

## ТЕОРИЯ ЭФФЕКТА БОРМАНА ДЛЯ КОНЕЧНОГО КРИСТАЛЛА

П. А. БЕЗИРГАНЯН, М. А. НАВАСАРДЯН

Методом разностных уравнений Дарвина изучен эффект Бормана для конечного кристалла.

Показано, что эффект Бормана зависит от размеров отражающих плоскостей: с уменьшением размеров отражающих плоскостей ослабляется взаимодействие между проходящей и отраженной волнами, увеличивается экстинкционная дистанция, ослабляется эффект Бормана.

Эффект, открытый Борманом [1] в 1941 году, объяснил Лауэ [2] на основе своей динамической теории рассеяния рентгеновских лучей в 1949 году. Недавно [3] этот эффект был объяснен и с помощью разностных уравнений (многократных отражений) Дарвина.

Как известно, динамические теории рассеяния рентгеновских лучей вообще разработаны только для случая неограниченных отражающих атомных плоскостей. С этой точки зрения, в частности, теория Дарвина [4] и на основе этой теории объяснение эффекта Бормана [3] страдают следующими недостатками:

1. При расчете амплитуд волн, отраженных от одной атомной плоскости и рассеянных в направлении первичного пучка, предположено, что размеры этой плоскости бесконечно велики, и для этих амплитуд соответственно получены следующие выражения:

$$-iq = i \frac{n^2 F(hkl) e^2}{mc^2 \sin \theta},$$

$$-i\sigma = i \frac{n^2 F(000) e^2}{mc^2 \sin \theta}.$$

Последние получены интегрированием в бесконечных пределах, которые равносильны предположению, что на рассеивающей атомной плоскости располагается бесконечно большое число зон Френеля.

Между тем, хорошо известно, что у реального кристалла ограничена не только толщина, но и ширина, и длина, и часто размеры отражающих плоскостей имеют размеры порядка размеров первой зоны Френеля [4, 5].

2. Амплитуда проходящей волны по Дарвину равна  $1 - i\sigma$  при единичной амплитуде падающей волны. Однако  $|1 - i\sigma| > 1$ , следовательно, по Дарвину получается, что интенсивность волны, проходящей одну атомную плоскость, больше интенсивности волны, падающей на эту плоскость и это тогда, когда отраженная волна уносит с собой часть энергии этой падающей волны (амплитуда отраженной волны равна  $-iq$ ).

Рассмотрим эффект Бормана в случае ограниченного кристалла.

Допустим плоская монохроматическая волна падает на кристалл в направлении единичного вектора  $\vec{S}_0$  (рис. 1) и точка наблюдения из начала координат видна в направлении единичного вектора  $\vec{S}_1$ . Пусть векторы  $\vec{S}_0$  и  $\vec{S}_1$  имеют следующие компоненты:

$$S_0(\cos \theta, 0, -\sin \theta), \quad \vec{S}_1(\cos \theta, 0, \sin \theta),$$

в направлениях координатных осей  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  соответственно. В рассматриваемом случае отражающие плоскости перпендикулярны к поверхности кристалла  $AB$  и  $A_1B_1$  (рис. 1) и параллельны координатной плоскости  $XOY$ .

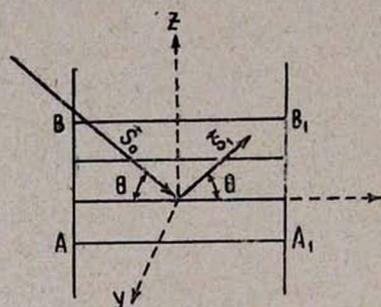


Рис. 1.

Тогда, если падающая волна в начале координат имеет вид  $e^{ikct}$ , т. е. амплитуда падающей волны в этой точке равна единице, то для амплитуд волн, отраженных от плоскости и рассеянных в направлении падающей волны, получим [5, 6]

$$G = G_0 e^{-i\gamma}, \quad \Sigma = \Sigma_0 e^{-i\gamma}, \quad (1)$$

где

$$G_0 = \sqrt{G_0'^2 + G_0''^2}; \quad \Sigma_0 = \sqrt{\Sigma_0'^2 + \Sigma_0''^2}; \quad (2)$$

$$G_0' = D(ab - cd); \quad G_0'' = -D(ad - bc);$$

$$a = \int_0^{\frac{r}{\lambda R} \sin \theta \cdot A} \cos \frac{\pi}{2} \cdot x^2 dx; \quad b = \int_0^{\frac{r}{\lambda R} B} \cos \frac{\pi}{2} y^2 dy; \quad (3)$$

$$c = \int_0^{\frac{r}{\lambda R} \sin \theta \cdot A} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx; \quad d = \int_0^{\frac{r}{\lambda R} B} \sin \frac{\pi}{2} y^2 dy; \quad (4)$$

$$D = \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin \theta} \cdot f(2\theta, k); \quad \Sigma_0' = D_1(ab - cd);$$

$$-\Sigma_0'' = D_1(ad + bc);$$

$$D_1 = \frac{n\lambda e^2 \cdot f(0, k)}{2mc^2 \sin \theta}; \quad n - \text{число атомов на единице площади плоскости,}$$

$2\theta$  — угол рассеяния,  $f(2\theta, k)$  и  $f(0, k)$  — атомные функции рассеяния в направлениях  $2\theta$  и  $0$  соответственно.

$R$  — среднее расстояние атомов облучаемого объема от точки наблюдения,

$A$  и  $B$  — размеры отражающих плоскостей в направлениях  $x$  и  $y$  соответственно.

Тогда вместо разностных уравнений

$$\begin{aligned} S_r &= -iq T_r + (1 - iq_0) e^{-i\varphi} \cdot S_{r-1}, \\ T_{r+1} &= (1 - iq_0) e^{-i\varphi} T_{r-1} - iq e^{-2i\varphi} \cdot S_{r-1}, \end{aligned} \quad (5)$$

в рассматриваемом случае получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned} S_r &= G_0 e^{-i\gamma_1} T_r + (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) e^{-i\varphi} S_{r-1}, \\ T_{r+1} &= (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) e^{-i\varphi} T_r + G_0 e^{-i\gamma_1} \cdot e^{-i2\varphi} \cdot S_{r-1}, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  и  $\varphi$  определяются с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \gamma_1 &= -\frac{G_0'}{G_0}, \quad \cos \gamma_2 = -\frac{\Sigma_0^2 + G_0^2}{2\Sigma_0}, \\ \varphi &= 2kd \sin \theta, \end{aligned} \quad (6a)$$

$2\theta$  — угол рассеяния.

Как видно из последних выражений, фазы  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  для неограниченных отражающих плоскостей с достаточной точностью совпадают. Действительно, с одной стороны, для таких плоскостей амплитуда отраженной волны чисто мнимая ( $G_0' = 0$ ,  $\gamma_1 = \frac{\pi}{2}$ ), а с другой стороны, из-за малости величин  $\Sigma_0$  и  $G_0$  имеем

$$\cos \gamma_2 \approx 0, \quad \text{т. е. } \gamma_2 \approx \frac{\pi}{2}.$$

Найдем соотношение между амплитудами проходящих волн после прохождения плоскостей с номерами  $r+1$ ,  $r$  и  $r-1$ . Для этого из второго уравнения (6), определив  $S_{r-1}$  и подставив в первое из них, получим, заменив  $r$  на  $r-1$ ,

$$\begin{aligned} S_{r-1} \cdot G_0 e^{-i\varphi} \cdot e^{-i\gamma_1} &= [G_0^2 e^{-i2\varphi} e^{-i\varphi} - (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2})^2 e^{-i\varphi}] T_{r+1} + \\ &+ (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) e^{-i\varphi} T_r. \end{aligned} \quad (7)$$

Из (7) определив  $S_{r-1}$  и подставив во второе из (6), получим желаемое соотношение

$$\begin{aligned} T_{r+1} \cdot e^{i\varphi} &= 2(1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) T_r + \\ &+ [G_0^2 e^{-i2\gamma_1} - (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2})^2] e^{-i\varphi} \cdot T_{r-1}. \end{aligned} \quad (8)$$

Решение последнего уравнения, как в [3], ищем в виде  $T_r = c \cdot \beta^r$ , тогда из (8) получим

$$\begin{aligned} \beta^2 \cdot e^{i\varphi} &= 2(1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) \beta + \\ &+ [G_0^2 e^{-i2\gamma_1} - (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2})^2] e^{-i\varphi}, \end{aligned}$$

откуда для  $\beta$  найдем

$$\beta = e^{-i\varphi} [(1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) \pm G_0 e^{-i\gamma_1}].$$

В рассматриваемом случае граничным условием будет

$$T_1 = (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2}) T_0. \quad (9)$$

Общее решение написав в виде

$$T_r = C_1 e^{-ir\varphi} (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2} + G_0 e^{-i\gamma_1})^r + C_2 e^{-ir\varphi} (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2} - G_0 e^{-i\gamma_1})^r, \quad (10)$$

с помощью (9) и (6), как и в случае [3], окончательно получим

$$T_r = V_r + W_r, \quad (11)$$

$$e^{i\varphi} S_{r-1} = V_r - W_r, \quad (12)$$

где

$$V_r = \frac{1}{2} e^{-ir\varphi} (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2} + G_0 e^{-i\gamma_1})^r,$$

$$W_r = \frac{1}{2} e^{-ir\varphi} (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2} - G_0 e^{-i\gamma_1})^r. \quad (13)$$

### Обсуждение результатов и выводы

В процессе распространения поля внутри кристалла происходит взаимодействие между проходящей и отраженной волнами (между  $T$  и  $S$  волнами). В начале (при малых  $r$ )  $T$  мало отличается от единицы (амплитуда падающей волны равна единице), а  $S$  очень мало, с углублением в кристалл энергия волны  $T$  по мере взаимодействия постепенно переходит в волну  $S$  и на некотором расстоянии от поверхности кристалла (при  $r = R$ , рис. 2), называемой экстинкционной дистанцией, вся энергия проходящей волны перекачивается в энергию отраженной ( $T_R = 0$ ). После этого картина меняется — энергия отраженной волны переходит в проходящую волну.

Экстинкционную дистанцию можно определить с помощью следующего соотношения

$$(1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2} + G_0 e^{i\gamma_1})^R + (1 + \Sigma_0 e^{-i\gamma_2} - G_0 e^{i\gamma_1})^R = 0,$$

которое с достаточной точностью переписав в виде

$$e^{R(\Sigma_0 e^{-i\gamma_2} + G_0 e^{i\gamma_1})} + e^{R(\Sigma_0 e^{-i\gamma_2} - G_0 e^{i\gamma_1})} = 0,$$

можем заменить соотношением

$$R(\Sigma_0 e^{-i\gamma_2} + G_0 e^{i\gamma_1}) - R(\Sigma_0 e^{-i\gamma_2} - G_0 e^{i\gamma_1}) = i\pi,$$

откуда

$$2RG_0 \sin \gamma_1 = \pi,$$

или

$$R = \frac{\pi}{2G_0 \sin \gamma_1}. \quad (14)$$

Значению  $R$  в виде (14) соответствует следующая величина дистанции экстинкции (рис. 2):

$$X = Rd \cdot \operatorname{ctg} \theta = \frac{\pi d \cdot \operatorname{ctg} \theta}{2C_0 \sin \gamma_1}. \quad (15)$$

Из последнего можно сделать следующие выводы:

1. Чем больше отражающие способности плоскостей, т. е. чем больше  $G_0$ , тем меньше экстинкционная дистанция, следовательно, тем сильнее взаимодействие между проходящей и отраженной волнами.

2. В случае ограниченных кристаллов с уменьшением размеров отражающих плоскостей действительная часть амплитуды волны, отраженной от одной плоскости, увеличивается [см. (1—4) и (6а), а также [6]], следовательно, уменьшается  $\gamma_1$  и увеличивается величина экстинкционной дистанции, т. е. при ограниченных кристаллах с уменьшением размеров отражающих плоскостей ослабляется динамическое взаимодействие между проходящей и отраженной волнами.

Теперь рассмотрим поглощающий кристалл. В работе [3] показано, что в неограниченном поглощающем кристалле, когда кристалл ориентирован на дифракцию и когда электрический вектор падающей волны перпендикулярен к плоскости, содержащей  $T$  и  $S$ , волна  $W_r$  проходит без поглощения, а волна  $V_r$  поглощается. Исчезновение коэффициента поглощения волны  $W_r$  объясняется тем, что в поглощающем кристалле в указанном случае поляризации мнимые части величин  $q$  и  $\sigma$  равны ( $q'' = \sigma''$ ). Действительно, так как в случае неограниченных отражающих плоскостей волны  $V_r$  и  $W_r$  выражаются следующим образом:

$$V_r = \frac{1}{2} e^{-ir\varphi} (1 - i\sigma_0 - iq)'$$

$$W_r = \frac{1}{2} e^{-ir\varphi} (1 - i\sigma_0 + iq),$$

то при  $\sigma'' = q''$  волна  $W_r$  проходит без поглощения. Однако в рассматриваемом случае эти волны выражаются через уравнения (11—13) и при ограниченном кристалле мнимые части величин  $\Sigma_0 e^{-i\gamma_1 z}$  и  $G_0 e^{-i\gamma_1 z}$  не равны ( $\gamma_1 \neq \gamma_2$ ) и тем больше отличаются, чем меньше размеры отражающих кристаллов. Следовательно, при ограниченных отражающих плоскостях и волна  $W_r$  не может проходить без поглощения. Как уже было сказано выше (6а), при неограниченных отражающих плоскостях  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  совпадают и исчезает коэффициент поглощения волны  $W_r$ .

Итак, резюмируя можем констатировать: при ограниченных отражающих плоскостях с уменьшением размеров отражающих плоскостей ослабляется взаимодействие между проходящей и отраженной волнами, что приводит к исчезновению аномально малого поглощения (аномального прохождения).

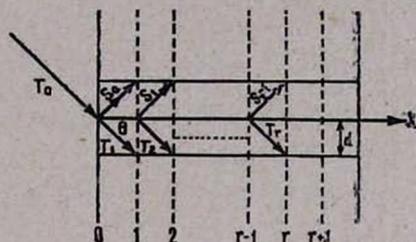


Рис. 2.

Следовательно, для таких кристаллов эффект Бормана не имеет места.

Ереванский государственный университет

Поступила 26.I.1968

### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. G. Borrmann, Phys. Zs, 42, 157 (1941).
2. M. Laue, Acta Cryst, 2, 106 (1949).
3. B. Borie, Acta Cryst, 21, 470 (1966).
4. C. Darwin, Phil. Mag, 27, 315, 675 (1914).
5. П. А. Безиргиян, ДАН АрмССР, 29, 223 (1959).
6. П. А. Безиргиян, И. Б. Боровский, Известия АН АрмССР, серия физ.-мат. наук, 13, № 1, (1960).

### ՔՐԻՍՏԱՆԻ ԷՖԵԿՏԻ ՏԵՍՈՒԹՅՈՒՆԸ ՎԵՐՋԱՎՈՐ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՀԱՄԱՐ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԻԱՆՅԱՆ, Մ. Ա. ՆԱՎԱՍԱՐԴՅԱՆ

Գարլինի ուղղորդման հավասարումների մեթոդով դիտարկվել է Բորմանի էֆեկտը վերջավոր բյուրեղի համար: Ցույց է տրված, որ որքան մեծ լինի հարթությունների անդրադարձնող ընդունակությունը, այնքան փոքր կլինի էքստինկցիոն հեռավորությունը և այնքան ավելի ուժեղ կլինի անցնող և անդրադարձող ալիքների փոխազդեցությունը:

Վերջավոր բյուրեղների դեպքում անդրադարձնող հարթությունների շափերի փոքրացման հետ, հարթությունից անդրադարձած ալիքի ամպլիտուդայի իրական մասը մեծանում է և, հետևաբար, մեծանում է նաև էքստինկցիոն հեռավորությունը, այսինքն՝ վերջավոր բյուրեղներում անդրադարձնող հարթությունների շափերի փոքրացման հետ թուլանում է անցած և անդրադարձած ալիքների դինամիկական փոխազդեցությունը:

Ցույց է տրված նաև, որ վերջավոր շափերի անդրադարձնող հարթությունների համար՝ երկու ալիքներից (անցնող և անդրադարձող) և ոչ մեկը չի անցնում առանց կլանման. այսինքն՝ վերջավոր բյուրեղների համար Բորմանի էֆեկտը անհետանում է:

### THE THEORY OF BORRMANN EFFECT FOR LIMITED CRYSTALS

P. H. BEZIRGANIAN and M. A. NAVASSARDIAN

The Borrmann effect is investigated in terms of Darwin's recurrent equations. It is shown that the higher the reflecting power of the reflecting planes, the lesser the extinction distance and stronger will be the interactions between the incident and the reflected waves. Decreasing the sizes of the reflecting planes, the real part of the amplitude of the reflected waves increases and hence the extinction distance increases, i. e. in limited crystals decreasing the sizes of the reflecting planes, the dynamical interaction between the incident and reflected waves decreases.

It is also shown that in the case of crystals with limited sizes none of the two waves passes without absorption i. e. for limited crystals the Borrmann's effect disappears.