

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

П. А. Безирганян, Ю. А. Рапая

Зависимость интенсивности отраженных
 рентгеновских волн от направления плоскости падения

В кинематической теории интерференции рентгеновских лучей значение амплитуды суммарной отраженной волны в точке наблюдения при монохроматической и плоскопараллельной падающей волне записывается следующим образом:

$$G_0 = A \frac{\sin N_1 \pi A_1}{\sin \pi A_1} \cdot \frac{\sin N_2 \pi A_2}{\sin \pi A_2} \cdot \frac{\sin N_3 \pi A_3}{\sin \pi A_3}, \quad (1)$$

(N_1, N_2, N_3 — число атомов соответственно в трех главных направлениях), откуда видно, что амплитуда и интенсивность рассеянных рентгеновских волн в направлении максимального отражения не зависят от направления плоскости падения.

Действительно, в направлении максимального отражения, где удовлетворяются условия

$$A_1 = n_1, \quad A_2 = n_2, \quad A_3 = n_3 \quad (2)$$

($n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), амплитуды и интенсивности рассеянных волн получаются соответственно:

$$G_0 = AN_1 N_2 N_3, \quad G_0^2 = A^2 N_1^2 N_2^2 N_3^2 = A^2 N^2,$$

т. е. в направлении максимального отражения интенсивность отраженных волн не зависит от направления плоскости падения (от направления вектора s_0) и пропорциональна квадрату числа рассеивающих атомов (ячеек).

Согласно этой же теории, интегральная интенсивность рассеянных волн выражается формулой

$$I = Q \cdot V,$$

где

$$Q = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 2\theta} F^2 N_{\lambda}^2 \frac{e^4}{m^2 c^4}.$$

Как видно из последнего, интегральная интенсивность не зависит от направления плоскости падения.

Таким образом, согласно кинематической теории интерференции рентгеновских лучей амплитуда, интенсивность и интегральная интен-

сивность селективно рассеянных рентгеновских лучей не зависят от направления плоскости падения, т. е. по этой теории вращение вектора $\vec{s}_0$ вокруг нормали отражающих плоскостей (не меняя угол Вульфа-Брегга) не меняет ни амплитуду, ни интенсивность, ни интегральную интенсивность отраженных волн.

То, что амплитуда и интенсивность отраженных рентгеновских волн в динамической теории интерференции рентгеновских лучей зависят от направления плоскости падения, доказано в [1].

Однако, и в рамках кинематической теории интерференции рентгеновских лучей можно доказать, что амплитуда, интенсивность и интегральная интенсивность отраженных рентгеновских волн зависят от направления плоскости падения, если только учесть те разности фаз, которые возникают из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами в направлении точки наблюдения.

Пусть плоская монохроматическая волна падает на кристалл в направлении единичного вектора $\vec{s}_0$ и точка наблюдения из начала координат видна в направлении $\vec{s}$, тогда амплитуда отраженной волны в этой точке будет (см. [2], [3]):

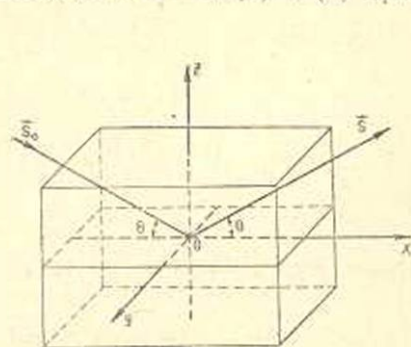
$$G = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \cdot P \sum \exp \left\{ -ik \left[(\vec{s} - \vec{s}_0) \cdot \vec{r} + \frac{r^2}{2R} - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{s})^2}{2R} \right] \right\}, \quad (3)$$

где P — фактор поляризации.

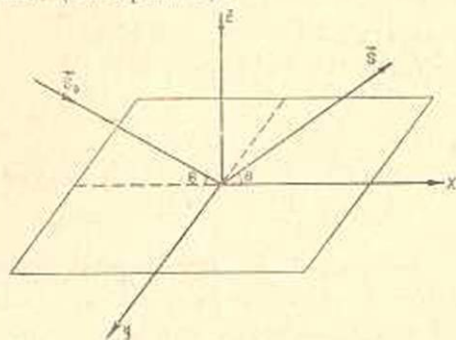
Если плоскость падения совпадает с плоскостью ZOX , а отражающие плоскости — с плоскостью XOY (трансляционные векторы $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ и $\vec{a}_3$ соответственно параллельны координатным осям OX, OY, OZ), то для направления максимального отражения, где удовлетворяются условия (2), выражение (3) примет вид (фиг. 1):

$$G = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \cdot P \sum_{m_1, m_2, m_3} \exp \left\{ -ik \frac{m_1^2 a_1^2 \sin^2 \theta + m_2^2 a_2^2 \cos^2 \theta - m_1 m_2 a_1 a_2 \sin 2\theta}{2R} \right\}. \quad (4)$$

Сначала исследуем (4) для одной отражающей плоскости. В случае плоскости $Z = 0$ (1) и (4) примут вид (см. фиг. 2):



Фиг. 1.



Фиг. 2.

$$G_0 = A \frac{\sin N_1 \pi A_1}{\sin \pi A_1} \frac{\sin N_2 \pi A_2}{\sin \pi A_2} = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} P N_1 N_2. \quad (5)$$

$$G_1 = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \cdot P \sum_{m_1=0}^{N_1-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_1^2 a_1^2}{2R} \sin^2 \theta \right\} \sum_{m_2=0}^{N_2-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_2^2 a_2^2}{2R} \right\}. \quad (6)$$

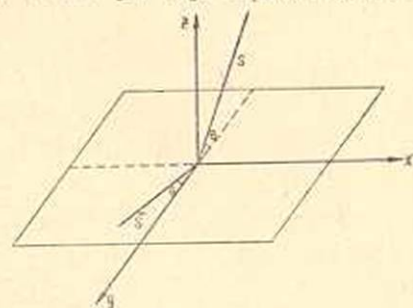
Теперь поворачиваем плоскость падения вокруг нормали отражающих плоскостей так, чтобы она совпала с плоскостью ZOY (см. фиг. 3), тогда для амплитуды волны, отраженной от той же самой плоскости XOY в направлении максимального отражения, получим:

$$G_0 = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} P N_1 N_2. \quad (7)$$

$$G_2 = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \cdot P \sum_{m_1=0}^{N_1-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_1^2 a_1^2}{2R} \right\} \sum_{m_2=0}^{N_2-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_2^2 a_2^2}{2R} \sin^2 \theta \right\}. \quad (8)$$

Ясно, что (6) и (8) не совпадут, если $N_1 \neq N_2$, и разница между ними будет тем больше, чем больше разница между N_1 и N_2 .

Из (5)–(8) видно, что по кинематической теории Лауэ интенсивность отраженных волн не зависит от направления плоскости падения, (5) и (7) не отличаются, а по нашим более точным расчетам эта интенсивность зависит от направления плоскости падения ((6) и (8) отличаются), и эта зависимость тем больше, чем больше отличаются размеры кристалла в разных направлениях.



Фиг. 3.

Численным примером можно наглядно показать, насколько сильно может зависеть высота дифракционного пика от направления плоскости падения.

Допустим, размер отражающих плоскостей в направлении оси OX равен 10^{-4} см, а в направлении OY — 10^{-3} см. Тогда, заменяя суммирование в (6) и (8) интегрированием и приведя интегралы к виду интегралов Френеля (см. [4], [5]), получим

$$\frac{|G_1|^2}{|G_2|^2} = \frac{A_2 \left[\left(\int_0^{a_1} \cos \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 + \left(\int_0^{a_1} \sin \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 \right]}{A^2 \left[\left(\int_0^{a_1} \cos \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 + \left(\int_0^{a_1} \sin \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 \right]} \times$$

$$\times \frac{\left[\left(\int_0^{v_1} \cos \frac{\pi}{2} z^2 dz \right)^2 + \left(\int_0^{v_1} \sin \frac{\pi}{2} z^2 dz \right)^2 \right]}{\left[\left(\int_0^{v_1'} \cos \frac{\pi}{2} z^2 dz \right)^2 + \left(\int_0^{v_1'} \sin \frac{\pi}{2} z^2 dz \right)^2 \right]}$$

где $|G_1|^2$ — интенсивность отраженных волн в направлении максимального отражения в случае, когда плоскость падения совпадает с плоскостью XOZ .

$|G_2|^2$ аналогично $|G_1|^2$, только плоскость падения совпадает с плоскостью YOZ .

$$u_1 = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} u \sin \theta,$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} v,$$

$$u_1' = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} u,$$

$$v_1' = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} v \cdot \sin \theta.$$

Для $\theta = 13^\circ 20'$, $\lambda = 1,539 \text{ \AA}$, $u = 10^{-3} \text{ см}$, $v = 10^{-4} \text{ см}$, $R = 10 \text{ см}$ получим

$$\left| \frac{G_1}{G_2} \right|^2 = 19.5. \quad (8')$$

В трехмерном случае, используя (3), вместо (6) и (8) соответственно получим:

$$G_1 = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \rho \sum_{m_1=0}^{N_1-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_2^2 a_2^2}{2R} \right\} \times \\ \times \sum_{m_2=0}^{N_2-1} \sum_{m_3=0}^{N_3-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_1^2 a_1^2 \sin^2 \theta - m_1 m_3 a_1 a_3 \sin 2\theta + m_3^2 a_3^2 \cos^2 \theta}{2R} \right\}. \quad (9)$$

$$G_2 = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \rho \sum_{m_1=0}^{N_1-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_1^2 a_1^2}{2R} \right\} \times \\ \times \sum_{m_2=0}^{N_2-1} \sum_{m_3=0}^{N_3-1} \exp \left\{ -ik \frac{m_2^2 a_2^2 \sin^2 \theta - m_2 m_3 a_2 a_3 \sin 2\theta + m_3^2 a_3^2 \cos^2 \theta}{2R} \right\}. \quad (10)$$

Как видно из (9) и (10), в трехмерном случае амплитуда, а следовательно, и интенсивность отраженных волн в направлении максимального отражения зависят от направления плоскости падения. (9) и (10) опять-таки отличаются друг от друга и тем больше, чем больше

отличаются друг от друга размеры отражающих плоскостей в направлении плоскости падения и в направлении ее нормали.

Для этих двух случаев кинематическая теория Лауэ дает одинаковые выражения

$$G = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} P N_1 N_2 N_3,$$

т. е. в трехмерном случае по расчетам Лауэ интенсивность селективно рассеянных волн не зависит от направления плоскости падения.

Зависимость интенсивности от ориентировки плоскости падения в трехмерном случае можно наглядно показать, заменяя опять суммирование интегрированием.

Действительно, заменяя суммирование (9) интегрированием, получим:

$$G_1 = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} P n \int_0^{\infty} \exp \left\{ -ik \frac{y^2}{2R} \right\} dy \times \\ \times \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -ik \frac{x^2 \sin^2 \theta + xz \sin 2\theta - z^2 \cos^2 \theta}{2R} \right\} dx dz,$$

где n — число атомов в единице объема.

Первый интеграл последнего выражения можно привести к виду интеграла Френеля:

$$\int_0^{\infty} \exp \left\{ -ik \frac{y^2}{2R} \right\} dy = \int_0^{v_1} \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} t^2 \right\} dt,$$

где $v_1 = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} y$.

Для интегрирования двойного интеграла

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -ik \frac{x^2 \sin^2 \theta + xz \sin 2\theta - z^2 \cos^2 \theta}{2R} \right\} dx dz \quad (11)$$

введем новые переменные интегрирования следующим образом:

$$\begin{aligned} x &= x' \cos \alpha - z' \sin \alpha \\ z &= x' \sin \alpha + z' \cos \alpha, \end{aligned} \quad (12)$$

Тогда подынтегральное выражение интеграла (11) примет следующий вид:

$$\exp \left\{ -ik \frac{x^2 \sin^2 \theta + xz \sin 2\theta - z^2 \cos^2 \theta}{2R} \right\} = \\ = \exp \left\{ -ik \frac{x'^2 \left(\cos^2 \alpha \sin^2 \theta + \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sin 2\theta - \sin^2 \alpha \cos^2 \theta \right)}{2R} \right\} \times$$

$$\times \frac{z' \left(\sin^2 \alpha \sin^2 \theta - \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sin 2\theta - \cos^2 \alpha \cos^2 \theta \right)}{2R} \times \\ \times \frac{x' z' (\cos^2 \alpha \sin 2\theta - \sin 2\alpha \sin 2\theta - \sin^2 \alpha \sin 2\theta - \sin 2\alpha \cos^2 \theta)}{2R} \Bigg\}.$$

Для того, чтобы изъять из последнего выражения произведение $x'z'$, надо применить следующее условие:

$$\cos^2 \alpha \sin 2\theta - \sin 2\alpha \sin^2 \theta - \sin^2 \alpha \sin 2\theta - \sin 2\alpha \cos^2 \theta = 0, \quad (13)$$

откуда получаем:

$$\operatorname{tg} 2\alpha = \sin 2\theta. \quad (14)$$

Для рассматриваемого случая $\theta = 13^\circ 20'$, α равно $12^\circ 5'$.

Учитывая условия (12) и (14), из (11) приближенно получим:

а) в случае, когда плоскость падения совпадает с плоскостью XOZ

$$G_1 = A \int_0^{v_1} \exp \left\{ -ik \frac{y^2}{2R} \right\} dy \int_0^{u_1} \exp \left\{ -ik \frac{x'^2 C_1}{2R} \right\} dx' \int_0^{w_1} \exp \left\{ -ik \frac{z'^2 C_2}{2R} \right\} dz'. \quad (15)$$

б) в случае, когда плоскость падения совпадает с плоскостью YOZ :

$$G_2 = A \int_0^v \exp \left\{ -ik \frac{x^2}{2R} \right\} dx \int_0^{v_1} \exp \left\{ -ik \frac{y'^2 C_1}{2R} \right\} dy' \int_0^{w_1} \exp \left\{ -ik \frac{z'^2 C_2}{2R} \right\} dz', \quad (16)$$

где

$$A = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} nP \cos^2 \alpha,$$

$$C_1 = \cos^2 \alpha \sin^2 \theta + \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sin 2\theta - \sin^2 \alpha \cos^2 \theta,$$

$$C_2 = \sin^2 \alpha \sin^2 \theta - \frac{1}{2} \sin 2\alpha \sin 2\theta - \cos^2 \alpha \cos^2 \theta,$$

$$v_1 = v \cos \alpha + w \sin \alpha,$$

$$w_1 = w \cos \alpha - u \sin \alpha.$$

Приведя (15) и (16) к интегралам Френеля, получим:

$$G_1 = A \int_0^{v_1} \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} t^2 \right\} dt \int_0^{u_1} \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} T^2 \right\} dT \int_0^{w_1} \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} q^2 \right\} dq,$$

$$G_2 = A \int_0^v \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} t^2 \right\} dt \int_0^{v_1} \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} T^2 \right\} dT \int_0^w \exp \left\{ -i \frac{\pi}{2} q^2 \right\} dq.$$

где

$$u_{11} = \sqrt{\frac{2C_1}{\lambda R}} (u_1 \cos \alpha + w \sin \alpha),$$

$$w_{11} = \sqrt{\frac{2C_2}{\lambda R}} (w \cos \alpha - u \sin \alpha),$$

$$u_1 = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} u,$$

$$v_{11} = \sqrt{\frac{2C_1}{\lambda R}} (v \cos \alpha + w \sin \alpha),$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{2}{\lambda R}} v.$$

Таким образом, для отношения интенсивностей этих двух случаев ориентировки плоскости падения получим:

$$\begin{aligned} \frac{|G_1|^2}{|G_2|^2} &= \frac{\left[\left(\int_0^{v_1} \cos \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 + \left(\int_0^{v_1} \sin \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 \right]}{\left[\left(\int_0^{u_1} \cos \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 + \left(\int_0^{u_1} \sin \frac{\pi}{2} t^2 dt \right)^2 \right]} \times \\ &\times \frac{\left[\left(\int_0^{v_{11}} \cos \frac{\pi}{2} T^2 dT \right)^2 + \left(\int_0^{v_{11}} \sin \frac{\pi}{2} T^2 dT \right)^2 \right]}{\left[\left(\int_0^{v_{11}} \cos \frac{\pi}{2} T^2 dT \right)^2 + \left(\int_0^{v_{11}} \sin \frac{\pi}{2} T^2 dT \right)^2 \right]}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для тех же значений θ , λ , u , v , R и для $w = 10^{-4}$ см из (17) получим:

$$\left| \frac{G_1}{G_2} \right|^2 = 14,92. \quad (18)$$

В ы в о д ы

1. Согласно кинематической теории интерференции рентгеновских лучей по Лауэ амплитуда и интенсивность селективно отраженных волн не зависят от ориентировки плоскости падения при данной системе отражающих плоскостей.

2. По нашим более точным расчетам эти амплитуда и интенсивность зависят от ориентировки плоскости падения при данной системе отражающих плоскостей.

3. В приведенном здесь частном случае ($\theta = 13^\circ 20'$, $\lambda = 1,539 \text{ \AA}$, $R = 10 \text{ см}$, $u = 10^{-3} \text{ см}$, $v = 10^{-4} \text{ см}$, $w = 10^{-4} \text{ см}$) зависимость интенсивности от направления плоскости падения более сильна в случае одной плоскости, чем в случае системы плоскостей, что не всегда может соблюдаться. Ясно, что отношения (8) и (18) зависят как от ориентировки плоскости падения, так и от размеров отражающего кристалла.

Ереванский государственный
университет

Поступила 19 VI 1962

Պ. Լ. Յեզիբեգյան, Յու. Ա. Ռափայան

ԱՆԴՐԱԴԱՐՁԱԾ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՀԱՌԱԳԱՅՅՆԵՐԻ ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅԱՆ ԿԱԽՈՒՄԸ ԱՆԿՄԱՆ ՀԱՐՔՈՒԹՅԱՆ ՈՒՂՂՈՒԹՅՈՒՆՆԵՑ

Ա. Մ. Փ Ո Փ Ո Ւ Մ

Ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի կինեմատիկ տեսության մեջ անդրադարձված ճառագայթների ինտենսիվությունը կախված չէ անկման հարթության ուղղությունից: Տվյալ աշխատության մեջ ցույց է տրվում, որ եթե հաշվի առնվի լրացուցիչ ֆազերի այն տարրերությունը, որն առաջանում է անդրադարձնող բյուրեղի տարրեր ատոմների կողմից դեպի դիտման կետը ցրված ճառագայթների ոչ զուգահեռական պատճառով, ապա անդրադարձված ճառագայթների ինտենսիվությունը կախված կլինի անկման հարթության ուղղությունից: Այդպիսի ալիքի ճշգրիտ հաշվումներով անդրադարձված ճառագայթների ինտենսիվությունների համար ստացված է բանաձև և արդյունքների հիման վրա թվային օրինակով ցույց է տրվում, որ անկման հարթության երկու փոխուղղահայաց ուղղությունների դեպքում ինտենսիվությունը կարող է փոխախել մինչև մոտավորապես 19 անգամ:

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Безирганян П. А., Акритов А. Г. Зависимость интенсивности рентгеновских волн от формы отражающего кристалла (случай поглощающего кристалла). Известия АН АрмССР, серия физ.-мат. наук, 13, № 5, 1960.
2. Безирганян П. А. Диссертация, МГУ, 1954.
3. Безирганян П. А., Боровский И. Б. Зависимость интенсивности отраженных волн от размеров отражающего кристалла. Известия АН АрмССР, серия физ.-мат. наук, 13, № 1, 1960.
4. Безирганян П. А. Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла. ДАН АрмССР, 29, № 5, 1959.
5. Безирганян П. А. Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла (случай поглощающего кристалла). ДАН АрмССР, 31, № 4, 1960.