Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 18, вып. 3, 162—166 (1983)

УДК 537.531

СТРОГИЙ ВАРИАНТ ДАРВИНОВСКОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ ИДЕАЛЬНЫМИ КРИСТАЛЛАМИ. КОЭФФИЦИЕНТ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕМЕНТАРНЫМ СЛОЕМ

П. А. БЕЗИРГАНЯН, А. П. АЙВАЗЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 25 марта 1982 г.)

Проведен строгий кинематический расчет коэффициента рассеяния для кристаллического слоя произвольной сколь угодно малой толщины. Полученное выражение существенно отличается от формул Дарвина и других авторов и является фундаментом для построения строгой динамической теории рассеяния рентгеновских лучей кристаллами.

1. Постановка задачи

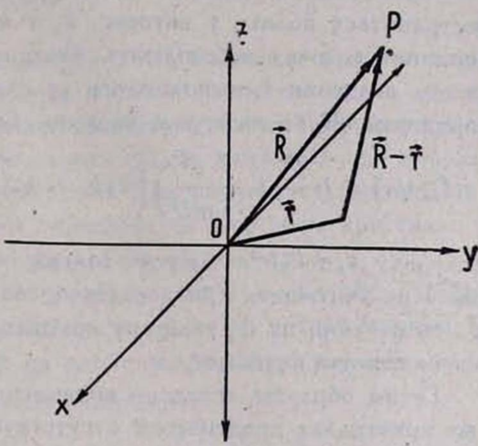
Как известно, в теории Дарвина рассматривался случай симметричного отражения плоской рентгеновской монохроматической волны идеальным кристаллом. Представляя кристалл состоящим из равноудаленных параллельных атомных плоскостей, Дарвин вычислил коэффициенты рассеяния для симметрично отраженной и прошедшей волн [1]. При этом делались следующие приближения: считалось, что амплитуда волны, рассеянной атомом в точку наблюдения, не зависит от его местонахождения на плоскости; размеры плоскости намного меньше, чем расстояние от начала координат до точки наблюдения; суммирование амплитуд волн, рассеянных всеми атомами плоскости, заменялось интегрированием; динамическое взаимодействие зарядов, лежащих в плоскости, не учитывалось. В результате получалось, что сумма интенсивностей отраженной и прошедшей волн превышает интенсивность падающей волны, что, естественно, не удовлетворяет закону сохранения энергии.

В дальнейшем появились работы, в которых метод Дарвина распространялся на лауэвскую геометрию [2, 3] и асимметричную брэгговскую геометрию [4, 5]. В этих работах кристалл разбивался на атомные плоскости, параллельные поверхности кристалла, причем это не брэгговские в обычном понимании плоскости. Метод расчета коэффициентов рассеяния для таких плоскостей аналогичен методу Дарвина, основан на тех же приближениях и страдает теми же недостатками.

2. Строгий расчет коэффициентов рассеяния бесконечной плоскости, имеющей сколь угодно малую толщину

Очевидно, что кинематический расчет в принципе не может дать точных значений для коэффициентов рассеяния атомной плоскости. Очевидно также и то, что чем меньше толщина рассматриваемого слоя, тем меньше будет и ошибка, возникающая из-за пренебрежения динамическим взаимодействием. Толщина слоя в явном виде входит в выражения для коэффициентов отражения кристалла. Таким образом, если в выражениях для коэффициента отражения кристалла устремить толщину слоев, на которые мы его разбиваем, к нулю, то получатся формулы, совпадающие с соответствующими результатами теории Эвальда—Лауэ.

Мы ставим задачу нахождения величины коэффициента отражения для слоя толщиной Δz, параллельного поверхности кристалла, как среднего значения коэффициента отражения бесконечно толстого кристалла. Для этого вычислим амплитуду поля в произвольной точке бесконечного по двум направлениям кристалла в зависимости от его толщины и рассмотрим предел отношения получающегося выражения к толщине кристалла, когда последняя стремится к бесконечности. Умножая получающийся результат на толщину слоя Δz, мы получим искомые выражения для среднего коэф-



К расчету амплитуды волны, рассеянной кристаллическим слоем.

фициента отражения, соответствующего каждой из рассеянных волн, которые будут тем точнее, чем больше толщина кристалла (кривая отражения бесконечно толстого кристалла имеет вид дельта-функции) и чем меньше толщина слоя Δz (поскольку мы пренебрегаем динамическим взаимодействием).

Рассмотрим бесконечный по всем направлениям кристалл. Выберем в нем систему координат так, чтобы плоскость xy была параллельна поверхности элементарного кристаллического слоя. Пусть фаза плоской монохроматической волны, падающей на кристалл, равна нулю в начале координат. Амплитуду волны, рассеянной в точку наблюдения P таким слоем, можно записать в виде

$$D(\mathbf{k}_0) = -\frac{e^2}{mc^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho(\mathbf{r})\, \frac{\exp\{-i2\pi\,[\,|\mathbf{R}-\mathbf{r}|\,k_0 + \mathbf{k}_0\mathbf{r}]\}}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}\, d\mathbf{r}, \qquad (1)$$

где $\frac{e^2}{mc^2}$ — множитель Томсона, $\rho(\mathbf{r})$ — плотность заряда в точке A, $\mathbf{R}$ — вектор, указывающий положение точки наблюдения, $|\mathbf{R}-\mathbf{r}|$ — расстояние от точки A до точки P (см. рисунок), $\mathbf{k}_0 = k_0\mathbf{s}_0$ — волновой вектор падающей волны.

Плотность распределения заряда в кристалле является периодической по трем направлениям и может быть представлена в виде ряда Фурье

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_h F_h \exp\{-i\mathbf{B}_h \mathbf{r}\}, \tag{2}$$

где F_h — коэффициент Фурье, $\mathbf{B}_h$ — вектор обратной решетки.

Подставляя (2) в (1), получим

$$D(\mathbf{k}_0) = -\frac{e^2}{mc^2} \frac{1}{V} \sum_h F_h \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\{-i2\pi[|\mathbf{R}-\mathbf{r}|\, k_0 + \mathbf{k}_h \mathbf{r}]\}}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}\, d\mathbf{r}, \tag{3}$$

где введено обозначение

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{B}_h. \tag{4}$$

Сначала покажем, что в достаточно толстом кристалле не могут распространяться волны, у которых $k_h \neq k_0$. Для этого перенесем начало координат в точку наблюдения, повернем оси координат так, чтобы при каждом значении h выполнялось условие $(\mathbf{k}_h)_{xy} = 0$, и введем полярные координаты. Взяв интеграл, получим (для каждого значения h)

$$D_h(k_0) = i\lambda \frac{F_h}{V}\left(-\frac{e^2}{mc^2}\right)\left\{\delta(k_h - k_0) + \frac{2ik_0}{k_h^2 - k_0^2}\right\} \exp\{-i2\pi \mathbf{k}_h \mathbf{R}\}.$$

Поскольку $k_h \neq k_0$, остаются только члены типа $2k_0/(k_h^2 - k_0^2)$, которые можно не учитывать при достаточно большой толщине кристалла, к тому же при делении их на толщину кристалла и устремлении последней к бесконечности они исчезают.

Таким образом, согласно кинематическому расчету, в бесконечно толстых кристаллах практически отсутствуют волны, волновые векторы которых не лежат на сфере Эвальда—Лауэ [6].

Что касается тех значений h, для которых $k_h = k_0$, то здесь удобно сместить начало координат в плоскости xy так, чтобы для каждого значения h вектор, соединяющий начало координат с точкой наблюдения, был параллелен вектору $\mathbf{k}_h$, и повернуть систему координат вокруг оси $0z$ так, чтобы выполнялось условие $(\mathbf{k}_h)_x = 0$. Перейдя к эллиптическим координатам и воспользовавшись понятием обобщенного значения интеграла, после ряда преобразований и учета поляризационных множителей получим

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}_0) = i\frac{e^2}{mc^2} \frac{\lambda \Delta z}{V} \sum_h \frac{F_h}{|\gamma_h|} [\mathbf{s}_h [\mathbf{E}_0 \mathbf{s}_h]] \exp\{-i2\pi \mathbf{k}_h^0 \mathbf{R}\}, \tag{5}$$

где γ_h — проекция единичного вектора отраженной волны на ось $0z$.

Из (5) следует, что где бы ни находился элементарный слой, он дает такой же вклад, что и слой, расположенный в начале координат. Это приводит к тому, что коэффициенты отражения элементарного слоя зависят от его расстояния до начала координат. Действительно, пусть элементарный слой находится на расстоянии z от начала координат, а векторы $\mathbf{k}_0^0$ и $\mathbf{k}_h^0$ — волновые векторы соответственно падающей и отраженной волн, удовлетворяющие условиям Лауэ. Поскольку падающая волна в начале координат имеет нулевую фазу, волну, рассеянную в точку наблюдения P, можно представить в виде

$$\mathbf{E}_{0h} = i\mathbf{q}(\mathbf{z}) \exp\{-i2\pi[(\mathbf{k}_0^0 - \mathbf{k}_h^0)\,\mathbf{z} + \mathbf{k}_h^0\mathbf{R}]\}\,\Delta z, \tag{6}$$

где $\mathbf{q}(\mathbf{z})$ — коэффициент отражения, который пока неизвестен.

С другой стороны, согласно (5), этот слой даст в точку наблюдения волну с волновым вектором $\mathbf{k}_h^0$, которой соответствует амплитуда

$$\mathbf{E}_h = i\,\frac{e^2}{mc^2}\,\frac{\lambda F_h}{V}\,\frac{1}{|\gamma_h|}\,[\mathbf{s}_h[\mathbf{E}_0\,\mathbf{s}_h]] \exp\{-i2\pi\mathbf{k}_h^0\mathbf{R}\}. \tag{7}$$

Приравнивая эти выражения, получаем формулу для коэффициентов отражения:

$$i\mathbf{q}_{0h}(\mathbf{z})\,\Delta z = i\,\frac{e^2}{mc^2}\,\frac{\lambda}{V}\,\frac{F_h}{|\gamma_h|}\,[\mathbf{s}_h[\mathbf{E}_0\,\mathbf{s}_h]] \exp\{-i2\pi(\mathbf{k}_0^0 - \mathbf{k}_h^0)\,\mathbf{z}\}. \tag{8}$$

Весь процесс вычислений проведен для волн, волновые векторы которых удовлетворяют трем условиям Лауэ; в бесконечном кристалле другие волны отсутствуют. Когда же мы рассматриваем отдельный элементарный слой, то полагаем, что коэффициенты отражения не меняются при небольших отклонениях от третьего условия Лауэ. Это вполне естественно, ибо жесткость каждого из условий Лауэ определяется размером кристалла в соответствующем направлении, а толщина слоя очень мала.

Выражение (8) отличается от результатов работ [1—5] тем, что оно получено для слоя произвольной толщины и содержит в себе множитель $\exp\{i2\pi(\mathbf{k}_0^0 - \mathbf{k}_h^0)\,\mathbf{z}\}$, указывающий на зависимость коэффициента рассеяния от расстояния слоя до начала координат.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Darwin C. G.* Phil. Mag., 27, 315, 675 (1914).
2. *Borie B.* Acta Crist., 21, 470 (1966).
3. *Borie B.* Acta Crist., 23, 210 (1967).
4. *Кузнецов А. В., Фофанов А. Д.* Изв. вузов, Физика, 10, 12 (1970).
5. *Кузнецов А. В., Фофанов А. Д.* Изв. вузов, Физика, 4, 108 (1972).
6. *Джеймс Р.* Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, Изд. ИЛ, М., 1950.

ԻԴԵԱԼԱԿԱՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՎ ՑՐՄԱՆ ԴԱՐՎԻՆՅԱՆ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՃՇԳՐԻՏ ՏԱՐԲԵՐԱԿԸ։ ՏԱՐՐԱԿԱՆ ՇԵՐՏԻ ՑՐՄԱՆ ԳՈՐԾԱԿԻՑԸ

Պ. Հ. ԲԵԶԻՐԳԱՆՅԱՆ, Ա. Պ. ԱՅՎԱԶՅԱՆ

Հետազոտված է հարթ մոնոխրոմատիկ ռենտգենյան ալիքների ցրումը իդեալական բյուրեղներում։ Կատարված է ճշգրիտ կինեմատիկ հաշվարկ կամայական փոքր հաստություն ունեցող բյուրեղային շերտի անդրադարձման գործակիցների համար։ Նշված է, որ ստացված արդյունքները կարող են հիմք հանդիսանալ ճշգրիտ դինամիկ տեսության կառուցման համար։

THE STRICT VERSION OF DARVIN'S THEORY OF SCATTERING BY IDEAL CRYSTALS. COEFFICIENT OF SCATTERING BY AN ELEMENTARY LAYER

P. A. BEZIRGANYAN, A. P. AJVAZYAN

The strict kinematical calculation of the scattering coefficient for an arbitrarily thin crystal layer was performed. The obtained expression essentially differs from formulae by Darvin and other authors and may serve as a starting point for the construction of strict dynamical theory of X-ray scattering by crystals.