

УДК 548.732

НОВЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ И ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ, ДИНАМИЧЕСКИ РАССЕЯННЫХ В МОНОКРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ

А.М. ЕГИАЗАРЯН, К.М. ГЕВОРКЯН, А.К. АТАНЕСЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 25 марта 2010 г.)

Предложен новый метод вычисления интенсивностей рентгеновских лучей и тепловых нейтронов, динамически рассеянных в монокристаллах с дефектами, путем сопоставления динамической теории брэгговской дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в совершенных монокристаллах и теории их малоуглового рассеяния.

1. Введение

Исследование явлений динамической дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в монокристаллах является актуальной задачей современной физики твердого тела. В общих чертах эти явления описываются одинаковыми уравнениями. Однако интегрирование этих уравнений (уравнения Такаги для рентгеновских лучей) в случае несовершенных монокристаллов или монокристаллов с дефектами является непростой задачей. Оно предполагает преодоление громоздких математических вычислений, что ограничивает эффективность исследований, особенно с точки зрения предсказания новых явлений. Для преодоления этого неудобства мы предлагаем новый метод вычисления интенсивностей рентгеновских лучей и тепловых нейтронов, многократно рассеянных в монокристаллах с некоторыми дефектами.

2. Теория

Предположим, что пучок рентгеновских лучей под углом Брэгга падает на монокристалл с дефектом (рис.1). Амплитуду дифрагированной волны будем рассматривать как результат двухэтапной дифракции.

На первом этапе пучок рентгеновских лучей динамически рассеивается на совершенном монокристалле (брэгговская дифракция). На втором этапе дифрагированные на первом этапе волны претерпевают малоугловое рассеяние на дефекте. На первом этапе происходит динамическая брэгговская дифракция рентгеновского пучка на совершенном монокристалле, для которого амплитуды дифрагированных волн известны [1]. На втором этапе дифрагированные на

первом этапе волны претерпевают фраунгоферовскую или френелевскую дифракцию на дефекте, в зависимости от размеров дефекта и параметров геометрии регистрации интенсивности дифрагированного излучения.

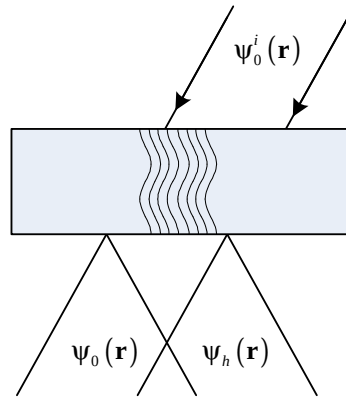


Рис.1. Схема падения лентообразного пучка на кристалл.

Будем считать, что монохроматический пучок рентгеновских лучей $\psi_0^i(\mathbf{r})$ под углом Брэгга падает на непоглощающий монокристалл со статическим дефектом (рис.1). Согласно выдвинутой идее, амплитуды волн $\psi_0(\mathbf{r})$ и $\psi_h(\mathbf{r})$ в первом приближении [2] можно представить в виде

$$\psi_{0,h}(\mathbf{r}) = \psi_{0,h}^0(\mathbf{r}) \left(1 \pm \frac{\nu}{4\pi} \int_V \psi_{0,h}^0(\mathbf{r}') \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right), \quad (1)$$

где $\psi_{0,h}(\mathbf{r})$ – амплитуды динамически дифрагированных на совершенном кристалле волн, ν – параметр, характеризующий силу взаимодействия волны $\psi_{0,h}^0$ с дефектом, $U(\mathbf{r}')$ – локальное смещение атомов от их положения в совершенном кристалле, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор наблюдаемой точки, интегрирование идет по объему распределения дефекта. Разница знаков плюс и минус следует из закона сохранения энергии, так как наблюдаемое усиление волны $\psi_h(\mathbf{r})$, рассеянной на дефекте, происходит за счет ослабления волны $\psi_0(\mathbf{r})$.

Выражение (1) представляет решение объемной задачи. Из анализа этого решения можно, в частности, предсказать явление переброски рентгеновских лучей из направления прохождения в направление отражения [3], а также явление фокусировки пучка, дифрагированного на дефекте в кристалле. В некоторых случаях можно рассмотреть обратную задачу – определение функции локального смещения $U(\mathbf{r})$ атомов от их положения в совершенном монокристалле и т.д.

В частности, рассмотрим явление модуляции рентгеновских лучей, многократно рассеянных на совершенном монокристалле кварца, где присутствует стоячая акустическая волна [4,5]. Согласно схеме эксперимента (рис.2), лентообразный монохроматический пучок рентгеновских лучей падает

на монокристалл кварца под точным углом Брэгга, когда по толщине кристалла присутствует стоячая акустическая волна. В условиях эксперимента можно принять, что $U = U_0 \cos(2\pi k_{ak} z)$, где k_{ak} – волновое число акустической волны. Выражение (1) приводится к виду

$$\Psi_{0,h}(x, y) = \Psi_{0,h}^0(x, y) \mp \frac{vU_0}{4\pi} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \Psi_{0,h}^0(0, z) \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cos(2\pi k_{ak} z) dz, \quad (2)$$

где $\Psi_{0,h}^0$ – плосковолновое решение для совершенного монокристалла, d – толщина кристалла. Имея в виду численные значения параметров геометрии и излучения проделанного эксперимента, интеграл в выражении (2) приводится к интегралу Френеля, реальная часть которого с точностью до постоянного множителя имеет вид

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \cos \left[-kz \sin \theta_B \frac{\Delta x}{2d_0} + k \frac{z^2 \cos \theta_B}{4d_0} \right] \cos(2\pi k_{ak} z) dz, \quad (3)$$

где θ_B – точный угол Брэгга, Δx – расстояние рассматриваемой точки на фотопластинке от ее центра, k – волновое число рентгеновской волны внутри кристалла. Результаты численного интегрирования приведены на рис. 3.

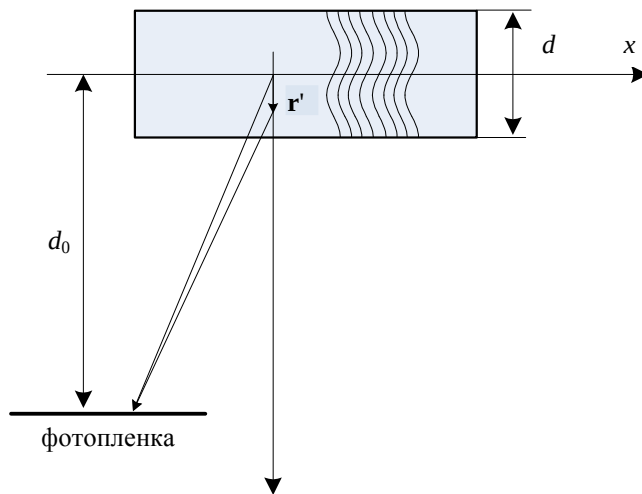


Рис.2. Схема дифракции пучка на кристалле при наличии стоячей акустической волны.

Из численного интегрирования (3) следует, что в геометрических сечениях как для проходящего, так и для отраженного пучков имеют место определенные осцилляции амплитуд, которые точно характеризуют экспериментальные результаты [3,4].

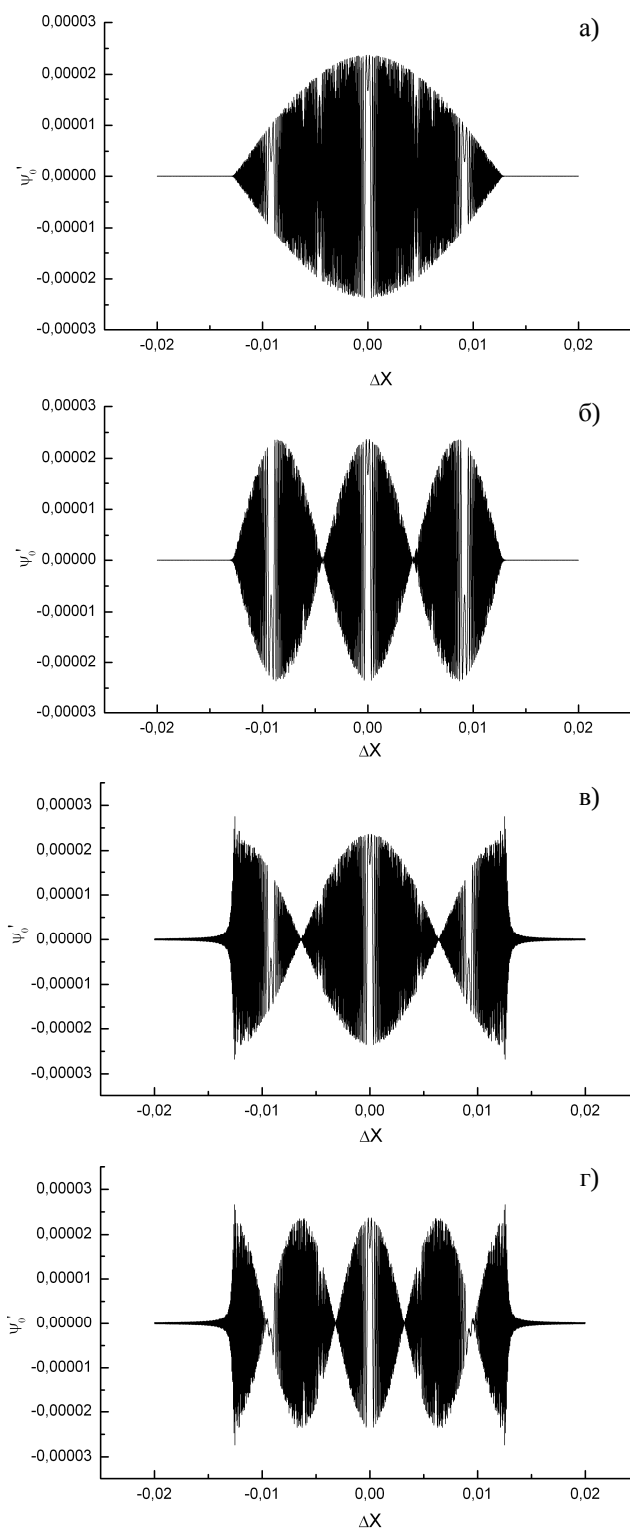


Рис.3. Результаты численного интегрирования для 1-ой (а), 3-ей (б), 5-ой (в) и 7-ой (г) гармоник.

3. Заключение

В заключение отметим, что выражение (1) представляет общее выражение для амплитуд нейтронных и рентгеновских пучков, многократно рассеянных на монокристаллах, содержащих дефекты различного вида. Из анализа этого выражения можно предсказать и количественно оценить известные и новые динамические явления при дифракции этих пучков.

ЛИТЕРАТУРА

1. **З.Г.Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.
2. **Д.И.Свергун, Л.А.Фейнгин.** Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М., Наука, 1986.
3. **А.Р.Мкртчян, М.А.Навасардян, В.К.Мирзоян.** Письма в ЖТФ, **8**, 677 (1982).
4. **В.К.Мирзоян, А.А.Егизарян, Э.Г.Багдасарян, П.В.Мирзоян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 355 (2007).
5. **В.К.Мирзоян, А.А.Егизарян, В.Н.Агабекян, П.В.Мирзоян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 104 (2008).

ԱՐԱՏՆԵՐՈՎ ՄԻԱԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԴԻՆԱՄԻԿ ՑՐՎԱԾ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ
ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԵՎ ՋԵՐՄԱՅԻՆ ՆԵՅՏՐՈՆՆԵՐԻ
ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՀԱՇՎԱՐԿՄԱՆ ՆՈՐ ՄԵԹՈԴ

Ա.Մ. ԵՂԻԱԶԱՐՅԱՆ, Կ.Մ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ա.Կ. ԱՏԱՆԵՍՅԱՆ

Առաջարկված է միաբյուրեղներում դինամիկ ցրված ռենտգենյան ճառագայթների և ջերմային նեյտրոնների ինտեսիվությունների հաշվարկման նոր մեթոդ համադրելով ռենտգենյան ճառագայթների և ջերմային նեյտրոնների կատարյալ միաբյուրեղներում Բրեգի դինամիկ ցրման և փոքր անկյան տակ ցրման տեսությունները:

A NEW METHOD FOR CALCULATING THE INTENSITY OF X-RAYS AND THERMAL NEUTRONS DIFFRACTED IN SINGLE CRYSTALS WITH DEFECTS

A.M. YEGHIAZARYAN, K.M. GEVORGYAN, A.K. ATANESYAN

We propose a new method for calculating the intensity of X-rays and thermal neutrons diffracted in a single crystal with some defects. Comparing the theories of Bragg diffraction of X-rays and thermal neutrons in perfect single crystals and their small-angle scattering theories, we propose a new method for calculating the intensity of X-rays and thermal neutrons diffracted in single crystals with defects.