2U34U4UV UUR ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԳԵՄԻԱՅԻ ՉԵԿՈՒՅՑՆԵՐ ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

XXXI

## 1960

ФИЗИКА

4

## П. А. Безирганян

## Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла

[Представлено академиком В- А. Амбарцумяном 7. IX 1960]

В статье (<sup>1</sup>) мы рассчитали интенсивность волн, отраженных от ограниченного кристалла в случае отсутствия поглощения. Теперь мы рассмотрим случай поглощающего кристалла.

Как известно, в случае поглощающего кристалла функция атомного рассеяния *f*, а, следовательно, и коэффициент преломления станут комплексными:

$$f = f' + if'', \quad n = n' + in''.$$

В этом случае для вещественной и мнимой частей амплитуды волны, отраженной от плоскости кристалла, совпадающей с плоскостью ХОУ {см. (1)}, получим

$$\begin{split} G_0' &= D\left[f'\left(2\theta, k\right)\left(a_1b_1 - a_2b_2\right) + f''\left(2\theta, k\right)\left(a_1b_2 + a_2b_1\right)\right] \\ G_0^* &= D\left[f''\left(2\theta, k\right)\left(a_1b_1 - a_2b_2\right) - f'\left(2\theta, k\right)\left(a_1b_2 + a_2b_1\right)\right] \\ \Sigma_0' &= D\left[f'\left(0, k\right)\left(a_1b_1 - a_2b_2\right) + f''\left(0, k\right)\left(a_1b_2 + a_2b_1\right)\right] \\ \Sigma_0^* &= D\left[f''\left(0, k\right)\left(a_1b_1 - a_2b_2\right) - f'\left(0, k\right)\left(a_1b_2 + a_2b_1\right)\right] \\ G_0 &= G_0' + iG_0^* \quad \text{M} \quad \Sigma_0 = \Sigma_0' + i\Sigma_0^*. \end{split}$$

Здесь *D*, *a*<sub>1</sub>, *b*<sub>1</sub>, *a*<sub>2</sub> и *b*<sub>2</sub> имеют прежние значения (<sup>1</sup>). *G*<sub>0</sub> — амплитуда волны, отраженной в направлении 20, *Σ*<sub>0</sub> — амплитуда волны, отраженной в направлении падающей волны.

Вещественную и мнимую части функции атомного рассеяния можно определить следующим образом. Ясно, что эти вещественная и мнимая части не зависят ог размеров отражающего кристалла, так как комплексность функции рассеяния зависит только от собственных частот рассеивающих электронов и от частоты падающей (первичной) волны. Если собственные частоты рассеивающих электронов (диполей) намного больше или намного меньше частоты падающей волны, то функция атомного рассеяния вещественная, а если эти частоты сравнимы, то функция атомного рассеяния станет комплексной. 227 В теории Дарвина при определении коэффициента преломления учитывается взаимодействие только между падающей и в ее направлении однократно отраженной волнами. Следовательно, коэффициент преломления, определяемый теорией Дарвина, не зависит существенным образом от расположения узлов в кристаллической структуре. Пока не выполняются условия отражения и не возникает диффрагированный пучок, показатель преломления кристалла будет равен показателю преломления для аморфного вещества того же состава и той же плотности (<sup>2</sup>).

С другой стороны, для коэффициента преломления аморфного тела по классической теории получается следующее выражение (<sup>3</sup>):

$$n=2\delta-i2\beta,$$

где

$$\delta = \sum_{q} \delta_{q} = -\sum_{q} \frac{2\pi n_{q} e^{2} mc^{2} (K_{q}^{2} - K^{2})}{m^{2} c^{4} (K_{q}^{2} - K^{2})^{2} + 4e^{4} K^{6}/9}$$

 $\rho = \nabla \rho = \nabla \qquad 4\pi n_q e^4 K^3$ 

$$p = \sum_{q} p_{q} = \sum_{q} \frac{3}{3} \left\{ m^{2} c^{4} \left( K_{q}^{2} - K^{2} \right)^{2} + 4 e^{4} K^{6} / 9 \right\}$$

где  $n_q$  — число электронов с собственной частотой  $v_q$ . В случае рентгеновских лучей  $v_q$  и  $K_q$  может относиться к границам поглощения K, L, M и т. д. Необходимо отметить, что, как это следует из вышесказанного, как в теории Дарвина, так и в электронной теории, коэфициент преломления определяется для аморфной бесконечной среды. Следовательно, мы можем сопоставить выражения коэффициента преломления, полученные в этих двух теориях и определить мнимые и действительные части функции рассеяния.

Действительно, теория Дарвина дает:

$$n = 1 - \frac{2\pi n e^2}{m\omega^2} f(0, k) = 1 - \frac{2\pi n e^2}{m\omega^2} f'(0, k) - i \frac{2\pi n e^2}{m\omega^2} f''(0, k), \qquad (3)$$

из (2) и (3) получим:

$$\frac{\lambda^2 n e^2}{4\pi m c^2} f'(0,k) = -\sum_{m'} \frac{2\pi n_q e^2 m c^2 (K_q^2 - K^2)}{m^2 c^4 (K_q^2 - K^2)^2 + 4e^4 K^6 / 9}$$

$$\frac{\lambda^2 n e^2}{4\pi m c^2} f''(0,k) = \sum_{m'} \frac{4\pi n_q e^4 K^3}{3 (m^2 c^4 (K_q^2 - K^2)^2 + 4e^4 K^6 / 9)}$$

(4)

где *n* — число атомов на единицу объема. Таким образом, с помощью (1) и (4) можем определить  $\Sigma_0$  и  $\Sigma_0$ . Для определения  $G_0$  и  $G_0$  с помощью (1) составим следующие отношения:

228

$$\frac{G_{0}}{\Sigma_{0}} = \frac{f'(20, k) \left[1 + \frac{f''(20, k) (a_{1}b_{2} + a_{2}b_{1})}{f'(20, k) (a_{1}b_{1} - a_{2}b_{2})}\right]}{f'(0, k) \left[1 + \frac{f''(0, k) (a_{1}b_{2} + a_{2}b_{1})}{f'(0, k) (a_{1}b_{1} - a_{2}b_{2})}\right]}$$
(5)

где  $\frac{f''(20, k)}{f'(20, k)}$  и  $\frac{f''(0, k)}{f'(0, k)}$  тангенсы угла изменения фазы излучения соответственно в направлениях падающей и отраженной под углом 20 волн. Предполагая, как это делает Джеймс, что это изменение фазы одинаково для всех углов рассеяния для данной электронной группы, из (5) получим:

$$G'_{0} = \frac{f'(2\theta, k)}{f'(0, k)} \Sigma'_{0}.$$
(6)

Точно таким же образом получим:

$$G_0 = \frac{f''(2\theta, k)}{f''(0, k)} \Sigma_0^{-}.$$
(7)

Далее, согласно нашему предположению, получим:

$$f''(20, k) = f''(0, k)$$

$$f'(20, k) = f'(0, k)$$

или

$$\frac{f''(20, k)}{f''(0, k)} = \frac{f'(20, k)}{f'(0, k)} = \frac{f(20, k)}{f(0, k)}$$
(8)

Повторяя соответствующие выкладки, сделанные в (1) для интенсивности волны, отраженной от ограниченного кристалла, как и в первом случае, получим:

$$\left|\frac{S}{T}\right|^2 = \frac{|G_0'|^2 + |G_0'|^2}{U+W+V},$$
(9)

где

$$U = [dk(0 - \theta_0)\cos\theta_0 - \Sigma_0^*]^2 + [\Sigma_0]^2, \qquad (10)$$

$$W = V \left\{ 2\Sigma_{0}^{*} \left[ ak \left( \theta - \theta_{0} \right) \cos \theta_{0} - \Sigma_{0}^{*} \right] + 2G_{0}^{*} G_{0}^{*} \right\}^{2} + L \right\}$$

$$L = V \left\{ \left[ ak \left( \theta - \theta_{0} \right) \cos \theta_{0} - \Sigma_{0}^{*} \right]^{2} + \left[ G_{0}^{*} \right]^{2} - \left[ G_{0}^{*} \right]^{2} - \left[ \Sigma_{0}^{*} \right]^{2} \right\}^{2} \right\}, \quad (11)$$

$$V = 2 \sqrt{UW} \cos(\varphi_1 - \varphi_2), \qquad (12)$$

$$\operatorname{tg}_{\tau_1} = \frac{\Sigma_0}{dk \left(\theta - \theta_0\right) \cos \theta_0 - \Sigma_0}$$
(13)

$$2\Sigma'_{0}\left[dk\left(\theta-\theta_{0}\right)\cos\theta_{0}-\Sigma'_{0}\right]+2G'_{0}G'_{0}$$

29



# Для сравнения с результатами, полученными по методу Прииса ()

для поглощающего кристалла, вычислим интенсивность в диффракционном максимуме при отражении рентгеновских лучей *М*<sub>о</sub>Ка<sub>1</sub> снова от кристалла кальцита.

В случае кальцита δ и β можно подсчитать следующим образом:

$$\delta = 2\delta C_a + 2\delta c + 6\delta_0$$
  

$$\beta = 2\beta C_a + 2\beta c + 6\beta_0$$
(15)

где 4, и 3, соответствующие части показателя преломления вещества, состоящего только из одного сорта атомов.

Так как длина волны  $M_0 K_{2_1}$  досгаточно далека от K границы поглощения *Ca*, *C* и 0. то величины, входящие в (15), с помощью (2) можно определить следующим образом (<sup>1</sup>):

$$\delta c_a = \frac{5N\rho e^{2\lambda^2}}{\pi m c^2 M}, \quad \delta c = \frac{3}{2} \frac{N\rho e^{2\lambda^2}}{\pi m c^2 M}; \quad \delta_0 = \frac{2N\rho e^{2\lambda^2}}{\pi m c^2 M},$$

$$\beta c_a = \frac{20N\rho e^{4\lambda}}{3m^2 c^4 M}; \quad \beta_c = \frac{2Ne^{4\lambda\rho}}{m^2 c^4 M}; \quad \beta_0 = \frac{8N\rho e^{4\lambda}}{3m^2 c^4 M},$$
(16)

где N — число Авогадро,

р — плотность кальцита,

М — молекулярный вес кальцита. Таким образом, из (5) и (16) получим:

$$f_{C_{a}}(0,k) = \frac{4\pi mc^{2}\delta_{C_{a}}}{\lambda^{2}ne^{2}}, \quad c(0,k) = \frac{4\pi mc^{2}\delta_{C}}{\lambda^{2}ne^{2}}, \quad f_{0}(0,k) = \frac{4\pi mc^{2}\delta_{0}}{\lambda^{2}ne^{2}}, \quad (17)$$

$$f_{C_{a}}(0,k) = \frac{4\pi mc^{2}\beta_{C_{a}}}{\lambda^{2}ne^{2}}; \quad f_{C}(0,k) = \frac{4\pi mc^{2}\beta_{C}}{\lambda^{2}ne^{2}}; \quad f_{C_{a}}(0,k) = \frac{4\pi mc^{2}\beta_{0}}{\lambda^{2}ne^{2}}.$$

Для вещественных и мнимых частей структурного фактора (плоскости (211)) получим:

$$f' \ 0, k) = 2 [f'_{C_a}(0, k) + f_C(0, k) + f' \ 0, z$$

$$f'' (0, k) = 2 [f_{C_a}(0, k) + f'_C(0, k) + f'_0(0, k)]$$

$$f' (2\theta, k) = 2 [f'_{C_a}(2\theta, k) + f_C(2\theta, k) + f_0(2\theta, k)]$$

$$f'' (2\theta, k) = 2 [f_{C_a}(2\theta, k) + f_C(2\theta, k) + f'_0(2\theta, k)]$$
(18)

Из экспериментальных данных известны (3)

$$\frac{f_{C_a}(2\theta, k)}{f_{C_a}(0, k)} = 0,768; \quad \frac{f_c(2\theta, k)}{f_c(0, k)} = 0,65 \quad \text{is} \quad \frac{f_0(2\theta, k)}{f_0(0, k)} = 775.$$
(19)

Следовательно, с помощью (8), (17), (18) и (19) можем определить f(20, k) и f''(20, k).



# в зависимости от 0 снова для следующих двух

случаев:

230

Первый случай:  $k = 8 \, cm$ ,  $A = B = 10^{-4} \, cm$ ,  $\lambda = 0.708 \, A^\circ$ . Второй случай:  $k = 8 \, c_M$ ,  $A = B = 10^{-3} \, c_M$ ,  $\lambda = 0,708 \, A^\circ$ .

Результаты расчетов представлены на фиг. 1 и 2. Из результатов этих расчетов в случае ограниченного поглощающего кристалла можно слелать следующие выводы.

1. Как известно, в теории Дарвина в случае поглощающего кристалла (метод Прииса) получается несимметричное отражение — плоская область полного отражения исчезает, однако в данном случае-в случае ограниченного поглощающего кристалла, как и в случае ограниченного непоглощающего кристалла, область отражения остается симметричной, т. е. в случае ограниченного кристалла кривые отраже-



A=B=10 CM

A=B=10 CM

Фиг. 1.

Фиг. 2.

ния симметричны как при наличии, так и при отсутствии поглощения.

2. В случае ограниченного поглощающего кристалла интенсивность отраженных волн уменьшается за счет поглощения (фиг. 1 и 2), однако это уменьшение для излучения М.К., и для кристалла кальцита незначительно, так как длина волны  $M_0K_{a_1}$  достаточно далека от краев поглощения Са, О и С.

3. Коэффициент преломления в этом случае зависит как от размеров отражающего кристалла, так и от величины поглощения-чем больше поглощение, тем меньше коэффициент преломления и выражается следующей формулой:

$$\mu = 1 + \frac{\sin \theta_0}{dk} D \left[ f''(0, k) \cdot (a_1 b_1 - a_2 b_2) - f'(0, k) \cdot (a_1 b_2 - a_2 b_1) \right].$$

4. С увеличением поглощения направление максимального отражения приближается к Вульф-Бреговскому направлению.

Ереванский государственный университет

### ጣ· Z· ԲኔԶԻՐԳԱՆՅԱՆ

## Ռենոգենյան ճառագայթների ինոերֆերենցիայի դինամիկ հետությունը վեւջավու բյուբեղի համար

Հողվածում բննարկվում է ռենտղենյան ճառագայթների ինտերֆնրենցիայի դինամիկ mbune Binebe depourdant & yimbang pinetade abupanes: Քննարկման արդյունքներից արվում է հետևյալ եզրակացությունները:



1. Ինչպես հայտնի է Դարվինի տեսության մեջ կլանող թյուրեղի դեպքում ատացվում է ոչ սիմետրիկ անդրադարձում՝ անդրադարձման հարթի տիրույթը անհետանում է սակայն տվյալ դեպքում՝ կլանող սահմանափակ բյուրեղի դեպքում, անդրադարձման ակրույթը ճնում է սիմետրիկ:

2. Կլանող սահմանափակ թյուրնդի դեպքում անդրադարձած ձառադայթների ինտենսիվությունը փոքրանում է ի հաշիվ կլանման, սակայն այդ փոքրացումը M<sub>o</sub>Ka<sub>1</sub> ձառագայթման համար կալցիտի թյուրեդի դեպքում աննշան է, որովհետև MoKa<sub>1</sub> ալիքի նթկարությունը րավականաշափ հեռու է Ca-ի, O-ի, և C-ի կլանման աղթյութից։

3. Այս ղեպբում բեկման ցուցիչը կախված է ինչպես բյուբեղի չափևըից, այնպես էլ կլանման մեծությունից՝ կլանման մեծացումից բեկման ցուցիչը փոբրանում է։ Բեկման ցուցիչը այս դեպբում արտանայտվում է նետևյալ բանաձևով՝

$$\mu = 1 + \frac{\sin \theta o}{a_R} D[f^*(o,k)(a_1b_1 - a_2b_2) - f'(o_1k)(a_1b_2 - a_2b_1)]:$$

4. կլանման մեծացմամը մեծազույն անգրազարձման ուզզունյունը մոտենում է Վուլֆ-Բըեզյան ուզզունյանը:

#### ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

<sup>1</sup> П. А. Безирганян, ДАН АрмССР т. ХХІХ, № 5, (1959). <sup>2</sup> Р. Джеймс, Оптические принципы диффракции рентгеновских лучей. <sup>3</sup> А. Комптон и С. Алисон, Рентгеновские лучи, теория и эксперимент. <sup>4</sup> Принс, Zs. Phys. 63, 477 (1930).



