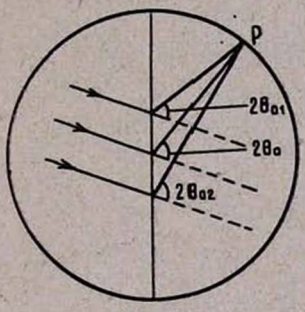

Рис. 3.

Выражение $\frac{\sin \mu a}{\mu a}$ разлагая в ряд по степеням μa и предполагая, что $\rho (a) = \rho_0$ при $a \leqslant a_0$, $\rho (a) = 0$, при $a > a_0$, после интегрирования по a, φ и θ получим

$$J = 2 \left(\frac{4\pi a_0^2 \rho^{2/3} F^{2/3}}{3^{2/3}} \right)^3 \left(\frac{1}{2} + \frac{\sin kd}{kd} \right) \left[1 - \frac{1}{10} \left(\frac{4\pi}{\lambda} \right)^2 a_0^2 + \cdots \right].$$

Аналогично для решетки получим выражение

$$J = 2 \cdot \left(\frac{4\pi a_0^2 \rho^{2/3} F^{2/3}}{3^{2/3}} \right)^3 \left[N + \sum_{\substack{n \neq n' \\ -N}}^{+N} \sum \frac{\sin kd (n - n')}{kd (n - n')} \times \right.$$

$$\left. \times \left[1 - \frac{1}{10} \left(\frac{4\pi}{\lambda} \right)^2 a_0^2 + \cdots \right] \right], \qquad (13)$$

которое в случае косого падения примет вид

$$J=2\left(\frac{4\pi a_0^2 \rho^{2/3} F^{2/3}}{3^{2/3}}\right)^3\left[N+\sum_{n\neq n'}^{+N}\sum \cos\varphi_n \frac{\sin kd\,(n-n')}{kd\,(n-n')}\right]\times$$

$$\times\left[1-\frac{1}{10}\left(\frac{4\pi}{\lambda}\right)^2 a_0^2+\cdots\right].$$

Обсуждение результатов и выводы

Как видно из (8), (12) и (13), в выражениях интегральной интенсивности рассеяния появляется интерференционный член (см. (8)), содержащий слагаемые, равные или пропорциональные (см. (12), (13)) множителю вида

$$\sum_{n\neq n'}\sum \frac{\sin kd\,(n-n')}{kd\,(n-n')}. \tag{14}$$

И, как уже было сказано выше, закон сохранения интенсивности рассеянного излучения справедлив только в том случае, когда интерференционный член, содержащий множитель (14), исчезает. Ясно, что все члены суммы (14), для которых n и n' намного отличаются друг от друга, исчезают. Значения, которыми нельзя пренебречь, могут принимать члены, для которых n и n' отличаются только на единицу. Поэтому мы можем, не совершив большой ошибки, сумму (14) заменить выражением

$$2\,(2N-1)\,\frac{\sin kd}{kd}. \tag{15}$$

Следовательно, выполнение закона сохранения интенсивности рассеяния обусловлено исчезновением последней величины. Функция $\frac{\sin kd}{kd}$ принимает максимальные значения при

$$kd=0;\ 1,\ 43\pi;\ 2{,}46\pi\cdots$$

Нулевые значения эта функция принимает при

$$kd=n=\pi,\quad \text{где}\quad n=0,\ \pm 1,\ \pm 2\cdots$$

Если пренебречь вторичными максимумами этой функции (они быстро уменьшаются с увеличением порядка), то для получения заметных значений выражения (15) необходимо выполнение условия

$$kd<\pi \quad \text{или} \quad 2d<\lambda, \tag{16}$$

т. е. двукратное расстояние между соседними рассеивателями должно быть меньше, чем длина падающей волны.

Условие (16) легко выполнимо для электронов, принадлежащих одному и тому же атому, особенно в случае длинных волн и тяжелых атомов. Для соседних атомов кристаллов, аморфных твердых тел и жидкостей условие (16) может выполняться в особых случаях больших длин падающих волн. Действительно, если $d=2A°$, $\lambda=8A°$, то

$kd = \frac{\pi}{2}$ и $\frac{\sin kd}{kd} = \frac{2}{\pi}$. Тогда интегральная интенсивность рассеяния значительно больше (см. (8)), чем предусматриваемая законом сохранения интенсивности рассеяния атомных рассеивателей.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

1. В общем случае закон сохранения интенсивности рассеянных волн не выполняется:

а) в общем случае интегральная интенсивность волн, рассеянных атомом с номером Z больше, чем интегральная интенсивность волн, рассеянных Z независимыми электронами.

б) в общем случае интегральная интенсивность волн, рассеянных N атомами среды (кристалл, аморфное тело, жидкость) больше, чем интегральная интенсивность волн, рассеянных N независимыми атомами.

2. В случае коротких длин падающих волн (λ значительно меньше, чем размеры атома) и легких атомов закон сохранения иатенсивности рассеянных волн выполняется.

3. В общем случае нельзя пользоваться выражением (3).

Ереванкский государственный университет Поступила 16 ноября 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. *Б. К. Вайнштейн*, Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. Изд. АН СССР, М.. 1963.
2. *А. Гинье*. Рентгенография кристаллов. Изд. физ.-мат. наук, М., 1961.
3. *А. Комптон, С. Алисон*, Рентгеновские лучи. Теория и эксперимент. ОГИЗ, Л.—М., 1941.
4. *Г. С. Ландсберг*, Оптика, изд. тех.-лит., М., 1957.

ՑՐՎԱԾ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅԱՆ ՊԱՀՊԱՆՄԱՆ ՕՐԵՆՔԻ ՄԱՍԻՆ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ, Լ. Գ. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ

Հետազոտված է ցրված ռենտգենյան ճառագայթների ինտենսիվության պահպանման օրենքը և ցույց է տրված, որ այդ օրենքը ունի սահմանափակ կիրառություն։ Այն ճիշտ է միայն առանձին մասնավոր դեպքերում։ Ընդհանուր դեպքում Z համարի ատոմի ցրած ճառագայթների ինտեգրալ ինտենսիվությունը մեծ է Z անկախ էլեկտրոնների ցրած ալիքների ինտեգրալ ինտենսիվությունից։ Այնուհետև ցույց է տրված, որ միջավայրի N ատոմների ցրած ալիքների ինտեգրալ ինտենսիվությունը ավելի մեծ է N անկախ ատոմների ցրած ալիքների ինտենսիվությունից։ Ցույց է տրված, որ այդ օրենքը ճիշտ է ընկնող կարճ ալիքների (λ զգալի փոքր է ատոմի չափերից) և թեթև ատոմների համար։

ON THE LAW OF CONSERVATION OF THE INTENSITY OF SCATTERED X-RAYS

P. H. BEZIRGANIAN, L. G. GASPARIAN

The law of conservation for the intensity of scattered X-rays is considered, and it is shown that it has limited application. It is valid only for special cases. In general case the integral intensity of waves scattered by an atom with an atomic number Z is

greater than the integral intensity of waves scattered by Z independent electrons. It is also shown that the integral intensity of the waves scattered by N atoms of a medium (crystalline, amorphous or liquid) is greater than that scattered by N independent atoms. The law of conservation of the scattered waves is valid for the case of light atoms and for incident waves with a wavelength much smaller than the size of the atoms.