ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

LXXVII 1983 3

УДК 539.1.01 : 548.0

ФИЗИКА

Р. С. Варданян

О применении принципа инвариантности в теории дифракции рентгеновских лучей

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Г. С. Саакяном 30/XII 1982)

В теории Дарвина дифракции рентгеновских лучей (см. например [1,2]), рассматривается отражение от кристалла, когда отражающие атомные плоскости параллельны поверхности кристалла. При решении задачи дифракции по методу Дарвина составляется следующая система уравнений „переноса" относительно T_k и S_k, где T_k, S_k амплитуды волн непосредственно над атомной плоскостью с номером k, идущих соответственно в направлении падения и отражения:

$$T_{k+1}=\sigma e^{-i\varphi}T_k+re^{-2i\varphi}S_{k+1};$$

$$S_k=\sigma e^{-i\varphi}S_{k+1}+rT_k. \tag{1}$$

Здесь r, σ соответственно коэффициенты отражения и пропускания одной атомной плоскости; $\varphi=\frac{2\pi d}{\lambda}\sin\theta$ изменение фазы волны при прохождении лучом межплоскостного расстояния (вдоль направления падения или отражения); d—расстояние между атомными плоскостями; λ—длина волны; θ—угол скольжения.

Для „полубесконечного" кристалла решение системы (1) ищется в виде

$$T_{k+1}=xT_k. \tag{2}$$

Отметим, что соотношение (2) в неявном виде содержит принцип инвариантности (ПИ). Но более эффективным является классический подход принципа инвариантности [3-5], позволяющий непосредственно определять коэффициент отражения амплитуды ρ полубесконечного кристалла. Рассмотрению этого вопроса посвящен пункт 1° данной статьи.

Представляет определенный интерес решение задачи дифракции на кристалле конечной толщины. Для решения аналогичной задачи переноса в работе Н. Б. Енгибаряна и М. А. Мнацаканяна [5] разработан эффективный метод, основанный на установлении связи между решениями задач переноса в полубесконечной среде и в среде конечной толщины. В пункте 2° дискретный аналог метода Н. Б. Енгибаряна и М. А. Мнацаканяна применяется для нахождения коэффициента отражения ρ_n и коэффициента пропускания Q_n кристалла, содержащих конечное число отражающих плоскостей.

1°. Пусть отражающие атомные плоскости заполняют полупространство (рис. 1). Обозначим через T_1 и S_1 соответственно амплитуды падающей и отраженной волн, причем будем считать, что угол скольжения θ близок к брегговскому углу θ_0. Будем пользоваться системой уравнения „переноса" (1). Согласно ПИ([3–5]) существует такое ρ, что

$$S_k=\rho\cdot T_k. \tag{3}$$

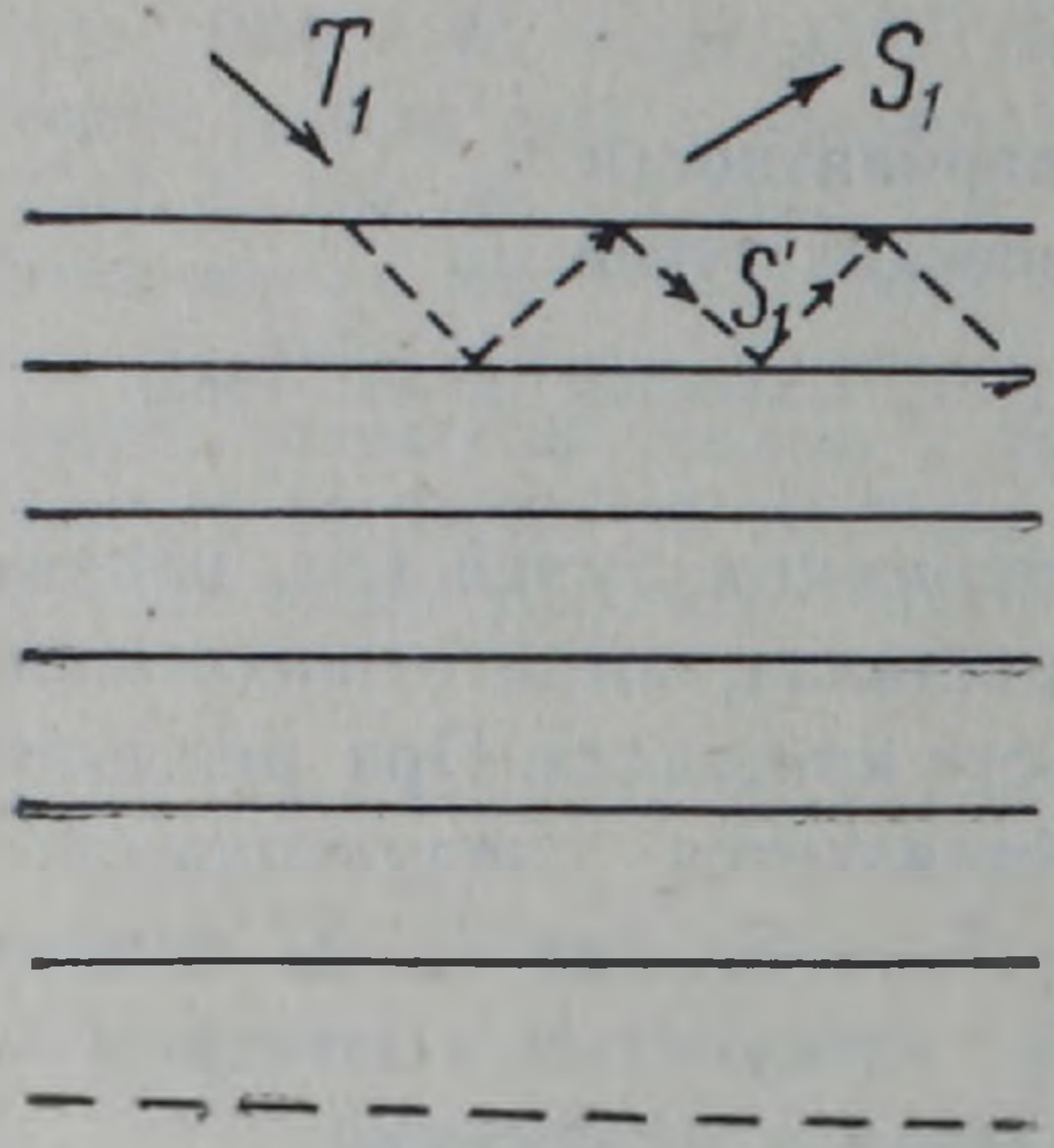

Рис. 1

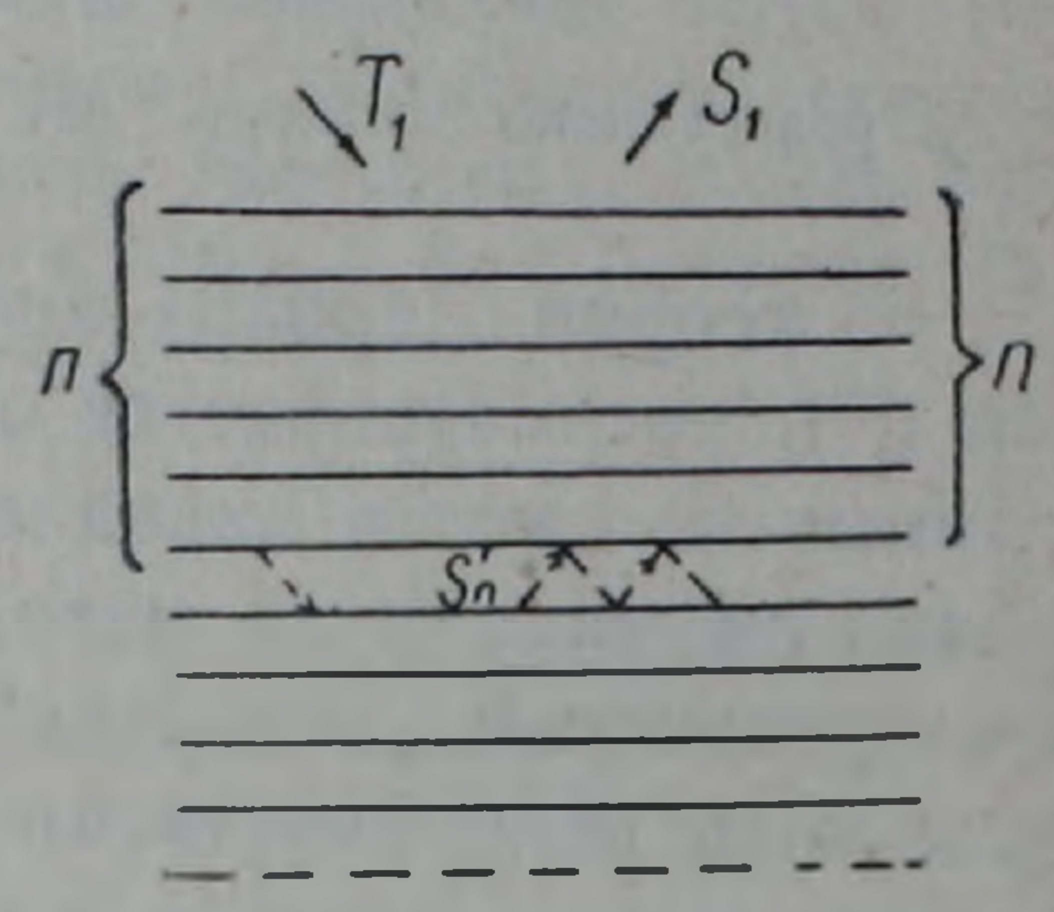

Рис. 2

Подстановка (3) в систему (1) приводит к следующему квадратному уравнению относительно ρ:

$$re^{-2i\varphi}\rho^2-[1+(r^2-\sigma^2)e^{-2i\varphi}]\rho+r=0. \tag{4}$$

Это уравнение Амбарцумяна для данной задачи.

Отметим, что для получения уравнения (4) можно было бы и не воспользоваться системой (1). Основываясь на ПИ, можно привести другой вывод уравнения (4).

Согласно принципу инвариантности, отражательная способность полубесконечного кристалла не изменится, если добавить (или отнять) конечное число атомных плоскостей.

Амплитуда волны, отраженной от всего кристалла, складывается из амплитуды волны, отраженной первой атомной плоскостью и из амплитуды волн, отраженных (после многократных рассеяний) от кристалла без первой атомной плоскости. Амплитуда волны, отраженной непосредственно от первой атомной плоскости, будет rT_1; амплитуда волны, дошедшей до второй плоскости и отраженной от всего „оставшегося" полубесконечного кристалла, будет $\rho e^{-i\varphi}\sigma T_1$. Следовательно, амплитуда волны, падающей на первую атомную плоскость снизу (в направлении отражения), будет

$$S_2'=e^{-i\varphi}\rho e^{-i\varphi}\sigma T_1.$$

Эта волна частично пройдет через первую атомную плоскость (либо непосредственно, либо после многократных отражений между плоскостью $n=1$ и всего оставшегося кристалла). Обозначим через

$Y_1 S_2'$ амплитуду прошедшей волны, тогда суммарная амплитуда волны, отраженной от всего кристалла, будет

$$S_1 = \rho T_1 = r T_1 + Y_1 e^{-i\varphi} \rho e^{-i\varphi} \sigma T_1. \tag{5}$$

С другой стороны, согласно сказанному

$$Y_1 S_2' = \sigma S_2' + S_2' e^{-i\varphi} \rho e^{-i\varphi} r T_1 Y_1. \tag{6}$$

Подставляя $Y_1 = (1 - r\rho e^{-2i\varphi})^{-1}\sigma$ из (6) в (5), приходим к уравнению (4).

Коэффициенты отражения и пропускания r и σ имеют вид (см. например ([2])):

$$r = -iq; \quad \sigma = 1 - iq_0.$$

Следовательно, для ρ получим окончательно следующее уравнение:

$$qe^{-2i\varphi}\rho^2 - i[1 - q^2 e^{-2i\varphi} - (1 - iq_0)^2 e^{-2i\varphi}]\rho + q = 0. \tag{7}$$

Представляя в виде $\varphi = m\pi + v$ и считая v малой величиной, относительно ρ получим следующее уравнение (в том приближении, что обычно делается в теории Дарвина):

$$\rho^2 + 2\frac{\varepsilon}{q}\rho + 1 = 0; \quad \rho = \frac{\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - q^2}}{-q}. \tag{8}$$

2°. Пусть кристалл содержит n атомных плоскостей (рис. 2). Введем коэффициент отражения ρ_n и коэффициент пропускания Q_n для такого кристалла:

$$\rho_n = \frac{S_1}{T_1}, \qquad Q_n = \frac{T_n'}{T_1}.$$

Присоединим к кристаллу (конечной толщины) снизу полубесконечный кристалл. Пусть на n-ую атомную плоскость снизу, в направлении отражения, падает волна с амплитудой S_n'. Эта волна либо непосредственно, либо после многократных отражений между кристаллом конечной толщины и присоединенным полубесконечным кристаллом частично выйдет из среды. Обозначим через $Y_n S_n'$ амплитуду вышедшей волны. Исходя из определения Y_n можно легко получить следующее простое рекуррентное соотношение

$$Y_n = \sigma e^{-i\varphi} Y_{n-1} + r e^{-i\varphi} \rho e^{-i\varphi} Y_n \tag{9}$$

с условием

$$Y_1 = \frac{\sigma}{1 - r\rho e^{-2i\varphi}}. \tag{10}$$

Из (9) и (10) следует

$$Y_n = \left(\frac{\sigma e^{-i\varphi}}{1 - r\rho e^{-2i\varphi}}\right)^n e^{i\varphi}. \tag{11}$$

Исходя из принципа инвариантности, будем считать, что коэффициент отражения полубесконечного кристалла не изменится, если добавить конечное число атомных плоскостей ([5]). Тогда легко составить следующую систему уравнений для ρ_n и Q_n:

$$\rho=\rho_n+Q_n e^{-i\varphi}\rho e^{-i\varphi} Y_n; \tag{12}$$

$$Y_n=Q_n+\rho_n e^{-i\varphi}\rho e^{-i\varphi} Y_n. \tag{13}$$

Из (11), (12), (13) с учетом (5) находим:

$$\rho_n=\frac{(1-R^{2n})\, e^{2in\varphi}}{1-R^{2n}\rho^2 e^{2i(n-1)\varphi}}; \tag{14}$$

$$R=\frac{\rho-r}{\rho\sigma}$$

$$Q_n=\frac{(1-\rho^2 e^{-2i\varphi})R^n e^{i(n+1)\varphi}}{1-R^{2n}\rho^2 e^{2i(n-1)\varphi}}. \tag{15}$$

Если для ρ ограничиться приближением (8), то можно показать, что для непоглощающего кристалла в соответствующем приближении ρ_n, $|\rho_n|^2$, Q_n, $|Q_n|^2$ имеют вид:

а) $\varepsilon^2\leqslant q^2$;

$$\rho_n=\frac{1-e^{-2nqx}}{1-e^{-2nqx+2i\alpha_0}}\, e^{i\alpha_0}; \qquad |\rho_n|^2=\frac{\operatorname{sh}^2 nqx}{\operatorname{sh}^2 nqx+x^2}; \tag{16}$$

$$Q_n=\frac{1-e^{2i\alpha_0}}{1-e^{-2nqx+2i\alpha_0}}\, e^{-nqx}; \qquad |Q_n|^2=\frac{x^2}{\operatorname{sh}^2 nqx+x^2}; \tag{17}$$

$$x=\sqrt{1-\varepsilon^2/q^2}, \qquad \alpha_0=\operatorname{arctg}\frac{\sqrt{q^2-\varepsilon^2}}{\varepsilon};$$

б) $\varepsilon^2\geqslant q^2$;

$$\rho_n=\frac{1-e^{2in\Phi}}{1-\rho^2\, e^{2in\Phi}}\,\rho; \qquad |\rho_n|^2=\frac{\sin^2 nq\zeta}{\sin^2 nq\zeta+\zeta^2}; \tag{18}$$

$$Q_n=\frac{1-\rho^2}{1-\rho^2 e^{2in\Phi}}\, e^{in\Phi}; \qquad |Q_n|^2=\frac{\zeta^2}{\sin^2 nq\zeta+\zeta^2}; \tag{19}$$

$$\zeta=\sqrt{\varepsilon^2/q^2-1}, \qquad \Phi=-\operatorname{sign}\varepsilon\sqrt{\varepsilon^2-q^2}.$$

Коэффициент отражения $|\rho_n|^2$ кристалла конечной толщины ранее был найден по динамической теории Эвальда—Лауэ (см. например ([6])). При решении этой задачи по теории Дарвина обычно совершается переход из системы разностных уравнений (1) к системе дифференциальных уравнений ([7]). В данной статье нами было показано, что применение принципа инвариантности В. А. Амбарцумяна позволяет решить задачу дифракции в рамках теории Дарвина без перехода к системе дифференциальных уравнений.

Хотя в статье рассматриваются задачи симметричного отражения от центросимметричного кристалла, предложенный метод легко обобщается и на случай асимметричного отражения от нецентросимметричного кристалла.

Автор выражает благодарность Н. Б. Енгибаряну за полезные советы и обсуждение.

Отдел прикладных проблем физики
Академии наук Армянской ССР

Ռ. Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի տեսության մեջ ինվարիանտության սկզբունքի կիրառման մասին

Աշխատանքում դիտարկվում են իդեալական բյուրեղների վրա ռենտգենյան ճառագայթների դիֆրակցիայի որոշ խնդիրներ։ Առաջարկվում է ռենտգենյան ճառագայթների բազմակի ցրման հաշվառման նոր մեթոդ, որի հիմքում ընկած է Վ. Հ. Համբարձումյանի ինվարիանտության սկզբունքը ([3,4])։ Այդ սկզբունքի կիրառությունը հնարավորություն է տալիս կիսանվերջ բյուրեղի դեպքում ստանալ հավասարում անմիջականորեն անդրադարձման գործակցի համար։ Վերջավոր հաստության բյուրեղի անդրադարձման և անցման գործակիցները որոշելու համար կիրառում է Ն. Բ. Ենգիբարյանի և Մ. Ա. Մնացականյանի մեթոդը ([5]), որը հնարավորություն է տալիս արտահայտել այդ գործակիցները կիսանվերջ բյուրեղի անդրադարձման գործակցով։

ЛИТЕРАТУРА—ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *Р. Джеймс,* Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, ИЛ, М., 1950. [2] *В. И. Иверонова, Г. П. Ревкевич,* Теория рассеяния рентгеновских лучей, Изд-во МГУ, 1978. [3] *В. А. Амбарцумян,* Научные труды, т. 1, Изд-во АН АрмССР, Ереван, 1960. [4] *В. В. Соболев,* Перенос лучистой энергии в атмосферах звезд и планет, ГИТТЛ, М., 1956. [5] *Н. Б. Енгибарян, М. А. Мнацаканян,* ДАН СССР, т. 217, № 3 (1974). [6] *И. Б. Боровский,* Физические основы рентгеноспектральных исследований, Изд-во МГУ, 1956. [7] *А. В. Кузнецов, А. Д. Феофанов,* Изв. вузов. Физика, т. 10, 1970.