

А.О. АБОЯН

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛАХ С УЧЕТОМ ДЛИТЕЛЬНОСТИ КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИСТОЧНИКА

Исследована дифракция рентгеновских лучей в кристаллах с учетом длительности когерентного излучения. Показано, что для точного определения ширины и интенсивности дифракционного максимума необходимо учесть время продолжительности когерентного излучения. Ширина и интенсивность дифракционного максимума зависят от числа отражающих плоскостей, одновременно участвующих в интерференции в точке наблюдения, а число этих плоскостей в основном зависит от длительности когерентного излучения.

Ключевые слова: когерентность, интерференция, длительность когерентности, цуг волн, интенсивность, высота и ширина дифракционного максимума.

Введение. В настоящее время возникла острая необходимость проведения некоторых теоретических и экспериментальных фундаментальных исследований в области рентгеновской оптики вообще и рентгеновской кристаллооптики в частности. Это обусловлено тем, что в рентгеноинтерференционных и рентгенодифракционных исследованиях без ограничения были использованы законы когерентности световых волн, в результате чего в физике рентгеновского диапазона длин волн возник значительный пробел. Дело в том, что цуги световых и рентгеновских волн резко отличаются друг от друга как размерами, так и формами и интерференционными (когерентными) свойствами. Цуги световых волн мало исследованы, а цуги рентгеновских волн вовсе не исследованы. Длины рентгеновских цугов составляют порядка 10 нм, т.е. гораздо меньше размеров обычных исследуемых кристаллов, что приводит к сильной зависимости дифракционных эффектов от цугового состава первичной волны. Поэтому можно считать, что практически до сих пор надлежащим образом не изучены вопросы когерентности рентгеновского диапазона длин волн в зависимости от способа их возникновения и монохроматизации, в результате чего становится невозможной однозначная интерпретация рентгеновских интерференционных сложных картин и дифракционных изображений несовершенств кристаллов и кристаллических систем. В связи с этим проводится теоретическое и экспериментальное фундаментальное исследование когерентности рентгеновского излучения с целью точной и однозначной интерпретации рентгеноинтерференционных и рентгенодифракционных картин, что имеет важное значение для рентгеновских спектральных и дифракционно – диагностических исследований.

Исходя из вышесказанного, необходимо провести общее исследование дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с учетом цугового состава первичной волны.

Проф. П.А. Безирганян впервые обратил внимание на то, что как в динамической, так и в кинематической теориях дифракции рентгеновских лучей в кристаллах существует значительный пробел – в этих теориях не учтен цуговой состав первичной волны, что является их значительным недостатком. Дело в том, что, с одной стороны, предполагается, что взаимно когерентными являются только волны, являющиеся частями одного и того же цуга, а с другой – весь облучаемый объем рассеивает когерентно. Однако размеры рентгеновских цугов, как уже было отмечено, порядка 10 нм, что гораздо меньше размеров даже кинематически рассеивающих блоков кристаллов. Таким образом, даже в кинематической теории предположения о том, что весь блок облучается когерентно (облучается целиком одним цугом) и рассеивает когерентно, не всегда верно.

При решении различных интерференционных задач рентгеновских лучей предполагают, что весь облучаемый объем кристалла независимо от его размеров рассеивает когерентно. Однако известно [1-4], что когерентными являются волны, принадлежащие одному и тому же акту испускания атома. Следовательно, интерференционная картина не может быть получена, даже если заставить встретиться волны, испускаемые одним и тем же атомом, но в разное время и причем с опозданием, большим временем длительности когерентного излучения.

В настоящей работе исследована дифракция рентгеновских лучей в кристаллах с учетом длительности когерентного излучения источника.

1. Интерференция волн, отраженных от плоскостей системы и принадлежащих данному цугу. Допустим, монохроматическое рентгеновское излучение, принадлежащее различным актам испускания атома, падает на систему отражающих плоскостей кристалла под углом Брэгга.

Пусть длительность одного акта испускания будет τ . Так как интерференция может наблюдаться только при наложении волн, принадлежащих одному и тому же акту испускания, то мы рассмотрим сумму волн, отраженных от плоскостей системы и принадлежащих данному цугу.

Задачу решим в рамках кинематической теории интерференции рентгеновских лучей, в частности, предположим, что волны, рассеянные от различных точек облучаемого объема в направлении точки наблюдения, параллельны.

Как известно, разность хода между волнами, отраженными от соседних плоскостей,

равна $2d \sin \theta$, тогда $\tau_0 = \frac{2d \sin \theta}{c}$ – время запаздывания между этими волнами, где

d – межплоскостное расстояние, c – скорость распространения электромагнитных волн. В

таком случае при $n = \frac{\tau}{\tau_0}$ и

$N > n$ (где N - число отражающих плоскостей) волна, отраженная от первой плоскости в точке наблюдения, не встретится с волнами, принадлежащими тому же цугу и отраженными от плоскостей, имеющих номера $n + 1, n + 2, \dots, N$ (рис.1). Следовательно, в общем случае число волн (число плоскостей), одновременно участвующих в интерференции в точке наблюдения, меньше, чем число облучаемых атомных плоскостей.

Зависимость числа волн (число плоскостей) от времени, отраженных от атомных плоскостей под углом Брэгга и одновременно участвующих в интерференции, показана на графике (рис. 2).

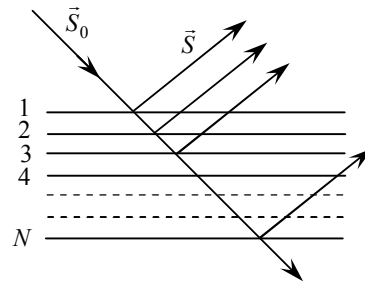


Рис. 1. Отражающие плоскости кристалла; $\vec{S}_0$ и $\vec{S}$ - единичные векторы направлений падения и отражения

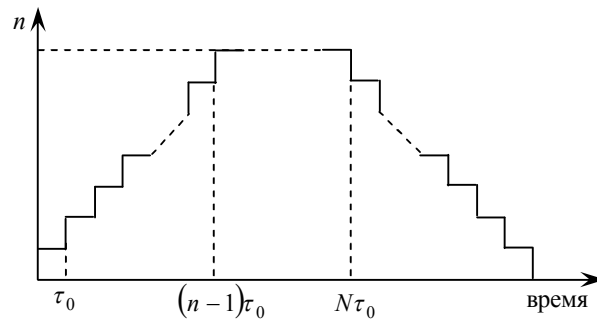


Рис. 2. Зависимость числа отражающих плоскостей от времени

При составлении графика имелось в виду, что в промежутке времени от 0 до τ_0 в точке наблюдения была только волна, отраженная от первой плоскости, в промежутке времени от τ_0 до $2\tau_0$ - волны, отраженные от первой и второй плоскостей и т. д., а в промежутке времени от $(n-1)\tau_0$ до $n\tau_0 = \tau$ - все волны, отраженные от первых n плоскостей. В промежутке времени от $(n-1)\tau_0$ до

$\tau + (N - n)\tau_0 = N\tau_0$ число волн в точке наблюдения остается максимальным и равным n в промежутке времени от $N\tau_0$ до $N\tau_0 + (n - 1)\tau_0$ число отражающих плоскостей падает от $n - 1$ до 1. Как видно из графика, максимальное число волн n , одновременно участвующих в интерференции в точке наблюдения, не зависит от числа отражающих плоскостей N (если $N > n$).

Из вышесказанного можно сделать следующие важные выводы: без учета продолжительности когерентного излучения невозможно точно определить: 1) ширину дифракционного максимума; 2) зависимость ширины дифракционного максимума от порядка отражения; 3) интенсивность дифракционного максимума; 4) зависимость интенсивности дифракционного максимума от порядка отражения. Действительно, как известно, ширина спектральной линии зависит от числа плоскостей, одновременно участвующих в интерференции. При определении ширины спектральной линии обычно предполагают, что число плоскостей семейства одновременно участвует в интерференции в точке наблюдения, и, следовательно, ширина спектральной линии определяется полным числом отражающих плоскостей. Однако, как показывает приведенный график, число плоскостей, одновременно участвующих в интерференции, меняется со временем, и максимальное значение этого числа равно n .

Таким образом, если $N > n$, то ширина спектральной линии определяется n , а не числом плоскостей N . В случае, когда $N < n$ (левая ступенчатая часть графика), максимальное число плоскостей, одновременно участвующих в интерференции, будет N , но число плоскостей, определяющих ширину спектральной линии, опять будет меньше, чем N , а среднее значение этого числа будет $N/2$.

Согласно кинематической теории интерференции, если амплитуда волны, отраженной от одной атомной плоскости, равна A и облучаемый кристалл имеет N таких отражающих плоскостей, то отраженная часть энергии будет

$$\frac{N^2 A^2}{A_0^2}, \quad (1)$$

где A_0 - амплитуда падающей волны.

Однако, имея в виду вышеприведенный график, для этой части найдем

$$\frac{[3Nn - n^2 + 1]A^2}{3A_0^2}, \quad (2)$$

в частном случае, когда $N = n$, получим

$$A^2 \frac{2N^2 + 1}{3A_0^2} \approx \frac{2}{3} \frac{A^2}{A_0^2} N^2. \quad (3)$$

Как видно из (1) и (2), без учета продолжительности когерентного излучения неточно определяется и отраженная часть энергии. Сравнивая (1) и (2), видно, что с увеличением числа отражающих плоскостей интенсивность отраженной волны, согласно соотношению (1), растет быстрее, чем следует из выражения (2).

Согласно интерференционным функциям Лауэ, высота и ширина дифракционного максимума не зависят от порядка отражения [5]. Поскольку в рассматриваемом случае с увеличением порядка отражения увеличивается τ_0 , а следовательно, уменьшается n , то с увеличением порядка отражения высота пика дифракционного максимума уменьшается, а ширина увеличивается.

2. Оценка длительности когерентного рентгеновского излучения. Из вышесказанного ясно, что когерентными являются только волны, являющиеся частями одного и того же цуга, следовательно, длительностью когерентного излучения будет длительность одного акта испускания (длительность испускания цуга).

Конечность цуга, а следовательно, и конечность длительности когерентного излучения, а также естественная ширина спектральной линии обусловлены в классической теории постепенным уменьшением амплитуды осциллятора (затухание из-за излучения), или в квантовой теории убыванием вероятности пребывания атома в его начальном состоянии [6-9].

Согласно классическим представлениям, каждому переходу атома от одного уровня на другой можно сопоставить один классический осциллятор [9], который, с точки зрения классической электродинамики, при излучении совершает затухающие колебания.

Затухание осциллятора из-за излучения происходит по закону $W_t = W_0 e^{-\gamma t}$, где W_0 и W_t - энергии осциллятора (колеблющегося электрона) в момент времени $t = 0$ и t соответственно, а γ (коэффициент затухания) определяется соотношением [6,9]

$$\gamma = \frac{8\pi^2 e^2}{3mc} \frac{1}{\lambda^2},$$

т.е. величиной интенсивности излучения.

Отсюда для эффективного времени жизни осциллятора или для времени затухания получим

$$\tau = \frac{1}{\gamma} = \frac{3mc}{8\pi^2 e^2} \lambda^2. \quad (4)$$

Как видно, энергия осциллятора (электрона), а следовательно, и интенсивность излучения убывают по экспоненциальному закону, значит, время τ можно принять за длительность отдельного акта излучения или за длительность когерентного излучения.

С точки зрения квантовой механики [6,9], в соотношениях неопределенностей для энергии и времени имеем

$$\Delta W \cdot \Delta t = \hbar, \quad (5)$$

где ΔW - ширина уровня, а Δt - время жизни уровня или длительность акта испускания (длительность когерентного излучения).

Из (5) для длительности когерентного излучения получим

$$\tau = \frac{\hbar}{\Delta W}, \quad (6)$$

которое связано с вероятностью перехода за секунду соотношением

$$\tau = \frac{1}{\gamma}. \quad (7)$$

Если с возбужденного уровня возможно несколько переходов на нижележащие уровни, то полная вероятность перехода выражается в виде

$$\gamma_i = \sum_k \gamma_{ik}, \quad (8)$$

где k - индекс нижележащего уровня, на который совершается переход. Отсюда для времени жизни уровня получим

$$\tau_i = \frac{1}{\gamma_i} = \frac{1}{\sum_k \gamma_{ik}}.$$

Следовательно, эффективное время жизни уровня i можно выразить через ширину начального и возможных конечных уровней k следующим образом:

$$\tau_i = \frac{1}{\gamma_i} = \frac{\hbar}{\Delta W_i} = \frac{\hbar}{\sum_k \Delta W_{ik}}, \quad (9)$$

где ΔW_{ik} - ширина k -го уровня.

Как видно из (4), с точки зрения классической электродинамики, эффективное время жизни осциллятора зависит только от длины волны, в то время как по квантовой механике, как видно из (9), время жизни уровня зависит от вероятностей переходов (от ширин уровней).

Однако нетрудно убедиться в том, что длительности когерентного излучения по классической (эффективное время жизни осциллятора (4)) и квантовой механике (время жизни уровня (9)) имеют одинаковый порядок. Докажем сказанное на конкретном примере.

Подставив численные значения величин e , m и c в (4), получим

$$\tau = 4,53\lambda^2 c. \quad (10)$$

Для золота $K_\alpha (K - L_{III})$ [9] ширина линии равна 58 эВ (ширина K - го уровня 54 эВ, а L_{III} -го уровня – 4 эВ), длина волны $\lambda_{K_{\alpha 1}} = 0,17982 \cdot 10^{-8}$ см. С учетом этих значений из (10) и (6) для длительности когерентного излучения соответственно получим

$$\tau_{\text{кл}} = 0,146 \cdot 10^{-16} \text{ с}, \quad \tau_{\text{кв}} = 0,114 \cdot 10^{-16} \text{ с}.$$

Как видно, классическая и квантовая длительности когерентного излучения достаточно хорошо совпадают.

В квантовом случае длительность когерентного излучения нами определялась по ширине линии, полученной совокупностью (ансамблем) атомов. Поэтому может показаться, что длительности излучений отдельных атомов гораздо больше длительности, определенной по (9).

Однако квантомеханический формализм содержит затухание излучений столь же полно, как и классическая теория, и квантовая теория также без затруднений объясняет естественную ширину спектральной линии, исходя из закона сохранения энергии. Следовательно, длительность когерентного излучения в квантовой механике можно определить и с помощью общего затухания излучений, что приводит к аналогичным результатам. Если же длительность жизни возбужденного состояния (длительность когерентного излучения) определена из общего затухания излучений, то ясно, что длительности отдельных актов не могут превысить общую длительность.

При расчете эффективного времени продолжительности когерентного излучения, не допуская существенной ошибки, за λ можно принять табличные значения длин волн рентгеновских спектральных линий.

Аналогичный результат получим для эффективного времени продолжительности когерентного излучения, если воспользуемся соотношением неопределенности $\tau \approx \frac{1}{\Delta\omega}$, где $\Delta\omega$ - ширина спектральной линии.

Тогда, например, для продолжительности когерентного излучения спектральной линии MoK_{α_1} $\lambda = 0,707 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ получим $\tau = 2,35 \cdot 10^{-16} \text{ с}$.

Рассмотрим отражение этого излучения от семейства плоскостей ромбоэдра кварца ($d = 3,3626 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $\theta = 6^\circ 2'$). В этом случае для τ_0 получим $\tau_0 = 0,2359 \cdot 10^{-18} \text{ с}$.

Следовательно, $n = \frac{\tau}{\tau_0} \approx 10^3$. Если толщина кристаллика кварца $\ell = 3,336 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, т.е. если

$N = 10^4$, то ширина спектральной линии MoK_{α_1} , отраженной от такого кристалла, будет определяться не $N = 10^4$ плоскостями, а $n = 10^3$ плоскостями, отраженная часть энергии будет не

$$\frac{N^2 A^2}{A_0^2} = \frac{A^2}{A_0^2} 10^8, \quad \text{а} \quad \frac{[3Nn - n^2 + 1] A^2}{3A_0^2} = \frac{A^2}{A_0^2} \cdot 9,66 \cdot 10^6.$$

Для вторичного отражения в этом случае получим

$$\tau_0 = 0,4718 \cdot 10^{-18} \text{ с}, \quad n = 0,5 \cdot 10^3, \quad \frac{[3Nn - n^2 + 1]A^2}{3A_0^2} = \frac{A^2}{A_0^2} \cdot 4,92 \cdot 10^6,$$

т.е. ширина и интенсивность спектральной линии сильно зависят от порядка отражения.

Исходя из вышеизложенного, приходим к следующим выводам:

1. Для точного определения ширины и интенсивности дифракционного максимума необходимо учесть время продолжительности когерентного излучения. Ширина и интенсивность дифракционного максимума зависят от числа отражающих плоскостей, одновременно участвующих в интерференции в точке наблюдения, а число этих плоскостей в основном зависит от длительности когерентного излучения.
2. Без учета длительности когерентного излучения при определении размера кристалла с помощью ширины дифракционного максимума можно допустить грубую ошибку, так как при малой продолжительности когерентного излучения даже большие кристаллы дают широкие дифракционные максимумы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дичберн Р. Физическая оптика. - М.: Наука, 1965.- 631 с.
2. Франсон М., Сланский С. Когерентность в оптике.- М.: Наука, 1967.- 90 с.
3. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. -М.: Наука, 1973. - 712 с.
4. Абоян А.О., Хзарджян А.А. Исследование видимости рентгеновских дифракционных муаровых картин трехкратным четырехкристалльным интерферометром // Изв. НАН Армении. Физика.- 2003.-Т.38, №5.- С.326-334.
5. Гинье А. Рентгенография кристаллов. - М.: Гос. изд. физ. мат. лит-ры, 1961. – 600 с.
6. Блохин М.А. Физика рентгеновских лучей. - М.: Наука, 1957. -518 с.
7. Гайтлер М. Квантовая теория излучения. -М.: Изд. ин. лит.,1956.- 491с.
8. Compton A.H., Allison S.K. X-Rays in Theory and Experiment. - New York, 1951.- 345 p.
9. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. -М.: Физматгиз, 1963.-319 с.

ГИУА (П). Материал поступил в редакцию 20.12.2010.

Ա.Հ. ԱՐՈՅԱՆ

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԱՂԲՅՈՒՐԻ ԿՈՂԵՐԵՆՏ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՏԵՎՈՂՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Հետազոտվել է ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիան բյուրեղներում աղբյուրի կոհերենտ ճառագայթման տևողության հաշվառմամբ: Ցույց է տրվել, որ դիֆրակցիոն մաքսիմումի ինտենսիվությունը և լայնությունը ճշգրիտ որոշելու համար անհրաժեշտ է հաշվի առնել կոհերենտ ճառագայթման տևողությունը: Դիֆրակցիոն մաքսիմումի ինտենսիվությունը և լայնությունը կախված են դիտման կետում ինտերֆերենցիային միաժամանակ մասնակցող անդրադարձնող հարթությունների թվից, իսկ այդ հարթությունների թիվը հիմնականում կախված է կոհերենտ ճառագայթման տևողությունից:

Առանցքային բառեր. կոհերենտություն, ինտերֆերենցիա, կոհերենտության տևողություն, ալիքների լծաշարք, ինտենսիվություն, դիֆրակցիոն մաքսիմումի լայնություն և բարձրություն:

A.H. ABOYAN

X - RAY DIFFRACTION IN CRYSTALS ALLOWING FOR COHERENT X - RAY SOURCE RADIATION DURATION

X- ray diffraction in crystals allowing for coherent radiation duration is studied. It is shown that for precise defining diffraction maximum width and intensity it is necessary to take into account the coherent radiation time duration. The width and intensity of diffraction maximum depend on refracting plane number simultaneously taking part in interference at the point of observation and the number of these planes mainly depend on coherent radiation duration.

Keywords: coherence, interference, coherence duration, wave train, intensity, height and width of diffraction maximum.