

П. А. Безирганян

## Рассеяние рентгеновских лучей в жидкостях

В работах [1] и [2] было исследовано рассеяние рентгеновских лучей в газах, состоящих из одноатомных и многоатомных молекул.

Здесь мы рассмотрим рассеяние рентгеновских лучей в жидкостях.

В случае жидкостей важную роль играют как внутримолекулярные, так и межмолекулярные интерференционные эффекты. В рассматриваемом случае, как в случае газов, размеры облучаемого объема определяются поперечным сечением падающего пучка рентгеновских лучей, следовательно, пренебрежение добавочных разностей фаз, возникающих из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами этого объема в направлении точки наблюдения, никак нельзя оправдать.

### § 1. Рассеяние рентгеновских лучей в жидкости, состоящей из одноатомных молекул

Мгновенная интенсивность рентгеновских волн, рассеянных одноатомной жидкостью с учетом добавочных разностей фаз, возникающих благодаря непараллельности этих волн, будет (см. [1])

$$J = B |f|^2 \left\{ N + \sum_p \sum_q e^{-ik \left[ (\vec{s} - \vec{s}_0) (\vec{r}_p - \vec{r}_q) - \frac{(\vec{r}_p \vec{s})^2 - (\vec{r}_q \vec{s})^2}{2R} \right]} \right\}, \quad (1.1)$$

где

$$B = \frac{1}{R} \frac{e^4}{m_0^2 c^4} \cdot \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2},$$

$2\theta$  — угол рассеяния.

Здесь предположено, что все рассеивающие атомы одинаковы. Среднюю интенсивность можно выразить следующим образом (см. [2]):

$$\bar{J} = B |f|^2 \left\{ N + N(N+1) \iint W \exp \left[ -ik \left[ (\vec{s} - \vec{s}_0) (\vec{r}_p - \vec{r}_q) + \frac{r_p^2 - r_q^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_p \vec{s}) - (\vec{r}_q \vec{s})}{2R} \right] \right] \frac{dv_p}{V} \frac{dv_q}{V} \right\}. \quad (1.2)$$

Функция вероятности  $W$  равна единице, когда всевозможные взаимные расположения молекул равновероятны. В случае одноатомных жидкостей функция вероятности, по-видимому, зависит только от расстояния  $W = W(r)$ . При любой закономерности в распределении молекул для больших расстояний  $W = 1$ , а для расстояний, меньших молекулярного диаметра (сферы действия),  $W = 0$ . Для промежуточных расстояний в рассматриваемом случае только можно утверждать, что эта функция симметрична. Имея в виду вышесказанное, удобно (1.2) привести к виду

$$\begin{aligned} \bar{J} &= B |f|^2 \times \\ &\times \left\{ N + N(N-1) \iint e^{-ik \left[ (\vec{s} - \vec{s}_0)(\vec{r}_p - \vec{r}_q) + \frac{r_p^2 - r_q^2}{2R} + \frac{(\vec{r}_p \vec{s})^2 - (\vec{r}_q \vec{s})^2}{2R} \right]} \frac{dv_p dv_q}{V^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{N(N-1)}{V^2} \iint (1-W) e^{-ik \left[ (\vec{s} - \vec{s}_0)(\vec{r}_p - \vec{r}_q) + \frac{r_p^2 - r_q^2}{2R} + \frac{(\vec{r}_p \vec{s})^2 - (\vec{r}_q \vec{s})^2}{2R} \right]} dv_p dv_q \right\}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Первый интеграл последнего выражения уже рассмотрен в [1], этот интеграл выражает рассеяние под малыми углами. Предполагая, что вероятность нахождения атома  $P$  где-то внутри объема  $V$  везде одинакова, и допуская, что облучаемый объем жидкости представляет собой шар радиуса  $R$ , можно второй интеграл в выражении (1.3) привести к виду (см. [3])

$$\frac{2\pi(N-1)N}{V} \iint (1-W) r^2 e^{+i \left[ 2rk \sin \theta \cos \alpha + \frac{kr^2 \sin^2 \beta}{2R} \right]} \sin \alpha \, d\alpha \, dr, \quad (1.4)$$

где

$$r = |\vec{r}_p - \vec{r}_q|.$$

При выводе (1.4) центр атома  $P$  принят за начало координат, а радиальное расстояние  $q$  от атома  $P$  обозначено через  $r$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  — углы между вектором  $\vec{r}$  и векторами  $\vec{s} - \vec{s}_0$  и  $\vec{s}$  соответственно.

Усредняя сначала по  $\beta$  (см. [2]), а потом интегрируя по  $\alpha$ , для средней интенсивности рассеянных волн для не очень малых углов получим

$$\bar{J} = B|f|^2 \left\{ N - \frac{4\pi N(N-1)}{V} \int_0^{\infty} (1-W) \frac{\sin 2kr \sin \theta}{2kr \sin \theta} r^2 dr + \right. \\ \left. + \frac{4N(N-1)}{VR} k \sin 2\theta \int_0^{\infty} (1-W) r^4 \int_0^{\pi} \sin 2\alpha \sin (F \cos \alpha) \sin \alpha d\alpha dr \right\}, \quad (1.5)$$

где

$$F = 2kr \sin \theta.$$

Здесь для  $r$  пределы интегрирования взяты от 0 до  $\infty$ , так как при больших  $r$  функция вероятности  $W$  равна единице и подынтегральная функция в (1.3) обращается в нуль.

Из последнего получим (см. [2])

$$\bar{J} = B|f|^2 \left\{ N - \frac{4\pi N(N-1)}{V} \int_0^{\infty} (1-N) \frac{\sin F}{F} r^2 dr + \right. \\ \left. + k^2 \sin \theta \sin 2\theta \frac{16N(N-1)}{3RV} \int_0^{\infty} (1-W) r^3 \Phi(F) dr \right\}, \quad (1.6)$$

где

$$\Phi(F) = \frac{3(\sin F - F \cos F)}{F^3}.$$

Найдем среднее рассеяние  $\bar{J}_a$ , приходящееся на один атом. Заменяя  $N-1$  через  $N$ , из (1.6) получим

$$\bar{J}_a = \frac{\bar{J}}{N} = B|f|^2 \left\{ 1 - \frac{4\pi N}{V} \int_0^{\infty} (1-W) \varphi(F) r^2 dr + \right. \\ \left. + \frac{16}{3} k^2 \sin \theta \sin 2\theta \frac{N}{RV} \int_0^{\infty} (1-W) r^3 \Phi(F) dr \right\}, \quad (1.7)$$

где

$$\varphi(F) = \frac{\sin F}{F}.$$

Функция интерференции определяется следующим выражением

$$I = \frac{\bar{J}_a}{|f|^2} = B \left\{ 1 - \frac{4\pi N}{V} \int_0^{\infty} (1-W) \varphi(F) r^2 dr + \right. \\ \left. + \frac{16}{3} k^2 \sin \theta \sin 2\theta \frac{N}{RV} \int_0^{\infty} (1-W) \Phi(F) r^3 dr \right\}. \quad (1.8)$$

## § 2. Рассеяние рентгеновских лучей в жидкости, состоящей из многоатомных молекул

В случае жидкости, состоящей из многоатомных молекул, необходимо различать два случая: случай, когда можно пренебречь долями различия фаз, возникающими из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами данной молекулы в направлении точки наблюдения, и случай, когда нельзя пренебречь этими различиями фаз.

Здесь мы рассмотрим только случай, когда размеры молекул жидкости меньше размеров первой зоны Френеля. Тогда различия фаз, возникающими из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами индивидуальной молекулы в направлении точки наблюдения, можно пренебречь. Различиями фаз, возникающими благодаря непараллельности волн, рассеянных атомами разных молекул в направлении точки наблюдения, пренебречь нельзя.

В этом случае для мгновенной амплитуды рассеянных волн получим

$$A = \frac{1}{R} \frac{e^2}{mc^2} P \sum_{\mu=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{n-1} f_p e^{ik \left[ (\vec{s}-\vec{s}_0) \vec{r}_{\mu p} + \frac{r_{\mu p}^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_{\mu p} \vec{s})^2}{2R} \right]} \quad (2.1)$$

где

$P$  — поляризационный фактор,

$N$  — число молекул в облучаемом объеме,

$n$  — число атомов в индивидуальной молекуле,

$\vec{r}_{\mu p} = \vec{r}_{\mu} + \vec{r}_{\mu p}^0$  — векторное расстояние атома  $P$  молекулы от начала координат,

$\vec{r}_{\mu}$  — векторное расстояние молекулы  $\mu$  от начала координат,

$\vec{r}_{\mu p}^0$  — векторное расстояние атома  $P$  от центра своей молекулы (см. фиг. 1),

$\sum_{\mu}$  обозначает суммирование по всем  $N$  молекулам облучаемого объема,

$\sum_{p}$  обозначает суммирование по всем  $n$  атомам молекулы.

В этом случае (2.1) можно привести к виду

$$A = \frac{1}{R} \frac{e^2}{mc^2} P \sum_{\mu=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{n-1} f_p e^{ik \left[ (\vec{s}-\vec{s}_0) (\vec{r}_{\mu} + \vec{r}_{\mu p}^0) + \frac{r_{\mu p}^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_{\mu p} \vec{s})^2}{2R} \right]}$$

Откуда для моментальной интенсивности получим

$$J = B \sum_{\mu} \sum_{\nu} \sum_p \sum_q \left\{ e \left[ \frac{ik}{(s - s_0)} (\vec{r}_{\mu} - \vec{r}_{\nu}) + \frac{r_{\mu}^2 - r_{\nu}^2}{2R} - \frac{(\vec{r}_{\mu} \vec{s})^2 - (\vec{r}_{\nu} \vec{s})^2}{2R} \right] \right. \\ \left. \times e^{ik(\vec{s} - \vec{s}_0)(\vec{r}_{\mu}^0 - \vec{r}_{\nu}^0)} f_{\mu} f_{\nu} \right\}. \quad (2.2)$$

Для нахождения средней интенсивности мы должны последнее выражение разбить на две части: первая часть содержит члены, для которых  $\mu = \nu$  (этими членами обусловлены внутримолекулярные интерференционные эффекты), а вторая часть пусть содержит члены, для которых  $\mu \neq \nu$  (этими членами обусловлены межмолекулярные интерференционные эффекты), т. е.

$$\bar{J} = \bar{J}_1 + \bar{J}_2, \quad (2.3)$$

где  $\bar{J}_1$  — среднее значение суммы членов первой части ( $\mu = \nu$ ),

$\bar{J}_2$  — среднее значение суммы членов второй части ( $\mu \neq \nu$ ).

Если молекулы имеют возможность принимать всевозможные ориентации в пространстве, то для  $\bar{J}_1$ , согласно [1] (см. также [2]), получим

$$\bar{J}_1 = BN \left( \sum_p f_p^2 + 2 \sum_{p,q} f_p f_q \frac{\sin(2k \sin \theta l_{pq})}{2k \sin \theta l_{pq}} \right), \quad (2.4)$$

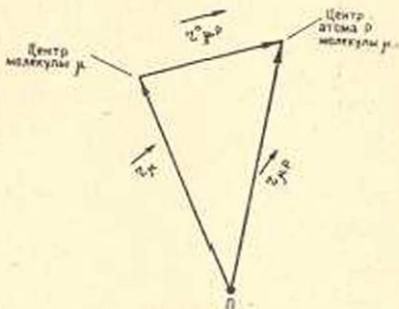
где  $l_{pq}$  — расстояние между атомами  $p$  и  $q$  в одной и той же молекуле. Для усреднения второй части предположим, что функция вероятности  $W(\vec{R}'_{\mu\nu})$ , где  $\vec{R}'_{\mu\nu}$  — векторное расстояние между центрами молекул  $\mu$  и  $\nu$ , в среднем радиально симметрична и одинакова для любой пары молекул, т. е.

$$W(\vec{R}'_{\mu\nu}) = W(R').$$

Тогда, имея в виду (1.6) и (2.2), для  $\bar{J}_2$  получим

$$\bar{J}_2 = -B \sum_p \sum_q \frac{4\pi N(N-1)}{V} \left[ f_p f_q e^{ik(\vec{s} - \vec{s}_0)(\vec{r}_{\mu}^0 - \vec{r}_{\nu}^0)} \right] \times \\ \times \left[ \int_0^{\infty} (1 - W) \frac{\sin F_1}{F_1} R^2 dR - \frac{4k^2 \sin \theta \sin 2\theta}{\pi R} \int_0^{\infty} (1 - W) R^2 \Phi(F_1) dR' \right],$$

где  $F_1 = 2kR' \sin \theta$ ,  $V$  — облучаемый объем.



Фиг. 1.

Так как в этой части суммы  $p$  и  $q$  относятся к разным молекулам, то  $r_{p\rho}^0$  и  $r_{vq}^0$  независимы друг от друга и для любого атома получим

$$\overline{\left[ e^{ik(\vec{s}-\vec{s}_0)\vec{r}_{p\rho}^0} \right]} = \frac{\sin 2kl_{op} \sin \theta}{2kl_{op} \sin \theta},$$

где  $l_{op}$  — расстояние атома  $P$  от центра молекулы.

Окончательно, для  $\bar{J}_2$  получим

$$\bar{J}_2 = -J_3 B \frac{4\pi N(N-1)}{V} \left\{ \int_0^\infty (1-W) \frac{\sin F_1}{F_1} R'^2 dR' - \frac{4k^2 \sin \theta \sin 2\theta}{\pi R} \int_0^\infty (1-W) R'^5 \Phi(F_1) dR' \right\}, \quad (2)$$

где

$$J_3 = \sum_p \sum_q f_p f_q \frac{\sin 2kl_{op} \sin \theta}{2kl_{op} \sin \theta} \cdot \frac{\sin 2kl_{oq} \sin \theta}{2kl_{oq} \sin \theta}.$$

Таким образом, из (2.3), (2.4) и (2.5) для средней интенсивности рассеянных волн получим

$$\bar{J} = \bar{J}_1 - J_3 B \frac{4\pi N(N-1)}{V} \left\{ \int_0^\infty (1-W) \frac{\sin F_1}{F_1} R'^5 dR' - \frac{4k^2 \sin \theta \sin 2\theta}{\pi R} \int_0^\infty (1-W) \Phi(F_1) R'^5 dR' \right\}.$$

Откуда, для среднего рассеяния  $\bar{J}_a$ , приходящегося на один атом получим

$$\bar{J}_a = \frac{\bar{J}}{N} = J_1 - J_3 B \frac{4\pi(N-1)}{V} \left\{ \int_0^\infty (1-W) \frac{\sin F_1}{F_1} R'^2 dR' - \frac{4k^2 \sin \theta \sin 2\theta}{\pi R} \int_0^\infty (1-W) \Phi(F_1) R'^5 dR' \right\}, \quad (2)$$

где

$$J_3 = \frac{J_1}{N}.$$

#### Обсуждение результатов

Как видно из (1.7) и (2.6), при учете разностей фаз, возникающих из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами

облучаемого объема в направлении точки наблюдения, средняя интенсивность рассеянных волн выражается двумя интерференционными функциями

$$\varphi(F) = \frac{\sin F}{F} \quad \text{и} \quad \Phi(F) = \frac{\sin F - F \cos F}{F^3}.$$

Между тем, без учета этих разностей фаз в выражении интенсивности фигурировала только первая из этих функций (см. [3]).

Таким образом, учет вышеуказанных добавочных разностей фаз привел к появлению в выражении средней интенсивности рассеянных волн интерференционной функции типа  $\Phi(F)$ .

Обе эти функции хорошо известны и часто встречаются в теории дифракции.

Для ряда значений  $F$ , для которых функция  $\varphi(F)$  принимает побочные максимальные и минимальные значения, функция  $\Phi(F)$  принимает нулевое значение. Кроме того, при возрастании  $F$  функция  $\Phi(F)$  спадает до нуля медленнее и далее быстрее затухает, чем  $\varphi(F)$ . В выражениях (1.7) и (2.6) соответственно в первые интегралы входят множители  $r^2\varphi(F)$  и  $R'^2\varphi(F_1)$ , а во вторые интегралы —  $r^3\Phi(F)$  и  $R'^3\Phi(F_1)$ , следовательно, первые интегралы имеют существенные значения соответственно при малых значениях  $r$  и  $R'$ , а вторые интегралы — при сравнительно больших значениях  $r$  и  $R'$ .

Таким образом, первый интеграл учитывает влияние ближнего порядка, а второй интеграл — влияние сравнительно дальнего порядка.

Однако, если дальний порядок отсутствует (молекулы малы), то вторым интегралом можно пренебречь.

Вторым интегралом можно пренебречь также во всех случаях, когда размеры облучаемого объема меньше размеров первой зоны Френеля.

### В ы в о д ы

Из вышеприведенных расчетов можно сделать следующие выводы.

1. При рассеянии рентгеновских лучей в жидкости, состоящей из одноатомных молекул:

а) угловая ширина интерференционных максимумов для малых углов рассеяния по нашим расчетам получается гораздо большей, чем по расчетам [3] (см. первый интеграл в выражении (1.3) и работу [1]),

б) в выражении средней интенсивности по нашим расчетам появляется второй интеграл (см. второй интеграл в выражении (1.7)), которым можно пренебречь только при малых облучаемых объемах по сравнению с первой объемной зоной Френеля (см. [1]). Без учета этого интеграла нельзя точно определить функцию вероятности  $W$ .

При рассеянии рентгеновских лучей в жидкости, состоящей из многоатомных молекул, когда размеры этих молекул меньше размеров первой зоны Френеля, в выражении интенсивности рассеянных

волн появляется второй интеграл, зависящий от дифракционной функции  $\Phi$  и выражающий влияние дальнего порядка (порядка вне первой объемной зоны Френеля). Для точного определения функции вероятности  $W$  необходимо учесть и этот интеграл.

Ереванский государственный университет

Поступила 5 IV 1963

## Պ. 2. Քեզիբգանյան

### ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅՅՆԵՐԻ ՑՐՈՒՍԸ ՀԵՂՈՒԿՆԵՐԻ ՄԵՋ

Ա Մ Փ Ո Փ Ո Ւ Մ

Հետազոտված է ունեցողության ճառագայթների ցրումը հեղուկների մեջ: Հեղուկների զեպքում կարևոր դեր են խաղում ինչպես ներմուկիուլյար, այնպես էլ միջմուկիուլյար ինտերֆերենցիոն էֆեկտները: Դիտարկվող զեպքում, ինչպես և զազերի զեպքում, ճառագայթվող ծախսի չափերը որոշվում են ընկնող ճառագայթների լայնական հատվածքի չափերով: Հետևապես, ճառագայթվող ծախսի տարբեր ատոմների կողմից զեպի դիտման կետը ցրված ճառագայթների ոչ զուգահեռության պատճառով առաջացած ֆազերի տարբերությունը ոչ մի կերպ արձամարձել չի կարելի:

Աշխատության մեջ որոշված է հեղուկներում ցրված ճառագայթների ինտենսիվությունը՝ հաշվի առնելով վերոհիշյալ ֆազերի տարբերությունը:

Ապացուցված է, որ՝

1. Փոքր անկյունների տակ ցրման անկյունային լայնությունը ստացվում է շատ ավելի մեծ, քան այն զեպքում, երբ հաշվի չի առնվում ֆազերի այլ լրացուցիչ տարբերությունը:

2. Հեղուկի բազմատոմ մուկիուլների զեպքում, երբ այդ մուկիուլների չափերը ավելի փոքր են, քան միկոնների առաջին զոնայի չափերը, ինտենսիվության արտահայտության մեջ ստացվում է մի նոր անդամ, որն արձամարձել այն զեպքում չի կարելի:

## Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Безирганян П. А. Рассеяние рентгеновских лучей в газах, жидкостях и аморфных телах I. ЖТФ, **32**, вып. 6, 1962.
2. Безирганян П. А. Рассеяние рентгеновских лучей в газах, жидкостях и аморфных телах II. ЖТФ, **33**, вып. 1, 1963.
3. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. ИЛ, М., 1950.