

ИССЛЕДОВАНИЕ ОТКЛОНЕНИЯ ОТ ЗАКОНА ВУЛЬФА—БРЭГГА В ОБЩЕМ СЛУЧАЕ

П. А. БЕЗИРГАНЯН, Г. М. АЛАДЖАДЖЯН

Систематически исследовано отклонение от закона Вульфа—Брэгга в случаях Брэгга и Лауэ. Получена исправленная формула Вульфа—Брэгга в общем виде. Показано, что во всех случаях отражений, за исключением симметричного случая Лауэ, происходит изменение угла Вульфа—Брэгга. В случае Брэгга угол отражения увеличивается, а в асимметричном случае Лауэ либо увеличивается, либо уменьшается.

В в е д е н и е

В связи с бурным развитием теории и экспериментальных исследований динамического рассеяния рентгеновских лучей детальное исследование отклонения от закона Вульфа—Брэгга приобретает важное значение. В различных рентгеновских резонаторах, интерферометрах, многокристалльных комбинированных монохроматорах и спектрометрах часто приходится луч, отраженный по Лауэ от одной части кристалла, привести в положение отражения по Брэггу для другой части этого же кристалла, и наоборот [1—6]. В подобных случаях необходимо учесть отклонение от закона Вульфа—Брэгга для различных отражений по Брэггу и Лауэ.

Отклонение от закона Вульфа—Брэгга впервые исследовали Дарвин [7] в 1913 г. и независимо от него Стенстрём [8], а объяснил Эвальд [9]. Эти авторы исследовали отклонение от закона Вульфа—Брэгга только для случая отражения Брэгга. В симметричном случае Лауэ отклонение от закона Вульфа—Брэгга не наблюдается: отражение происходит точно под углом Вульфа—Брэгга. Поэтому не было обращено внимания на асимметричное отражение Лауэ. Только в последние годы Э. Г. Пинскер показал [10], что в асимметричном случае отражения Лауэ также происходит отклонение от закона Вульфа—Брэгга. Однако в этих работах такое отклонение исследовано не детально и не для всех углов отражения. Оказывается, к вопросу исследования отклонения от закона Вульфа—Брэгга можно подойти двояко. В рамках кинематической теории дифракции рентгеновских лучей для описания отклонения от закона Вульфа—Брэгга (для получения исправленного уравнения Вульфа—Брэгга) достаточно учесть преломление рентгеновских лучей при входе в кристалл и выходе из кристалла. В динамической теории дифракции рентгеновских лучей направление максимального отражения отклоняется от вульф-брегговского направления отражения кинематической теории.

Здесь мы будем детально исследовать отклонение от закона Вульфа—Брэгга в рамках кинематической теории дифракции рентгеновских лучей с учетом отличия показателя преломления от единицы. В таком аспекте исследовано отклонение от закона Вульфа—Брэгга и в работе [11], однако в этой работе исследование не носит общий характер и, в частности, там не исследован асимметричный случай Лауэ.

Вывод исправленной формулы Вульфа-Брэгга

Рассмотрим общий случай отражения рентгеновских лучей от семейства плоскостей (hkl) , которые с поверхностью SS' входа в кристалл составляют угол γ (см. рис. 1а). Сначала исследуем асимметричный случай Лауэ (угол Вульфа—Брэгга θ меньше угла γ).

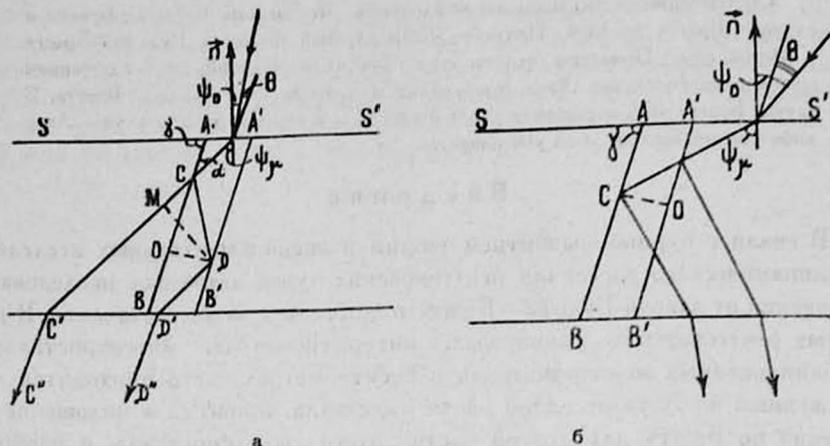


Рис. 1. Схематическое изображение отражения рентгеновских лучей от двух соседних плоскостей для случая Лауэ:

- а) при условии $\psi_0 + \theta + \gamma = \pi/2$, ψ_0 — угол между падающей рентгеновской волной и нормалью \vec{n} к поверхности SS' , ψ_r — угол преломления; AB и $A'B'$ — отражающие плоскости с межплоскостным расстоянием $OD = d$, которые составляют с SS' угол γ ; $OD \perp AB$ и $MD \perp CM$, α — угол между преломленной волной и отражающей плоскостью;
- б) при условии $\psi_0 + \gamma - \theta = \pi/2$, ψ_0 — угол падения, ψ_r — угол преломления, AB и $A'B'$ — отражающие плоскости с межплоскостным расстоянием $OC = d$.

Пусть рентгеновская волна падает на поверхность кристалла под углом ψ_0 относительно нормали \vec{n} к поверхности; ψ_r является углом преломления. Преломленная волна падает на отражающие плоскости (hkl) под углом скольжения α . Отражаясь от плоскостей AB и $A'B'$ семейства (hkl) и преломляясь в точках C' и D , она выходит в направлениях $C'C''$ и $D'D''$. Для разности оптических ходов волн, отраженных от плоскостей AB и $A'B'$, находим

$$\Delta = \mu (MC - CD). \quad (1)$$

Пользуясь определением показателя преломления

$$\mu = \frac{\sin \psi_0}{\sin \psi_r} \approx 1 - \delta,$$

после несложных преобразований выражение (1) можно привести к виду

$$\Delta = 2d [\cos \gamma \sqrt{\sin^2(\theta + \gamma) - 2\delta} - \sin \gamma \cos(\theta + \gamma)]. \quad (2)$$

Для разности оптических путей Δ между волнами, отраженными от соседних плоскостей, из (2) с точностью до δ^2 находим

$$\Delta = 2d \sin \theta \left(1 - \frac{\delta \cos \gamma}{\sin \theta \sin (\theta + \gamma)} \right),$$

откуда для исправленного уравнения Вульфа—Брэгга получаем

$$2d \sin \theta \left(1 - \frac{\delta \cos \gamma}{\sin \theta \sin (\theta + \gamma)} \right) = m\lambda. \quad (3)$$

Формула (3) выведена для асимметричного случая Лауэ для семейства плоскостей (hkl) , однако можно показать, что она имеет общий характер и верна для случаев (симметричного и асимметричного) Лауэ и Брэгга. Более того, из (3) можно получить исправленное уравнение Вульфа—Брэгга в случае Лауэ для плоскостей $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, заменив в ней θ на $-\theta$. В сказанном можно убедиться из следующего.

1. Вывод исправленного уравнения для случая Брэгга ($\theta > \gamma$).

На рис. 2 показан ход лучей при брэгговском отражении от плоскостей AB и $A'B'$. Для разности оптических путей волн, отраженных от соседних плоскостей в точках C и D , получаем

$$\Delta = \mu (CD + DM),$$

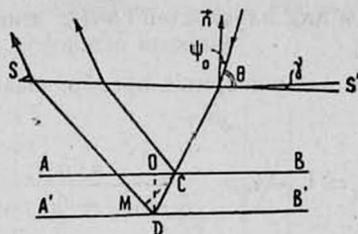


Рис. 2. Схематическое изображение отражения рентгеновских лучей от двух соседних плоскостей для случая Брэгга: ψ_0 — угол между падающей рентгеновской волной и нормалью n к поверхности SS' ; AB и $A'B'$ — отражающие плоскости с межплоскостным расстоянием $OD = d$, которые составляют с SS' угол γ ; $OD \perp AB$ и $MC \perp MD$.

откуда после некоторых преобразований приходим к (3) с учетом того, что в этом случае $\theta > \gamma$.

2. Вывод исправленного уравнения Вульфа—Брэгга для плоскостей $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$.

На рис. 16 показан ход лучей, отраженных от плоскостей $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ в случае Лауэ. С помощью соответствующих расчетов для разности оптических путей волн, отраженных от соседних плоскостей, получаем

$$\Delta = 2d \sin \theta \left(1 + \frac{\delta \cos \gamma}{\sin \theta \sin (\gamma - \theta)} \right),$$

откуда следует исправленное уравнение Вульфа—Брэгга

$$2d \sin \theta \left(1 + \frac{\delta \cos \gamma}{\sin \theta \sin (\gamma - \theta)} \right) = m\lambda, \quad (4)$$

которое можно получить из (3) заменой θ на $-\theta$.

3. При $\gamma = \pi/2$ из (3) получаем уравнение Вульфа-Брэгга для симметричного случая Лауэ

$$2d \sin \theta_0 = m\lambda, \quad (5)$$

которое совпадает с обычным уравнением Вульфа-Брэгга (в этом случае отражение происходит точно под углом Вульфа-Брэгга).

4. При $\gamma = 0$ получаем исправленное уравнение Вульфа-Брэгга для симметричного случая Брэгга

$$2d \sin \theta \left(1 - \frac{\delta}{\sin^2 \theta} \right) = m\lambda.$$

Исследование отклонения от угла Вульфа-Брэгга

Итак, а самом общем случае исправленное уравнение Вульфа-Брэгга можно представить в следующем виде:

$$2d \sin \theta \left(1 \pm \frac{\delta \cos \gamma}{\sin \theta \sin(\gamma \mp \theta)} \right) = m\lambda, \quad (6)$$

где верхние знаки верны для плоскостей (\overline{hkl}) , а нижние — для плоскостей (hkl) (в случае Лауэ).

Из (6) с помощью элементарных преобразований с точностью до членов $(\Delta\theta)^2$ получаем

$$\Delta\theta_0 = \theta - \theta_0 = \pm \frac{\delta \cos \gamma}{\sin(\gamma \pm \theta_0) \cos \theta_0}, \quad (7)$$

где θ_0 — угол Вульфа-Брэгга. Величиной $(\Delta\theta)^2$ можно пренебречь, так как показатель преломления рентгеновских лучей мало отличается от единицы (δ мала) и поэтому $\Delta\theta$ порядка 10^{-5} рад. При выводе (7) $\sin(\gamma \pm \theta)$ мы заменили на $\sin(\gamma \pm \theta_0)$, так как эти величины в указанных приближенных расчетах равны.

Из (7) для симметричных случаев отражения получаем:

1) для симметричного случая Брэгга ($\gamma = 0$)

$$\Delta\theta_0 = \frac{2\delta}{\sin 2\theta_0};$$

2) для симметричного случая Лауэ

$$\Delta\theta_0 = 0,$$

т. е. в этом случае отражение происходит точно под углом Вульфа-Брэгга.

До сих пор мы исследовали отклонение падающей волны от вульф-брэгговского направления. Однако для нахождения суммарного отклонения от угла $2\theta_0$, т. е. суммарного изменения угла между падающей и отраженной волнами, необходимо определить и отклонение отраженной волны от вульф-брэгговского направления отражения.

Нетрудно убедиться в том, что в случае плоско-параллельных пластин это отклонение можно найти из (7), заменив (hkl) на (\overline{hkl}) . Обозна-

чим угол между отраженной волной и отражающей плоскостью через θ_h , а отклонение этого угла от угла θ_0 — через $\Delta\theta_h = \theta_h - \theta_0$. Тогда соответствующие отклонения примут вид

1) отклонение падающей волны —

$$\Delta\theta_0 = \frac{\pm \delta \cos \gamma}{\cos \theta_0 \sin (\gamma + \theta_0)},$$

2) отклонение отраженной волны —

$$\Delta\theta_h = \frac{\mp \delta \cos \gamma}{\cos \theta_0 \sin (\gamma \mp \theta_0)},$$

3) суммарное отклонение —

$$\Delta(2\theta) = \Delta\theta_0 - \Delta\theta_h = \frac{\delta \cos \gamma}{\cos \gamma_0} \left(\frac{1}{\sin (\gamma + \theta_0)} - \frac{1}{\sin (\gamma - \theta_0)} \right).$$

Большое практическое значение имеет исследование зависимости отклонений от угла γ . На рис. 3—5 приведены графики, выражающие зависимость величин $\Delta\theta_0$, $\Delta\theta_h$ и $\Delta(2\theta)$ от угла γ . На основе этих графиков можно сделать следующие основные выводы.

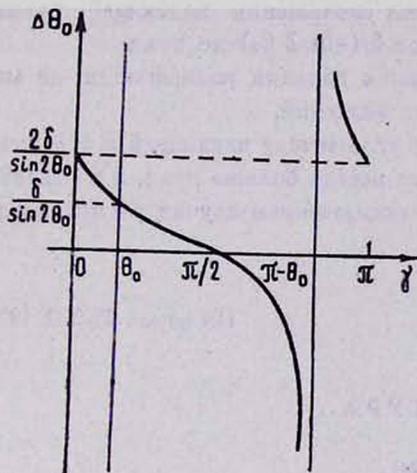


Рис. 3.

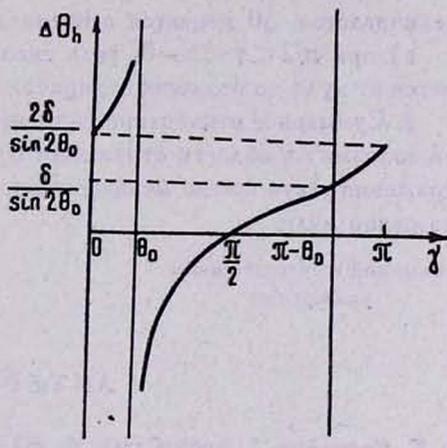


Рис. 4.

Рис. 3. Зависимость отклонения от угла Брэгга падающей рентгеновской волны от угла γ между поверхностью кристалла и отражающей плоскостью; $\theta_0 < \gamma < \pi - \theta_0$ — область отражения Лауэ.

Рис. 4. Зависимость отклонения от угла Брэгга отраженной волны от угла γ .

1. В областях брэгговских отражений, т. е. в областях $0 < \gamma < \theta$ и $\pi - \theta < \gamma < \pi$ отклонения $\Delta\theta_0$ и $\Delta\theta_h$, а также и суммарное отклонение, положительны; при брэгговских отражениях из-за преломления углы скольжения падения и отражения увеличиваются. Увеличивается и угол между падающей и отраженной волнами. Значительные отклонения получаются только тогда, когда падающая или отраженная волна вне кристалла рас-

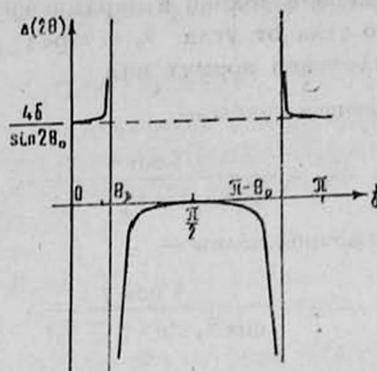


Рис. 5. Зависимость отклонения угла между падающей и отраженной рентгеновскими волнами от угла γ .

пространяется под очень малыми углами относительно поверхности кристалла.

2. В области лауэ-отражения ($0 < \gamma < \pi - \theta_0$) картина следующая:

а) при симметричном отражении ($\gamma = \pi/2$) отклонения от закона Вульфа—Брэгга не происходит;

б) при $\theta_0 < \gamma < \pi/2$ в случае (hkl) угол скольжения падающей волны увеличивается, $\Delta\theta$ меняется в пределах от $\delta/(\sin 2\theta_0)$ до нуля;

в) при $\pi/2 < \gamma < \pi - \theta_0$ угол скольжения падения уменьшается, он меняется от нуля до больших отрицательных значений.

3. Суммарное отклонение (изменение угла между падающей и отраженной волнами) в области отражения Брэгга всегда больше нуля, а в области отражения Лауэ всегда меньше нуля, за исключением случая $\gamma = \pi/2$, когда оно равно нулю.

Ереванский государственный
университет

Поступила 28. XII. 1974

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Matsushita. J. Appl. Cryst., 7, 254 (1974).
2. S. Kikuta. J. Phys. Soc. Japan, 30, 222 (1971).
3. S. Kikuta, K. Kohra. J. Phys. Soc. Japan, 29, 1322 (1970).
4. B. Okkerse. Philips. Res. Repts., 18, 413 (1963).
5. U. Bonse, M. Hart. Acta Cryst., A24, 23 (1968).
6. U. Bonse, M. Hart. Zs. Phys., 1, 194 (1966).
7. C. G. Darwin. Phil. Mag., 27, 315 (1914).
8. W. Stenström. Dissertation, Lund (1919).
9. Ewald. Zs. Phys., 2, 332 (1920).
10. Э. Г. Пинскер. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах, Изд. Наука, 1974.
11. М. А. Блохин. Физика рентгеновских лучей, Гостехиздат, 1953.

ՎՈՒՆՖ-ԲՐԵԳԻ ՕՐԵՆՔԻՑ ՇԵՂՄԱՆ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒՄԸ
ԸՆԴՀԱՆՈՒՐ ԴԵՊՔՈՒՄ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳՅԱՆՅԱՆ, Գ. Մ. ԱԼԱԶԻԶՅԱՆ

Սխտեմատիկորեն ուսումնասիրված է շեղումը Վուլֆ-Բրեգի օրենքից Բրեգի և Լաուեի դեպքերում: Ստացված է Վուլֆ-Բրեգի ուղղված բանաձևը ընդհանուր տեսքով: Ցույց է տրված, որ անդրադարձման բոլոր դեպքերում, բացի Լաուեի սիմետրիկ դեպքից, տեղի է ունենում շեղում Վուլֆ-Բրեգի անկյունից: Բրեգի դեպքում անդրադարձման անկյունը մեծանում է, իսկ Լաուեի ասիմետրիկ դեպքում կամ մեծանում է, կամ փոքրանում:

STUDY OF DIVERGENCES FROM WOLF-BRAGG LAW

P. H. BEZIRGANYAN, G. M. ALADZHADZHIAN

The divergences from the Wolf-Bragg law in Bragg and Laue cases are studied theoretically. The corrected Wolf-Bragg formula is derived for a general case. For all the cases of reflexion except the symmetrical Laue case, changes in the Wolf-Bragg angle occurs. In a Bragg case the angle of reflexion increases. In an asymmetrical Laue case the angle can either decrease or increase.