

П. А. Безирганян

**Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей
для конечного кристалла**

(Представлено академиком В. А. Амбарцумяном 29. VII. 1959)

Как известно, задача динамической теории интерференции рентгеновских лучей решена только для плоско-параллельной неограниченной кристаллической пластинки (для случая, когда кристалл ограничен двумя параллельными бесконечными плоскостями). Определена зависимость интенсивности отраженных волн от толщины только такой кристаллической пластинки (1-3).

Однако у реального кристалла ограничена не только толщина, но и ширина и длина. Возникает естественный вопрос — как зависит интенсивность отраженных волн от ширины и длины отражающего кристалла?

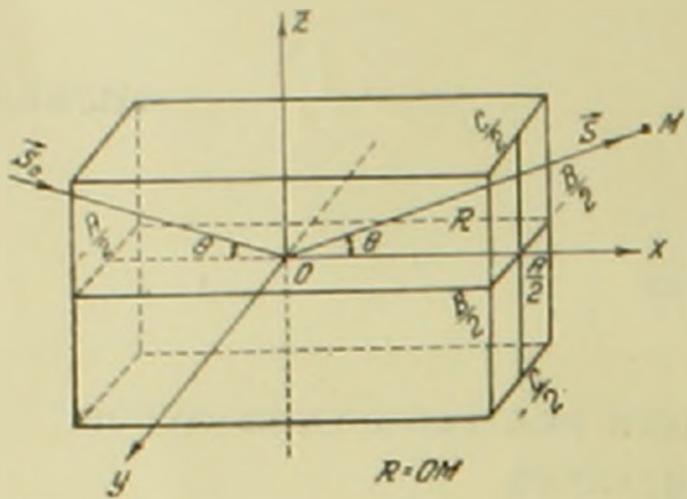
Доказано (4,5), что интенсивность отраженных волн не зависит от длины и ширины отражающего кристалла, т. е. от размеров отражающих плоскостей, только в том случае, если размеры кристалла (ширина и длина) больше, чем 10^{-2} см и что кинематическая теория интерференции рентгеновских лучей (теория Лауэ) верна только для кристаллов, размеры которых меньше, чем 10^{-4} см. Следовательно, для кристаллов, размеры которых больше 10^{-5} см и меньше 10^{-2} см, невозможно точно определить интенсивность отраженных волн ни по расчетам кинематической теории, ни по расчетам динамической теории. Далее доказано, что поправка Дарвина к формуле Лауэ на первичную экстинкцию для таких кристаллов также неверна.

В настоящей работе решена задача динамической теории интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла.

Пусть плоская монохроматическая волна падает на кристалл в направлении единичного вектора \vec{S}_0 (фиг. 1) и точка наблюдения из начала координат видна в направлении \vec{S} . Допустим, что вектора \vec{S}_0 и \vec{S} имеют следующие направляющие косинусы:

$$\vec{S}_0 (\cos\theta, 0, -\sin\theta), \quad \vec{S} (\cos\theta, 0, \sin\theta).$$

Отражающие плоскости кристалла параллельны плоскости xoy . Размеры кристалла в направлениях x , y и z соответственно равны A , B и C , периоды кристалла в направлениях x , y и z соответственно равны a , b и c . Если падающая волна в начале координат $(0, 0, 0)$



Фиг. 1.

имеет вид e^{ikct} , т. е. амплитуда падающей волны в этой точке равна единице, то волна, отраженная от плоскости кристалла, совпадающей с плоскостью xoy , будет:

$$G = \frac{n}{R} \cdot \frac{e^2}{mc^2} f(2\theta, k) \exp [ik(ct - R)] \times$$

$$\times \int_{-\frac{A}{2}}^{\frac{A}{2}} \exp \left(-ik \frac{x^2 \sin^2 \theta}{2R} \right) dx \times$$

$$\times \int_{-\frac{B}{2}}^{\frac{B}{2}} \exp \left(-ik \frac{y^2}{2R} \right) dy$$

или

$$G = \frac{n}{R} \frac{e^2}{mc^2} f(2\theta, k) \int_0^A \exp \left(-ik \frac{x^2 \sin^2 \theta}{2R} \right) dx \times$$

$$\times \int_0^B \exp \left(-ik \frac{y^2}{2R} \right) dy,$$

где n — число атомов на единицу площади плоскости. Амплитуда этой волны будет

$$G_0 = \frac{n}{R} \frac{e^2}{mc^2} f(2\theta, k) \int_0^A \exp \left(-ik \frac{x^2 \sin^2 \theta}{2R} \right) dx \int_0^B \exp \left(-ik \frac{y^2}{2R} \right) dy,$$

откуда, после простых преобразований, получим:

$$G_0 = \frac{n \cdot e^2}{2mc^2 \sin^2 \theta} f(2\theta, k) \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin^2 \theta} \cdot R} \exp \left(-i \frac{\pi}{2} x^2 \right) dx \times$$

$$\times \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} \cdot B} \exp \left(-i \frac{\pi}{2} y^2 \right) dy.$$

В общем случае эта амплитуда комплексная, вещественная и мнимая части которой выражаются следующим образом:

$$G_0' = \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \cos \frac{\pi}{2} x^2 dx \times \right. \\ \left. \times \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \cos \frac{\pi}{2} y^2 dy - \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx \cdot \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \sin \frac{\pi}{2} y^2 dy \right\};$$

$$G_0'' = - \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(2\theta, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \cos \frac{\pi}{2} x^2 dx \times \right. \\ \left. \times \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \sin \frac{\pi}{2} y^2 dy + \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \cos \frac{\pi}{2} y^2 dy \right\},$$

где $G_0 = G_0' + iG_0''$.

Амплитудой волны, отраженной от этой же плоскости в направлении падающего пучка, будет

$$\Sigma_0' = \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(0, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \cos \frac{\pi}{2} x^2 dx \times \right.$$

$$\left. \times \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \cos \frac{\pi}{2} y^2 dy - \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx \cdot \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \sin \frac{\pi}{2} y^2 dy \right\},$$

$$\Sigma_0'' = - \frac{n\lambda e^2}{2mc^2 \sin\theta} f(0, k) \left\{ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin\theta} A} \cos \frac{\pi}{2} x^2 dx \cdot \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}} B} \sin \frac{\pi}{2} y^2 dy + \right.$$

$$+ \left. \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin \theta} A} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} B}} \cos \frac{\pi}{2} y^2 dy \right\},$$

где Σ_0' и Σ_0'' — вещественная и мнимая части амплитуды Σ_0 этой волны.

Случай непоглощающего кристалла. Составив и решив разностные (рекуррентные) уравнения, в случае непоглощающего и неполярного кристалла, получим (6), (7):

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{G_0' + iG_0''}{1 - x(1 + \Sigma_0' + i\Sigma_0'') \exp(-ikd \sin \theta)}, \quad (1)$$

где

T_0 — амплитуда падающей волны на поверхности кристалла,
 S_0 — амплитуда отраженной от кристалла волны на поверхности кристалла.

x — определяется с помощью следующего уравнения:

$$T_r = T_0 x^r,$$

где T_r — амплитуда волны, распространяющейся в направлении первичного пучка, над плоскостью $r + 1$,

d — межплоскостное расстояние отражающих плоскостей.

Имея в виду, что:

а) коэффициент преломления рентгеновских лучей очень мало отличается от единицы, следовательно и угол θ мало отличается от угла θ_0 , где θ_0 — угол, удовлетворяющий уравнению Вульфа — Брегга ($2d \sin \theta_0 = n\lambda$);

б) величина x по абсолютной величине должна быть меньше единицы и мало отличаться от единицы,

в) G_0' , G_0'' , Σ_0' и Σ_0'' — малые величины, уравнение (1) можно привести к следующему виду

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{G_0'' - iG_0'}{i\Sigma_0'' - \Sigma_0' + dk(\sin \theta - \sin \theta_0) \pm L},$$

где $L = \sqrt{[i\Sigma_0'' - \Sigma_0' + dk(\sin \theta - \sin \theta_0)]^2 - (iG_0' - G_0'')^2}$. (2)

Разность синусов можно преобразовать следующим образом:

$$\sin \theta - \sin \theta_0 = 2 \cos \frac{\theta - \theta_0}{2} \sin \frac{\theta - \theta_0}{2} \approx (\theta - \theta_0) \cos \theta_0.$$

Имея в виду (3), из (2) получим

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{G_0'' - iG_0'}{i\Sigma_0'' - \Sigma_0' + dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 \pm L_1},$$

где

$$L_1 = \sqrt{|i\Sigma_0' - \Sigma_0'' + dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0|^2 - (iG_0' - G_0'')^2}. \quad (4)$$

Знак у квадратного корня выбирается так, чтобы имело место

$$\left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 < 1. \quad (5)$$

Для определения интенсивности найдем квадрат модуля

$$\left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 = \left| \frac{G_0' - iG_0''}{i\Sigma_0' - \Sigma_0'' + dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 \pm L_1} \right|^2. \quad (6)$$

Знаменатель последнего уравнения можно записать в виде:

$$\begin{aligned} & i\Sigma_0' - \Sigma_0'' + dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 \pm \\ & \pm \sqrt{|i\Sigma_0' - \Sigma_0'' + dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0|^2 - (iG_0' - G_0'')^2} = \\ & = \sqrt{|dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''|^2 + (\Sigma_0')^2} \cdot e^{i\varphi_1} \pm \\ & = \sqrt{\{2\Sigma_0' |dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''| + 2G_0' G_0''\}^2 + L_2} \cdot e^{i\varphi_2}, \end{aligned}$$

где

$$L_2 = \{|dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''|^2 + (G_0')^2 - (\Sigma_0')^2 - (G_0'')^2\}^2, \quad (7)$$

$$\operatorname{tg} \varphi_1 = \frac{\Sigma_0'}{dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''}, \quad (8)$$

$$\operatorname{tg} \varphi_2 = \frac{2\Sigma_0' |dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''| + 2G_0' G_0''}{|dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''|^2 + (G_0')^2 - (\Sigma_0')^2 - (G_0'')^2}. \quad (9)$$

Имея в виду (7), (8) и (9), из (6) получим

$$\left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 = \frac{[G_0']^2 + [G_0'']^2}{U + W + V}, \quad (10)$$

где

$$U = |dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''|^2 + (\Sigma_0')^2, \quad (11)$$

$$W = \pm \sqrt{\{2\Sigma_0' |dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0''| + 2G_0' G_0''\}^2 + L_2}, \quad (12)$$

$$V = 2 \sqrt{UW} \cdot \cos(\varphi_1 - \varphi_2). \quad (13)$$

Для сравнения с результатами теории Дарзина вычислим интенсивность в дифракционном максимуме при отражении рентгеновских лучей $M_0 K_{\alpha_1}$ от кристалла кальцита. Вычислим структурный фактор для кальцита (плоскости (211)), имея в виду, что кальцит состоит из перемежающихся плоскостей Ca, C и O-атомов. Как известно, в единичной ячейке кальцита содержится 10 атомов, имеющих следующие координаты:

$$2Ca \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4} \right) \\ 2C \left(0, 0, 0 \right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (14)$$

$$6O \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0 \right), \left(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4} \right), \left(0, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4} \right) \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2} \right) \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \right).$$

В этом случае в выражениях (10) вместо атомных факторов надо взять структурные факторы, которые через атомные факторы выражаются следующим образом:

$$G_0 = D (a_1 b_1 - a_2 b_2) \left\{ \sum_i f_{Ca} (2\theta, k) e^{i2\pi N (hx_j + ky_j + lz_j)} + \right. \\ \left. + \sum_j f_C (2\theta, k) e^{i2\pi N (hx_j + ky_j + lz_j)} + \sum_j f_O (2\theta, k) e^{i2\pi N (hx_j + ky_j + lz_j)} \right\},$$

где N — порядок отражения,

x_j, y_j, z_j — координаты атома j в единичной ячейке,

(h, k, l) — индексы Миллера отражающих плоскостей.

Имея в виду координаты (14), из последнего для $N = 1$, получим:

$$\Sigma_0' = D (a_1 b_1 - a_2 b_2) 2 |f_{Ca} (0, k) + f_C (0, k) + f_O (0, k)|,$$

$$\Sigma_0'' = -D (a_1 b_2 + a_2 b_1) 2 |f_{Ca} (0, k) + f_C (0, k) + f_O (0, k)|,$$

$$G_0' = D (a_1 b_1 - a_2 b_2) 2 |f_{Ca} (2\theta, k) + f_C (2\theta, k) + f_O (2\theta, k)|,$$

$$G_0'' = -D (a_1 b_1 + a_2 b_1) 2 |f_{Ca} (2\theta, k) + f_C (2\theta, k) + f_O (2\theta, k)|,$$

где

$$a_1 = \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin \theta \cdot A}} \cos \frac{\pi}{2} x^2 dx, \quad a_2 = \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \sin \theta \cdot A}} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx,$$

$$b_1 = \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R} \cdot B}} \cos \frac{\pi}{2} y^2 dy, \quad b_2 = \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\lambda R}}} \sin \frac{\pi}{2} y^2 dy, \quad D = \frac{n \lambda e^2}{2 m c^2 \sin \theta}.$$

Для кальцита, в случае падающей волны $M_0 K \alpha_1$ ($\lambda = 0,708 \text{ \AA}$), из экспериментальных данных известны (6)

$$\frac{f_{Ca} (2\theta, k)}{f_{Ca} (0, k)} = 0,768; \quad \frac{f_C (2\theta, k)}{f_C (0, k)} = 0,65 \quad \text{и} \quad \frac{f_O (2\theta, k)}{f_O (0, k)} = 0,775.$$

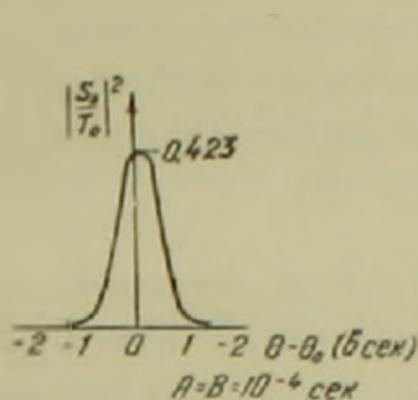
Рассчитали $\left| \frac{S}{T} \right|^2$ в зависимости от θ для следующих двух случаев:

первый случай — $R = 8$ см, $A = B = 10^{-4}$ см, $\lambda = 0,708$ Å,

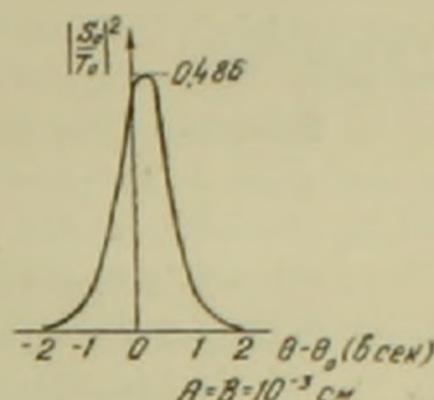
второй случай — $R = 8$ см, $A = B = 10^{-3}$ см, $\lambda = 0,708$ Å.

Результаты расчетов представлены на фиг. 2 и 3.

Согласно динамической теории Дарвина в случае непоглощающего кристалла получается полное отражение, направление максимального отражения и коэффициент преломления рентгеновских лучей не зависят от размеров отражающего кристалла.



Фиг. 2.



Фиг. 3.

Однако исследование выражения (10) показывает, что в случае ограниченного кристалла (реальный кристалл):

а) полное отражение не получается (фиг. 2 и 3) и интенсивность отраженной волны зависит от размеров отражающего кристалла, пока размеры кристалла меньше, чем $10^{-2} - 10^{-1}$ см (в зависимости от длины волны, фиг. 2 и 3);

б) максимальное отражение получается в случае

$$dk(\theta - \theta_0)\cos\theta_0 - \Sigma_0'' = 0,$$

откуда, для направления максимального отражения, получается

$$\theta = \theta_0 + \frac{\Sigma_0''}{dk\cos\theta_0}, \quad (15)$$

т. е. направление и ширина области максимального отражения до тех пор зависят от размеров кристалла, пока эти размеры меньше $10^{-2} - 10^{-1}$ см;

в) коэффициент преломления рентгеновских лучей зависит от размеров кристалла и выражается следующей формулой

$$\mu = 1 + \frac{\sin\theta_0}{dk} \Sigma_0', \quad (16)$$

В случае неограниченного кристалла выражения (10), (15) и (16) совпадают с соответствующими выражениями динамической теории Дарвина, т. е. результаты динамической теории Дарвина получаются из (10), (15) и (16) как частный случай.

Ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի դինամիկ տեսությանը վերջավոր բյուրեղի համար

Ռենտգենյան ճառագայթների ինտերֆերենցիայի դինամիկ տեսության խնդիրը լուծված էր միայն հարթ-գուգահեռ անսահմանափակ բյուրեղի դեպքում: Տվյալ աշխատանքում լուծված է ռենտգենյան ճառագայթների դինամիկ տեսության խնդիրը վերջավոր բյուրեղի համար կյանման քաղկայությունների դեպքում:

Ստացված է արտահայտություններ բյուրեղից անդրադարձած դուռար ալիքի ամպլիտուդայի և ինտենսիվության համար: Լուծման արդյունքներից կարելի է անել հետևյալ հետևությունները.

ա) լրիվ անդրադարձում չի ստացվում և անդրադարձած ալիքի ինտենսիվությունը կախված է բյուրեղի շափերից, քանի դեռ անդրադարձնող բյուրեղի շափերը փոքր են $10^{-2} - 10^{-1}$ սանտիմետրից (կախված ալիքի երկարությունից):

բ) մաքսիմալ անդրադարձում ստացվում է այն դեպքում, երբ բախարարվում է

$$dk(\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \sum_j = 0$$

սլայմանը.

որտեղ θ_0 -ն Վույֆի Բրեյի անկյունն է.

\sum_j -ն անդրադարձած ալիքի ամպլիտուդայի կեղծ մասն է.

d -ն անդրադարձնող հարթությունների միջև եղած հեռավորությունն է.

իսկ k -ն ալիքային թիվն է.

գ) Ռենտգենյան ճառագայթների բեկման ցուցիչը նույնպես կախված է բյուրեղի ափերից:

Անսահմանափակ բյուրեղի դեպքում տվյալ աշխատանքում ստացված բանաձևերը համընկնում են Դարվինի համապատասխան բանաձևերի հետ:

ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

¹ С. С. Дарвин, Phil. Mag., 27, 315 (1914). ² М. Von Laue, Röntgenstrahl-interferenzen (1948). ³ Н. Zachariasen, Theory of X-ray Giffraction in Crystals. ⁴ П. А. Безурганян, Диссертация, МГУ, 1953. ⁵ П. А. Безурганян и И. Б. Боровский, Известия АН АрмССР (серия физ.-мат. наук), т. XIII, № 1 (1960). ⁶ А. Комптон и С. Алисон Рентгеновские лучи, теория и эксперимент, ОИИЗ, 1941. ⁷ Г. С. Жданов, Основы рентгеновского гострук турного анализа (1940).