

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

П. А. БЕЗИРГАНЯН

ЗАВИСИМОСТЬ ДИФРАКЦИОННОЙ ШИРИНЫ
 СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ОТ РАЗМЕРОВ
 ОТРАЖАЮЩЕГО КРИСТАЛЛА

Как известно, размеры и форма области вокруг узлов обратной решетки, в пределах которой значения интенсивности дифракционного максимума существенны, зависят от размеров и внешней формы отражающего кристалла.

Границы этой области в случае параллелепипедального кристалла обычно определяются из следующих условий:

$$\begin{aligned} h - \frac{1}{N_1} \leq \xi \leq h + \frac{1}{N_1}, \quad k - \frac{1}{N_2} \leq \eta \leq k + \frac{1}{N_2}, \\ l - \frac{1}{N_3} \leq \zeta \leq l + \frac{1}{N_3}, \end{aligned} \quad (1)$$

где h, k, l — целые числа,

N_1, N_2, N_3 — числа атомов соответственно в направлениях \vec{a}, \vec{b} и \vec{c} ,
 ξ, η, ζ — компоненты вектора S/λ , параллельные трем осям обратной решетки, выраженные как кратные обратных трансляций \vec{a}^*, \vec{b}^* и \vec{c}^* ,

$\vec{s} = \vec{S} - \vec{S}_0$ — где \vec{S} и \vec{S}_0 — единичные векторы направления распространения отраженной и падающей волн соответственно.

По (1) получается, что размер вышеуказанной области вокруг узла обратной решетки в данном направлении, а следовательно, и ширина дифракционного максимума в этом направлении, зависят только от размера кристалла в этом же направлении.

Таким образом, по (1) получается, что узлы обратной решетки при малых кристаллах, превратятся в параллелепипеды со сторонами

$$\frac{\vec{a}^*}{N_1}; \quad \frac{\vec{b}^*}{N_2}; \quad \frac{\vec{c}^*}{N_3};$$

величины которых обратно пропорциональны соответствующим величинам сторон кристаллического параллелепипеда.

Условия (1) получены на основании формулы для интенсивности

$$J = \frac{|\Phi_0|}{R^2} J_0,$$

где J_0 — лауэвская функция интерференции

$$J_0 = \frac{\sin^2(\pi N_1 \xi)}{\sin^2(\pi \xi)} \frac{\sin^2(\pi N_2 \eta)}{\sin^2(\pi \eta)} \frac{\sin^2(\pi N_3 \zeta)}{\sin^2(\pi \zeta)}. \quad (2)$$

Соотношения (1) и вытекающие из них выводы получены на основании следующих двух предположений:

1. Величины ξ , η и ζ в области вокруг узлов обратной решетки, в пределах которой значения интенсивности дифракционного максимума существенны, то есть в пределах (1), независимы друг от друга.

2. Волны, рассеянные различными атомами облученного объема в направлении точки наблюдения, считаются параллельными.

На основании этих предположений доказывается [1]—[4], что ширина спектральной линии (колец Дебая-Шеррера) зависит только от размеров кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей.

В данной работе рассматривается характер независимости величин ξ , η и ζ друг от друга и доказывается, что ширина спектральной линии (колец Дебая-Шеррера) зависит как от числа отражающих плоскостей (толщины кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей), так и от размеров отражающих плоскостей.

§ 1. Характер независимости величин ξ , η и ζ друг от друга в области узла обратной решетки

ξ , η и ζ можно выразить через параметры кристаллической решетки следующим образом:

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{a(\cos \alpha_0 - \cos \alpha)}{\lambda}, \\ \eta &= \frac{b(\cos \beta_0 - \cos \beta)}{\lambda}, \\ \zeta &= \frac{c(\cos \gamma_0 - \cos \gamma)}{\lambda}, \end{aligned} \quad (3)$$

где \vec{a} , \vec{b} и \vec{c} — трансляции прямой решетки, α_0 , β_0 и γ_0 — углы между вектором \vec{S}_0 и векторами \vec{a} , \vec{b} и \vec{c} соответственно, α , β и γ — углы между вектором \vec{S} и векторами \vec{a} , \vec{b} и \vec{c} соответственно.

Как известно, между углами α , β и γ существует соотношение, которое в случае прямоугольных координат имеет вид

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1. \quad (4)$$

Следовательно, при постоянстве одного из этих углов с изменением второго третий не может не изменяться. Это означает, что при

данном \vec{S}_0 с изменением одной из величин ξ , η и ζ остается неизменной только одна из остальных двух.

Выражение (2) представляет собой произведение трех множителей типа

$$\frac{\sin^2 NZ}{\sin^2 Z},$$

которые, согласно (3) и (4), независимы друг от друга: с изменением одного из углов α , β и γ , то есть с изменением направления рассеяния, остается неизменным только один из этих множителей.

„Размер“ узла обратной решетки, например, в направлении \vec{b}^* обычно определяется расстоянием от узла обратной решетки в направлении \vec{b}^* до той точки, где интерференционная функция J_0 падает до нуля*. Эта точка от узла обратной решетки, согласно (2), находится на расстоянии \vec{b}^*/N_2 , то есть „размер“ узла обратной решетки в направлении \vec{b}^* обратно пропорционален числу частиц кристалла в направлении \vec{b}^* .

Допустим, что плоскость векторов \vec{S}_0 и \vec{S} (плоскость падения) совпадает с плоскостью векторов \vec{a} и \vec{b} , тогда (3) примет вид

$$\begin{aligned}\xi &= \frac{a(\cos \alpha - \cos \alpha_0)}{\lambda}, \\ \eta &= \frac{b(\sin \alpha + \sin \alpha_0)}{\lambda}, \\ \zeta &= 0.\end{aligned}\quad (5)$$

Как видно из последнего, при данном α_0 с изменением множителя

$$\frac{\sin^2(\pi N_2 \eta)}{\sin^2(\pi \eta)}$$

изменяется и множитель

$$\frac{\sin^2(\pi N_1 \xi)}{\sin^2(\pi \xi)}.\quad (6)$$

Следовательно, если N_1 значительно больше N_2 , то с изменением η (угла α) множитель (6), следовательно, и J_0 может принимать нулевое значение до того, как η примет значение

$$\eta = \frac{1}{N_2}.$$

* Интерференционная функция J_0 в узлах обратной решетки имеет максимальное значение.

то есть „размер“ узла обратной решетки в направлении \vec{b}^* при данном \vec{S}_0 может быть меньше, чем \vec{b}^*/N_2 .

Таким образом, в данном случае „размер“ узла обратной решетки в направлении \vec{b}^* не только зависит от размера кристалла в направлении \vec{b} , но и от размера кристалла в направлении \vec{a} .

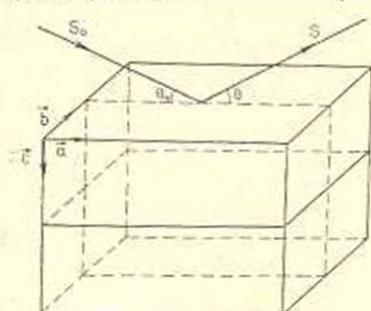
Выражения (5) показывают, что с изменением одной из величин ξ и η может остаться неизменной другая только в том случае, когда одновременно изменяются углы α и α_0 .

Этот случай мы рассмотрим более детально.

§ 2. Зависимость ширины колец Дебая-Шеррера от размеров частиц

В работах [1]—[4] выведены различные формулы для определения ширины колец Дебая-Шеррера в зависимости от размеров кристаллов (числа отражающих плоскостей).

По мнению авторов с помощью этих формул можно определить размеры кристаллов, перпендикулярные к отражающим плоскостям.



Фиг. 1.

Докажем, что дифракционные ширины колец Дебая-Шеррера зависят только от наименьших размеров кристалла в плоскости падения и что с помощью дифракционных ширин этих колец можно определить только эти размеры.

Пусть плоскость падения (плоскость векторов \vec{S}_0 и \vec{S}) совпадает с плоскостью векторов \vec{a} и \vec{c} и вектор \vec{S}_0 составляет угол θ_0 с вектором \vec{a} (см. фиг. 1), тогда для интерференционной функции J_0 получим

$$J_0 = N_2^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{ak (\cos \theta - \cos \theta_0)}{2} N_1 \right]}{\sin^2 \left[\frac{ak (\cos \theta - \cos \theta_0)}{2} \right]} \frac{\sin^2 \left[\frac{ck (\sin \theta + \sin \theta_0)}{2} N_3 \right]}{\sin^2 \left[\frac{ck (\sin \theta + \sin \theta_0)}{2} \right]}$$

где θ — угол между векторами \vec{a} и \vec{S} .

J_0 принимает максимальное значение при $\theta = \theta_0$ и нулевое значение при

$$\frac{ak (\cos \theta_1 - \cos \theta_0)}{2} = \pm \frac{\pi}{N_1}, \quad (\theta = \theta_1)$$

или при

$$\frac{ck(\sin\theta_3 + \sin\theta_0)}{2} = \pm \frac{\pi}{N_3} + ck \sin\theta, \quad (\theta = \theta_3).$$

В случае

$$\theta_1 = \theta_0 + \Delta\theta_1 \quad \text{и} \quad \theta_3 = \theta_0 + \Delta\theta_3$$

из последних соотношений получим

$$\Delta\theta_1 = \frac{\lambda}{N_1 a \sin\theta_0} = -\frac{\lambda}{L_1 \sin\theta_0}, \quad (8)$$

$$\Delta\theta_3 = \frac{\lambda}{N_3 c \cos\theta_0} = \frac{\lambda}{L_3 \cos\theta_0}, \quad (9)$$

где L_1 и L_3 — размеры кристалла в направлении \vec{a} и \vec{c} .

Как видно из (7)–(9), при

$$\cos\theta - \cos\theta_0 = 0,$$

то есть при постоянном λ , что выполняется при одновременном увеличении или уменьшении углов θ_0 и θ , ширина спектральной линии определяется условием (9).

При условии же

$$\frac{ck(\sin\theta + \sin\theta_0)}{2} = n\pi = \text{const},$$

то есть при постоянном λ , что выполняется тогда, когда с увеличением одной из величин θ или θ_0 другая уменьшается, ширина спектральной линии определяется условием (8). Угловая ширина кольца Дебая-Шеррера равна $2\Delta\theta_3$, если $\Delta\theta_3 > \Delta\theta_1$, в противном случае, то есть в случае $\Delta\theta_3 < \Delta\theta_1$, равна $2\Delta\theta_1$.

Из (8) и (9) следует

$$\frac{\Delta\theta_3}{\Delta\theta_1} = \frac{L_1 \sin\theta_0}{L_3 \cos\theta_0} = \frac{L_1}{L_3} \text{tg}\theta_0. \quad (10)$$

При $\theta_0 = 45^\circ$ из (10) получим

$$\frac{\Delta\theta_3}{\Delta\theta_1} = \frac{L_1}{L_3}. \quad (11)$$

Из (8)–(11) можно сделать следующие выводы:

1. Дифракционная ширина кольца Дебая-Шеррера зависит от угла Вульфа-Брега и от размеров кристалла только в плоскости падения и не зависит от размера кристалла в направлении нормали к плоскости падения.

2. Дифракционная ширина кольца Дебая-Шеррера определяется размером кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей до тех пор, пока

$$\frac{L_1}{L_3} \text{tg}\theta_0 < 1, \quad (12)$$

то есть когда $\Delta\theta_3 < \Delta\theta_1$. В противном случае, то есть в случае

$$\frac{L_1}{L_2} \operatorname{tg} \theta_0 > 1, \quad (13)$$

дифракционная ширина кольца зависит от размеров отражающих плоскостей в направлении плоскости падения. Таким образом, получается, что в случае, когда удовлетворяется условие (12), ширина кольца зависит от числа отражающих плоскостей, а в случае удовлетворения условия (13) ширина кольца зависит только от размеров отражающих плоскостей в плоскости падения.

3. (12) и (13) показывают, что при очень малых углах ($\theta \ll 90^\circ$) дифракционная ширина кольца определяется размером кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей, а при очень больших углах ($\theta \sim 90^\circ$) зависит от размеров отражающих плоскостей в направлении плоскости падения.

4. Из (8) и (9) для линейной дифракционной ширины кольца Дебая-Шеррера получим

$$B_1 = R \cdot 2\Delta\theta_1 = \frac{2R\lambda}{L_1 \sin \theta_0}, \quad (14)$$

$$B_2 = R \cdot 2\Delta\theta_2 = \frac{2R\lambda}{L_2 \cos \theta_0}, \quad (15)$$

откуда для размеров кристалла получим

$$L_1 = \frac{2R\lambda}{B_1 \sin \theta_0},$$

$$L_2 = \frac{2R\lambda}{B_2 \cos \theta_0}.$$

Таким образом, в случае (12) с помощью ширины кольца Дебая-Шеррера определяется L_1 , а в случае (13)— L_2 .

Дифракционная полуширина кольца определяется из условий

$$\frac{1}{2} = \frac{J_0(\theta_0 + \Delta\theta)}{J_0(\theta_0)} = \frac{1}{N_1 N_2} \frac{\sin^2 \left[L_1 \frac{\sin \theta_0 \cdot \Delta\theta}{2} k \right]}{\sin^2 \left[\frac{\sin \theta_0 \cdot \Delta\theta}{2} k \right]} \frac{\sin^2 \left[L_2 \frac{\cos \theta_0 \cdot \Delta\theta}{2} k \right]}{\sin^2 \left[\frac{\cos \theta_0 \cdot \Delta\theta}{2} k \right]}. \quad (16)$$

Как видно, дифракционная полуширина зависит как от L_1 , так и от L_2 , то есть от размеров кристалла в двух взаимноперпендикулярных направлениях в плоскости падения. Полуширина, определяемая формулой (16), гораздо меньше полуширины, определяемой только одним множителем

$$\frac{1}{2} = \frac{J_0(\theta_0 + \Delta\theta)}{J_0(\theta_0)} = \frac{\sin^2 \left[L_2 \frac{\cos \theta_0 \cdot \Delta\theta}{2} k \right]}{\sin^2 \left[\frac{\cos \theta_0 \cdot \Delta\theta}{2} k \right]} \frac{1}{N_2^2}. \quad (17)$$

(8), (9), (14) и (15) получены для частного случая, когда плоскость падения совпадает с плоскостью главных направлений \vec{a} и \vec{b} .

В общем случае для отражающих плоскостей (hkl) , если кристаллы имеют форму параллелепипеда со сторонами N_1a , N_2b и N_3c и если толщину кристалла в направлении нормали к отражающей плоскости характеризовать длиной отрезка, проходящего через две противоположные грани [10], то вместо (8) и (9) получим

$$\Delta\theta_1 = \frac{\lambda}{N_1 a_1 \sin \theta_0} = \frac{\lambda}{P \sin \theta_0}, \quad (18)$$

$$\Delta\theta_2 = \frac{\lambda}{\cos \theta_0} \frac{\Sigma}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}, \quad (19)$$

где $\Sigma = \frac{h}{N_1 a^2}$, когда отрезок, характеризующий толщину кристалла, проходит через грани bc
 $= \frac{k}{N_2 b^2}$, когда проходит через грани ac
 $= \frac{l}{N_3 c^2}$, когда проходит через грани ab ,

P — размер кристалла в плоскости падения в направлении отражающих плоскостей.

Как видно (9) и (19) совпадают соответственно с формулами Шеррера-Селякова [2], [3] и Лауэ [1].

Таким образом, неудовлетворительность формул Шеррера, Селякова и Лауэ в том, что в расчете ширины кольца в этих формулах не учтены соответственно условия (8) и (18).

Рассмотрим численный пример. Допустим излучение CuK_α , ($\lambda = 1,5375$) падает на кристалл кальцита и отражается от плоскостей поверхности скола (111). Пусть размер кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей будет 10^{-4} см, а размер отражающих плоскостей в направлении плоскости падения 10^{-5} см. Имея в виду, что межплоскостные расстояния этих плоскостей при первом порядке отражения равны $d_1 = 3,0290 \text{ \AA}$, для угла Вульфа-Брэгга получим $\theta_1 = 14^\circ 29'$. Тогда согласно (8) и (9) для $\Delta\theta_1$ и $\Delta\theta_2$ получим

$$\Delta\theta_1 = \frac{1,5375 \cdot 10^{-8} \text{ см}}{10^{-4} \text{ см} \cdot 0,25}, \quad \Delta\theta_2 = \frac{1,5375 \cdot 10^{-8} \text{ см}}{10^{-5} \text{ см} \cdot 0,25},$$

откуда $\Delta\theta_2 > \Delta\theta_1$, то есть в данном случае дифракционной шириной является $\Delta\theta_2$, которая на порядок больше, чем $\Delta\theta_1$.

Таким образом, в рассматриваемом случае дифракционная ширина обусловлена не размером кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей, а размером отражающих плоскостей в направ-

лении плоскости падения. Наоборот, если с помощью дифракционной ширины спектральной линии определить размер кристалла, то в рассматриваемом случае определяется размер отражающих плоскостей в направлении плоскости падения, что на порядок меньше от размера кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей. Следовательно, если согласиться с мнениями авторов [1]—[4], то при определении размера кристалла в направлении нормали отражающих плоскостей в данном частном случае можно ошибиться на порядок.

§ 3. Более строгое решение задачи

При учете разности фаз, возникающих из-за непараллельности волн, рассеянных различными атомами облучаемого объема в направлении точки наблюдения M , для амплитуды отраженной волны вместо лауэвского выражения (см. [5]—[7])

$$A = \frac{f}{R} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \sum \exp[-ik(\vec{S} - \vec{S}_0) \vec{r}]$$

получается выражение

$$A = \frac{f}{R} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \sum \exp \left\{ -ik \left[(\vec{S} - \vec{S}_0) \vec{r} + \frac{r^2}{2R} - \frac{(\vec{r}\vec{S})^2}{2R} \right] \right\}, \quad (20)$$

где \vec{S}_0 — единичный вектор, указывающий направление падения;

\vec{S} — единичный вектор, указывающий направление точки наблюдения от начала координат O .

R — среднее расстояние облучаемых атомов от точки наблюдения. Падающая волна плоская.

Пусть одна из отражающих плоскостей совпадает с плоскостью XOY , а плоскость, содержащая \vec{S} и \vec{S}_0 , — с плоскостью XOZ . Если \vec{S}_0 и \vec{S} составляют с осью X углы соответственно θ_0 и θ , то для амплитуды рассеянной волны в точке наблюдения M получим

$$A = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} \sum \exp \left\{ -ik \left[(\cos \theta - \cos \theta_0) x + (\sin \theta - \sin \theta_0) z + \frac{y^2}{2R} + \frac{x^2 \sin^2 \theta}{2R} + \frac{z^2 \cos^2 \theta}{2R} - xz \sin 2\theta \right] \right\}. \quad (21)$$

Заменяя суммирование интегрированием, для амплитуды рассеянной волны получим (при плоской падающей волне)

$$A = \frac{f}{R} \frac{e^2}{mc^2} n \int_0^U \int_0^V \int_0^W \exp \left\{ -ik \left[(\cos \theta - \cos \theta_0) x + (\sin \theta - \sin \theta_0) z + \frac{y^2}{2R} + \frac{x^2 \sin^2 \theta}{2R} - xz \sin 2\theta \right] \right\} dx dy dz, \quad (22)$$

где n — число атомов в единице объема.

При точечном источнике* для этой же амплитуды получим (см. [8])

$$A = \frac{f}{R_1 R_2} \frac{e^2}{mc^2} n \iiint \exp \left\{ -ik \left[-\vec{r}(\vec{S} - \vec{S}_0) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{r^2}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) - \frac{(\vec{S}_0 \vec{r})^2}{2R_1} - \frac{(\vec{S} \vec{r})^2}{2R_2} \right] \right\} dx dy dz, \quad (22)$$

Если ориентировка векторов \vec{S} и \vec{S}_0 относительно координатных осей x, y, z та же самая, что и в случае падающей плоской волны, то из (23) получим

$$A = \frac{f}{R_1 R_2} \frac{e^2 n}{mc^2} \int_0^U \int_0^V \int_0^W \exp \left\{ -ik \left[(\cos \theta_0 - \cos \theta) x + (\sin \theta_0 - \sin \theta) z + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{y^2}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + \frac{x^2}{2} \left(\frac{\sin^2 \theta_0}{R_1} + \frac{\sin^2 \theta}{R_2} \right) + \frac{z^2}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta_0}{R_1} + \frac{\cos^2 \theta}{R_2} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - xz (\sin 2\theta_0 + \sin 2\theta) \right] \right\} dx dy dz. \quad (24)$$

В (22) и (24) U, V, W размеры кристалла соответственно в направлениях x, y и z .

Если плоскость падения (содержащую \vec{S}_0 и \vec{S}) вращать вокруг оси z так, чтобы она совпадала с плоскостью $zoу$, то для амплитуды рассеянной волны получим:

при падающей плоской волне

$$A = \frac{f}{R} \frac{e^2 n}{mc^2} \int_0^U \int_0^V \int_0^W \exp \left\{ -ik \left[(\cos \theta - \cos \theta_0) y + (\sin \theta + \sin \theta_0) z + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{x^2}{2R} + \frac{y^2 \sin^2 \theta}{2R} + \frac{z^2 \cos^2 \theta}{2R} - xz \sin 2\theta \right] \right\} dx dy dz, \quad (25)$$

при падающей сферической волне:

$$A = \frac{f}{R_1 R_2} \frac{e^2 n}{mc^2} \int_0^U \int_0^V \int_0^W \exp \left\{ -ik \left[(\cos \theta - \cos \theta_0) y + (\sin \theta - \sin \theta_0) z + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{x^2}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + \frac{y^2}{2} \left(\frac{\sin^2 \theta_0}{R_1} + \frac{\sin^2 \theta}{R_2} \right) + \frac{z^2}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta_0}{R_1} + \frac{\cos^2 \theta}{R_1} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - yz (\sin 2\theta_0 + \sin 2\theta) \right] \right\} dx dy dz. \quad (26)$$

* Естественные источники, являющиеся совокупностями точечных источников (атомы можно считать точечными источниками рентгеновских лучей).

Нетрудно догадаться, что (22) и (24) в функции от θ определяют „размеры“ узла обратной решетки в направлении \vec{a}^* при плоской и сферической падающих волнах соответственно.

Таким же образом (25) и (26) определяют „размеры“ узла обратной решетки в направлении \vec{b}^* при плоской и сферической падающих волнах соответственно. Для определения „размера“ узла обратной решетки в направлении \vec{c}^* надо плоскость падения (плоскость векторов \vec{S}_0 и \vec{S}) вращать вокруг оси ox на 180° и в выражениях (22) и (24) x заменить через z , а z через x :

в случае падающей плоской волны

$$A = \frac{f e^2 n}{R m c^2} \int_0^U \int_0^V \int_0^W \exp \left\{ -ik \left[(\sin \theta - \sin \theta_0) x + (\cos \theta - \cos \theta_0) z + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{y^2}{2R} + \frac{x^2 \cos^2 \theta}{2R} - \frac{z^2 \sin^2 \theta}{2R} - xz \sin 2\theta \right] \right\} dx dy dz, \quad (27)$$

в случае падающей сферической волны

$$A = \frac{f}{R_1 R_2} \frac{e^2 n}{m c^2} \int_0^U \int_0^V \int_0^W \exp \left\{ -ik \left[(\sin \theta - \sin \theta_0) x + (\cos \theta - \cos \theta_0) z + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{y^2}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) + \frac{x^2}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta_0}{R_1} + \frac{\cos^2 \theta}{R_2} \right) + \frac{z^2}{2} \left(\frac{\sin^2 \theta_0}{R_1} + \frac{\sin^2 \theta}{R_2} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - xz (\sin 2\theta_0 + \sin 2\theta) \right] \right\} dx dy dz. \quad (28)$$

Как видно из (22)–(28), как при плоской, так и при сферической падающих волнах при изменении размера кристалла в одном направлении изменяются „размеры“ узла обратной решетки во всех направлениях. Действительно, например, из (22), (25) и (27) видно, что при изменении размера кристалла в направлении z „размер“ узла обратной решетки, а следовательно, и размеры дифракционного максимума изменяются не только в направлении \vec{c}^* , но и в направлениях \vec{a}^* и \vec{b}^* .

Вышеизложенное можно более наглядно показать численным примером. Для этого определив из (28) $|A|^2$ и приведя интегралы к виду интегралов Френеля, можно построить график зависимости $|A|^2$ от θ .

Такие расчеты приведены в [9], и здесь не будем повторять их.

Выводы

Из вышеприведенных расчетов можно сделать следующие выводы.

1. Дифракционная ширина спектральной линии при неподвижном монокристалле и плоско-параллельном падающем пучке зависит только от наибольшего размера кристалла в плоскости падения, и с помощью этих ширин спектральных линий можно определить только указанный размер.

2. Дифракционная ширина спектральной линии при плоскопараллельном падающем пучке и качающемся кристалле или при расходящемся падающем пучке и неподвижном кристалле зависит от наименьшего размера кристалла в плоскости падения. В этом случае с помощью дифракционных ширин спектральных линий можно определить только этот наименьший размер кристалла.

3. Дифракционная ширина колец Дебая-Шеррера зависит от наименьших размеров кристалла в плоскости падения, следовательно, с помощью дифракционной ширины не всегда определяются размеры кристаллов в направлении нормали отражающих плоскостей (см. [8]—[13]).

Ереванский государственный университет

Поступила 17 XII 1963

Պ. Ա. ԲԵՋՐԳՅԱՆՆ

ՍՊԵԿՏՐԱԼ ԳԾԻ ԳԻՖՐԱԿՑԻՈՆ ԼԱՅՆՈՒԹՅԱՆ ԿԱԽՈՒՄԸ ԱՆԿՐԱԿԱՐՁՆՈՂ ԲՏՈՒՐՆԵՂԻ ՉԱՓԵՐԻՑ

Ա մ փ ո փ ո լ մ

Ստիտրաբար համարում են, որ հակադարձ ցանցի հանգույցների շափերը հակադարձ համեմատական են բյուրեղի շափերին:

Տվյալ աշխատության մեջ ապացուցվում է, որ

1. անսոգենյան սպեկտրալ գծի դիֆրակցիոն լայնությունը անշարժ բյուրեղի և հարթ զուգահեռ ընկնող ճառագայթների դեպքում կախված է միայն անկման հարթության մեջ բյուրեղի ամենամեծ շափից և սպեկտրալ գծի այդ լայնության միջոցով կարելի է որոշել միայն վերոհիշյալ շափերը,

2. հարթ զուգահեռ սկզբնական փնջի և տատանվող բյուրեղի կամ տարամետվող սկզբնական փնջի և անշարժ բյուրեղի դեպքում սպեկտրալ գծի դիֆրակցիոն լայնությունը կախված է անկման հարթության մեջ բյուրեղի փոքրագույն շափից: Այդ դեպքում սպեկտրալ գծի դիֆրակցիոն լայնության միջոցով որոշվում է բյուրեղի փոքրագույն շափը,

3. Գերալ-Շեռերի օղակների լայնությունը կախված է անկման հարթության մեջ բյուրեղի ամենափոքր շափերից, հետևաբար, օղակի դիֆրակցիոն լայնության միջոցով միշտ չէ, որ որոշվում է բյուրեղի շափը անդրադարձնող հարթություններին ուղղահայաց ուղղությամբ:

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. *Laue M., Lorentz.* Factor und Intensitätsverteilung in Debey-Scherer Ringen. *Zs. f. kristallogr.*, **64**, 1926, 115.
2. *Scherrer P.*, *Nachr. von d. könig. Ges. d. Wiss. zu Gött.*, **98**, 1918.
3. *Селяков Н.* Рентгенографический метод определения размеров кристаллов в мелкокристаллическом веществе. *Ж. Р. Ф. Х. О., ч. физ.*, **56**, 71, Л., 1924.
4. *Колпинский В. А.* Элементарный вывод выражения для ширины кольца Дебай-Шеррера. *ЖЭТФ*, **6**, вып. 8, 1936.
5. *Безирганян П. А.* Диссертация, МГУ, 1954.
6. *Безирганян П. А., Боровский И. Б.* Дифракция рентгеновских лучей на изогнутых кристаллах. *Труды Ереванского гос. университета, серия физ.-мат.*, **48**, вып. 2, 1955.
7. *Безирганян П. А.* Рассеяние рентгеновских лучей в газах, жидкостях и аморфных твердых телах. *ЖТФ*, вып. 6, 1962.
8. *Безирганян П. А., Акритов А. Г.* Зависимость интенсивности отраженных волн от размеров отражающего монокристалла. *Известия АН АрмССР, серия физ.-мат. наук*, вып. 3, 1962.
9. *Безирганян П. А., Никоян Ж. О.* Зависимость ширины дифракционных максимумов от размеров кристалла. *Кристаллография*, **7**, вып. 3, 1963.
10. *Китайгородский А. И.* Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. М., 1952.