ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՌ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР
Ֆիզիկո-մաթեմատ. գիտություններ XIII, № 2, 1960 Физико-математические науки

ФИЗИКА

П. А. Безирганян, А. Г. Акритов

Зависимость интенсивности рентгеновских отраженных волн от формы отражающего кристалла

В работах [1] и [2] решена задача динамической теории интерференции рентгеновских лучей в случаях ограниченного непоглощающего и поглощающего кристаллов.

Однако, практически важное значение имеет и такой случай, когда кристалл в двух направлениях ограничен, а в одном направлении практически неограничен. Такие случаи довольно часто встречаются среди органических кристаллов, когда размеры в одном направлении так велики (относительно первой зоны Френеля), что практически можно считать неограниченными.

В настоящей работе решена динамическая задача интерференции для двух случаев непоглощающего кристалла. В одном случае кристаллы неограничены в направлении x, а в другом — в направлении y (см. фиг. 1 и 2).

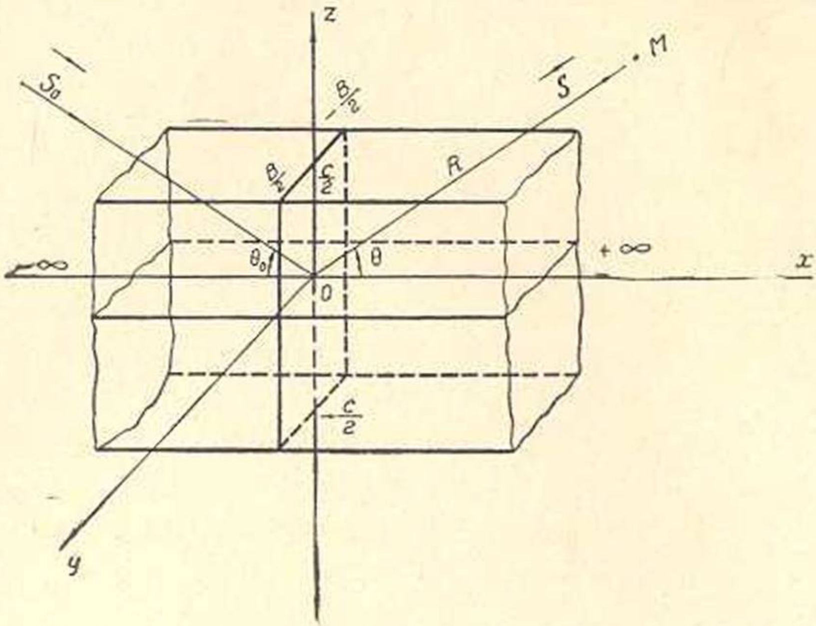
Первый случай

Пусть плоская монохроматическая волна, как и в случаях, рассмотренных в [1] и [2], падает на кристаллы в направлении единичного вектора s_0 (фиг. 1) и точка наблюдения M из начала координат видна в направлении s. Размеры кристалла в направлениях y и z соответственно равны B и C, а в направлении x неограничены ($-\infty \leq x \leq \infty$).

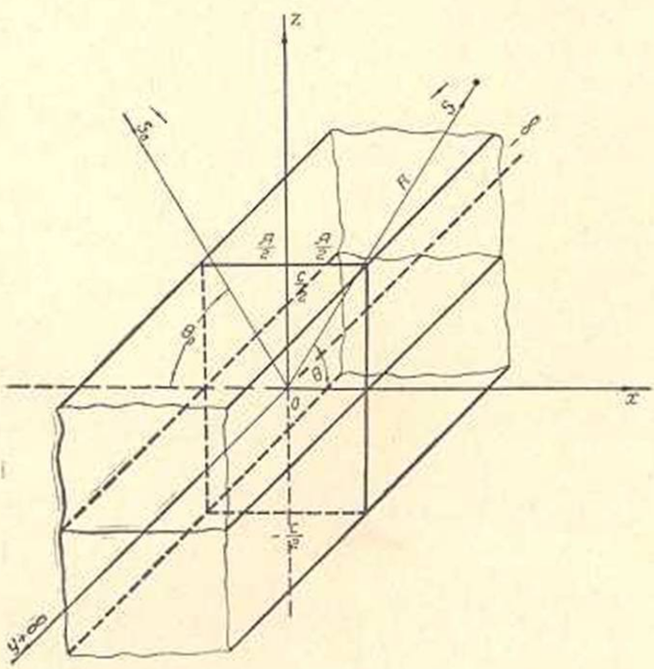
В этом случае волна отраженная от плоскости кристалла, совпадающей с плоскостью xOy, будет

$$G = \frac{ne^2}{Rmc^2} f(2\vartheta, k)\, exp[ik(ct-R)] \int\limits_{-\infty}^{+\infty} exp\left(-ik\frac{x^2 \sin^2\theta}{2R}\right) dx \times$$

$$\times \int\limits_{-\frac{B}{2}}^{+\frac{B}{2}} exp\left(-ik\frac{y^2}{2R}\right) dy.$$



Фиг. 1.



Фиг. 2.

Интеграл с бесконечными пределами дает

$$\int_{-\infty}^{+\infty} exp\left(ik\frac{\sin^2\theta}{2R}x^2\right)dx = \sqrt{\frac{\pi R}{k\sin^2\theta}}\,(1-i).$$

Следовательно, после простых преобразований, для амплитуды волны, отраженной от плоскости кристалла, совпадающей с плоскостью xOy, получим

$$G_0 = \frac{ne^2\lambda}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k)\,[1-i] \int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}B} exp\left(-i\frac{\pi}{2}y^2\right) dy,$$

вещественная и мнимая части которой выражаются следующим образом

$$G_0' = \frac{ne^2\lambda}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k)\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy - \int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right],$$

$$G_0'' = -\frac{ne^2\lambda}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k)\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy + \int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right],$$

где $G_0 = G_0' + iG_0''$.

Вещественная и мнимая части амплитуды волны, отраженной от этой же плоскости в направлении падающей волны, будут

$$\Sigma_0' = \frac{ne^2\lambda}{2mc^2 \sin\theta} f(0,k)\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy - \int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right],$$

$$\Sigma_0'' = -\frac{ne^2\lambda}{2mc^2 \sin\theta} f(0,k)\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy + \int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B} \sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right],$$

где $\Sigma_0 = \Sigma_0' + i\Sigma_0''$.

Для поглощающего кристалла в этом случае получим

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{G_0' - iG_0''}{i\Sigma_0' - \Sigma_0'' + dk(\sin\theta - \sin\theta_0) \pm \sqrt{[i\Sigma_0' - \Sigma_0'' + dk(\sin\theta - \sin\theta_0)]^2 - (iG_0' - G_0'')^2}}, \tag{1}$$

где S_0—амплитуда отраженной от кристалла волны на поверхности кристалла,

T_0—амплитуда падающей волны на поверхности кристалла,

d—межплоскостное расстояние отражающих плоскостей,

θ_0—угол, удовлетворяющий уравнению Вульфа-Брегга,

θ—угол, соответствующий исправленной формуле Вульфа-Брегга.

Имея в виду, что коэффициент преломления рентгеновских лучей очень мало отличается от единицы, из (1) получим

$$\frac{S_0}{T_0}=\frac{G_0''-iG_0'}{i\Sigma_0'-\Sigma_0''+dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0\pm\sqrt{[i\Sigma_0'-\Sigma_0''+dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0]^2-(iG_0'-G_0'')^2}}.$$

При отражении рентгеновских лучей $M_0K\alpha_1$ от кристалла кальцита [плоскости (211)], для вещественных и мнимых частей амплитуд отраженной волны получим

$$G_0'=\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy-\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right]\times$$

$$\times[f_{Ca}(2\theta,k)+f_C(2\theta,k)+f_0(2\theta,k)],$$

$$G_0''=-\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy+\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right]\times$$

$$\times[f_{Ca}(2\theta,k)+f_C(2\theta,k)+f_0(2\theta,k)],$$

$$\Sigma_0'=\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy-\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right]\times$$

$$\times[f_{Ca}(0,k)+f_C(0,k)+f_0(0,k)],$$

$$\Sigma_0''=-\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\cos\frac{\pi}{2}y^2\,dy+\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\cdot B}\sin\frac{\pi}{2}y^2\,dy\right]\times$$

$$\times[f_{Ca}(0,k)+f_C(0,k)+f_0(0,k)],$$

где f_{Ca}, f_C и f_0—соответственно атомные факторы кальция, углерода и кислорода.

Относительная интенсивность отраженной волны в этом случае, как и в работах [1] и [2], выражается формулой

$$\left|\frac{S_0}{T_0}\right|^2=\frac{[G_0']^2+[G_0'']^2}{U+V+W}, \tag{2}$$

где $U=[dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0-\Sigma_0'']^2+[\Sigma_0']^2$,

$$W=\Big\{\{2\Sigma_0'[dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0-\Sigma_0'']^2+2G_0'G_0''\}^2+$$

$$+\{[dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0-\Sigma''\,]^2+(G_0')^2-(\Sigma_0')^2-(G_0'')^2\}^2\Big\}^{1/2},$$

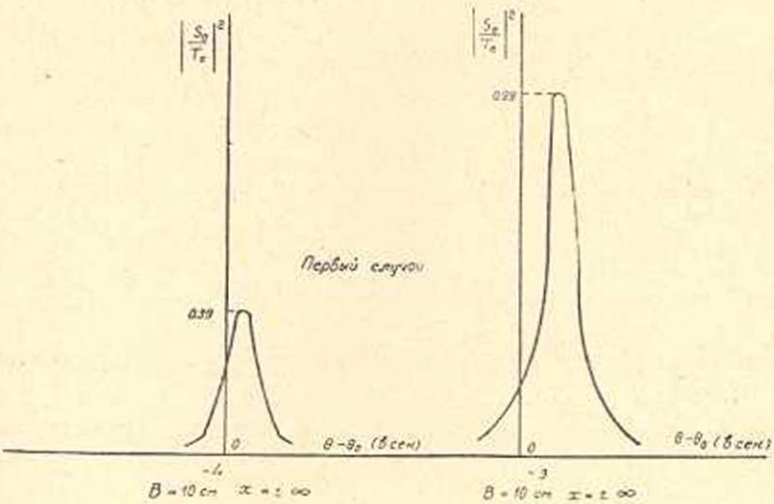
$$V=2\sqrt{U\cdot W}\cos(\varphi_1-\varphi_2),$$

где φ_1 и φ_2 определяются из выражений

$$\operatorname{tg}\varphi_1=\frac{\Sigma_0^{'}}{dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0-\Sigma_0^{''}},$$

$$\operatorname{tg}2\varphi_2=\frac{2\Sigma_0^{'}[dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0-\Sigma_0^{''}]+2G_0^{'}G_0^{''}}{[dk(\theta-\theta_0)\cos\theta_0-\Sigma_0^{''}]^2+(G_0^{'})^2-(\Sigma_0^{'})^2-(G_0^{''})^2}.$$

Результаты вычислений в случае отражения рентгеновских лучей $M_0K\alpha_1$ от кристалла кальцита представлены на фиг. 3 и 4.



Фиг. 3. Фиг. 4.

Второй случай

Во втором случае (фиг. 2), т. е. когда размеры кристалла в направлениях x и z соответственно равны A и C, а в направлении y неограничены ($-\infty\leqslant y\leqslant\infty$), для волны, отраженной от плоскости кристалла совпадающей с плоскостью xOy, получим

$$G=\frac{ne^2\lambda}{2mc^2\sin\theta}\,f(2\theta,k)[i-1]\,exp[ik(ct-R)]\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}exp\left(-i\frac{\pi}{2}x^2\right)dx.$$

Следовательно, в этом случае вещественные и мнимые части амплитуд могут выражаться следующими формулами

$$G_0^{'}=\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\cos\frac{\pi}{2}x^2dx-\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\sin\frac{\pi}{2}x^2dx\right]\times$$

$$\times[f_{Ca}(2\theta,k)+f_C(2\theta,k)+f_0(2\theta,k)],$$

$$G_0^{'}=-\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\cos\frac{\pi}{2}\,x^2dx+\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\sin\frac{\pi}{2}\,x^2dx\right]\times$$

$$\times[f_{Ca}(2\theta,k)+f_C(2\theta,k)+f_0(2\theta,k)],$$

$$\sum_0^{'}=\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\cos\frac{\pi}{2}\,x^2dx-\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\sin\frac{\pi}{2}\,x^2dx\right]\times$$

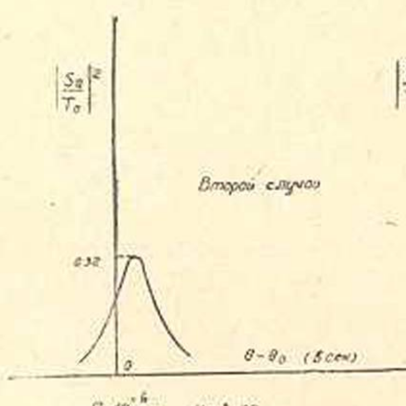
$$\times[f_{Ca}(0,k)+f_C(0,k)+f_0(0,k)],$$

$$\sum_0^{'}=-\frac{ne^2\lambda}{mc^2\sin\theta}\left[\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\cos\frac{\pi}{2}\,x^2dx+\int\limits_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}\sin\theta\cdot A}\sin\frac{\pi}{2}\,x^2dx\right]\times$$

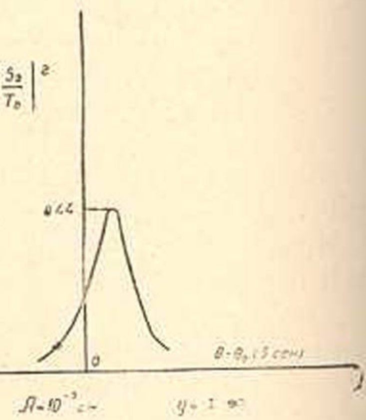
$$\times[f_{Ca}(0,k)+f_C(0,k)+f_0(0,k)].$$

Относительная интенсивность и в этом случае выражается формулой (2).

Результаты вычислений для второго случая представлены на фиг. 5 и 6.



Фиг. 5.

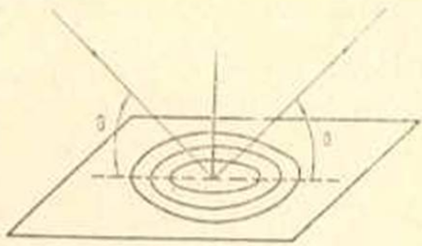


Фиг. 6.

Из результатов приведенных расчетов можно сделать следующий важный вывод: в случае ограниченного кристалла интенсивность волн, отраженных от данной системы плоскостей при данных углах падения и отражения, зависит от ориентировки плоскости падения. К этому выводу не могут привести ни кинематическая теория интерференции рентгеновских лучей, ни динамические теории Дарвина и Эвальда—Лауэ. Действительно, как известно, в кинематической теории интенсивность волн, отраженных от ограниченной двухмерной атомной решетки, выражается формулой

$$J = \frac{f^2}{R^2} \frac{\sin^2\left(M_1 \frac{A}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{A}{2}\right)} \cdot \frac{\sin^2\left(M_2 \frac{B}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{B}{2}\right)},$$

где M_1—число атомов вдоль одной оси и M_2—число атомов вдоль другой оси. В этом случае интенсивность диффракционного максимума не зависит (при данном угле падения) от того, совпадает ли с первой или со второй осью проекция направления падающего пучка на отражающую плоскость.



Фиг. 7.

А динамические теории Дарвина и Эвальда—Лауэ рассматривают только неограниченные кристаллы, следовательно различные случаи ориентировки плоскости падения при данном угле падения они не могут различать.

Применяемый нами динамический метод интерференции для ограниченных кристаллов дает возможность установить зависимость интенсивности волн, отраженных от данной системы плоскостей при данных углах падения и отражения, от ориентировки плоскости падения.

Легко показать, что в этом случае зоны Френеля имеют вид эллипсов (см. фиг. 7), большие оси которых направлены по проекции направления падающего пучка на отражающую плоскость. Следовательно, при ограниченном кристалле, когда размеры кристалла меньше, чем размеры первой зоны Френеля, не безразлично как ориентирована большая ось эллипса относительно кристалла.

В рассмотренном первом случае кристалл в направлении большой оси эллипса неограничен, а в направлении малой оси—ограничен, во втором случае, наоборот, в направлении большой оси кристалл ограничен и размер его в этом направлении меньше, чем большая ось эллипса.

Этим и объясняется тот факт, что в первом случае интенсивность отражения (фиг. 3 и 4) больше, чем во втором случае (фиг. 5 и 6), так как во втором случае первая зона действует не полностью — эллипс первой зоны не помещается полностью на отражающей плоскости кристалла.

Этот результат особенно важен для волокнистых веществ, размеры кристаллов которых в одном направлении много больше, чем в других направлениях.

В этом случае интенсивность отраженных волн при данных углах падения и отражения зависит от ориентировки плоскости падения относительно кристаллографических осей отражающего кристалла.

Պ. Ա. Բեզիրգանյան, Ա. Գ. Ակրիտով

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁԱԾ ԱԼԻՔՆԵՐԻ ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅԱՆ ԿԱԽՈՒՄԸ ԱՆԴՐԱԴԱՐՁՆՈՂ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՁԵՎԻՑ

Ա Մ Փ Ո Փ Ո Ւ Մ

Հոդվածում քննարկվում է ինտերֆերենցիայի դինամիկ խնդրի երկու դեպք։ Մի դեպքում բյուրեղն անսահմանափակ է x *ուղղությամբ, իսկ մյուս դեպքում՝* y *ուղղությամբ (ֆիգ. 1,2)։ Քննարկման արդյունքներից արվում է հետևյալ եզրակացությունը։*

Անկման և անդրադարձման տվյալ անկյունների դեպքում, սահմանափակ բյուրեղի հարթությունների տվյալ սիստեմից անդրադարձած ռենտգենյան ճառագայթների ինտենսիվությունը կախված է անկման հարթության դիրքից։

Այդ եզրակացությունը նոր է և չի բխում ոչ կինեմատիկ տեսությունից և ոչ էլ Դարվինի ու Էվալդի-Լաուեի տեսությունից։

Քննարկված դեպքից առաջինում անդրադարձած ռենտգենյան ճառագայթների ինտենսիվությունն ավելի մեծ է, քան երկրորդ դեպքում։ Դա բացատրվում է նրանով, որ ֆրենելյան զոնաների մեծ առանցքներն ուղղված են անդրադարձնող հարթությունների վրա ընկնող ճառագայթի պրոյեկցիայի ուղղությամբ։ Այդ պատճառով էլ, երբ բյուրեղը սահմանափակ է (բյուրեղի չափերն առաջին զոնայի չափերից փոքր են), առաջին դեպքում գործում է առաջին զոնայի ավելի մեծ մասը, քան երկրորդ դեպքում։

Այդ եզրակացությունը մեծ նշանակություն ունի այնպիսի բյուրեղների ուսումնասիրման գործում, որոնց չափերը տարբեր ուղղությամբ միևնույն կարգի չեն։

ЛИТЕРАТУРА

1. **Безирганян П. А.** Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла. ДАН Арм. ССР, том XXIX, № 5, 1959.
2. **Безирганян П. А.** Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла (случай поглощающего кристалла). ДАН Арм. ССР, в печати.

Ереванский государственный университет,
Армянский сельскохозяйственный институт

Поступила 24 IX 1959