ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՌ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

Ֆիզիկ-մաթեմատ. գիտություններ XIII, № 1, 1960 Физико-математические науки

ФИЗИКА

П. А. Безирганян, И. Б. Боровский

Зависимость интенсивности отраженных рентгеновских волн от размеров отражающего монокристалла

§ 1. Введение

Многочисленными экспериментальными работами советских и иностранных исследователей доказано, что интенсивность отраженных рентгеновских волн уменьшается с увеличением размеров отражающего монокристалла. Известно так же, что в результате рекристаллизации каменной соли при высокой температуре интенсивность волн низких порядков отражения значительно ослабляется. В работах [1] и других показано, что шлифовкой поверхностей отражающего монокристалла можно значительно увеличить интенсивность отраженных волн. Авторы этих работ объясняют увеличение интенсивности отраженных волн увеличением мозаичности кристалла и уменьшением экстинкции. В работе [2] показано, что растиранием в ступке порошка сложных карбидов вольфрама и титана увеличивается интенсивность интегрального отражения низких порядков. Обычно это уменьшение объясняют [3] первичной и вторичной экстинкциями или одной из них, связанными с экранированием в совершенных кристаллах верхними плоскостями нижележащих плоскостей, а в несовершенных кристаллах — верхними блоками нижележащих блоков.

Существуют кинематическая и динамическая теории интерференции рентгеновских лучей.

Кинематическая теория пренебрегает взаимодействием между первичной и вторичными и между вторичными волнами.

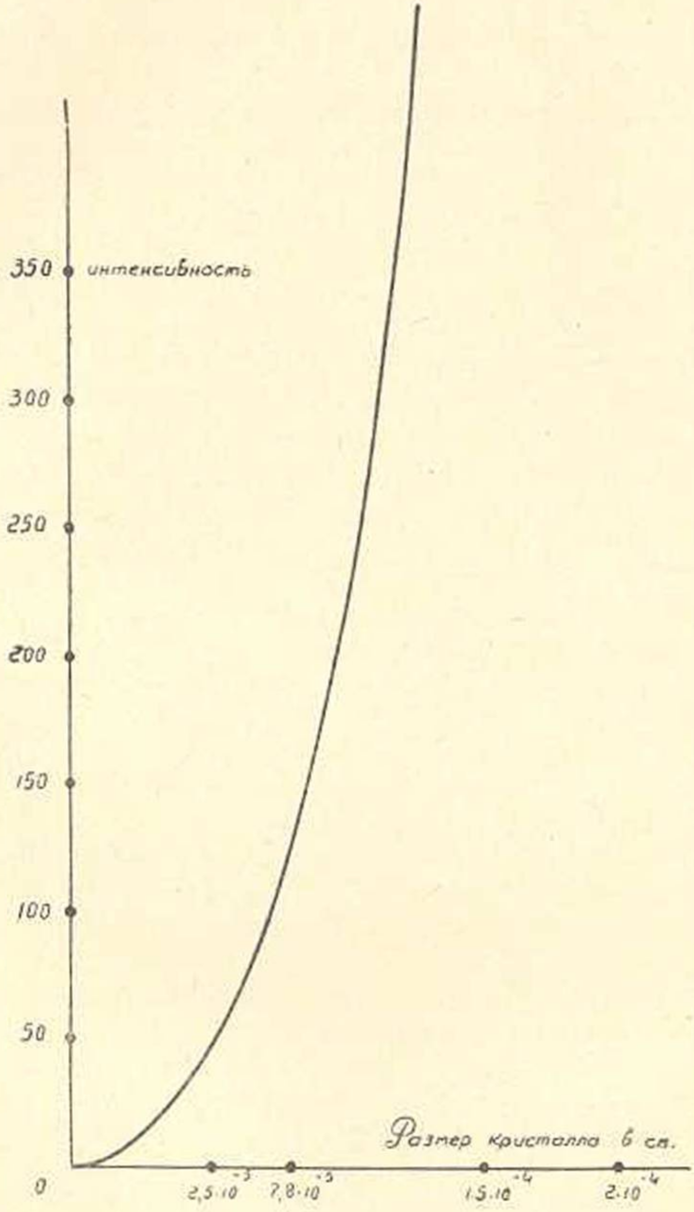
Согласно кинематической теории интерференции рентгеновских лучей, развитой первоначально Лауэ [4], амплитуда волны, отраженной от монокристалла в направлении максимального отражения, пропорциональна числу атомов всего кристалла, облучаемых первичным пучком. В расчетах, приводящих к таким результатам, Лауэ предположил, что точка наблюдения расположена так далеко, что волны, рассеянные различными атомами в направлении точки наблюдения, параллельны.

Значение амплитуды суммарной отраженной волны в точке наблюдения при монохроматической и плоскопараллельной падающей волны, согласно теории Лауэ, запишется следующим образом

$$G = A\,\frac{\sin M\pi A_1}{\sin \pi A_1}\cdot\frac{\sin N\pi A_2}{\sin \pi A_2}\cdot\frac{\sin L\pi A_3}{\sin \pi A_3}.$$

Из последнего выражения видно, что:

а) амплитуда отраженной волны непрерывно увеличивается с увеличением размеров кристалла (см. фиг. 1),



Фиг. 1.

б) амплитуда отраженной волны не зависит от порядка отражения (вернее, зависит только через атомный фактор), в) нет сдвига фаз между рассеянной и первичной волнами, т. е. амплитуда волны, отраженной от одномерной, двухмерной или трехмерной решетки, всегда вещественна.

Следовательно, кинематическая теория интерференции не в состоянии объяснить уменьшение интенсивности отраженных волн увеличением размеров отражающего монокристалла. Это расхождение кинематической теории Лауэ с экспериментом объясняют тем, что взаимодействие между первичной и вторичными и между вторичными волнами не учитывается и вводятся поправки на первичную экстинкцию. Однако, одним из существенных недостатков кинематической теории Лауэ для кристаллов, размеры которых больше 10^{-5} *см*, является то, что волны, рассеянные различными атомами в направлении точки наблюдения, считаются параллельными.

Производя расчеты с учетом расходимости волн, рассеянных различными атомами в направлении точки наблюдения, в пределах кинематической теории интерференции рентгеновских лучей можно доказать, что интенсивность отраженных волн уменьшается увеличением размеров отражающего монокристалла.

В отличие от кинематической теории, динамическая теория интерференции рентгеновских лучей учитывает взаимодействие между первичными и вторичными, а также между вторичными, волнами.

В настоящее время, кроме классических [5], [6, 7, 8] теорий, разработана также и квантовая (Колер) теория интерференции рентгеновских лучей.

Однако во всех этих теориях рассматривается или конечное число отражающих плоскостей бесконечных размеров или бесконечное число отражающих плоскостей конечных размеров.

Поэтому как в кинематической, так и в динамической теории недостаточно полно учитывается влияние размеров отражающих монокристаллов на интенсивность отраженных волн.

§ 2. Зависимость амплитуды отраженных волн от размеров кристалла

Рассчитаем волну, отраженную от плоского кристалла, если падающая волна плоская и монохроматическая.

Пусть плоская монохроматическая волна падает на кристалл в направлении единичного вектора $\vec{S}_0$ (см. фиг. 2 и 3) и точка наблюдения M из начала координат видна в напралении $\vec{S}$.

Разность хода Δ в точке наблюдения M между волнами, отраженными от точек 0 и A, равна

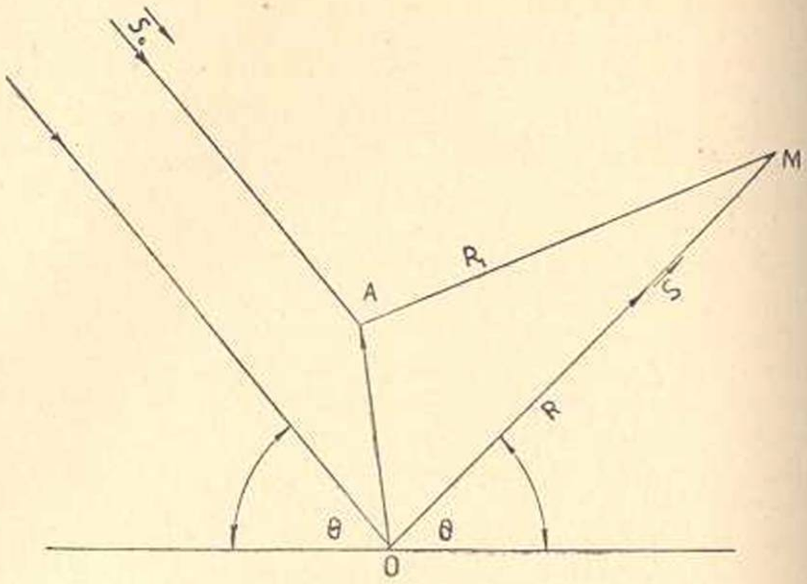
$$\Delta = R - R_1 - \vec{S}_0\vec{r}\,.$$

где R — расстояние точки наблюдения от начала координат,

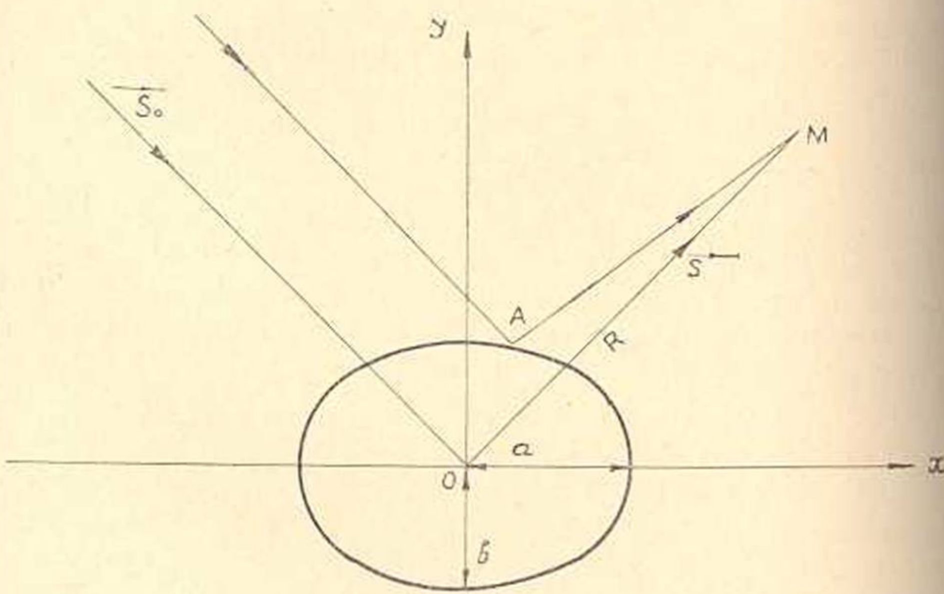
R_1 — расстояние точки наблюдения от рассеивающего атома,

r — расстояние атома от начала координат.

Найдем величину R_1.



Фиг. 2



Фиг. 3.

$$R_1 = \sqrt{R^2 + r^2 - 2\vec{r}\vec{R}} = \sqrt{R^2 + r^2 - 2R(\vec{r}\vec{S})}.$$

Разлагая в ряд и не учитывая степеней выше второй, находим

$$R_1 = R + \frac{r^2}{2R} - \vec{S}\vec{r} - \frac{(\vec{r}\vec{S})^2}{2R}.$$

Если падающая волна в точке 0 имеет вид $\exp(-i\omega t)$, то отраженная волна в точке M может быть выражена

$$G=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum\exp\left\{-ik\left[(\vec{S}-\vec{S_0})\vec{r}+\frac{r^2}{2R}-\frac{(\vec{r}\vec{S})^2}{2R}\right]\right\}. \quad (1)$$

В кинематической теории Лауэ для отраженной волны получается следующее выражение

$$G=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum\exp\{-ik(\vec{S}-\vec{S_0})\vec{r}\}.$$

Следовательно, исходные допущения Лауэ (параллельность волн, рассеянных различными атомами в направлении точки наблюдения) приводят к пренебрежению слагаемыми

$$\frac{kr^2}{2R}-\frac{k(\vec{r}\vec{S})^2}{2R}$$

в показателе экспоненциальной функции.

Рассмотрим к чему приводит это пренебрежение.

Допустим, что имеем тригонометрическую функцию $\sin(x-\alpha)$ или $\cos(x-\alpha)$ и что $x \gg \alpha$.

Очевидно, что величиной α в аргументе тригонометрической функции можно пренебречь только в том случае, если она много меньше, чем $\frac{\pi}{2}$.

Оценим величину $\frac{kr^2}{2R}$, которую Лауэ в своих расчетах не учитывает. Обычно, для рентгеновских лучей $k\sim 2\pi\cdot 10^8$ *см*$^{-1}$, r^2 изменяется в пределах $0\leqslant r^2\leqslant 0{,}01$ *см*^{2} если сечение падающего пучка порядка $0{,}01$ *см*^{2} и, наконец, $R\sim 10$ *см* (расстояние от образца до фотопленки). В таком случае величина $\frac{kr^2}{2R}$ изменяется в пределах $0\leqslant\frac{kr^2}{2R}\leqslant\pi\cdot 10^5$ и пренебрегать ею нельзя.

При размерах облучаемых кристалликов порядка 10^{-4} *см* величина $\frac{kr^2}{2R}$ будет порядка π.

Теперь покажем, что расчеты Лауэ справедливы лишь для маленьких кристаллов порядка 10^{-6} и 10^{-5} *см* и в этом случае совпадают с результатами более строгих расчетов.

Формулу [1] можем переписать в следующем виде:

$$G=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum_{m'}\exp\{-ik(\vec{S}-\vec{S_0})(\vec{a}m'+\vec{b}n+\vec{c_0}l)\}\times$$

$$\times\sum_{m',n,l}\exp\left\{-ik\frac{(\vec{a}m'+\vec{b}n+\vec{c_0}l)^2}{2R}\right\}\sum_{m',n,l}\exp\left\{ik\frac{|(\vec{a}m'+\vec{b}n+\vec{c_0}l)\vec{S}|^2}{2R}\right\}.$$

Допустим, что $\vec{S}_0$ и $\vec{S}$ с координатными осями x, y и z составляют углы:

$$\vec{S}_0(\theta;\,90^\circ;\,90^\circ-\theta),\quad \vec{S}(\alpha;\,\beta;\,\gamma).$$

Тогда выражение для G можно переписать в следующем виде

$$G=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum_{m'=0}^{M-1}\exp\left\{-ik\left[(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{a}m'+\frac{a^2\sin^2\alpha-m'^2}{2R}\right]\right\}\times$$

$$\times\sum_{m'=0}^{N-1}\exp\left\{-ik\left[(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{b}n+\frac{b^2\sin\beta n^2}{2R}\right]\right\}\times$$

$$\times\sum_{l=0}^{L-1}\exp\left\{-ik\left[(\vec{S}-\vec{S}_0)c_0l+\frac{c_0^2\sin\gamma_0l^2}{2R}\right]\right\},$$

где a, b и c — периоды решетки,
M, N и L — числа атомов в направлениях $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$.

Обозначив

$$(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{a}=A_1,\quad \frac{a^2\sin^2\alpha}{2R}=B_1,\quad \frac{2ab\cos\alpha\cos\beta}{2R}=A_4,$$

$$(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{b}=A_2,\quad \frac{b^2\sin^2\beta}{2R}=B_2,\quad \frac{2ac_0\cos\alpha\cos\gamma}{2R}=B_4,$$

$$(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{c}_0=A_3,\quad \frac{c_0^2\sin^2 j}{2R}=B_3,\quad \frac{2c_0b\cos\beta\cos\gamma}{2R}=C_4,$$

получим

$$G=A\sum_{m'}\sum_{n}\sum_{l}\exp\{-ik(A_1m'+B_1m'^2+A_2n+B_2n^2+A_3l+B_3l^2)\}\times$$

$$\times\sum_{m',n,l}\exp\{ik(A_4m'n+B_4m'l+C_4nl)\},$$

где

$$A=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{i\omega t\}.$$

Если размеры облучаемого монокристалла порядка $10^{-6}-10^{-5}$ *см*, то с хорошим приближением мы можем тригонометрические функции

$$\cos(kB_1m'^2),\quad \sin(kB_1m'^2),\quad \cos(kB_2n^2),\quad \sin(kB_2n^2),\quad \cos(kB_3l^2),$$
$$\sin(kB_3l^2),\quad \cos(kB_4m'l),\quad \sin(kB_4m'l),\quad \cos(kA_4m'n),\quad \sin(kA_4m'n),$$
$$\cos(kC_4nl),\quad \sin(kC_4nl),$$

заменить величинами

$$\left(1-\frac{1}{2}k^2B_1^2m^4\right)\cdot kB_1m^2,\quad \left(1-\frac{1}{2}k^2B_2^2n^4\right)\cdot B_2kn^2,$$

$$\left(1-\frac{1}{2}k^2B_3^2l^4\right)\cdot kB_3l^2,\quad \left(1-\frac{1}{2}B_4^2m^2l^2\right)\cdot kB_4ml,$$

$$\left(1-\frac{1}{2}k^2A_4^2m^2n^2\right)\cdot kA_4mn,\quad \left(1-\frac{1}{2}k^2C_4^2n^2l^2\right)\cdot kC_4nl,$$

соответственно. Это допустимо, так как в этом случае максимальное значение аргумента этих тригонометрических функций порядка 10^{-3}—-10^{-2} радиана.

Произведя суммирование по m, n и l, получим

$$G_{пл}=\frac{f}{R}\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum_{m',n,l}\exp\{-ik(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{r}\}+A',$$

где A' в 10^{+2} раз меньше первой суммы, совпадающей с Лауэвской суммой. Следовательно, в этом случае направление максимумов и величину амплитуды волны, отраженной от такого маленького кристалла, можно определить с помощью формулы Лауэ.

Следует обратить внимание на то, что для маленьких кристаллов амплитуда волны, отраженной от одной плоскости, почти целиком вещественна.

В самом деле, для таких кристаллов расчет амплитуды волны, отраженной от отдельной плоскости, можно произвести с помощью формулы

$$G_{пл}=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum_{m',n}\exp\{-ik(\vec{S}-\vec{S}_0)\vec{r}\},$$

где $\vec{r}=\vec{a}m'+\vec{b}n$, а эта сумма для амплитуды дает вещественную величину.

На одном частном примере покажем, что для больших кристаллов расчеты Лауэ резко отличаются от более точных расчетов, проделанных в пределах кинематической теории интерференции рентгеновских лучей.

Пусть величины, фигурирующие в наших расчетах, имеют следующие значения:

$$K=2\pi\cdot10^8\ см^{-1};\ \theta=45^\circ;\ R=8\ см;\ a=5\cdot10^{-8}\ см;$$

$$M=1{,}024\cdot10^8;\ b=5\cdot10^{-8}\ см;\ N=5{,}24\cdot10^7\ см.$$

Рассчитаем отражение от одной плоскости. Суммарная волна, отраженная от одной плоскости, выражается следующим образом

$$G_{пл}=\frac{f}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}\exp\{-i\omega t\}\sum_{m'=0}^{M-1}\exp\left\{-ik\frac{a\sin^2\theta}{2R}m'^2\right\}\sum_{n=0}^{N-1}\exp\left\{-\frac{ikb}{2R}n^2\right\}.$$

Для нашего частного случая, пользуясь известными формулами (18),

$$\sum_{m=0}^{M-1} \sin \frac{2\pi m^2}{M} = \frac{\sqrt{M}}{2}\left(1 + \cos \frac{\pi M}{2} - \sin \frac{M\pi}{2}\right),$$

$$\sum_{m=0}^{M-1} \cos \frac{2\pi m^2}{M} = \frac{\sqrt{M}}{2}\left(1 + \cos \frac{M\pi}{2} + \sin \frac{M\pi}{2}\right),$$

и, суммируя по m' и n, получим

$$G_{nn} = A \frac{\sqrt{MN}}{4}\left\{\left[\left(1 + \cos \frac{M\pi}{2} + \sin \frac{M\pi}{2}\right) - i\left(1 + \cos \frac{M\pi}{2} - \sin \frac{M\pi}{2}\right)\right] \times \right.$$

$$\left. \times \left[\left(1 + \cos \frac{N\pi}{2} + \sin \frac{N\pi}{2}\right) - i\left(1 + \cos \frac{N\pi}{2} - \sin \frac{N\pi}{2}\right)\right]\right\}.$$

После некоторых простых преобразований получим

$$G_{nn} = A\sqrt{MN}\left\{\sin \frac{M+N}{2}\pi \cos \frac{M-N}{2}\pi + \frac{1}{2} \sin \frac{M+N}{2}\pi - \right.$$

$$\left. - i\left[\cos \frac{M+N}{2}\pi + \frac{1}{2}\left(1 + \cos \frac{M-N}{2}\pi\right)\right]\right\}.$$

Как видно, для нашего частного случая амплитуда волны, отраженной от плоскости, пропорциональна квадратному корню из числа атомов и в общем случае комплексна.

Таким образом, расчеты Лауэ применимы лишь для кристаллов, размеры которых меньше 10^{-4} *см*. Для таких кристаллов с помощью расчетов Лауэ можно приблизительно определить интенсивность и сдвиг фаз (относительно подающей волны) отраженной суммарной волны.

Метод расчета Лауэ неприменим для кристаллов, размеры которых порядка и больше 10^{-4} *см*, этим методом для таких кристаллов нельзя рассчитывать ни интенсивность, ни сдвиг фаз отраженных суммарных волн.

Расчеты Лауэ применимы, следовательно, только для кристаллов, размеры которых много меньше, чем первая зона Френеля.

Пока размеры кристалла много меньше, чем первая зона Френеля, амплитуда отраженной волны пропорциональна числу частиц, облучаемых первичной волной.

Однако, с дальнейшим увеличением размеров кристалла нарушается эта пропорциональность и с увеличением размеров кристалла амплитуда отраженной волны не только не увеличивается, а может уменьшаться (прибавление четных зон Френеля уменьшает действие нечетных зон).

Все сказанное выше можно сделать еще нагляднее, если несколько уменьшить точность наших расчетов для амплитуды волны, отраженной от плоскости, заменяя при этом суммирование (1) интегрированием. В самом деле, амплитуда волны, отраженной от одной плоскости, выражается следующим интегралом

$$G_{\text{пл}}=\frac{n}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}f\exp\left[i\left(\omega t-kR\right)\right]\int\int\exp\left\{-\frac{ik\left(x^2\sin^2\theta+y^2\right)}{2R}dxdy\right\},$$

где n — число атомов в 1 $см^2$ плоскости: x и y совпадают с направлениями $\vec{a}$ и $\vec{b}$ соответственно.

Докажем прежде всего, что амплитуда волны, отраженной от плоскости, вещественна для маленьких кристаллов, комплекса для кристаллов, имеющих размеры больше 10^{-4} $см$, и чисто мнимая для очень больших кристаллов.

Вещественную и мнимую части этой амплитуды можно записать следующим образом

$$G_{\text{веществ.}}=\frac{n}{R}\frac{e^2}{mc^2}f\left[\int\limits_0^u\cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}dx\int\limits_0^v\cos\frac{ky^2}{2R}dy-\right.$$

$$\left.-\int\limits_0^u\sin\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}dx\cdot\int\limits_0^v\sin\frac{ky^2}{2R}dy\right],$$

(2)

$$G_{\text{мнимая}}=-i\frac{n}{R}\frac{e^2}{mc^2}f\left[\int\limits_0^u\cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}dx\int\limits_0^v\cos\frac{ky^2}{2R}dy+\right.$$

$$\left.+\int\limits_0^u\sin\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}dx\cdot\int\limits_0^v\cos\frac{ky^2}{2R}dy\right],$$

где u и v линейные размеры плоскости в направлениях x и y соответственно.

В конечных пределах эти интегралы не могут быть выражены конечной величиной. Для вычисления этих интегралов с конечными пределами воспользуемся рядами тригонометрических функций синуса и косинуса.

$$\int\limits_0^u\cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}dx=u\left[1-\frac{1}{2!5}\left(\frac{k\sin^2\theta}{2R}u^2\right)^2+\frac{1}{4!9}\left(\frac{k\sin^2\theta}{2R}u^2\right)^4-\cdots\right],$$

$$\int\limits_0^u\sin\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}dx=u\left[\frac{1}{1!3}\cdot\frac{k\sin^2\theta}{2R}u^2-\frac{1}{3!7}\left(\frac{k\sin^2\theta}{2R}u^2\right)^3+\right.$$

$$\frac{1}{5!11}\left(\frac{k\sin^2\theta}{2R}u^2\right)^5+\cdots\Bigg].$$

$$\int_0^v \cos\frac{ky^2}{2R}\,dy = v\left[1-\frac{1}{2!5}\left(\frac{k}{2R}v^2\right)^2+\frac{1}{4!9}\left(\frac{k}{2R}v^2\right)^4-\cdots\right],$$

$$\int_0^v \sin\frac{ky^2}{2R}\,dy = v\left[\frac{1}{1!3}\,\frac{k}{2R}v^2-\frac{1}{3!7}\left(\frac{k}{2R}v^2\right)^3+\frac{1}{5!11}\left(\frac{k}{2R}v^2\right)^5\cdots\right].$$

Последние выражения показывают, что для кристаллов, размеры которых не больше 10^{-4} *см*, интегралами

$$\int_0^u \sin\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx \quad \text{и} \quad \int_0^v \sin\frac{ky^2\,dy}{2R}$$

можно пренебречь по сравнению с интегралами

$$\int_0^u \cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx \quad \text{и} \quad \int_0^v \cos\frac{ky^2}{2R}\,dy.$$

В таком случае получим

$$G_{\text{веществ.}} = \frac{n}{R}\cdot\frac{e^2}{mc^2}f\int_0^u \cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx\int_0^v \cos\frac{ky^2}{2R}\,dy,$$

$$G_{\text{мнимая}} = 0,$$

т. е. для кристаллов, размеры которых не превышают 10^{-4} *см*, амплитуда волны, отраженной от плоскости и вообще от кристалла, почти целиком вещественна, т. е. сдвига фазы относительно первичной волны нет.

Эти ряды также показывают, что когда размеры кристалла превышают 10^{-4} *см*, амплитуда отраженной волны становится комплексной. Теперь покажем, что с увеличением размеров кристалла мнимая часть амплитуды увеличивается и в конце концов она становится почти целиком мнимой. Для этого рассмотрим следующие интегралы

$$Y_1 = \int_0^u \exp\left\{-ik\frac{\sin^2\theta}{2R}x^2\right\}dx; \quad Y_2 = \int_0^v \exp\left\{-\frac{i\kappa}{2R}y^2\right\}dy.$$

Сделаем следующие преобразования

$$Y_1 = \int_0^\infty \exp\left\{-ik\frac{\sin^2\theta}{2R}x^2\right\}dx - \int_u^\infty \exp\left\{-ik\frac{\sin^2\theta}{2R}x^2\right\}dx,$$

$$Y_2 = \int_0^\infty \exp\left\{-\frac{iky^2}{2R}\right\} dy - \int_v^\infty \exp\left\{-\frac{iky^2}{2R}\right\} dy.$$

Интегралы

$$\int_u^\infty \exp\left\{-ik\frac{\sin^2\theta}{2R}x^2\right\} dx \quad \text{и} \quad \int_v^\infty \exp\left\{-\frac{ky^2}{2R}\right\} dy$$

бесконечно много раз интегрируя по частям, можем выразить следующими рядами:

$$\int_u^\infty \exp\left\{-\frac{ik\sin^2\theta}{2R}x^2\right\} dx = \frac{2R\exp\left\{-\frac{ik\sin^2\theta}{2R}u^2\right\}}{-ik\sin^2\theta\cdot u}\left[1+\frac{2R}{-i\sin^2\theta\, ku^2}-\right.$$

$$\left.-\frac{(2R)^2\cdot 1\cdot 3}{(-ik\sin^2\theta\, u^2)^2}+\frac{(2R)^3\cdot 3\cdot 5}{(-ik\sin^2\theta\, u^2)^3}\cdots\right],$$

$$\int_v^\infty \exp\left\{-\frac{iky^2}{2R}\right\} dx = \frac{2R\exp\left\{-\frac{ikv^2}{2R}\right\}}{-ikv}\left[1+\frac{2R}{-ikv^2}+\frac{(2R)^2\, 1\cdot 3}{(-ikv^2)^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{(2R)^3\cdot 3\cdot 5}{(-ikv^2)^3}+\cdots\right].$$

Таким образом получим

$$Y_1 = \int_0^\infty \exp\left\{-\frac{ik\sin^2\theta x^2}{2R}\right\} dx +$$

$$+\frac{2R\exp\left\{-i\frac{k\sin^2\theta u^2}{2R}\right\}}{-ik\sin\theta\cdot u}[1+\cdots],$$

$$Y_2 = \int_0^\infty \exp\left\{-i\frac{ky^2}{2R}\right\} dy + \frac{2R\exp\left\{-i\frac{kv^2}{2R}\right\}}{-ikv}[1+\cdots],$$

или

$$Y_1 = \frac{\sqrt{\pi R}(1-i)}{\sqrt{k}\sin\theta\cdot 2} + \frac{2R\exp\left\{-\frac{ik\sin^2\theta u^2}{2R}\right\}}{-ik\sin^2\theta\cdot u}[1+\cdots],$$

$$Y_2 = \frac{\sqrt{\pi R}(1-i)}{\sqrt{k}}\cdot\frac{1-i}{2} + \frac{2R\exp\left\{-\frac{iku^2}{2R}\right\}}{-ikv}[1+\cdots].$$

Отсюда видно, что если u и v порядка 10^{-2} *см*, то всеми членами по сравнению с первыми можно пренебречь. В таком сучае получим

$$G_{mn} = \frac{\pi n l^2 f (1-i)^2}{kmc^2 \sin\theta} = -i \frac{\pi n e^2 f}{kmc^2 \sin\theta},$$

то есть, когда размеры кристалла доходят до 10^{-2} *см*, амплитуда волны, отраженной от плоскости (с точностью до 10^{-1}), целиком мнимая.

§ 3. Зависимость интенсивности отраженных волн от размеров кристалла

Рассмотрим зависимость интенсивности отраженных волн от размеров отражающего кристалла. Для этого проследим изменение значения интегралов I_1 и I_2 в зависимости от верхних пределов u и v и построим кривые, показывающие зависимости величин I_1^2, I_2^2 соответственно от u

$$\left\{\left[\int_0^u \cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx\right]^2 + \left[\int_0^u \sin\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx\right]^2\right\}$$

и v

$$\left\{\left[\int_0^v \cos\frac{ky^2}{2R}\,dy\right]^2 + \left[\int_0^v \sin\frac{ky^2}{2R}\,dy\right]^2\right\},$$

а также зависимость величины

$$\left\{\left[\int_0^u \cos\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx\right]^2 + \left[\int_0^u \sin\frac{kx^2\sin^2\theta}{2R}\,dx\right]^2\right\}\times$$

$$\times\left\{\left[\int_0^v \cos\frac{ky^2}{2R}\,dy\right]^2 + \left[\int_0^v \sin\frac{ky^2}{2R}\,dy\right]^2\right\}$$

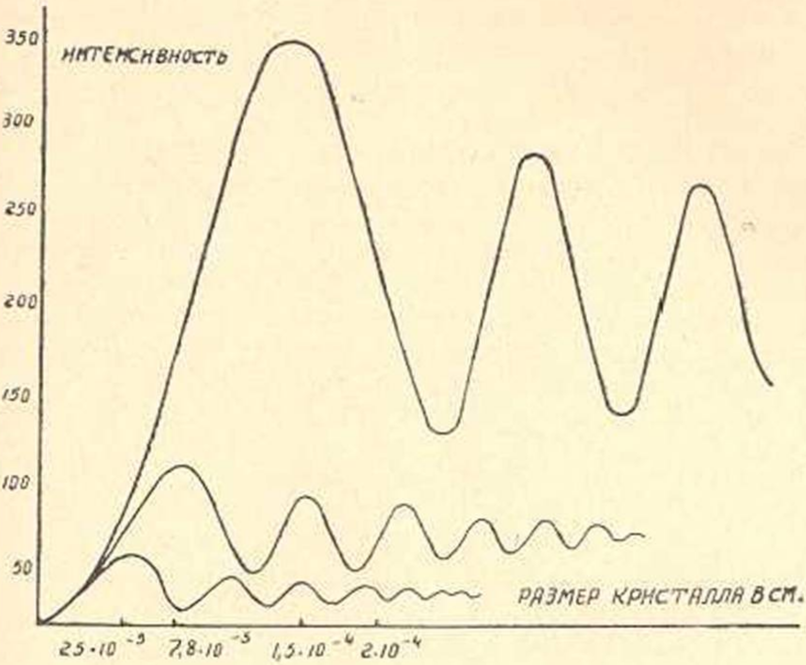
от u и v.

Кривые этих зависимостей были построены с помощью графического интегрирования интегралов $\int_0^u$ и $\int_0^v$.

Эти кривые* (см. фиг. 4) показывают, что пока размеры кристалла меньше, чем первая зона Френеля, интенсивность отраженных волн увеличивается с увеличением размеров кристалла. С дальнейшим увеличением размеров кристалла величина этой интенсивности колеблется. С увеличением размеров кристалла частота колебаний быстро увеличивается, максимумы уменьшаются, а минимумы увеличиваются, т. е. кривая сглаживается.

---

* Эти кривые построены для $M_0 k_{\alpha_1}$ излучения и для плоскостей 1340 кварца.



Фиг. 4.

В конце концов, когда линейные размеры кристалла превышают 10^{-2} *см*, интенсивность отраженных волн практически становится равной одной четверти интенсивности волны, отраженной первой зоной Френеля. На фигуре 1 приведена кривая, показывающая зависимость интенсивности отраженных волн по расчетам Лауе. Как видно из сопоставления двух кривых, даже в пределах первой зоны Френеля результаты расчетов Лауэ существенно расходятся с результатами более строгих расчетов.

Результаты расчетов Лауэ совпали бы с более строгими расчетами, если первая зона Френеля была бы бесконечно большой.

На фиг. 4 показана зависимость интенсивности отраженных волн от размеров кристалла для различных порядков отражения. Как видно из этих фигур, чем ниже порядок рефлекса, т. е. чем больше площади зон Френеля, тем больше амплитуда и меньше частота колебаний интенсивности, поэтому изменение интенсивности сильных рефлексов легко обнаружить. Для слабых рефлексов кривая быстро сглаживается и уменьшение интенсивности с увеличением размеров кристалла трудно обнаружить.

Следовательно, интенсивность зависит от порядка отражения и размеров кристалла и тем сильнее, чем сильнее отражение.

Согласно представлениям Вульфа-Брегга кристалл рассматривается состоящим из семейства паралелльных равноотстоящих атомных плоскостей, которые отражают рентгеновские лучи по зеркальному закону, если длина падающей волны удовлетворяет одному из следующих условий

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm \ldots,$$

где d — межплоскостное расстояние этих плоскостей,

θ — угол скольжения падающих и отраженных волн.

В динамической теории Дарвина [5], [9] в основе всех вычислений лежит представление о взаимном обмене энергией между первичными и отраженными волнами. Дарвин учитывает многократное отражение волн между Вульф-Бегговскими плоскостями и взаимодействие как между первичной и многократно отраженными волнами, так и между многократно отраженными волнами.

Расчет волны, отраженной от одной плоскости, Дарвин [9] производит с помощью интеграла

$$\int\int \exp\left\{-\frac{ik(x^2\sin^2\theta + y^2)}{2R}\right\} dydx.$$

Он построил свою динамическую теорию, выбрав для пределов интегрирования $\pm\infty$, предполагая, что результаты будут пригодны для любого кристалла, так как в отражении участвует, главным образом, первая френелевская зона. В дальнейших своих расчетах Дарвин исходит из того, что амплитуда волны, отраженной от плоскости, чисто мнимая (умножается на $-i$), что означает отставание по фазе от первичной волны на $\frac{\pi}{2}$ а, следовательно, дважды отраженная волна будет находиться в противофазе с первичной волной.

Однако, как только что было доказано, сдвиг фазы отраженной волны относительно первичной волны зависит от размеров кристалла. Величина этого сдвига фазы для кристаллов, размеры которых меньше 10^{-5} *см*, незначительна, далее с увеличением размеров отражающего монокристалла она растет и колеблется около $\frac{\pi}{2}$ со значительной амплитудой и, наконец, для кристаллов, размеры которых больше 10^{-2} *см*, практически становится равной $\frac{\pi}{2}$.

Далее из выражения

$$\int_0^u = \int_0^\infty - \int_u^\infty$$

видно, что интеграл $\int_0^u$ можно заменить с точностью до величины 0,1 интегралом $\int_0^\infty$ только тогда, когда $u \geqslant 10^{-2}$ *см*.

Следовательно, для кристаллов, размеры которых меньше 10^{-2} *см*, по расчетам Дарвина не точно определяются сдвиг фаз и амплитуды волн, отраженных от плоскости.

Несомненно, для таких кристаллов неточны все выводы, вытекающие из динамической теории Дарвина (за исключением выводов, относящихся ко вторичной экстинкции). Например, формула Дарвина для учета влияния первичной экстинкции

$$\frac{E_\omega}{I_0} = Qv \frac{thmq}{mq}$$

выведена для конечного числа бесконечных плоскостей, поэтому не всегда применима для кристаллов, размеры которых меньше, чем 10^{-2} *см*.

В динамической теории Дарвина неверно определяется и коэффициент преломления рентгеновских лучей для кристаллов, размеры которых меньше 10^{-2} *см*. Для определения этого коэффициента Дарвин определяет амплитуду волны, отраженной от плоскости с бесконечными пределами.

Таким образом, он для таких кристаллов неверно определяет величину и сдвиг фаз этой амплитуды, следовательно, и неверно определяет коэффициент преломления. Более точные расчеты показывают, что величина коэффициента преломления для кристаллов, размеры которых меньше 10^{-2} *см*, зависит от размеров кристалла.

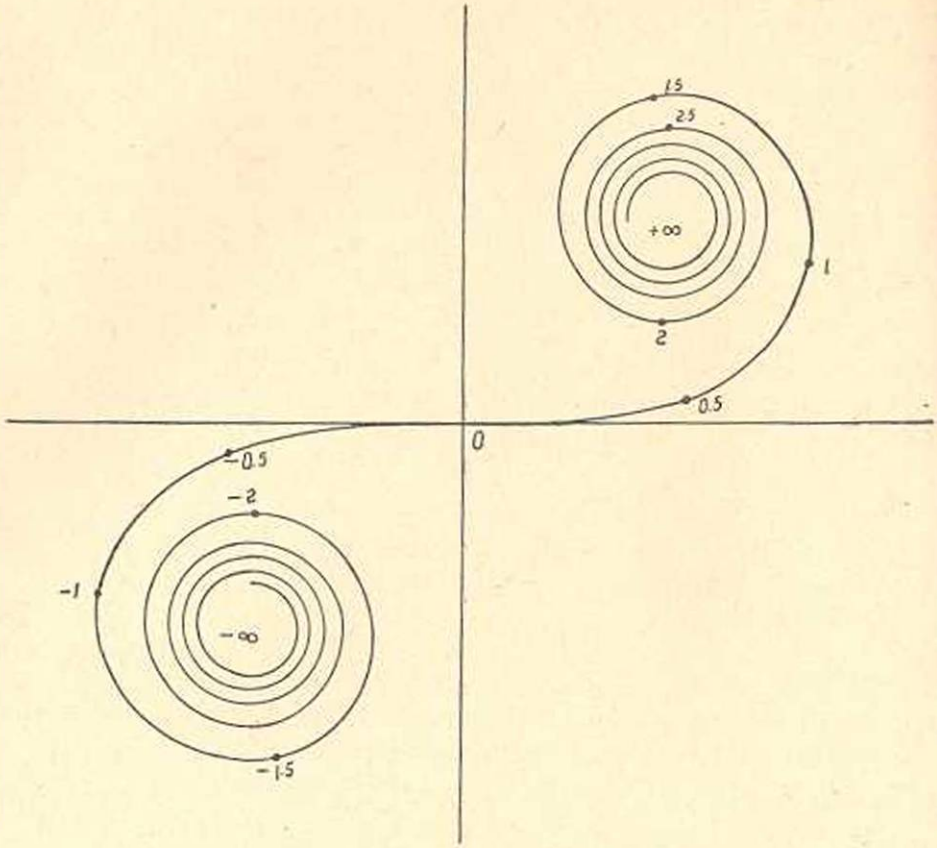
Расчеты Дарвина для вторичной экстинкции верны, так как здесь определялись интенсивности [9, 10], для которой фазовые сдвиги не играют роли. В теории вторичной экстинкции расчеты интенсивности по методу Лауэ производятся только для блоков, величины которых предполагаются меньше 10^{-4} *см*, а для таких кристаллов, как уже мы показали, расчеты Лауэ приблизительно верны.

Из всего вышесказанного становится ясным, что для кристаллов, размеры которых больше 10^{-5} *см* и меньше 10^{-2} *см*, невозможно точно определить интенсивность отраженных волн ни по расчетам Лауэ, ни по расчетам Дарвина и, наконец, для таких кристаллов неверна и поправка Дарвина к формуле Лауэ на первичную экстинкцию.

Так, например, точка $w = 1$ на спирали Корню (фиг. 5) при длине волны $M_0 k_{\alpha_1}$ и для плоскостей кварца (1340) соответствует величине размера кристалла $2{,}8 \cdot 10^{-4}$ *см*. В этом случае значения

$$\int \exp\left\{-i\,\frac{k \sin^2\theta\, x^2}{2R}\right\} dx,$$

вычисленные Лауэ, Дарвином и нами относятся соответственно как 45:32:40, а для точки $w = 1, 2$, что соответствует размеру кристалла $2{,}9 \cdot 10^{-4}$ *см*, эти результаты относятся как 108:64:85.



Фиг. 5

§ 4. Поправка к динамической теории Дарвина

Поправку в динамическую теорию Дарвина можно внести, если принять, что амплитуда волны, отраженной от одной плоскости, в общем случае комплексна.

Из (2) имеем

$$G_{\text{пл}} = G_{\text{вещ}} + G_{\text{мнимая}}$$

или

$$G_{\text{пл}} = G' - iG''$$

где

$$G' = G_{\text{вещ}}; \quad G'' = iG_{\text{мним}}.$$

Амплитуду волны, отраженной от одной плоскости в направлении падающей волны, обозначим через $G_{0,\text{ пл}} = G_0' - iG_0''$, где G_0' и G_0'' вещественные и мнимые части этой амплитуды при отсутствии обычного поглощения.

В таком случае показатель преломления рентгеновских лучей можно выразить следующим образом:

$$\mu = 1 - \delta = 1 - \frac{G_0^{*} \sin\theta}{kd},$$

где d межплоскостное расстояние отражающих плоскостей. Так как G_0^{*} зависит от размеров отражающих плоскостей (2), то, следовательно, показатель преломления рентгеновских лучей также зависит от размеров отражающего кристалла и только для кристаллов, размеры которых больше чем 10^{-2} *см*, коэффициент преломления практически не зависит от размеров кристалла и по величине равен

$$\mu = 1 - \delta = 1 - \frac{\lambda^2 l^2}{2\pi mc^2} nf(0).$$

Для учета взаимодействия между первичными и отраженными, а также между отраженными волнами, произведем расчеты, аналогичные расчетам Дарвина. Тогда для неполярного кристалла получим следующие уравнения [9]

$$S_r = -iG'_{\text{пл}} + (1 - iG'''_{0,\,\text{пл}})\, e^{-i\varphi} S_{r+1},$$
$$T_{r+1} = (1 - iG'''_{0,\,\text{пл}})\, e^{-i\varphi} T_r - iG'''_{\text{пл}}\, e^{-2i\varphi} S_{r+1}, \tag{3}$$

где T_r и S_r амплитуды, соответственно первичной и отраженной волны в точках, находящихся над r-ой плоскостью,

$$\varphi = ka \sin\theta; \quad G''' = G'' + iG'; \quad G''' = G_0''' + iG'.$$

Система (3) решается подстановками

$$T_{r+1} = \chi T_r \text{ и } S_{r+1} = \chi S_r.$$

Таким образом, для отношения амплитуды отраженного от поверхности кристалла пучка к амплитуде пучка, падающего на поверхность кристалла, получим

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-G'''}{G_0''' + v \pm \sqrt{(G''' + v)^2 - G'''^2}},$$

где v определяется из уравнения $kd \sin\theta = m\pi + v$.

Обозначив $\varepsilon = G_0''' + v$ получим

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-G''' - iG'}{\varepsilon + iG_0' \pm \sqrt{(\varepsilon + iG_0')^2 + (G'' + iG)^2}}. \tag{4}$$

Знак у квадратного корня надо выбирать так, чтобы $\left(\frac{S_0}{T_0}\right)$ было меньше единицы.

Когда действительная часть амплитуды волны, отраженной от одной плоскости, равна нулю, то (4) совпадает с уравнением Дарвина

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-G'''}{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - G'^2}}.$$

Как видно, формула (4) по форме совпадает с формулой, выведенной с учетом поглощения.

Для определения зависимости интегральной интенсивности отраженных волн от размеров отражающих плоскостей (в рамках кинематической теории интерференции рентгеновских лучей), определим интенсивность суммарной волны, отраженной от трехмерного кристалла. Для этого мы можем отражение кристалла, содержащего L плоскостей рассматривать как рассеяние одномерной решетки, каждый рассеивающий центр которой рссеивает волну с интенсивностью $I_0 (G_{пл})^2$, где I_0 — интенсивность первичной волны.

Таким образом, для интевсивности волны, отраженной от трехмерного кристалла, получим

$$I = I_0 \,|\, G_{пл} |^2 \frac{\sin^2 L\,(kd \sin\theta)}{\sin^2 (kd \sin\theta)}, \tag{5}$$

где d — межплоскостное расстояние отражающих плоскостей.

Из (5) видно, что интенсивность отражения заметна только в пределах

$$-\pi/L < kd \sin\theta < \pi/L.$$

Нетрудно убедиться в том, что в этих пределах изменением $|G_{пл}|^2$ с точностью до 10^{-4} можно пренебречь. Следовательно, характер зависимости интегральной интенсивности от размеров отражающих плоскостей определяется характером зависимости $|G_{пл}|^2$ от размеров отражающих плоскостей.

Выводы

1. Кинематическая теория интерференции рентгеновских лучей Лауэ применима только для кристаллов, размеры которых меньше размеров первой зоны Френеля.

2. Динамическая теория Дарвина применима только для кристаллов, размеры которых много больше размеров первой зоны Френеля, т. е. для кристаллов, размеры которых больше 10^{-2} *см*.

3. Поправка Дарвина на первичную экстинкцию учитывает зависимость интенсивности отраженных волн только от толщины кристалла, поэтому она неточна для кристаллов, размеры отражающих плоскостей которых меньше 10^{-2} *см*.

4. До сих пор считали, что уменьшение интенсивности отраженных волн с увеличением размеров отражающего кристалла можно объяснить только динамической теорией интерференции рентгеновских лучей. Как показали наши расчеты, по крайней мере часть этого уменьшения можно объяснить в пределах кинематической теории интерференции рентгеновских лучей.

5. В динамической теории Дарвина неточно определяется показатель преломления для кристаллов, размеры которых меньше 10^{-2} *см*.

6. В динамическую теорию Дарвина можно внести поправку, чтобы она была применима для кристаллов любых размеров.

Ереванский государственный университет.
Институт маталлургии им. А. А. Байкова АН СССР

Поступила 8 V 1959

Պ. Հ. Բեզիրգանյան և Ի. Բ. Բորովսկի

ՄԻԱԲՅՈՒՐԵՂԻՑ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁԱԾ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅԱՆ ԿԱԽՈՒՄԸ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁՆՈՂ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՉԱՓԵՐԻՑ

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Հետազոտված են անդրադարձած ռենտգենյան ճառագայթների ինտենսիվության կախումը անդրադարձնող միաբյուրեղի չափերից և Լաուեի տեսության կիրառելիության սահմանները։

Հետազոտությունից պարզվել է, որ՝

1. Ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի Լաուեի կինեմատիկ տեսությունը կիրառելի է միայն այն բյուրեղների նկատմամբ, որոնց չափերը փոքր են Ֆրենելի առաջին զոնայի չափերից։

2. Դարվինի դինամիկ տեսությունը կիրառելի է միայն այնպիսի բյուրեղների նկատմամբ, որոնց չափերը շատ մեծ են Ֆրենելի առաջին զոնայի չափերից։

3. Մինչև այժմ ընդունված էր, որ բյուրեղի չափերի մեծացման հետևանքով անդրադարձած ռենտգենյան ճառագայթների ինտենսիվության փոքրացումը կարելի է բացատրել միայն ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի դինամիկ տեսությամբ։ Սակայն հաշիվները ցույց են տալիս, որ այդ փոքրացման գոնե մի մասը կարելի է բացատրել ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի կինեմատիկ տեսությամբ։

ЛИТЕРАТУРА

1. *Гогоберидзе Д. В.* Некоторые объемные дефекты кристаллов. Л., 1958.
2. *Уманский Я. С.* Карбиды твердых сплавов. М., 1947.
3. *Darwin C. G.* The teory of X-ray reflection. Phil. Mag. 27, 315—333, 1914.
4. *Von Laue M.* Röntgenstrahlinterferenzen, 1948.
5. *Darwin C. G.* The theory of X-ray reflection. Phil. Mag. 27, 675—690, 1914.
6. *Христов Хр. Я.* О прохождении электромагнитных волн через плоскопараллельную кристаллическую пластинку. ДАН, т. 81, 553, 1951.
7. *Христов Хр. Я.* О прохождение лучей Рентгена через плоскопараллельную пластинку кристалла. ДАН, т. 81, 799, 1951.
8. *Христов Хр. Я.* О прохождении лучей света через плоскопараллельную кристалическую пластинку. ДАН, т. 85, 1269, 1952.
9. *Darwin C. G.* The reflection of X-rays from imperfect crystals. Phil. Mag., 43, 801—829, 1922.
10. *Жданов Г. С.* Основы рентгеноструктурного анализа. Гостехиздат, 1940.