XXXI 1960 4

ФИЗИКА

П. А. Безирганян

Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей для конечного кристалла

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

В статье (¹) 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:

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

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

$$\begin{split} G_0' &= D \left[f' \left(2\theta, \, k \right) \left(a_1 b_1 - a_2 b_2 \right) + f'' \left(2\theta, \, k \right) \left(a_1 b_2 + a_2 b_1 \right) \right] \\ G_0' &= D \left[f'' \left(2\theta, \, k \right) \left(a_1 b_1 - a_2 b_2 \right) - f' \left(2\theta, \, k \right) \left(a_1 b_2 + a_2 b_1 \right) \right] \\ \Sigma_0' &= D \left[f' \left(0, \, k \right) \left(a_1 b_1 - a_2 b_2 \right) + f'' \left(0, \, k \right) \left(a_1 b_2 + a_2 b_1 \right) \right] \\ \Sigma_0' &= D \left[f'' \left(0, \, k \right) \left(a_1 b_1 - a_2 b_2 \right) - f' \left(0, \, k \right) \left(a_1 b_2 + a_2 b_1 \right) \right] \\ G_0 &= G_0' + i G_0' \quad \text{M} \quad \Sigma_0 = \Sigma_0' + i \Sigma_0'. \end{split}$$

Здесь D, a_1 , b_1 , a_2 и b_2 имеют прежние значения (1). G_0 — амплитуда волны, отраженной в направлении 2θ ,

 Σ_0 — 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 от 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.

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 (2).

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

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

где

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

$$\beta = \sum_{q} \beta_{q} = \sum_{q} \frac{4\pi n_{q} e^{4} K^{3}}{3 \left[m^{2} c^{4} (K_{q}^{2} - K^{2})^{2} + 4e^{4} K^{6}/9\right]},$$
(2)

где n_q — число электронов с собственной частотой \mathbf{v}_q . В случае рентгеновских лучей \mathbf{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, коэффициент 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:

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

из (2) и (3) получим:

$$\frac{\lambda^{2}ne^{2}}{4\pi mc^{2}}f'(0,k) = -\sum \frac{2\pi n_{q} e^{2}mc^{2} (K_{q}^{2} - K^{2})}{m^{2}c^{4}(K_{q}^{2} - K^{2})^{2} + 4e^{4}K^{6}/9}$$

$$\frac{\lambda^{2}ne^{2}}{4\pi mc^{2}}f''(0,k) = \sum \frac{4\pi n_{q} e^{4}K^{3}}{3\{m^{2}c^{4}(K_{q}^{2} - K^{2})^{2} + 4e^{4}K^{6}/9\}}$$
(4)

где п — число атомов на единицу объема.

Таким образом, с помощью (1) и (4) можем определить Σ_0 и Σ_0 . Для определения G_0 и G_0 с помощью (1) составим следующие отношения:

$$\frac{G_0'}{\Sigma_0'} = \frac{f'(20, k) \left[1 + \frac{f''(20, k) (a_1 b_2 + a_2 b_1)}{f'(20, k) (a_1 b_1 - a_2 b_2)}\right]}{f'(0, k) \left[1 + \frac{f''(0, k) (a_1 b_2 + a_2 b_1)}{f'(0, k) (a_1 b_1 - a_2 b_2)}\right]} \tag{5}$$

где $\frac{f''(20,k)}{f'(20,k)}$ и $\frac{f''(0,k)}{f'(0,k)}$ тангенсы угла изменения фазы излучения со-

ответственно 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:

$$G_{0}' = \frac{f'(20, k)}{f'(0, k)} \Sigma_{0}'$$
(6)

Точно таким же образом получим:

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

Далее, согласно нашему предположению, получим:

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

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

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

$$W = V \left\{ \frac{2\Sigma_0' \left[ak \left(\theta - \theta_0 \right) \cos \theta_0 - \Sigma_0 \right] + 2G_0 G'' \right\}^2 + L}{2}$$

$$L = V + \frac{1}{|ak(b - b_0)\cos b_0 - \Sigma_0|^2 + |G_0|^2 - |G_0|^2 - |\Sigma_0'|^2|^2}, \quad (11)$$

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

$$tg \varphi_1 = \frac{\Sigma_0'}{dk (\theta - \theta_0) \cos \theta_0 - \Sigma_0'}$$
 (23)

$$tg 2\varphi_2 = \frac{2\Sigma_0' \left[dk(\theta - \theta_0)\cos\theta_0 - \Sigma_0'\right] + 2G_0'G_0}{\left[dk(\theta - \theta_0)\cos\theta_0 - \Sigma_0\right]^2 + \left[G_0\right]^2 - \left[G_0\right]^2 - \left[\Sigma_0\right]^2} \tag{14}$$

Для сравнения с результатами, полученными по методу Прииса (1)

для поглощающего кристалла, вычислим интенсивность в диффракционном максимуме при отражении рентгеновских лучей $M_0K\alpha_1$ 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 о и з соответствующие части показателя преломления вещества, состоящего только из одного сорта атомов.

Так как длина волны M_0K_{2} , достаточно далека от K границы поглощения Ca, C и 0. то величины, входящие в (15), с помощью (2) можно определить следующим образом (1):

$$\delta_{C_a} = \frac{5N\rho e^2 \lambda^2}{\pi m c^2 M}, \quad \delta_{C} = \frac{3}{2} \frac{N\rho e^2 \lambda^2}{\pi m c^2 M}; \quad \delta_{0} = \frac{2N\rho e^2 \lambda^2}{\pi m c^2 M},$$

$$\beta_{C_a} = \frac{20N\rho e^4 \lambda}{3m^2 c^4 M}; \quad \beta_{C} = \frac{2Ne^4 \lambda \rho}{m^2 c^4 M}; \quad \beta_{0} = \frac{8N\rho e^4 \lambda}{3m^2 c^4 M}.$$
(16)

где N — число Авогадро,

р — плотность кальцита,

М — молекулярный вес кальцита.

Таким образом, из (5) и (16) получим:

$$f_{C_a}(0,k) = \frac{4\pi mc^2 \delta_{C_a}}{\lambda^2 ne^2}, \quad c(0,k) = \frac{4\pi mc^2 \delta_C}{\lambda^2 ne^2}, \quad f_0(0,k) = \frac{4\pi mc^2 \delta_0}{\lambda^2 ne^2},$$

$$f_{C_a}(0,k) = \frac{4\pi mc^2 \beta_{C_a}}{\lambda^2 ne^2}, \quad f_C(0,k) = \frac{4\pi mc^2 \beta_C}{\lambda^2 ne^2}, \quad f_{C_a}(0,k) = \frac{4\pi mc^2 \beta_0}{\lambda^2 ne^2}.$$
(17)

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

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

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

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

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

$$(18)$$

Из экспериментальных данных известны (3)

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

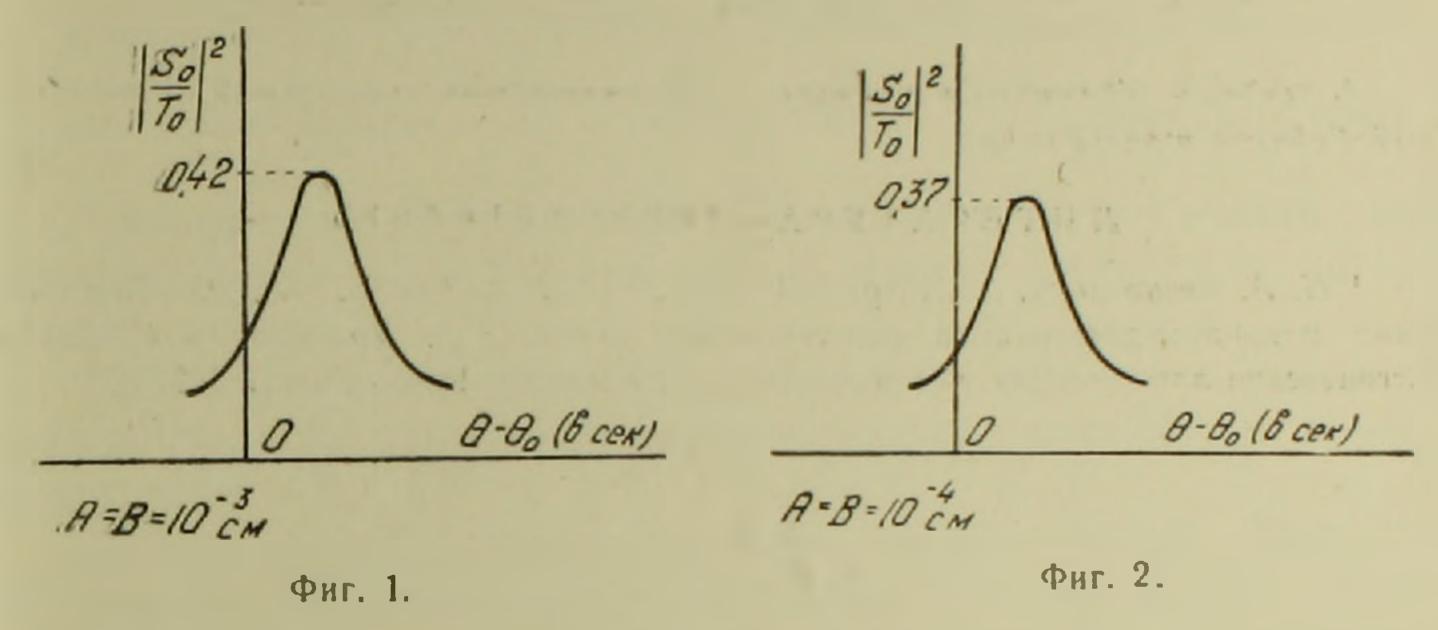
Следовательно, с помощью (8), (17), (18) и (19) можем определить $f(2\theta, k)$ и $f''(2\theta, k)$.

Рассчитали $\left\| \frac{S}{T} \right\|^2$ в зависимости от 0 снова для следующих двух случаев:

Первый случай: k=8 см, $A=B=10^{-4}$ см, $\lambda=0.708$ A° . Второй случай: k=8 см, $A=B=10^{-3}$ см, $\lambda=0.708$ A° .

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-



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 M_0K_a , и для кристалла кальцита незначительно, так как длина волны M_0K_a , достаточно далека от краев поглощения Ca, 0 и C.
- 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

Ռենոգենյան ճառագայթների ինոերֆերենցիայի դինամիկ ոեսությունը վերջավոր բյուրեղի համար

երրահիվար անվեսուրերը և հրարով եր չ բարիան թվետիանու թերուրրթենը, արոսություրը վրենավան ը ինտրով և հաշերկի մրաճուղ։ Հոմվացուղ երրանվում է սբրամբրիան ջառամանիրը իրարև ֆրերընցիանի միրադիկ

- 1. Ինչպես հայտնի է Դարվինի տեսության մեջ կլանող թյուրեղի դեպքում ստացսակայն տվյալ դեպոում՝ ևլանող սահմանափակ ըլուրեղի դեպոռւմ, անդրադարձման աչրույթը մնում է սիմետրիկ։
- 2. Կլանող սահմանափակ բյուրեղի դեպքում անդրադարձած ձառադայնների ինտենսիվությունը փոքրանում է ի հաշիվ կլանման, սակայն այդ փոքրացումը _{MoKa1} ձառազայթման համար կալցիտի բյուրեղի դեպքում աննչան է, որովհետև MoKa1 ալիքի նրկարությունը րավականաչափ հեռու է Ca-ի, O-ի, և C-ի կլանման աղբյուրից։
- 3. Այս դեպքում ընկման ցուցիչը կախված է ինչպես թյուրեղի չափևրից, այնպես էլ կլանման մեծությունից՝ կլանման մեծացումից ընկման ցուցիչը փոքրանում է։ Բնկման ցուցիչը այս դեպքում արտահայտվում է հետևյալ բանաձևով՝

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

4. Կլանման մեծացմամը մեծաղույն անդրադարձման ուղղությունը մոտենում է Վուլֆ-Բրեղյան ուղղությանը:

ЛИТЕРАТУРА — ԳРԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

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