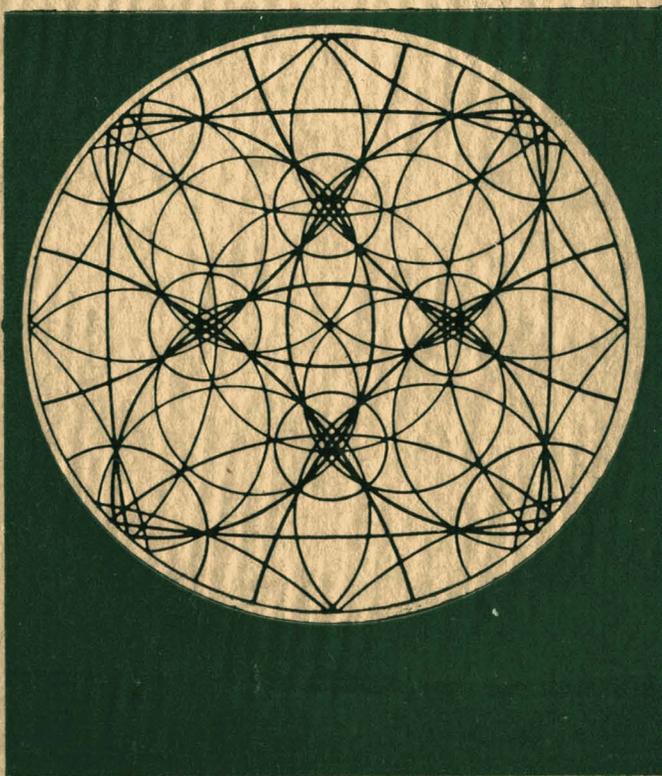


Д. М. ВАСИЛЬЕВ

**дифракционные
методы
исследования
структур**



Д. М. ВАСИЛЬЕВ

Дифракционные
методы
исследования
структур



Москва „Металлургия“ 1977

УДК 539.27 535.4

Рецензент докт. техн. наук *Л. М. Утевский*

УДК 539.27 535.4

Дифракционные методы исследования структур. В а с и л ь
е в Д. М. М., «Металлургия», 1977. 248 с.

В книге излагаются физические основы дифракционных методов исследования кристаллических тел. Все изложение основано на применении Фурье-преобразования и операций типа свертки.

Для усвоения материала требуется математическая подготовка в объеме обычного вузовского курса математики; дополнительные сведения по теории Фурье-преобразований, сингулярных функций и операций типа свертки приведены в начале книги.

Помимо общей теории дифракции, на идеальных кристаллах в кинематическом приближении рассматриваются также некоторые вопросы дифракции на кристаллах с искажениями структуры.

Книга предназначена для научных работников и инженеров-исследователей, а также может быть использована студентами высших учебных заведений, приступающими к изучению дифракционных методов анализа структуры кристаллов.

Ил. 107. Табл. 2. Список лит.: 40 назв.

© Издательство «Металлургия», 1977

В 31102—066
040(01)—77 90—77

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

$\{a_i\}$ — множество величин a_1, a_2, a_3, \dots ;

\vec{a}_i — базисные векторы кристаллографического базиса;

\vec{b}_i — векторы сопряженного базиса;

$\vec{r} = (r_1, r_2, r_3)$ — вектор с текущими координатами $\{r_i\}$ в пространстве объекта;

$\vec{R} = (u_1, u_2, u_3)$ — решеточный вектор в пространстве объекта;

$\{u_i\}$ — целые числа;

$\vec{h} = (h_1, h_2, h_3)$ — вектор с текущими координатами $\{h_i\}$ в Фурье-пространстве;

$\vec{H} = (h_1^0, h_2^0, h_3^0)$ — решеточный вектор в Фурье-пространстве;

$\{h_i^0\}$ — целые числа, называемые индексами дифракции;

$(\vec{r}^{(1)}, \vec{r}^{(2)})$ — скалярное произведение векторов $\vec{r}^{(1)}$ и $\vec{r}^{(2)}$.

В книге принято правило нормировки $(\vec{a}_i, \vec{b}_j) = \lambda \delta_{ij}$,
где λ — длина волны применяемого излучения;

$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j \\ 0 & \text{при } i \neq j \end{cases}$ — символ Кронекера.

$\vec{e}, \vec{i}, \vec{n}$ — единичные векторы;

$\hat{g}, \hat{c}, \hat{e}$ — тензоры;

$\hat{\mathcal{F}}$ и $\hat{\mathcal{F}}^{-1}$ — операторы прямого и обратного Фурье-преобразования;

$f(t), f(\vec{r})$ — прообразы Фурье;

$F(v), F(\vec{h})$ — образы Фурье;

$\delta(x)$ — дельта-функция Дирака;

$\Pi(x) = \begin{cases} 1 & \text{при } |x| \leq L/2 \\ 0 & \text{при } |x| > L/2 \end{cases}$ — функция шели;

$\Pi(x)$ — решеточная функция;

\mathcal{L} — область существования квадрата модуля Фурье-образа;

\oplus — символ свертки двух функций.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Основные направления развития народного хозяйства СССР на 1976—1980 годы, принятые XXV съездом КПСС, предусматривают совершенствование подготовки научных и научно-педагогических кадров.

В течение длительного времени автор читал начальные главы курса рентгеновского структурного анализа в кинематическом приближении по схеме, аналогичной расположению материала в книге Г. С. Жданова¹ и ряде других книг: дифракция на одно-, двух- и трехмерной решетке, вывод формулы для амплитуды и интенсивности методом простого суммирования амплитуд лучей, рассеянных элементами решетки. Условия, при которых наблюдаются дифракционные максимумы, записываются при этом в форме уравнений Лауэ или, если использовать обратные векторы \vec{a}^* , \vec{b}^* и \vec{c}^* , — в форме одного уравнения, содержащего «обратный вектор» \vec{H} .

Как правило, курсу структурного анализа предшествует курс кристаллографии, в котором после рассмотрения пространственной решетки, описывающей пространство кристалла, чисто формально, для облегчения ряда вычислений, вводится «обратная решетка», описывающая «обратное пространство». При переходе к изложению теории дифракции «обратная решетка» опять же вводится чисто формально для того, чтобы получить с помощью сферы Эвальда правильные результаты при рассмотрении геометрии дифракционной картины, причем в качестве критерия этой правильности чаще всего используется закон Вульфа—Брегга.

Так, Г. Липсон и Г. Стипл² в своей книге пишут: «Эвальд предложил весьма эффективную геометрическую интерпретацию закона Брегга $n\lambda = 2d \sin \theta$, для отражения от семейства плоскостей (hkl) ».*

Трактовка процедуры Эвальда как формальной интерпретации закона Брегга не облегчает рассмотрения различных задач теории дифракции. По-видимому, очень распространенная, но неправильная точка зрения на обратную решетку как на воображаемый объект, использование которого при рассмотрении дифракции полезно, но без которого можно при желании обойтись, ограничившись использованием «отражающих плоскостей», связана с отождествлением кристаллографической обратной решетки [а на самом деле всего лишь ковариантных векторов с координатами (h, k, l) , не образующих решетки и применяемых в кристаллографии для облегчения расчета углов между плоскостями, между пло-

¹ Жданов Г. С. Основы рентгеновского структурного анализа. М., Гостехиздат, 1940. 446 с. с ил.

² Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. Пер. с англ. М., «Мир», 1972. 384 с. с ил.

скостями и прямыми и межплоскостных расстояний в кристалле] с обратной решеткой, применяемой в теории дифракции для описания расположения дифракционных максимумов во фраунгоферовском спектре кристалла, т. е. на рентгенограмме.

Насколько широк диапазон различий в объяснении смысла «обратного пространства» и «обратной решетки», применяемых при рассмотрении дифракции, можно видеть из книги А. Вильсона¹, в которой утверждается, что «. Рентгенограммы гораздо более сходны с обратной решеткой, чем с прямой решеткой; можно, пожалуй, сказать, что рентгенограмма является более или менее искаженной обратной решеткой», и из книги А. И. Китайгородского², в которой сказано: «Обратная решетка, в отличие от прямой, не имеет реального физического смысла, а является математическим образом, весьма удобным для истолкования явлений дифракции рентгеновских лучей в кристаллах».

Трудности, с которыми сталкиваешься при априорном введении обратного пространства, заставили автора отказаться от традиционного способа изложения материала и полностью перейти к аппарату Фурье-преобразования, при помощи которого мы вычисляем амплитуду рассеянной волны в области фраунгоферовской дифракции, не связывая себя в общем случае заботами о специально подобранной структуре образца и об априорном введении обратного пространства, так как «обратность» метрики дифракционной картины получается естественным путем в результате нахождения амплитуд фраунгоферовского спектра.

Немаловажным стимулом для такого перехода послужили успехи, полученные в когерентной оптике, где хорошие результаты при описании дифракции сравнительно легко достигаются с помощью интегральных преобразований.

При чтении этих книг бросается в глаза, что термин «обратное пространство» нигде в них не употребляется, хотя свойство «обратности» метрики фраунгоферовского спектра по отношению к метрике объекта заложено в самой природе процесса дифракции. Если изобразить объект в виде «гармошки», то фраунгоферовский спектр, т. е. дифракционная картина, также будет выглядеть как гармошка, причем растяжение (сжатие) гармошки-объекта будет вызывать сжатие (растяжение) гармошки-спектра. Таким образом, метрика спектра оказывается «обратной» по отношению к метрике объекта, что дает основание назвать пространство, в котором располагается спектр, обратным.

Только в этом заключается действительный смысл термина «обратное пространство», когда его применяют при описании фраунгоферовского спектра.

¹ Вильсон А. Оптика рентгеновских лучей. Пер. с англ. М., ИЛ, 1951, 142 с. с ил.

² Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ. М.—Л., ГИТТЛ, 1950. 650 с. с ил.

Обычно при описании дифракции в оптическом диапазоне для объекта используются единичные орты \vec{i} , \vec{j} , \vec{k} или в наших обозначениях — базисные векторы $\{\vec{e}_i\}$. При этом мы обязаны применять для описания спектра обратные векторы $\{\vec{e}_i^{-1}\}$, совпадающие по величине и направлению с «прямыми» векторами $\{\vec{e}_i\}$. Таким образом, обратность метрики спектра маскируется, и надобность в явном введении обратного пространства отпадает.

Иначе обстоит дело при работе в ненормированном базисе $\{\vec{a}_i\}$, применяемом для описания объекта, и базисе $\{\vec{b}_i\}$, применяемом для описания спектра, когда обратность метрики спектра наглядно проявляется в обратности базисных векторов $\{\vec{b}_i\}$.

Изложение основ теории дифракции на трехмерных объектах при помощи Фурье-преобразования и операций типа свертки содержится в пятой части книги А. Гинье¹, а также в книгах А. И. Китайгородского², Б. К. Вайнштейна³ и Р. Хоземана и С. Багчи⁴. Последние три книги посвящены специальным вопросам теории дифракции и написаны, несомненно, не для начинающих, а для «знатоков», что же касается книги А. Гинье, то к изучению пятой части читатель подходит, будучи «испорчен» чтением предыдущих второй—четвертой глав, в которых материал излагается традиционно, так что для изучения пятой главы ему приходится переучиваться, что всегда труднее, чем начинать сначала. Автор убежден, что изложение теории дифракции при помощи аппарата Фурье-преобразования является не только самым целесообразным, но и самым простым способом, так как полностью соответствует тому, что происходит с рассеянными на объекте лучами, образующими, в конечном итоге, фраунгоферовскую дифракционную картину.

Обычно лекции по дифракционным методам исследования читаются на 3—4-м курсах физико-механического факультета Ленинградского политехнического института. К этому времени студенты уже прослушали стандартный курс высшей математики, в котором интегральным преобразованиям, операциям типа свертки и сингулярным функциям уделяется слишком мало времени.

Для того чтобы изложить минимум сведений, необходимый для понимания дифракции, обычно требуется математическое введение, на которое уходит несколько первых лекций.

¹ Гинье А. Рентгенография кристаллов. Пер. с франц. М., Физматгиз, 1961. 604 с. с ил.

² Китайгородский А. И. Теория структурного анализа. М., Изд-во АН СССР, 1954. 284 с. с ил.

³ Вайнштейн Б. К. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. М., Изд-во АН СССР, 1963. 372 с. с ил.

⁴ Hosemann R., Bagchi S. Direct analysis of diffraction by matter. Amsterdam, Holland, 1962, p. 734.

В данной книге первые параграфы гл. I содержат такое математическое введение, без освоения которого нет смысла читать последующие главы.

Значительно более подробно, чем в существующих книгах, рассматривается дифракционная картина, получаемая в расходящемся пучке рентгеновских лучей, причем здесь автор почти целиком, если не по форме, то по содержанию, использовал материал диссертации С. А. Иванова¹.

Во всех случаях автор не касался вопроса о том, как надо проводить эксперимент, а ставил своей целью объяснить, почему получается та или иная дифракционная картина, причем во всех, без исключения, случаях использовался один и тот же математический аппарат Фурье-преобразования, позволяющий без выработки специальных приемов *ad hoc* решать поставленную задачу.

Кристаллографическая алгебра везде применяется в компактной матричной форме².

В книге не используется понятие «отражающих плоскостей», равно как и термин «обратное пространство». Вместо последнего термина говорится о пространстве Фурье, т. е. о пространстве, в котором располагаются фраунгоферовские дифракционные максимумы (рентгеновская пленка, флюоресцирующий экран и т. п.); ясно, что в данном случае оба термина эквивалентны.

Неоценимую помощь в работе над книгой оказали автору студенты и товарищи по кафедре физики металлов Ленинградского политехнического института П. П. Большаков, С. А. Иванов, А. П. Кокко, А. И. Мелькер, В. И. Монин, Б. М. Тараканов, Ю. Ф. Титовец, В. В. Трофимов, многочисленные дискуссии с которыми помогли понять ряд важных вопросов.

Всем им автор выражает сердечную благодарность.

¹ Иванов С. А. Дифракция в расходящемся пучке рентгеновских лучей. Автореф. канд. дис. Л., 1974.

² Васильев Д. М. Физическая кристаллография. М., «Металлургия», 1972. 279 с. с ил.

ГЛАВА I

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ

1. Ряды Фурье и интеграл Фурье

Пусть на отрезке (x_1, x_2) задана функция $f(x)$. Поставим задачу описать эту функцию при помощи ряда вида

$$f(x) \approx \sum_{j=1}^m C_j g_j(x), \quad (1)$$

где C_j — постоянные;
 $g_j(x)$ — некоторые функции.

Для того чтобы наилучшим образом описать $f(x)$ рядом (1), необходимо так подобрать коэффициенты C_j , чтобы при заданных функциях $g_j(x)$ средняя квадратичная ошибка

$$\langle [\Delta f(x)]^2 \rangle = \frac{1}{x_2 - x_1} \int_{x_1}^{x_2} \left[f(x) - \sum_{j=1}^m C_j g_j(x) \right]^2 dx$$

была минимальной.

Эта задача решается при помощи обобщенного ряда Фурье

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\infty} C_j g_j(x),$$

где $\{g_j(x)\}$ — множество функций, ортогональных на отрезке (x_1, x_2) , т. е. удовлетворяющих условию

$$\int_{x_1}^{x_2} g_j(x) g_k^*(x) dx = K_j \delta_{jk},$$

где K_j — постоянная.

Если задать $\{g_j(x)\}$ в виде $\{e^{iyx}\}$, где $y = 2\pi n/l$, $n = 0, \pm 1, \pm 2$, а l — длина отрезка (x_1, x_2) , то получим

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C(n) e^{i \frac{2\pi}{l} nx}. \quad (2)$$

$$C(n) = \frac{1}{l} \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} f(x) e^{-i \frac{2\pi}{l} nx} dx. \quad (3)$$

Особенностью функций $\exp i \frac{2\pi}{l} nx$ является то, что они периодичны с периодом T , равным l

$$e^{i \frac{2\pi}{l} n (x+T)} = e^{i \frac{2\pi}{l} nx} \quad \text{при } T = l,$$

так как $\exp i2\pi n = 1$.

Это обстоятельство приводит к тому, что при попытке вычислить $f(x)$ вне интервала (x_1, x_2) , на котором определялись коэффициенты $C(n)$, по формуле (3) мы получим периодическую функцию $f_T(x)$, поведение которой определяется только поведением $f(x)$ на отрезке (x_1, x_2) .

Посмотрим, как надо изменить форму записи ряда (2) для того, чтобы можно было описывать непериодическую функцию $f(x)$ на бесконечном промежутке, не опасаясь появления нежелательных «дубликатов» этой функции за пределами отрезка (x_1, x_2) .

Введя период функции $f_T(x)$, равный $T = l$, и частоту $\nu = n\nu_0 = n/l$, перепишем формулы (2), (3) в виде

$$f(x) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} C(\nu) e^{i2\pi\nu x}, \quad (4)$$

где

$$C(\nu) = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(x) e^{-i2\pi\nu x} dx. \quad (5)$$

Обозначив $TC(\nu) = F(\nu)$ и устремляя период T к бесконечности, получим, что $T^{-1} \rightarrow d\nu$, так что соотношения (4) и (5) запишутся в виде

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) e^{i2\pi\nu x} d\nu; \quad (6)$$

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi\nu x} dx. \quad (7)$$

Выражение (6) описывает функцию $f(x)$ в пространственной области, выражение (7) описывает эту функцию в частотной области, так как, зная коэффициенты $F(\nu)$, мы всегда можем восстановить при помощи соотношения (6) саму функцию $f(x)$.

2. Дельта-функция Дирака

Рассмотрим соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0), \quad (8)$$

справедливое для любой функции $f(x)$, непрерывной при $x = x_0$. Это соотношение не имеет смысла, если рассматривать $\delta(x - x_0)$ как обычную функцию. Однако оно становится весьма полезным, если рассматривать его как функционал, т. е. правило, по которому функции $f(x)$ придается значение $f(x_0)$. Выражение (8) можно рассматривать вместе с тем как определение функции $\delta(x)$, называемой дельта-функцией; все свойства дельта-функции могут быть получены из определяющего выражения (8).

Действительно, само выражение (8) описывает фильтрующее свойство дельта-функции; это соотношение позволяет из всех значений $f(x)$ выбрать ее значение в точке $x = x_0$.

Положив в соотношении (8) $x_0 = 0$, получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0),$$

и, наконец, приняв $f(x) = 1(x)$, будем иметь соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (9)$$

Соотношения (8) и (9) допускают наглядную интерпретацию дельта-функции как предела последовательности «колоколообразных» функций, локализованных около нуля и изменяющихся так, что при увеличении высоты функции в нуле ее ширина в основании пропорционально уменьшается, так что площадь, ограниченная кривой, все время остается равной единице. В пределе дельта-функция будет иметь бесконечно большую высоту при нулевой ширине.

Легко видеть, что такой интерпретации удовлетворяет ряд функций: функция Гаусса $(2\pi(x^2))^{-1/2} \exp(-x^2/2(x^2))$; функция щели $L^{-1}\Pi(x)$; функция $(2k)^{-1} \times \exp(-|x|/k)$; функция $k/\pi \sin kx/kx$; функция $k/\pi \sin^2 kx/(kx)^2$.

Легко обобщить формулу (8) на случай функции, заданной в пространстве с базисными векторами $\{\vec{a}_i\}$. В этом случае

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) dV_a = f(\vec{x}_0),$$

причем $\vec{x} = x_i \vec{a}_i$,

dV_a — элемент объема рассматриваемого пространства.

3. Свертка функций

Если имеются две функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$, то можно образовать третью функцию

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) f_2(x - \tau) d\tau, \quad (10)$$

называемую сверткой функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$; удобно обозначать операцию свертки символом \oplus и записывать интеграл (10) в виде

$$f(x) = f_1(x) \oplus f_2(x).$$

Легко проверить, что операция свертки подчиняется коммутативному, дистрибутивному и ассоциативному законам и в этом смысле ведет себя как обычное умножение.

Очень полезным оказывается очевидное свойство

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) f_2(x - \tau) d\tau dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x) dx, \quad (11)$$

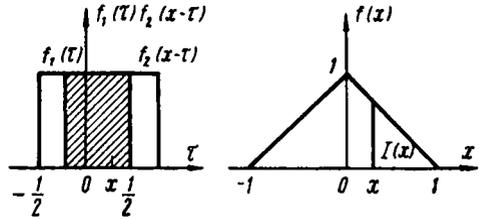
так как при интегрировании в бесконечных пределах по переменной x начало отсчета несущественно, и функция $f_2(x - \tau)$ может быть заменена на $f_2(x)$.

Для лучшего уяснения того, что получается при свертке двух функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$, нужно учесть, что при заданном значении x подынтегральная функция в интеграле (10) получается от произведения $f_1(\tau)$ на инвертированную функцию $f_2(-\tau)$, сдвинутую вправо (при $x > 0$) на величину x (рис. 1). Если функции $f_1(x)$ и $f_2(x)$ финитные, т. е. имеют ограниченные области существования, то и $f(x)$ будет также финитной функцией.

При вычислении свертки (10) приходится сканировать функцию $f_1(x)$ с помощью функции $f_2(x)$ (или наоборот); очевидно, в случае финитных $f_1(x)$ и $f_2(x)$ область существования функции $f(x)$ будет равна сумме областей существования функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$.

Рис. 1. Свертка двух функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ при $f_1(x) = f_2(x) = \Pi(x)$, причём $\Pi(x) = 1$ на отрезке $(-1/2, 1/2)$. Заштрихованная площадь рав-

на $I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) f_2(x-\tau) d\tau$; значение интеграла $I(x)$ отложено в виде ординаты функции $f(x)$



Очень важным является случай свертки дельта-функции с «хорошей» функцией $f(x)$. Фильтрующее свойство дельта-функции может быть записано в виде свертки

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \delta(x - \tau) d\tau = f(x)$$

или символически

$$f(x) \oplus \delta(x) = \delta(x) \oplus f(x) = f(x). \tag{12}$$

Таким образом, свертка «хорошей» функции $f(x)$ с дельта-функцией дает исходную функцию $f(x)$.

Другой крайний случай — свертка функции $f(x)$ с постоянной величиной 1 (x):

$$f(x) \oplus 1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) d\tau = \text{const } 1(x), \tag{13}$$

равная площади, ограниченной функцией $f(x)$.

Для любого линейного оператора \hat{L} справедливо свойство

$$\hat{L}[f_1(x) \oplus f_2(x)] = \{\hat{L}[f_1(x)]\} \oplus f_2(x) = f_1(x) \oplus \{\hat{L}[f_2(x)]\}. \tag{14}$$

Это свойство прямо следует из того, что свертка является результатом сканирования функции $f_1(x)$ функцией $f_2(x)$ (или наоборот).

Рассмотрим свертку «финитной» функции $f_1(x)$, не равной нулю только на конечном отрезке (x_1, x_2) , с «гребенкой Дирака», собранной из бесконечно большого количества дельта-функций, отстоящих друг от друга на расстоянии a (рис. 2). Гребенка Дирака, которую мы будем обозначать как $\text{Ш}(x)$, записывается в виде

$$\text{Ш}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Из основного свойства (12) ясно, что свертка $f_1(x) \oplus \text{Ш}(x)$ приводит к появлению бесконечного числа функций $f_1(x)$, отстоящих друг от друга на расстоянии a . Таким образом гребенка Дирака «штампует» любую финитную функцию в соответствии со своим параметром a .

Разумеется, можно образовывать самосвертку функции $f_1(x)$, положив в формуле (10) $f_1(x) = f_2(x)$; в этом случае получим, что $f(x) = f_1(x) \oplus f_1(x)$. По существу на рис. 1 изображена самосвертка функции $\Pi(x)$.

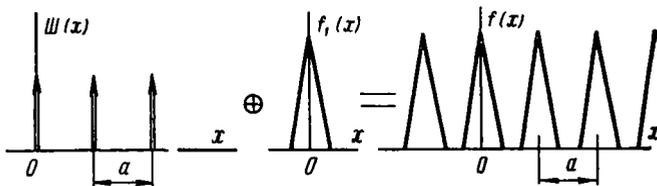


Рис. 2. Свертка финитной функции $f_1(x)$ с «гребенкой Дирака» $\text{Ш}(x)$

Очевидно, самосвертка дельта-функции снова равна дельта-функции: $\delta(x) \oplus \delta(x) = \delta(x)$, и самосвертка гребенки Дирака снова дает гребенку Дирака: $\text{Ш}(x) \oplus \text{Ш}(x) = \text{Ш}(x)$.

4. Преобразование Фурье

Выражение (7)

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi\nu x} dx$$

можно рассматривать как интегральное преобразование, совершаемое с помощью оператора Фурье $\widehat{\mathcal{F}}$ над функцией $f(x)$, в результате которого получается функция $F(\nu)$:

$$f(x) \xrightarrow{\widehat{\mathcal{F}}} F(\nu) \text{ или } \widehat{\mathcal{F}}[f(x)] = F(\nu).$$

Выражение

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) e^{i2\pi\nu x} d\nu$$

аналогично может рассматриваться как преобразование, совершаемое при помощи оператора $\widehat{\mathcal{F}}^{-1}$ над функцией $F(\nu)$:

$$F(\nu) \xrightarrow{\widehat{\mathcal{F}}^{-1}} f(x) \text{ или } \widehat{\mathcal{F}}^{-1}[F(\nu)] = f(x).$$

Можно легко показать [2], что оператор $\widehat{\mathcal{F}}^{-1}$ является обратным по отношению к оператору $\widehat{\mathcal{F}}$, так что в точках непрерывности функции $f(x)$

$$\widehat{\mathcal{F}}^{-1}\{\widehat{\mathcal{F}}[f(x)]\} = f(x). \quad (15)$$

Процесс получения функции $F(\nu)$ из функции $f(x)$ при помощи оператора $\widehat{\mathcal{F}}$ называется прямым преобразованием Фурье, обратная процедура $\widehat{\mathcal{F}}^{-1}$ — обратным преобразованием. Часто термин «преобразование Фурье» применяется как для обозначения операции вычисления по формулам (6) и (7), так и для обозначения результата преобразования, т. е. функций $F(\nu)$ и $f(x)$. Мы в дальнейшем сохраним термин «преобразование Фурье» только для обозначения процедур (6) и (7), а сами функции $F(\nu)$ и $f(x)$ будем называть соответственно образом Фурье и прообразом Фурье.

Из смысла оператора $\widehat{\mathcal{F}}$ сразу вытекает его линейность:

$$\widehat{\mathcal{F}}[\alpha f_1(x) + \beta f_2(x)] = \alpha \widehat{\mathcal{F}}[f_1(x)] + \beta \widehat{\mathcal{F}}[f_2(x)],$$

где α и β не зависят от x .

Легко получить некоторые важные свойства преобразования Фурье.

Сдвиг в пространственной области

Если $\widehat{\mathcal{F}}[f(x)] = F(\nu)$, то

$$\widehat{\mathcal{F}}[f(x - x_0)] = F(\nu) e^{-i2\pi\nu x_0}. \quad (16)$$

Доказательство:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}}[f(x - x_0)] &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x - x_0) e^{-i2\pi\nu x} dx = \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(x - x_0) e^{-i2\pi\nu(x - x_0)} d(x - x_0) \right) e^{-i2\pi\nu x_0} = F(\nu) e^{-i2\pi\nu x_0}. \end{aligned}$$

Выражение, стоящее в круглых скобках, равно $F(\nu)$, в чем легко убедиться, заменив $x - x_0$ на новую переменную x' .

Сдвиг в частотной области

Если $\widehat{\mathcal{F}}^{-1}[F(\nu)] = f(x)$, то

$$\widehat{\mathcal{F}}^{-1}[F(\nu - \nu_0)] = f(x) e^{i2\pi\nu_0 x}. \quad (17)$$

Доказательство такое же, как и при сдвиге в пространственной области.

Так же просто можно получить свойство изменения масштаба в пространственной области.

Если $\widehat{\mathcal{F}}[f(x)] = F(\nu)$, то

$$\widehat{\mathcal{F}}[f(ax)] = \frac{1}{|a|} F\left(\frac{\nu}{a}\right). \quad (18)$$

Если $f(x)$ — функция типа «колокол», то образ $F(\nu)$ также будет колоколообразным. При $a > 1$ функция $f(ax)$ будет более узкой, чем $f(x)$, а образ $|a|^{-1} F\left(\frac{\nu}{a}\right)$ будет, наоборот, расширяться по сравнению с образом $F(\nu)$; высота в максимуме у образа $|a|^{-1} F\left(\frac{\nu}{a}\right)$ будет уменьшаться по сравнению с высотой образа $F(\nu)$.

Такое соотношение, при котором сужение прообраза ведет к расширению образа и наоборот, справедливо всегда.

Фурье-преобразование свертки двух функций в пространственной области

Если $\widehat{\mathcal{F}} [f_1(x)] = F_1(v)$ и $\widehat{\mathcal{F}} [f_2(x)] = F_2(v)$,

$$\text{то } \widehat{\mathcal{F}} [f_1(x) \oplus f_2(x)] = \widehat{\mathcal{F}} [f_1(x)] \widehat{\mathcal{F}} [f_2(x)] = F_1(v) F_2(v). \quad (19)$$

Доказательство:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}} [f_1(x) \oplus f_2(x)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) f_2(x-\tau) d\tau e^{-i2\pi vx} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) e^{-i2\pi v\tau} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x-\tau) e^{-i2\pi v(x-\tau)} d(x-\tau) = F_1(v) F_2(v). \end{aligned}$$

В качестве примера применения соотношения (19) выведем очень полезные для дальнейшего соотношения, связанные со сверткой двух функций Гаусса:

$$f_1(x) = (2\pi\sigma_1^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}} \quad \text{и} \quad f_2(x) = (2\pi\sigma_2^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_2^2}},$$

где $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle$.

Так как

$$\widehat{\mathcal{F}} \left[(2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \right] = e^{-2\pi^2\sigma^2 v^2}$$

и

$$e^{-2\pi^2\sigma_1^2 v^2} e^{-2\pi^2\sigma_2^2 v^2} = e^{-2\pi^2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) v^2},$$

то из соотношения (19) сразу следует, что

$$\begin{aligned} (2\pi\sigma_1^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}} \oplus (2\pi\sigma_2^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_2^2}} &= \\ &= [2\pi(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)]^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}}. \end{aligned}$$

Аналогично получаем для свертки двух функций Коши:

$$f_1(x) = \frac{k_1}{\pi} (1 + k_1^2 x^2)^{-1} \quad \text{и} \quad f_2(x) = \frac{k_2}{\pi} (1 + k_2^2 x^2)^{-1}.$$

Так как

$$\widehat{\mathcal{F}} \left[\frac{k}{\pi} (1 + k^2 x^2)^{-1} \right] = e^{-\frac{2\pi}{k} |v|}$$

и

$$e^{-\frac{2\pi}{k_1} |v|} e^{-\frac{2\pi}{k_2} |v|} = e^{-\frac{2\pi}{k} |v|}$$

где $\frac{1}{k} = \frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2}$, то

$$\frac{k_1}{\pi} (1 + k_1^2 x^2)^{-1} \oplus \frac{k_2}{\pi} (1 + k_2^2 x^2)^{-1} = \frac{k}{\pi} (1 + k^2 x^2)^{-1}.$$

Если $\widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F_1(v)] = f_1(x)$ и $\widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F_2(v)] = f_2(x)$, то

$$\widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F_1(v) \oplus F_2(v)] = \widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F_1(v)] \widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F_2(v)] = f_1(x) f_2(x). \quad (20)$$

Доказательство аналогично (19).

Используя свойство операторов $\widehat{\mathcal{F}}$ и $\widehat{\mathcal{F}}^{-1}$, описываемое соотношением (15), можно из соотношений (16), (17) и (19), (20) получить, что

$$\left. \begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F(v) e^{-i2\pi v x_0}] &= f(x - x_0); \\ \widehat{\mathcal{F}} [f(x) e^{i2\pi v_0 x}] &= F(v - v_0); \\ \widehat{\mathcal{F}}^{-1} [F_1(v) F_2(v)] &= f_1(x) \oplus f_2(x); \\ \widehat{\mathcal{F}} [f_1(x) f_2(x)] &= F_1(v) \oplus F_2(v). \end{aligned} \right\} \quad (20a)$$

Простым вычислением легко доказывается также свойство симметрии.

Если $\widehat{\mathcal{F}} [f(x)] = F(v)$, то

$$\widehat{\mathcal{F}} [F(x)] = f(-v). \quad (21)$$

Справедливо также соотношение Парсиваля.

Если $\widehat{\mathcal{F}} [f(x)] = F(v)$, то

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |F(v)|^2 dv. \quad (21a)$$

Если $f(x)$ описывает амплитуду сигнала, то $\int |f(x)|^2 dx$ дает его энергию.

Таким образом, соотношение (21a) показывает, что энергия сигнала в пространственной и частотной областях сохраняется постоянной.

Фурье-преобразование дельта-функции

Записав формально основное соотношение (7) для дельта-функции

$$\widehat{\mathcal{F}} [\delta(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-i2\pi v x} dx,$$

можно сразу получить, учитывая фильтрующее свойство (8), что

$$\widehat{\mathcal{F}} [\delta(x)] = e^{-i2\pi v x} \Big|_{x=0} = 1(v). \quad (22)$$

Также просто можно получить, что

$$\widehat{\mathcal{F}} [1(x)] = \delta(v);$$

$$\widehat{\mathcal{F}}^{-1} [1(v)] = \delta(x);$$

$$\widehat{\mathcal{F}}^{-1} [\delta(v)] = 1(x).$$

Используя свойства сдвига (16) и (17), можно написать следующие полезные соотношения:

$$\left. \begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}} [\delta (x - x_0)] &= e^{-i2\pi\nu x_0}; \\ \widehat{\mathcal{F}} [e^{i2\pi\nu_0 x}] &= \delta (\nu - \nu_0). \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Выражая $\cos 2\pi\nu_0 x$ и $\sin 2\pi\nu_0 x$ через сумму и разность гармонических функций $\exp i2\pi\nu_0 x$ и $\exp -i2\pi\nu_0 x$, получим, что

$$\left. \begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}} [\cos 2\pi\nu_0 x] &= \frac{1}{2} [\delta (\nu - \nu_0) + \delta (\nu + \nu_0)]; \\ \widehat{\mathcal{F}} [\sin 2\pi\nu_0 x] &= \frac{1}{2i} [\delta (\nu - \nu_0) - \delta (\nu + \nu_0)]. \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

Фурье-преобразование периодических функций

Для отыскания Фурье-преобразования периодической функции $f(x)$ с периодом l разложим ее в ряд Фурье и определим преобразование Фурье-функции $f(x)$ как сумму преобразований от членов ряда:

$$\widehat{\mathcal{F}} [f(x)] = F(\nu) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C(n) \widehat{\mathcal{F}} \left[e^{i \frac{2\pi}{l} nx} \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C(n) \delta (\nu - n\nu_0), \quad (25)$$

где $l^{-1} \equiv \nu_0$.

Теперь не составляет труда найти Фурье-образ гребенки Дирака $\text{Ш}(x)$, составленной из дельта-функций, отстоящих друг от друга на a :

$$\text{Ш}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Так как $\text{Ш}(x)$ на интервале $(-a/2, a/2)$ равна $\delta(x)$, то из соотношений (25) и (3) получим

$$\widehat{\mathcal{F}} [\text{Ш}(x)] = \frac{1}{a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\nu - n\nu_0) = \frac{1}{a} \text{Ш}(\nu),$$

где $a^{-1} \equiv \nu_0$.

Аналогично для ограниченной гребенки $\text{Ш}_N(x)$, заданной только на интервале $(0, Na)$, получим

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}} [\text{Ш}_N(x)] &= \widehat{\mathcal{F}} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \delta(x - na) \right] = \sum_{n=0}^{N-1} \widehat{\mathcal{F}} [\delta(x - na)] = \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i2\pi\nu na} = e^{-i\pi(N-1)\nu a} \frac{\sin \pi N\nu a}{\sin \pi\nu a}. \end{aligned} \quad (26)$$

Фазовый множитель $\exp -i\pi(N-1)\nu a$ может быть сделан равным единице, если расположить гребенку симметрично относительно нуля, т. е. положить

$$\text{Ш}_N(x) = \sum_{n=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \delta(x - na),$$

так что при этом

$$\widehat{\mathfrak{F}}[\mathbb{Ш}_N(x)] = \frac{\sin \pi Nva}{\sin \pi va}. \quad (27)$$

Этот же результат может быть получен более изящным путем, если записать $\mathbb{Ш}_N(x)$ в виде

$$\mathbb{Ш}_N(x) = \Pi(x) \mathbb{Ш}(x),$$

где функция щели $\Pi(x)$ определена на промежутке $(-Na/2, Na/2)$.
Используя свойство (20') и данные табл. 1, получим

$$\begin{aligned} \widehat{\mathfrak{F}}[\mathbb{Ш}_N(x)] &= \widehat{\mathfrak{F}}[\Pi(x) \mathbb{Ш}(x)] = \widehat{\mathfrak{F}}[\Pi(x)] \oplus \widehat{\mathfrak{F}}[\mathbb{Ш}(x)] = \\ &= \frac{\sin \pi Nav}{\pi v} \oplus \frac{1}{a} \mathbb{Ш}(v) = \frac{\sin \pi Nav}{\pi av} \oplus \mathbb{Ш}(v). \end{aligned} \quad (28)$$

Легко видеть, что выражения (27) и (28) идентичны, так как вблизи любого из главных максимумов функции (27) $\sin \pi va \approx \pi va$, и единственная разница между соотношениями (28) и (27) состоит в том, что в первом случае периодичность обусловлена сверткой с гребенкой Дирака, а во втором непосредственно обеспечивается самой функцией (27).

Фурье-преобразование функции нескольких переменных

Определим Фурье-преобразование функции двух переменных $f(x_1, x_2)$ как

$$\widehat{\mathfrak{F}}f(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2) e^{-i2\pi(v_1x_1 + v_2x_2)} dx_1 dx_2. \quad (29)$$

Таким образом, Фурье-образ функции $f(x_1, x_2)$, равный

$$\widehat{\mathfrak{F}}[f(x_1, x_2)] = F(v_1, v_2),$$

может быть найден из выражения (29).

Все рассмотренные для одномерной функции свойства Фурье-преобразования могут быть аналогичным образом сформулированы и для функции нескольких переменных. В частности, аналогом свойства изменения масштаба (18) будет соотношение, получаемое при линейном преобразовании координат с помощью матрицы (a_{ij}) [3].

Если $\widehat{\mathfrak{F}}[f(x_1, x_2)] = F(v_1, v_2)$, то при замене координат по правилу $x'_i = a_{ij}x_j$ получим, что

$$\widehat{\mathfrak{F}}[f(x'_1, x'_2)] = \frac{1}{|\det(a_{ij})|} F(v'_1, v'_2), \quad (30)$$

где $\det(a_{ij})$ — определитель матрицы (a_{ij}) , а координаты $\{v'_i\}$ находятся по правилу

$$v'_i = A_{ij}v_j, \quad (30a)$$

где $A_{ij} = \tilde{a}_{ij}^{-1}$.

Из соотношений (30) и (30a) следует фундаментальная особенность Фурье-образа, связанная с поворотом прообраза.

Если прообраз поворачивается на угол φ_0 , то матрица (a_{ij}) , равная

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_0 & -\sin \varphi_0 \\ \sin \varphi_0 & \cos \varphi_0 \end{pmatrix},$$

является ортогональной, и поэтому $A_{ij} = a_{ij}$, так что штрихованные координаты $\{\vec{v}_i\}$ в частотной области преобразуются так же, как и координаты в пространственной области, а это значит, что поворот прообраза приводит к такому же повороту Фурье-образа.

Эта особенность Фурье-образа часто используется при наблюдении дифракции, когда вращение образца приводит к соответствующему вращению дифракционной картины.

Фурье-преобразование функции с разделяющимися переменными в прямоугольной системе координат

Рассмотрим функцию с разделяющимися переменными в прямоугольных координатах

$$f(x_1, x_2) = f_1(x_1) f_2(x_2).$$

Легко видеть из соотношения (29), что в этом случае

$$\widehat{\mathfrak{F}}[f(x_1, x_2)] = \widehat{\mathfrak{F}}[f_1(x_1)] \widehat{\mathfrak{F}}[f_2(x_2)]. \quad (31)$$

Фурье-преобразование функций векторного аргумента

От формы записи Фурье-преобразования (6), (7) легко перейти к случаю векторного аргумента, введя нормированный базис $\{\vec{e}_i\}$ в пространстве прообраза и соответствующий нормированный базис $\{\vec{e}_i^{-1}\}$ в Фурье-пространстве.

Если записать векторы \vec{x} и \vec{v} в пространственной и частотной областях в виде $\vec{x} = x_i \vec{e}_i$, $\vec{v} = v_i \vec{e}_i^{-1}$, где $|\vec{e}_i| = |\vec{e}_i^{-1}| = 1$ и $(\vec{e}_i, \vec{e}_j^{-1}) = \delta_{ij}$, то

$$F(\vec{v}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) e^{-i2\pi(\vec{v}, \vec{x})} dV_x, \quad (32)$$

$$f(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{v}) e^{i2\pi(\vec{v}, \vec{x})} dV_v, \quad (32a)$$

где dV_x и dV_v — элементы объема в пространственной и частотной областях.

В ряде случаев удобнее работать в ненормированном базисе, введя базисные векторы $\{\vec{a}_i\}$, согласованные с симметрией объекта; соответственно в Фурье-пространстве приходится вводить базисные векторы $\{\vec{b}_i\}$. При этом целесообразно ввести правило нормировки

$$(\vec{a}_i, \vec{b}_j) = \lambda \delta_{ij}, \quad (33)$$

где λ — длина волны дифрагирующего излучения.

Если вектор \vec{r} в пространстве прообраза записать в виде $\vec{r} = r_i \vec{a}_i$, а в Фурье-пространстве ввести вектор \vec{v} в виде $\vec{v} = \frac{\vec{h}}{\lambda} = \frac{h_i}{\lambda} \vec{b}_i$, то выражения (32) и (32a) примут вид

$$F\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}) e^{-i2\pi\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r}\right)} dV_a; \quad (34)$$

$$f(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} F\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}\right) e^{i2\pi\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r}\right)} dV_b, \quad (34a)$$

где dV_a и dV_b — элементы объема в пространстве объекта и в Фурье-пространстве.

Если ввести решеточный вектор $\vec{R} = u_i \vec{a}_i$ в пространстве объекта и решеточный вектор $\vec{H} = h_i^0 \vec{b}_i$ в Фурье-пространстве, то функции $\text{Ш}(\vec{r})$ и $\text{Ш}(\vec{h})$ могут быть записаны в виде

$$\text{Ш}(\vec{r}) = \sum_{\{u_i\}=-\infty}^{\infty} {}^{(3)} \delta(\vec{r} - \vec{R});$$

$$\text{Ш}(\vec{h}) = \sum_{\{h_i^0\}=-\infty}^{\infty} {}^{(3)} \delta(\vec{h} - \vec{H}).$$

Здесь надо иметь в виду и в дальнейшем не забывать, что векторы $\{\vec{a}_i\}$ и $\{\vec{b}_i\}$ вовсе не обязаны исходить из одной точки. Взаимное расположение начала координат в прообразе и в Фурье-образе зависит от того, какая физическая задача решается при помощи Фурье-преобразования.

При изучении дифракции начало координат прообраза обычно совмещается с центром объекта, на котором происходит дифракция, а начало координат Фурье-образа, т. е. точка, откуда строятся векторы $\{\vec{b}_i\}$ и $\{\vec{h}\}$, обязательно находится на некотором расстоянии от объекта, т. е. там, где реализуется дифракция Фраунгофера.

В том случае, когда функция $f(x)$ не может быть задана на промежутке $(-\infty, \infty)$, как это требуется для проведения Фурье-преобразования по рецепту (6), (7), и мы вынуждены работать на ограниченном промежутке $(-l/2, l/2)$, можно определить «усеченный» Фурье-образ как

$$F_{yc}(n) = \widehat{\mathfrak{F}}_{yc} [f(x)] = \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} f(x) e^{-i2\pi \frac{n}{l} x} dx. \quad (35)$$

Сравнивая соотношения (35) и (3), легко установить, что прообраз $f(x)$ должен отыскиваться из выражения

$$f(x) = \widehat{\mathfrak{F}}_{yc}^{-1} [F_{yc}(n)] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_{yc}(n) e^{i2\pi \frac{n}{l} x} \quad (35a)$$

В том случае, когда по каким-либо причинам ограничивается спектр функции $f(x)$, т. е. Фурье-образ, и мы вынуждены работать теперь уже в Фурье-пространстве на ограниченном промежутке $(-\kappa/2, \kappa/2)$, усеченный Фурье-прообраз можно определить как

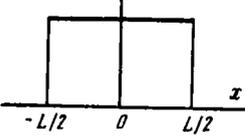
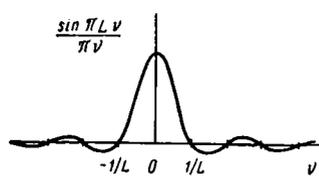
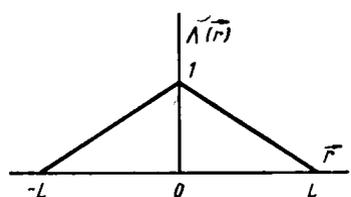
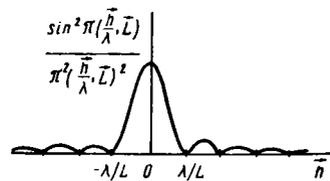
$$f_{yc}(n) = \widehat{\mathfrak{F}}_{yc}^{-1} [F(v)] = \frac{1}{\kappa} \int_{-\kappa/2}^{\kappa/2} F(v) e^{i2\pi \frac{n}{\kappa} v} dv \quad (36)$$

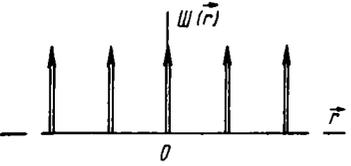
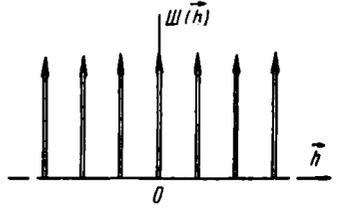
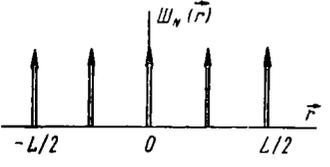
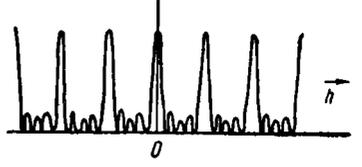
и

$$F(v) = \widehat{\mathfrak{F}}_{yc} [f_{yc}(n)] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_{yc}(n) e^{-i2\pi \frac{n}{\kappa} v} \quad (36a)$$

Хотя формулы (35), (36) взяты из теории рядов Фурье, описание соответствующих процедур как усеченного Фурье-преобразования в ряде случаев помогает легче понять свойства получаемых функций (табл. 1)

НЕКОТОРЫЕ ВАЖНЫЕ ФУНКЦИИ И ИХ ФУРЬЕ-ОБРАЗЫ

Прообраз	Фурье-образ
<p style="text-align: center;">Дельта-Функция</p> 	
<p style="text-align: center;">Функция щели $\Pi(x)$</p> 	
<p style="text-align: center;">$\Pi(x)$</p> <p style="text-align: center;">$\Pi(\vec{r})$</p> <p style="text-align: center;">$L = L_1 L_2 L_3$</p>	$L \frac{\sin \pi L \nu}{\pi L \nu}$ $\sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_1 \right) \sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_2 \right) \times$ $\times \sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_3 \right)$ $L \frac{\sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L} \right)}{\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_1 \right) \left(\pi \frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_2 \right) \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_3 \right)}$
<p style="text-align: center;">Функция треугольника</p>  $\Lambda(\vec{r}) = 1 - \frac{ \vec{r} }{ \vec{L} }$	 $ \vec{L} \frac{\sin^2 \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L} \right)}{\pi^2 \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L} \right)^2}$

Прообраз	Фурье-образ
<p>Неограниченная гребенка Дирака (решеточная функция)</p>  $\Psi(\vec{r}) = \sum_{\{u\}=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r} - \vec{R})$	 $\frac{1}{v_a} \Psi(\vec{h}) = \frac{1}{v_a} \sum_{\{h^0\}=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{h} - \vec{H})$
<p>Ограниченная гребенка Дирака</p>  $\Psi(\vec{r}) = \sum \delta(\vec{r} - \vec{R})$ $L = L_1 L_2 L_3$ <p>Функция Гаусса</p> $(2\pi \langle x^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} \exp - \frac{x^2}{2 \langle x^2 \rangle}$	 $\frac{\sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_1 \right) \sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_2 \right) \sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{L}_3 \right)}{\sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, a_1 \right) \sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, a_2 \right) \sin \pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, a_3 \right)}$ $\exp - 2\pi^2 \langle x^2 \rangle v^2$
<p>Функция Коши</p> $\frac{k}{\pi} (1 + k^2 x^2)^{-1}$	$\exp - \frac{2\pi}{k} v $

5. Свойства оптического сигнала

Напряженность электрического поля, созданного в точке $M(x_1, x_2, x_3)$ источником, работающим в режиме квазигармонических колебаний, может быть записана в виде

$$\vec{E}(M) = \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}, t) \exp i \left[2\pi\nu \left(t - \frac{|\vec{r}|}{v} \right) + \psi(t) \right]. \quad (36)$$

Здесь $\vec{E}(\vec{r}, t)$ — амплитуда поля;

$|\vec{r}|$ — расстояние от M до начала координат (до источника);

v — скорость распространения колебаний в данной среде;

$\psi(t)$ — начальная фаза, с которой колебания начинают из источника в момент времени $t = 0$;

$\frac{|\vec{r}|}{v}$ — время запаздывания, за которое колебания проходят путь от источника до M .

Для стационарного поля справедливо условие $\vec{E}_0(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r})$.

В случае линейно поляризованной волны выражение (36) достаточно записать в скалярной форме:

$$E = E_0 \exp i \left[2\pi\nu \left(t - \frac{|\vec{r}|}{v} \right) + \psi \right]. \quad (366)$$

Так как при дифракции нас интересует значение напряженности поля в различных точках M для некоторого момента времени t , целесообразно выделить в соотношении (366) член $\exp i2\pi\nu t$, определяющий мгновенную фазу, и записать выражение для напряженности поля в виде

$$E = ae^{i2\pi\nu t}, \quad (37)$$

где

$$a = E_0 e^{-i\Phi}.$$

В выражении (37)

$$\Phi = \varphi - \psi; \quad \varphi = 2\pi\nu \frac{|\vec{r}|}{v} = \frac{2\pi}{\lambda} |\vec{r}| = k |\vec{r}|.$$

Комплексная амплитуда $a_0 = E_0 \exp -i\Phi$ называется оптическим сигналом. Как видно, оптический сигнал содержит информацию о собственно амплитуде поля E_0 , о фазе $\varphi = k |\vec{r}|$, связанной с расстоянием рассматриваемой точки M от начала координат, и о начальной фазе ψ , имеющей место в начале координат в момент времени $t = 0$.

Предположим для определенности, что волна распространяется вдоль \vec{e}_3 . Если при этом $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$, $E_0(\vec{r}) = E_0(x_1, x_2)$ и $\varphi(\vec{r}) = \varphi(x_3)$, то волна называется плоской. В этом случае поверхностями постоянной фазы являются плоскости, перпендикулярные оси \vec{e}_3 .

Сферические волны будут иметь место в том случае, если для данного направления

$$E_0(\vec{r}) = \frac{\text{const}}{|\vec{r}|} \quad \text{и} \quad \varphi(\vec{r}) = \varphi(|\vec{r}|).$$

Как видно, в этом случае поверхностями постоянной фазы являются сферы радиуса $|\vec{r}|$ с центром в начале координат.

Рассмотрим свойства некоторых приемников оптического сигнала. В настоящее время чаще всего для этой цели применяются фотоэмульсии и различные счетчики излучений.

В фотоэмульсии, содержащей кристаллы бромистого серебра $AgBr$, поглощенный фотон приводит, в конечном итоге, к появлению атома серебра.

Очень упрощенно этот процесс может быть описан реакцией



Металлическое серебро, образовавшееся в результате поглощения фотона, образует центры скрытого фотографического изображения. Последующее проявление и фиксирование эмульсии ставит своей целью сделать металлическое серебро, появившееся в результате реакции, видимым и удалить из эмульсии ионы серебра, не принявшие участия в этой реакции.

В конечном итоге, количество металлического серебра, оставшееся в фотоэмульсии и определяющее ее почернение, оказывается пропорциональным количеству поглощенных фотонов и, вместе с тем, интенсивности действовавшей на эмульсию волны.

Аналогичным образом, различные счетчики фотонов независимо от принципов их работы измеряют интенсивность падающей на них волны, пропорциональную количеству поглощенных в счетчике фотонов.

Таким образом, все существующие приемники излучения оказываются квадратичными, т. е. регистрирующими интенсивность или квадрат амплитуды падающей волны; непосредственная регистрация фазового множителя $e^{i\Phi}$ квадратичным приемником невозможна, вследствие чего в таком приемнике происходит утеря части информации, содержащейся в оптическом сигнале.

Рассмотрим взаимодействие двух волн \vec{E}_1 и \vec{E}_2 в точке M , находящейся на некотором расстоянии от этих источников.

Пусть источники 1 и 2 (рис. 3) создают в точке $M(x_1, x_2, x_3)$ поля

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_{01} \exp i \left[2\pi\nu \left(t - \frac{|\vec{r}^{(1)}|}{v} \right) + \psi_1(t) \right];$$

$$\vec{E}_2 = \vec{E}_{02} \exp i \left[2\pi\nu \left(t - \frac{|\vec{r}^{(2)}|}{v} \right) + \psi_2(t) \right],$$

где $\psi_1(t)$ и $\psi_2(t)$ — начальные фазы, с которыми колебания распространяются из соответствующего источника;

$|\vec{r}^{(1)}|$ и $|\vec{r}^{(2)}|$ — расстояния точки M от первого и второго источников.

В том случае, когда поля \vec{E}_1 и \vec{E}_2 много меньше внутренних полей излучающих атомов, результирующее поле в точке M может быть найдено как

$$\vec{E}(M) = \vec{E}_1(M) + \vec{E}_2(M).$$

Ограничиваясь случаем, когда колебания обоих источников линейно поляризованы в одной и той же плоскости, можно найти сигнал в точке M как сумму сигналов, создаваемых первым и вторым источниками:

$$a(M) = a_1(M) + a_2(M).$$

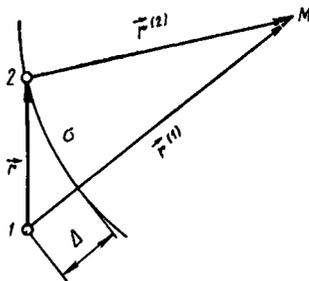


Рис. 3. Схема для расчета результирующего поля в точке M : 1 и 2 — источники линейно поляризованного излучения; σ — дуга окружности радиусом $|\vec{r}^{(2)}|$; Δ — оптическая разность хода лучей 1 M и 2 M

Наблюдаемая в точке M интенсивность будет равна квадрату оптического сигнала, усредненному по времени наблюдения:

$$\begin{aligned} I &= \langle a(M) a^*(M) \rangle = \langle (a_1 + a_2) (a_1 + a_2)^* \rangle = \\ &= \langle a_1 a_1^* \rangle + \langle a_2 a_2^* \rangle + \langle a_1 a_2^* \rangle + \langle a_1^* a_2 \rangle. \end{aligned} \quad (38)$$

Сигналы a_1 и a_2 могут быть записаны в виде

$$a_1 = E_{01} e^{-i\Phi_1}; \quad a_2 = E_{02} e^{-i\Phi_2}.$$

Так как

$$a_1 a_2^* + a_1^* a_2 = 2E_{01} E_{02} \cos(\Phi_1 - \Phi_2) = 2\text{Re}(a_1 a_2^*),$$

то выражение (38) может быть записано в виде

$$I = I_1 + I_2 + 2 \text{Re} \Gamma_{12}, \quad (38a)$$

где обозначено

$$\langle a_1 a_1^* \rangle = I_1; \quad \langle a_2 a_2^* \rangle = I_2; \quad \langle a_1 a_2^* \rangle = \Gamma_{12}.$$

Если время запаздывания для сигнала a_1 равно θ_1 , а для сигнала a_2 — θ_2 , то функция взаимной когерентности Γ_{12} может быть найдена как

$$\Gamma_{12} = \langle a_1(t - \theta_1) a_2^*(t - \theta_2) \rangle. \quad (39)$$

Прибавляя к аргументам обеих амплитуд θ_1 и обозначая $\theta_1 - \theta_2 = \theta$, получим из соотношения (39)

$$\begin{aligned} \Gamma_{12}(\theta) &= \langle a_1(t) a_2^*(t + \theta) \rangle = \\ &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau a_1(t) a_2^*(t + \theta) dt = \overline{a_1(t) \oplus a_2(t)}, \end{aligned}$$

где черта сверху означает нормировку по времени наблюдения τ .

Как видно, когерентность двух колебаний определяется нормированной функцией кросс-корреляции их амплитуд.

Удобно ввести нормированную степень когерентности $\gamma_{12}(\theta)$, положив

$$\gamma_{12}(\theta) = \frac{\Gamma_{12}(\theta)}{I} = \frac{\Gamma_{12}(\theta)}{(I_1 I_2)^{\frac{1}{2}}}.$$

Представив $\gamma_{12}(\theta)$ как

$$\gamma_{12}(\theta) = |\gamma_{12}(\theta)| e^{-i\Phi_{12}(\theta)},$$

можно переписать соотношение (38a) в виде

$$I = I_1 + I_2 + 2 \sqrt{I_1} \sqrt{I_2} |\gamma_{12}(\theta)| \cos \Phi_{12}(\theta).$$

Эта формула является основной при анализе результатов взаимодействия в точке M колебаний, исходящих из двух источников.

Если в любой точке M $|\gamma_{12}| = 0$, т. е.

$$I = I_1 + I_2, \quad (40)$$

то колебания 1 и 2 будут некогерентными.

Если хотя бы в одной точке $|\gamma_{12}| = 1$, т. е.

$$I = I_1 + I_2 + 2 \sqrt{I_1} \sqrt{I_2} \cos \Phi_{12}, \quad (41)$$

то колебания называются когерентными.

В случае $0 < |\gamma_{12}| < 1$ колебания оказываются частично когерентными.

Не останавливаясь на полном анализе временной когерентности колебаний, связанной с режимом работы источников и с анализом пространственной когерентности, зависящей от размеров источников, рассмотрим наиболее простой и важный случай работы двух источников на одинаковой частоте ν и в стационарном режиме, при котором $\psi_1 - \psi_2 = \text{const}$; без ущерба для дальнейшего можно положить $\psi_1 - \psi_2 = 0$.

В этом случае

$$\gamma_{12} = \frac{E_{01}e^{-i\varphi_1}E_{02}e^{i\varphi_2}}{\sqrt{E_{01}^2}\sqrt{E_{02}^2}} = e^{-i(\varphi_1 - \varphi_2)},$$

так что $|\gamma_{12}| = 1$; $\Phi_{12} = \varphi_1 - \varphi_2$ и

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1}\sqrt{I_2}\cos(\varphi_1 - \varphi_2). \quad (41a)$$

Если изобразить амплитуды $a_1 = E_{01}e^{-i\varphi_1}$ и $a_2 = E_{02}e^{-i\varphi_2}$ на фазовой плоскости, то легко видеть, что квадрат модуля суммы $a_1 + a_2$ оказывается равным выражению (41a).

Таким образом, при полностью когерентных колебаниях интенсивность может быть найдена как

$$I(M) = |a_1(M) + a_2(M)|^2.$$

Обобщая эту формулу на N источников, получим, что

$$I_{\text{ког}}(M) = \left| \sum_{j=1}^N a_j(M) \right|^2 \quad (42)$$

Обобщением выражения (40) для N источников будет соотношение

$$I_{\text{неког}}(M) = \sum_{j=1}^N |a_j(M)|^2.$$

Таким образом, при полностью когерентных колебаниях надо сначала найти суммарную амплитуду, а затем, возведя ее в квадрат, отыскивать полную интенсивность.

Для некогерентных колебаний наблюдаемая интенсивность равна сумме интенсивностей, создаваемых отдельными источниками.

Особенно простой вид принимает выражение (41) для случая $E_{01} = E_{02}$:

$$I = 2I_1(1 + \cos\Phi_{12}).$$

Отсюда видно, что когда колебания от источников 1 и 2 (см. рис. 3) приходят в некоторую точку $M (+)$ с одинаковой фазой, т. е.

$$\Phi_{12} = 2\pi h^\circ, \quad (42a)$$

где h° — целое число, то в этой точке

$$I(M(+)) = 4I_1;$$

если в другую точку $M (-)$ колебания приходят в противофазе, т. е.

$$\Phi_{12} = 2\pi \left(h^\circ \pm \frac{1}{2} \right), \quad (42b)$$

то $I(M(-)) = 0$.

Понятно, что общая энергия, излучаемая источниками 1 и 2 как в случае (42a), так и в случае (42b), остается одной и той же, однако в случае когерентности колебаний их интерференция приводит к перераспределению энергии по различным направлениям в соответствии с соотношением (41), в то время как при некогерентных колебаниях распределение энергии оказывается изотропным.

В заключение рассмотрим прохождение сигнала (не обязательно оптического) через линейную систему, инвариантную к сдвигу аргумента сигнала.

Пусть имеется некоторое устройство (система), на вход которого подается сигнал $f(x)$, преобразуемый системой в отклик $h(x)$. Если свойства системы описываются линейным оператором \hat{L} , то такая система называется линейной.

Символически можно записать, что

$$h(x) = \hat{L}[f(x)]. \quad (43)$$

Очень важным классом линейных систем являются системы, инвариантные к сдвигу (трансляции) сигнала.

Для таких систем

$$\hat{L}[f(x - x_0)] = h(x - x_0). \quad (43a)$$

В соответствии с основным свойством дельта-функции сигнал $f(x)$ можно представить в виде

$$f(x) = f(x) \oplus \delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \delta(x - \tau) d\tau.$$

Поддействовав оператором \hat{L} на сигнал $f(x)$ и учитывая свойство (14), получим из соотношений (43) и (43a)

$$h(x) = L[f(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \hat{L}[\delta(x - \tau)] d\tau.$$

Функция $\hat{L}[\delta(x - \tau)]$ представляет собой отклик системы на сигнал, описываемый дельта-функцией, сдвинутой относительно начала координат.

Если обозначить реакцию системы на сигнал в виде дельта-функции, т. е. импульсный отклик системы через $g(x)$, и положить $\hat{L}[\delta(x)] = g(x)$, то из соотношения (43a) получим, что $\hat{L}[\delta(x - \tau)] = g(x - \tau)$, и отсюда

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(x - \tau) d\tau = f(x) \oplus g(x). \quad (44)$$

Импульсный отклик $g(x)$ называют также функцией рассеяния или инструментальной функцией.

Соотношение (44) является основным для линейных пространственно-инвариантных систем: функция выхода системы (отклик) равна свертке функции входа (сигнал) с функцией рассеяния (инструментальная функция).

Важной проблемой, возникающей при использовании рассматриваемых систем, является получение информации о сигнале $f(x)$ в процессе эксперимента.

Очевидно, функция выхода $h(x)$ может быть измерена непосредственно как реакция системы на сигнал $f(x)$; для нахождения функции $g(x)$ необходимо подать на вход системы импульсный сигнал $\delta(x)$.

В итоге отыскание функции $f(x)$ сводится к решению интегрального уравнения (44), в котором неизвестная функция $f(x)$ находится под знаком интеграла.

Наиболее общим приемом является переход от пространственной к частотной области.

Если обозначить Фурье-образы функций $h(x)$, $f(x)$ и $g(x)$ соответственно как $H(v)$, $F(v)$ и $G(v)$, то из свойства (19) сразу получим, что

$$H(v) = F(v) G(v)$$

$$\text{или } F(v) = \frac{H(v)}{G(v)}. \quad (45)$$

Переход от пространственной области к частотной позволяет отыскать Фурье-образ сигнала по экспериментально определяемым Фурье-образам функции выхода и инструментальной функции, после чего функция $f(x)$ находится как прообраз функции $F(v)$.

Второй путь получения информации из соотношения (44) заключается в использовании свойства (11), которое позволяет найти не саму функцию $f(x)$, а

только величину $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$ из соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx. \quad (46)$$

Третий путь связан с использованием вторых центральных моментов функций $h(x)$, $f(x)$ и $g(x)$, т. е. величин типа

$$m_2^{\Phi} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \Phi(x) dx,$$

где x отсчитывается от начала координат, выбранного так, чтобы абсцисса центра тяжести профиля функции $\Phi(x)$ была равна нулю.

Вычисляя величину m_2^h , получим из соотношения (44)

$$m_2^h = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(x - \tau) x^2 d\tau dx.$$

Положив $x - \tau = y$, получим отсюда

$$\begin{aligned} m_2^h &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\tau^2 + 2\tau y + y^2) f(\tau) g(y) d\tau dy = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tau^2 f(\tau) g(y) d\tau dy + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 g(y) f(\tau) dy d\tau + \\ &+ 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tau f(\tau) y g(y) d\tau dy. \end{aligned} \quad (47)$$

Если нормировать площади, ограниченные функциями $g(x)$ и $h(x)$ на единицу, т. е. положить

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} h(x) dx = 1,$$

то из соотношения (47) сразу получим

$$m_2^h = m_2^f + m_2^g, \quad (47a)$$

так как третий интеграл в соотношении (47) равен нулю.

Таким образом, если второй центральный момент

$$m_2^f = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx$$

содержит интересующую нас информацию о сигнале $f(x)$, то может быть использовано соотношение (47а).

Основной трудностью, которую приходится преодолевать при практическом использовании соотношений (45), (46) и (47а), является замена интервала $(-\infty, \infty)$, в котором справедливы эти соотношения, конечным интервалом, в котором осуществляется регистрация функций $h(x)$ и $g(x)$.

6. Дифракция Френеля и Фраунгофера

Дифракцией называется отклонение от прямолинейного распространения света, обусловленное препятствием. Зоммерфельд [5] определяет дифракцию как «... любое отклонение света от прямолинейного хода лучей, если только оно не может быть истолковано как отражение или преломление». При макроскопическом подходе к явлению дифракции определение Зоммерфельда является достаточно всеобъемлющим: если же

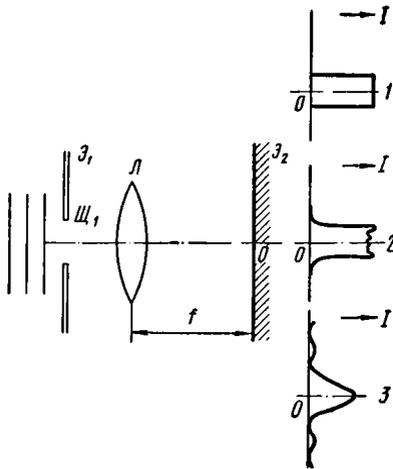


Рис. 4. Дифракция плоской волны на щели \mathcal{W}_1 . Распределение интенсивности I на экране \mathcal{E}_2 :

1 — сразу за отверстием; 2 — в области дифракции Френеля; 3 — в области дифракции Фраунгофера

рассматривать взаимодействие падающей волны с объектом на атомном уровне, то и отражение, и преломление, и все то, что с макроскопических позиций называется дифракцией, есть результат рассеяния падающей волны на объекте.

В случае электромагнитной волны рассеивание происходит на электронных оболочках; в случае де-бройлевской электронной волны рассеивает электростатический потенциал атомов; в случае аналогичной волны нейтронов рассеяние происходит на ядре и на магнитном моменте атома.

Поскольку нас интересует атомная структура и рассмотрение взаимодействия волны с объектом на атомном уровне, в дальнейшем термины «дифракция» и «рассеяние» будут употребляться в одинаковом смысле.

Обычно принято рассматривать дифракцию двух типов. Дифракцией Френеля называют явления, наблюдаемые вблизи препятствия; явления на бесконечности, наблюдаемые в параллельных лучах, называются дифракцией Фраунгофера. В случае плоской падающей волны и работы в оптическом диапазоне фраунгоферовскую дифракционную картину (фраунгоферовский спектр) можно наблюдать либо на расстояниях, много больших размера препятствия, либо на близком расстоянии, перенеся дифракционную картину из бесконечности в фокальную плоскость линзы, поставленной на пути дифрагированных пучков (рис. 4).

При работе в рентгеновском диапазоне дифракция Фраунгофера на кристаллических структурах наблюдается в непосредственной близости от образца.

Рассмотрим, что получится, если щель \mathcal{W}_1 , расположенную на экране \mathcal{E}_1 , осветить плоской волной, распространяющейся слева направо (см. рис. 4).

Если экран \mathcal{E}_2 расположен в непосредственной близости от \mathcal{E}_1 , то на нем возникает точное изображение щели \mathcal{W}_1 , в этом случае дифракционные явления не наблюдаются.

Если несколько отнести экран \mathcal{E}_2 от экрана \mathcal{E}_1 , то будет наблюдаться дифракция Френеля: происходит колебание освещенности в пределах пучка, прошедшего через щель, однако картина на экране в целом воспроизводит форму щели \mathcal{W}_1 .

Если отнести экран \mathcal{E}_2 на значительное расстояние, то будет наблюдаться дифракция Фраунгофера. В этом случае картина на экране не имеет ни малейшего сходства с формой щели \mathcal{W}_1 , а является дифракционным изображением точечного источника S_∞ , который, будучи отнесен от щели на бесконечность, дал систему плоских волн, падающих на щель.

При работе в оптическом диапазоне не обязательно относить экран \mathcal{E}_2 в бесконечность (практически на несколько десятков метров при ширине щели \mathcal{W}_1 около 0,01 мм). Дифракционная картина может быть перенесена линзой L из бесконечности в фокальную плоскость этой линзы.

Если убрать экран со щелью \mathcal{W}_1 , то роль щели в этом случае будет играть оправа линзы L , на которой и будет происходить дифракция падающей волны, а роль линзы сведется, как и прежде, к переносу дифракционного изображения источника из бесконечности в фокальную плоскость этой линзы.

Рассмотрим подробнее расчет дифракционной картины, создаваемой отверстием произвольной формы \mathcal{W} , расположенным в непрозрачном экране \mathcal{E}_1 , на который слева падает плоская волна $E = E_0 e^{i2\pi\nu t}$

Для характеристики свойств отверстия удобно ввести коэффициент пропускания $q(x_1, x_2)$, равный отношению комплексной амплитуды поля $f(x_1, x_2)$ сразу после отверстия к амплитуде поля перед отверстием:

$$q(x_1, x_2) = \frac{f(x_1, x_2)}{E_0}.$$

Если отверстие «пустое», т. е. в его пределах нет рассеивающих центров, то можно положить

$$q(x_1, x_2) = \Pi(x_1, x_2) = \begin{cases} 1 & \text{внутри отверстия} \\ 0 & \text{вне отверстия.} \end{cases} \quad (48)$$

В том случае, когда размеры отверстия в экране \mathcal{E}_1 и размеры области наблюдения дифракционной картины на экране \mathcal{E}_2 много меньше расстояния l между \mathcal{E}_1 и \mathcal{E}_2 (рис. 5), амплитуду поля $A(y_1, y_2)$ дифрагированной волны в точке $M(y_1, y_2)$, расположенной на экране \mathcal{E}_2 вблизи оси x_3 , можно найти по формуле Френеля—Кирхгофа, записанной для данного случая в форме [6]

$$A(y_1, y_2) = \frac{1}{i\lambda} \iint_{\text{по отверстию}} f(x_1, x_2) \frac{\exp ikr}{r} dx_1 dx_2, \quad (49)$$

здесь r — расстояние от точки (x_1, x_2) в отверстии до точки M (см. рис. 5).

Принимается, что вектор \vec{k} падающей волны направлен вдоль x_3 . В том случае, когда $q(x_1, x_2)$ задано в форме соотношения (48), пределы интегрирования можно расширить на интервал $(-\infty, \infty)$, подразумевая, что $f(x_1, x_2)$ равно нулю за пределами отверстия.

Множитель $i^{-1} = -i$ перед интегралом означает, что дифрагированная волна опережает на четверть периода волну, прошедшую в точку M без дифракции [7].

Смысл выражения (49) очевиден. Поле в точке M рассматривается в соответствии с формулой (42) как сумма элементарных полей, созданных сферическими волнами с амплитудой $r^{-1}f(x_1, x_2) dx_1 dx_2$, распространяющимися в соответствии

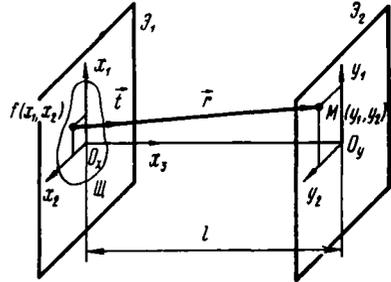


Рис. 5. Рассеяние плоской волны с амплитудой E на отверстии \mathcal{W} :

$f(x_1, x_2)$ — амплитуда поля сразу за отверстием; \mathcal{E}_2 — дифракционный экран, на котором наблюдается дифракционная картина

с принципом Гюйгенса из каждой точки (x_1, x_2) отверстия, «затянутого» плоской падающей волной. Множитель $\exp ikr$ учитывает изменение фазы волны при прохождении колебания от точки (x_1, x_2) до точки (y_1, y_2) , т. е. на пути длиной r .

Подставляя r в виде

$$r = [(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + l^2]^{\frac{1}{2}} \quad (50)$$

и ограничиваясь ввиду условия

$$(y_1 - x_1) \ll l \text{ и } (y_2 - x_2) \ll l \quad (50a)$$

первыми тремя членами разложения, получим из соотношения (50)

$$r \approx l \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{y_1 - x_1}{l} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{y_2 - x_2}{l} \right)^2 \right]. \quad (50b)$$

Условие (50a) определяет область, в которой наблюдается дифракция Френеля. Подставляя соотношение (50b) в (49a) и полагая в формуле (49) $r \approx l$ в знаменателе подынтегрального выражения, получим

$$A(y_1, y_2) = \frac{\exp ikl}{i\lambda l} \iint_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2) \exp \left\{ i \frac{k}{2l} [(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2] \right\} dx_1 dx_2. \quad (51)$$

Как видно, соотношение (51) может быть записано в виде свертки

$$A(y_1, y_2) = Cf(y_1, y_2) \oplus e^{i\alpha(y_1^2 + y_2^2)} \quad (51a)$$

$$\text{где } C = \frac{\exp ikl}{i\lambda l}; \quad \alpha = \frac{k}{2l}.$$

Функцию $\exp i\alpha(y_1^2 + y_2^2) = z(y)$ называют функцией Френеля. Соотношение (51a) показывает, что в области дифракции Френеля амплитуда поля равна (с точностью до постоянного фазового множителя) свертке амплитуды поля сразу после отверстия с функцией Френеля:

$$A(y_1, y_2) = Cf(y_1, y_2) \oplus z(y_1, y_2). \quad (51b)$$

Соотношение (51b) может быть записано иначе. Для одномерного случая

$$\begin{aligned} f(y) \oplus z(y) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) e^{i\alpha(y-\tau)^2} d\tau = e^{i\alpha y^2} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) e^{i\alpha\tau^2} e^{-i2\alpha y\tau} d\tau = \\ &= e^{i\alpha y^2} \widehat{\mathfrak{F}} [f(x) e^{i\alpha x^2}], \end{aligned}$$

если положить, что Фурье-преобразование функции $f(x) e^{i\alpha x^2}$ совершается на частоте ν , при которой $2\alpha y = 2\pi\nu$ или

$$\nu = \frac{\alpha}{\pi} y = \frac{k}{2\pi l} y = \frac{y}{\lambda l}. \quad (52)$$

Из выражения (51), позволяющего определить амплитуду поля в области Френеля, легко получить выражение для амплитуды поля в области дифракции Фраунгофера, где расстояние l настолько велико, что

$$\frac{k}{2l} (x_1^2 + x_2^2) \ll 1, \quad (52a)$$

из-за чего в подинтегральном выражении (51) можно положить $\exp i \frac{k}{2l} (x_1^2 + x_2^2) \approx 1$ и получить

$$A(y_1, y_2) = C' F(v_1, v_2) = C' \widehat{\mathcal{F}}[f(x_1, x_2)], \quad (53)$$

где $C' = C \exp i\alpha (y_1^2 + y_2^2)$, а частоты v_1 и v_2 определены в соотношении (52).

Таким образом, в области дифракции Фраунгофера амплитуда дифрагированной волны равна, с точностью до постоянного фазового множителя, Фурье-образу амплитуды поля сразу за препятствием.

С помощью соотношения (52а) можно оценить требуемое для наблюдения дифракции Фраунгофера удаление экрана \mathcal{E}_2 от препятствия. Так, при работе в оптическом диапазоне с зеленым светом $\lambda \approx 5 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ и ширине щели в 1 мм получим $l \gg 10 \text{ м}$; при работе в рентгеновском диапазоне $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$ и ширине щели в 4 \AA (расстояние между атомами) $l \gg 10^{-5} \text{ мм}$; при $\lambda = 1 \text{ \AA}$ и ширине щели $3 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ (размер когерентной области в кристалле) $l \gg 1 \text{ см}$.

7. Дифракция Фраунгофера на отверстиях и на дифракционной решетке

Пользуясь математическим аппаратом п. 6, легко найти распределение амплитуды и интенсивности на дифракционной картине, создаваемой некоторыми объектами.

Рассмотрим дифракцию на прямоугольном отверстии размера $L_1 \times L_2$. Принимая для простоты, что амплитуда поля слева от отверстия равна единице, $E_0(x_1, x_2) = 1$, получим для фраунгоферовской амплитуды выражение

$$A(v_1, v_2) = C' \widehat{\mathcal{F}}[q(x_1, x_2)].$$

Амплитудный коэффициент пропускания $q(x_1, x_2)$ для «пустого» отверстия является не чем иным, как функцией щели:

$$q(x_1, x_2) = \Pi(x_1, x_2) = \Pi(x_1) \Pi(x_2),$$

поэтому амплитуда $A(v_1, v_2)$ оказывается равной (с учетом табл. 1)

$$A(v_1, v_2) = C' \widehat{\mathcal{F}}[\Pi(x_1, x_2)] = C' \widehat{\mathcal{F}}[\Pi(x_1)] \widehat{\mathcal{F}}[\Pi(x_2)] \times \\ \times [\Pi(x_2)] = C' \frac{\sin \pi L_1 v_1}{\pi v_1} \frac{\sin \pi L_2 v_2}{\pi v_2}, \quad (54)$$

и интенсивность

$$I(v_1, v_2) = A(v_1, v_2) A^*(v_1, v_2) = \frac{\sin^2 \pi L_1 v_1}{(\pi v_1)^2} \frac{\sin^2 \pi L_2 v_2}{(\pi v_2)^2}. \quad (54a)$$

Функции (54) и (54а) изображены в табл. 1.

Разберем случай дифракции Фраунгофера на дифракционной решетке. Дифракционной решеткой называется устройство, обеспечивающее периодическую модуляцию падающей волны по амплитуде (амплитудная решетка), по фазе (фазовая решетка) или по обоим этим параметрам (рис. 6). Так же, как и для отверстия, для решетки можно ввести комплексный коэффициент пропускания (для отражательной решетки это будет коэффициент отражения), который

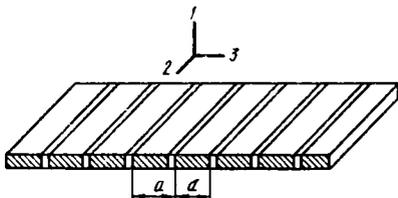


Рис. 6. Дифракционная решетка. Непрозрачные участки имеют длину $a-d$; длина решетки L

в общем случае описывает как изменение фазы, так и изменение модуля амплитуды при прохождении волны через решетку.

Если принять, что амплитуда поля перед решеткой равна единице, то амплитуда поля сразу после решетки будет равна

$$f(x) = q(x) \oplus \text{Ш}_N(x).$$

В том случае, когда плоская волна падает нормально на решетку, можно воспользоваться соотношением (53) и записать амплитуду поля в области Фраунгофера как

$$\begin{aligned} A(v) &= \widehat{\mathcal{F}}[f(x)] = C' \widehat{\mathcal{F}}[q(x)] \widehat{\mathcal{F}}[\text{Ш}_N(x)] = \\ &= C'Q(v) \frac{\sin \pi Nav}{\sin \pi av}, \end{aligned} \quad (55)$$

где $Q(v) = \widehat{\mathcal{F}}[q(x)]$.

Интенсивность дифракционной картины запишется как

$$I(v) = |Q(v)|^2 \frac{\sin^2 \pi Nav}{\sin^2 \pi av}. \quad (55a)$$

Выражения (55) и (55a) можно записать в другой форме, более удобной для анализа. Выражая $\text{Ш}_N(x)$ как $\text{Ш}_N(x) = \Pi(x) \text{Ш}(x)$, где функция щели определена на отрезке $(-L/2, L/2)$, мы можем получить, что

$$f(x) = q(x) \oplus \Pi(x) \text{Ш}(x),$$

откуда

$$\begin{aligned} A(v) &= C' \widehat{\mathcal{F}}[f(x)] = C' \widehat{\mathcal{F}}[q(x)] \widehat{\mathcal{F}}[\Pi(x) \text{Ш}(x)] = \\ &= C'Q(v) \widehat{\mathcal{F}}[\Pi(x)] \oplus \widehat{\mathcal{F}}[\text{Ш}(x)] = C'Q(v) \frac{\sin \pi Nav}{\pi v} \oplus \frac{1}{a} \text{Ш}(v) = \\ &= C'Q(v) \frac{\sin \pi Nav}{\pi av} \oplus \text{Ш}(v); \end{aligned} \quad (56)$$

$$I(v) = |Q(v)|^2 \frac{\sin^2 \pi Nav}{(\pi av)^2} \oplus \text{Ш}(v). \quad (56a)$$

Функция (55) для случая $|Q(v)| = 1$ изображена в табл. 1. Распределение интенсивности, описываемое выражениями (55a) или (56a), изображено на рис. 7

в предположении $|Q(v)|^2 = 1$.

Прежде чем подробно рассматривать смысл выражения (55a), получим его для $|Q(v)|^2 = 1$ прямым способом, суммируя амплитуды лучей, рассеянных отдельными элементами решетки, у которой коэффициент пропускания $q(x)$ является дельта-функцией.

Пусть на такую решетку с N рассеивающими элементами, отстоящими друг от друга на расстоянии a , падает плоская волна единичной амплитуды, направление которой задается вектором \vec{i}^0 (рис. 8).

Оптическая разность хода Δ для двух лучей, рассеянных нуле-

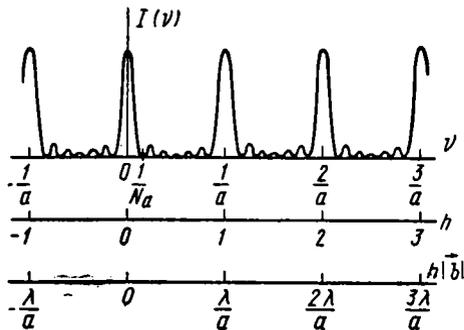


Рис. 7 Распределение интенсивности на дифракционном экране, создаваемое решеткой, изображенной на рис. 6

вым и первым элементом решетки, равна разности длин \overline{OA} и $\overline{O'A'}$:

$$\Delta(1) = \overline{OA} - \overline{O'A'} = \\ = (\vec{t}, \vec{a}) - (\vec{t}^0, \vec{a}).$$

Разность хода $\Delta(u)$ для двух лучей, рассеянных нулевым и u -м элементом решетки, равна

$$\Delta(u) = [(\vec{t} - \vec{t}^0), u \vec{a}].$$

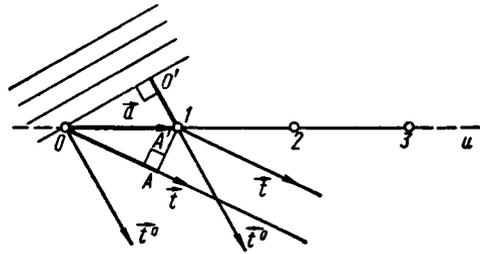


Рис. 8. Разность хода, создаваемая при наклонном падении плоской волны на решетку

Обозначая вектор, определяющий положение u -го элемента через $\vec{r} = ua$, и вводя волновой вектор $\vec{k} = 2\pi/\lambda \vec{t}$, получим для разности фаз между нулевым и u -м рассеянными в направлении \vec{k} лучами величину

$$\varphi(\vec{r}) = [(\vec{k} - \vec{k}^0), \vec{r}] = (\vec{s}, \vec{r}),$$

где $\vec{s} = \vec{k} - \vec{k}^0$.

Подсчитывая общую амплитуду как сумму амплитуд для отдельных лучей (см. п. 5), рассеянных в направлении \vec{k} всеми элементами решетки, получим

$$A(\vec{s}) = \sum_{u=0}^{N-1} e^{-i\varphi(u, \vec{s})} = \frac{1 - \exp -iN(\vec{s}, \vec{a})}{1 - \exp -i(\vec{s}, \vec{a})} = \\ = e^{-i(N-1)\frac{(\vec{s}, \vec{a})}{2}} \frac{\sin N\frac{(\vec{s}, \vec{a})}{2}}{\sin \frac{(\vec{s}, \vec{a})}{2}}. \quad (57)$$

Так же, как и в соотношении (26), фазовый множитель появился из-за того, что середина решетки не совпадает с началом координат.

Распределение интенсивности примет вид

$$I(\vec{s}) = \frac{\sin^2 N\frac{(\vec{s}, \vec{a})}{2}}{\sin^2 \frac{(\vec{s}, \vec{a})}{2}}. \quad (57a)$$

Положим пока чисто формально

$$\frac{(\vec{s}, \vec{a})}{2} = \pi h, \quad (57b)$$

где h — любое, не обязательно целое, число.

Положение главных максимумов функции (57a), изображенной на рис. 7, будет определяться целочисленными значениями переменной h , которые в дальнейшем будут обозначаться как h^0 :

$$h^0 = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \text{ и т. д.},$$

т. е.

$$(\vec{s}, \vec{a}) = 2\pi h^0. \quad (58)$$

Смысл соотношения (58), называемого соотношением Лауэ, очевиден: главные максимумы будут наблюдаться в тех направлениях, для которых разность фаз лучей, рассеянных соседними элементами решетки, будет кратна 2π ; очевидно, оптическая разность хода при этом окажется кратной длине волны.

Выясним теперь смысл пространственной частоты ν , являющейся координатой в пространстве Фурье-образа. Пространственная частота ν была введена в соотношение (52) с тем, чтобы представить амплитуду дифрагированной волны, измеряемую на экране \mathcal{E}_2 , расположенном перпендикулярно \vec{t}^0 на расстоянии l от объекта, как результат Фурье-преобразования (53). Связь между расстоянием y от начала координат на экране \mathcal{E}_2 до точки, в которой измеряется амплитуда, и пространственной частотой задавалась в виде $\nu = y/\lambda l$.

Все расчеты в п. 6 велись в нормированном базисе $\{\vec{e}_i\}$; для одномерного случая (53) можно переписать в виде

$$\vec{y} = y \vec{e}^{-1} = \lambda l \nu \vec{e}^{-1}, \quad (59)$$

где \vec{e}^{-1} — базисный вектор, при помощи которого описывается метрика на экране \mathcal{E}_2 ; связь между \vec{e} и \vec{e}^{-1} задается правилом нормировки

$$(\vec{e}, \vec{e}_j^{-1}) = \delta_{ij}. \quad (59a)$$

Как видно из соотношения (53) и рис. 5, пространственная частота ν с точностью до длины волны λ равна направляющему косинусу вектора \vec{t} дифрагированной волны: $\nu = \cos \psi / \lambda$, так как весь расчет в п. 6 проводился в предположении $r \approx l$.

Для такого объекта, как решетка, удобно перейти от нормированных базисов $\{\vec{e}_i\}$ и $\{\vec{e}_i^{-1}\}$ к базисным векторам, длины которых согласованы с расстояниями между рассеивающими центрами в объекте и с расстояниями между главными максимумами на дифракционной картине.

Для одномерного случая, когда расстояние между рассеивающими центрами равно a , удобно для описания решетки использовать вектор \vec{a} ; для описания дифракционной картины используем вектор \vec{b} такой, что его длина равна расстоянию между главными максимумами:

$$|\vec{b}| = \lambda / |\vec{a}|,$$

а направление вектора \vec{b} совпадает с \vec{e}^{-1} :

$$\vec{b} = \frac{\lambda}{|\vec{a}|} \vec{e}^{-1}. \quad (60)$$

Для того чтобы не зависеть от расстояния до экрана \mathcal{E}_2 , положим $l = 1$ и обозначим вектор \vec{y} при $l = 1$ как \vec{h} :

$$\vec{h} = \frac{\vec{y}}{l} = \vec{y}_{l=1}. \quad (60a)$$

Записывая \vec{h} в нормированном базисе \vec{e}^{-1} и в базисе \vec{b} , получим, используя соотношения (59) и (60), что

$$\vec{h} = \lambda \nu \vec{e}^{-1} = h \vec{b} = h \frac{\lambda}{|\vec{a}|} \vec{e}^{-1},$$

откуда можно установить связь между координатой h и частотой ν :

$$\nu = \frac{h}{|a|}. \quad (61)$$

Как видно, при учете соотношений (57б) и (61) выражения (57а) и (56а) будут описывать одну и ту же функцию, так как в (57а) положено $|Q(\nu)|^2 = 1$.

Используя формулы (60) и (61), можно найти соотношение между векторами $\vec{\nu}$ и \vec{h} :

$$\vec{\nu} = \nu \vec{e}^{-1} = \frac{h}{|a|} \vec{e}^{-1} = \frac{h\vec{b}}{\lambda} = \frac{\vec{h}}{\lambda}, \quad (61a)$$

которое было чисто формально введено в п. 4.

Вектор \vec{h} , определяющий положение точки на дифракционном экране, отстоящем на единичном расстоянии от объекта, в дальнейшем будем называть дифракционным вектором. Как видно, вектор \vec{h} , равно как и его координата h , имеет размерность $[L]^0$ только потому, что дифракционная картина наблюдается на экране, отстоящем на единицу от объекта, вообще же говоря, \vec{h} является «обычным» вектором, определяющим положение точки в пространстве; как видно из соотношения (61а), вектор пространственной частоты $\vec{\nu}$ отличается от \vec{h} только множителем λ^{-1} .

Соотношение (57б) связывает координаты дифракционного вектора \vec{h} с разностью волновых векторов падающей и рассеянной волны и с вектором \vec{a} , соединяющим два соседних рассеивающих центра.

При заданной структуре объекта может изменяться только направление вектора \vec{a} (например, при вращении образца); равным образом в эксперименте можно изменять как модуль, так и направление вектора \vec{a} . Хотя это соотношение мы получили при рассмотрении дифракции на решетке, оно имеет совершенно общий смысл, будучи отнесено к любой паре рассеивающих центров.

Основное соотношение (53), позволяющее найти амплитуду дифрагированной волны как Фурье-образ амплитуды поля сразу за объектом, можно записать, опуская постоянную C' , в виде

$$A(\vec{h}) = \vec{\mathcal{F}}[f(\vec{r})] = \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}) e^{-i2\pi\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r}\right)} dV_a. \quad (62)$$

Хотя соотношение (53) было получено для частного случая падения плоской волны с вектором \vec{k}^0 , направленным по \vec{e}_3 , мы можем применять соотношение (62) без этих ограничений, имея в виду, что при наблюдении интенсивности постоянный фазовый множитель C' пропадает ($C'C'^* = 1$), а для того, чтобы определить, какие дифракционные максимумы из множества $\{A(\vec{h})\}$, полученного по соотношению (62), будут наблюдаться при заданных $\{a_i\}$ и \vec{k}^0 , нужно учесть соотношение (57б).

Запишем систему уравнений Лауэ для 3-пространства:

$$\frac{\vec{s} \cdot \vec{a}_i}{2} = \pi h_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Здесь $\{h_i\}$ — координаты вектора \vec{h} , записанного при помощи векторов сопряженного базиса $\{\vec{b}_i\}$:

$$\vec{h} = h_i \vec{b}_i = \frac{(\vec{s}, \vec{a}_i)}{2\pi} \vec{b}_i. \quad (63)$$

Выражая вектор \vec{s} также в базисе $\{\vec{b}_i\}$:

$$\vec{s} = s_i \vec{b}_i \quad (63a)$$

и умножая скалярно правую и левую части этого выражения на \vec{a}_i , получим

$$(\vec{s}, \vec{a}_i) = s_i (\vec{b}_i, \vec{a}_i)$$

(не суммировать справа по $i!$), откуда, учитывая соотношение (33):

$$s_i = \frac{1}{\lambda} (\vec{s}, \vec{a}_i).$$

Сравнивая формулы (63) и (63a), получим

$$\vec{h} = \frac{\lambda}{2\pi} \vec{s} = \vec{t} - \vec{t}^0. \quad (64)$$

Как видно, во всех случаях

$$|\vec{h}| \leq 2. \quad (64a)$$

Уравнение (64) описывает в векторной форме систему уравнений Лауэ; здесь в явном виде исчезла зависимость координат вектора \vec{h} от $\{\vec{a}_i\}$, хотя в действительности она сохранилась благодаря условиям нормировки (33).

При введении метрики непосредственно в формулы для Фурье-преобразования очень просто разобраться в том, что будет происходить с дифракционной картиной при изменении некоторых параметров в пространстве объекта. Так, например, при увеличении длины волны λ расстояние между дифракционными максимумами, равное $\lambda |a|^{-1}$, будет увеличиваться. При работе в оптическом диапазоне высокочастотная часть спектра ограничивается размерами входного (или выходного) зрачка системы, т. е. чаще всего размерами соответствующих линз. Ясно, что при достаточно больших λ в спектре, т. е. на дифракционной картине, может остаться только нулевой максимум с $h^0 = 0$.

При работе в рентгеновском диапазоне линзы не применяются, но в полной мере проявляется действие необходимого для наблюдения максимумов с $|h^0| > 0$ условия $|\vec{H}| \leq 2$.

Естественно, что это условие имеет место и при работе в оптическом диапазоне, но там оно обычно маскируется ограничениями, налагаемыми размерами зрачков.

При работе в рентгеновском диапазоне условие (64a) также может привести к исчезновению всех максимумов, за исключением нулевого, что произойдет при $|\vec{H}|_{\min} = |\vec{b}| = \lambda/|\vec{a}| > 2$, т. е. при $\lambda > 2|\vec{a}|$.

Условие (64) допускает очень наглядную и удобную интерпретацию, предложенную Эвальдом. Так как $|\vec{t}| = |\vec{t}^0| = 1$, то векторы \vec{h} , \vec{t} и \vec{t}^0 образуют равнобедренный треугольник, одна из вершин которого находится в начале координат Фурье-пространства, а другая, откуда исходят векторы \vec{t} и \vec{t}^0 , — в центре сферы Эвальда радиуса единица. Третья вершина треугольника будет всегда находиться на поверхности сферы Эвальда, позволяя, таким образом, определить, какие из функций множества $\{I(\vec{h})\}$, найденного в соответствии с соотношением (62), будут соответствовать реально наблюдаемым дифракционным максимумам (рис. 9).

На рис. 10 изображен случай, который может наблюдаться при дифракции падающей волны с вектором \vec{t}^0 на объекте, множество функций интенсивности которого, полученное при помощи соотношения (62), состоит из $\{I_1(\vec{h}), I_2(\vec{h}), I_3(\vec{h}), I_4(\vec{h})\}$. Области существования функций $I_j(\vec{h})$ изображены заштрихованными областями на концах соответствующих дифракционных векторов и обозначены как \mathcal{L}_j .

Объект, на котором происходит дифракция, расположен в центре сферы Эвальда (точка O). Начало координат Фурье-пространства (точка 000) находится на единичном расстоянии от объекта; концы всех дифракционных векторов \vec{h} , соответствующие реально наблюдаемым дифракционным максимумам, также находятся на единичном расстоянии от объекта, что соответствует условию (60а).

Нелишне подчеркнуть, что объект действительно находится в точке O и дифрагированные лучи действительно исходят всегда из этой точки, т. е. из объекта. Учитывая это обстоятельство, легко видеть, что нормировка (33), приводящая к тому, что радиус сферы Эвальда оказывается равным единице, является более предпочтительной, чем нормировка типа (59а), при которой радиус сферы Эвальда равен λ^{-1} и точка O в случае работы

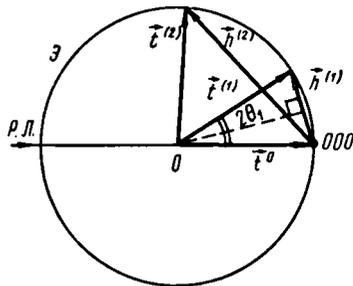


Рис. 9. Отбор реально наблюдаемых при данных условиях эксперимента дифракционных максимумов при помощи процедуры Эвальда. Геометрическое представление условия $\vec{t} - \vec{t}^0 = \vec{h}$

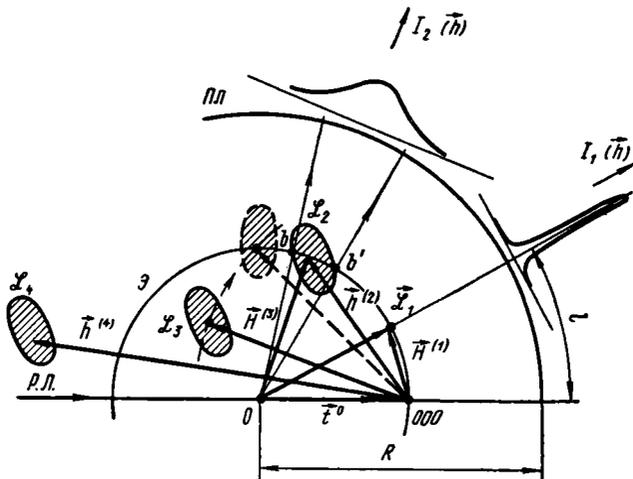


Рис. 10. Применение процедуры Эвальда к множеству функций $\{I(\vec{h})\}$:

Пл — пленка для регистрации максимумов

в режиме (100а) уже не может быть совмещена с центром неподвижного объекта.

Как видно из рис. 10, при данном расположении объекта и, следовательно, квадрата его Фурье-образа, т. е. множества $\{I_1, I_2, I_3, I_4\}$ относительно \vec{t}^0 , сферой Эвальда пересечется дельта-функция $I_1(\vec{h})$ и колоколообразная функция

$I_2(\vec{h})$, что даст дельта-образный пик интенсивности для $I_1(\vec{h})$ и размытый пик, отвечающий сечению функции $I_2(\vec{h})$ дугой bb' для $I_2(\vec{h})$. Функция $I_2(\vec{h})$ не пересекается сейчас сферой Эвальда и не дает дифракционного максимума, однако при повороте объекта по часовой стрелке, что будет сопровождаться таким же поворотом Фурье-образа, может быть достигнуто пересечение области существования функции $I_3(\vec{h})$ и сферы Эвальда с возникновением пика интенсивности. Конечно, при этом погаснут пики $I_2(\vec{h})$ и $I_1(\vec{h})$.

Пик интенсивности от функции $I_4(\vec{h})$ вообще не может быть получен, так как вся область существования находится за пределами сферы Эвальда, $|\vec{h}^{(4)}| > 2$.

Легко сообразить, что нужно сделать для того, чтобы «вытянуть» пик $I_4(\vec{h})$. Так как $|\vec{b}_i| = \lambda |a_i|^{-1}$, то, уменьшив длину волны дифрагирующего излучения, мы уменьшим тем самым длины всех \vec{h} векторов, все множество $\{I_1, I_2, I_3, I_4\}$ стянется к точке (000), и если при этом окажется, что $|\vec{h}^{(4)}| < 2$, то при подходящем повороте объекта может быть получено сечение \mathcal{L}_4 сферой Эвальда.

Очень просто зафиксировать пики интенсивности, уловив дифрагированные пучки фотопленкой, расположенной соосно с объектом (рис. 10). В этом случае профиль интенсивности оказывается функцией угла между \vec{i}^0 и \vec{i} , обычно обозначаемого как 2θ . Так, для $I_2(\vec{h})$ получим на пленке

$$I_2(\vec{h})|_{bb'} = I_2'(2\theta),$$

причем угол 2θ измеряется прямо на пленке (см. рис. 10): $2\theta = l/R$. От угла 2θ легко перейти к модулю вектора \vec{h} (см. рис. 9): $|\vec{h}| = 2 \sin \theta$.

В качестве примера использования построения Эвальда снова рассмотрим дифракцию на одномерной решетке, но вместо оптической решетки, изображенной на рис. 6, которая дает цилиндрические рассеянные волны, возьмем решетку, состоящую из цепочки рассеивающих центров, отстоящих друг от друга на расстоянии a . В том случае, когда размеры рассеивающих элементов много меньше длины волны λ , можно положить $q(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$, так что каждый элемент (узел решетки) будет являться центром вторичной рассеянной сферической волны.

Используя тот же путь, что и при выводе соотношения (55), получим, опуская здесь и в дальнейшем постоянную C' :

$$A(\vec{h}) = \hat{\mathcal{F}}[f(\vec{r})] = \hat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r}) \cdot \mathcal{M}(\vec{r})] = \hat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r})] \oplus \hat{\mathcal{F}}[\mathcal{M}(\vec{r})]. \quad (65)$$

В нашем случае решетчатая функция одномерная, и ее следует записать в ромбическом базисе (рис. 11) как

$$\mathcal{M}(\vec{r}) = \sum_{u_3=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r}_3 - \vec{R}_3), \quad (66)$$

где $\vec{r}_3 = r_3 a_3$; $\vec{R}_3 = u_3 a_3$; r_3 — текущая координата; u_3 — целое число. Функцию формы следует записать в виде

$$\Pi(\vec{r}) = \delta(\vec{r}_1) \delta(\vec{r}_2) \Pi(\vec{r}_3),$$

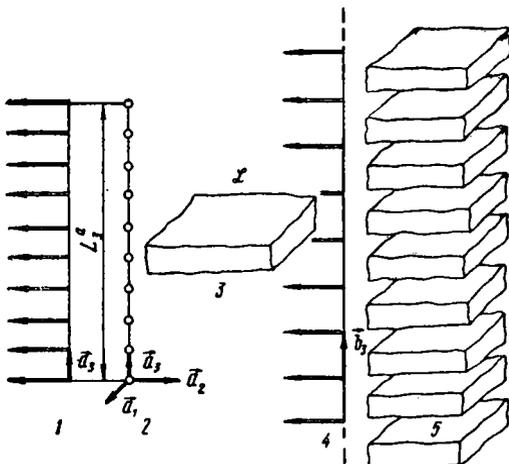
где $\vec{r}_1 = r_1 a_1$, $\vec{r}_2 = r_2 a_2$,

и функция $\Pi(\vec{r}_3)$ определена на отрезке $(-L_3/2, L_3/2)$.

рис. 11. Дифракция на одномерной точечной решетке:

1 — одномерная решеточная функция $\Pi(\vec{r})$; 2 — область существования решеточной функции, т. е. множество узлов, отстоящих друг от друга на расстоянии a ; 3 — область существования функции

$1(h_1) 1(h_2) (\pi h_3)^{-2} \sin^2 \pi N_3 h_3$ имеет неограниченные размеры по осям \vec{b}_1 и \vec{b}_2 . По оси b_3 область \mathcal{L} ограничена двумя плоскостями, находящимися друг от друга на расстоянии $\lambda L_3^{-1} = = L_3^b$; 4 — решеточная функция $\Pi(\vec{h})$; 5 — область существования функции $|A(\vec{h})|^2$. Пакет, сложенный из областей типа 3, имеет неограниченные размеры по оси \vec{b}_3



В итоге получим из соотношения (65)

$$A(\vec{h}) = 1(\vec{h}_1) 1(\vec{h}_2) |a_3| \frac{\sin \pi N_3 h_3}{\pi h_3} \oplus \frac{1}{|a_3|} \sum_{h_3^0=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{h}_3 - \vec{H}_3) =$$

$$= 1(\vec{h}_1) 1(\vec{h}_2) \frac{\sin \pi N_3 h_3}{\pi h_3} \oplus \Pi(\vec{h}_3),$$

где $\vec{h}_3 = h_3 \vec{b}_3$ и $\vec{H}_3 = h_3^0 \vec{b}_3$, а

$$1(\vec{h}) = 1(\vec{h}_1) 1(\vec{h}_2) \frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2} \oplus \Pi(\vec{h}_3).$$

Область существования функции $1(\vec{h})$ изображена на рис. 11.

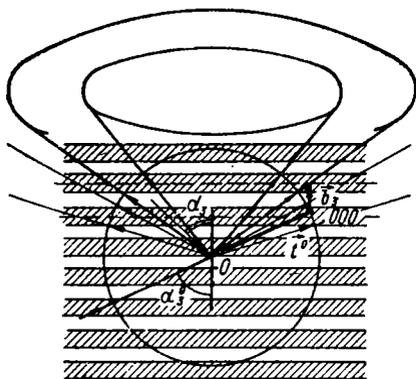


рис. 12. Отыскание дифракционной картины, создаваемой одномерной решеткой. Множество расширенных конусов, создаваемых ограниченной решеткой. Изображены конусы нулевого и первого порядков

Применяя построение Эвальда, получим (рис. 12), что дифракционные максимумы будут иметь вид конусов, причем ширина максимума обуславливается областью существования функции $\frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2}$, равной с точностью до множителя, мало отличающегося от единицы, $|b_3| N_3^{-1}$, если оценивать этот размер на половине высоты функции.

При $|a_3| = \text{const}$ и $N_3 \rightarrow \infty$

$$\frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2} \rightarrow N_3 \delta(h_3)$$

и область существования функции $\hat{\mathcal{L}}[\Pi(\vec{r})]$, равной $1(\vec{h}_1) 1(\vec{h}_2) \delta(\vec{h}_3)$,

превращается в плоскость, что в итоге дает дельта-образные максимумы в виде конусов.

Легко видеть из рис. 12, что угол при вершине конуса α_3 может быть определен при помощи соотношения

$$|\vec{t}^0| \cos \alpha_3^0 + \frac{(\vec{H}, \vec{a}_3)}{|\vec{a}_3|} = |\vec{t}| \cos \alpha_3,$$

которое получается при проектировании векторов \vec{t}^0 , \vec{t} и \vec{H} на направление \vec{a}_3 :

$$\cos \alpha_3 = \frac{h_3^0 \lambda}{|\vec{a}_3|} + \cos \alpha_3^0.$$

От функции (66) легко перейти к оптической решетке, изображенной на рис. 6. Если штрихи решетки расположены перпендикулярно \vec{a}_3 , то функция формы примет вид

$$\Pi(\vec{r}) = \delta(\vec{r}_1) \Pi(\vec{r}_2) \Pi(\vec{r}_3), \text{ так что}$$

$$\widehat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r})] = \Pi(\vec{h}_1) \delta(\vec{h}_2) \frac{\sin \pi N_3 h_3}{\pi h_3},$$

и область существования функции $|\widehat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r})]|^2$ будет иметь вид полосы шириной $|\vec{b}_3| N_3^{-1}$.

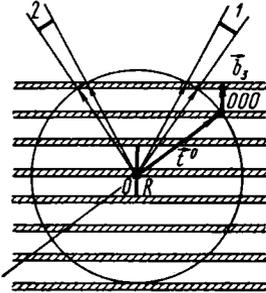


Рис. 13. Отыскание дифракционной картины для оптической решетки. Получение двух максимумов первого порядка, соответствующих работе на просвет (1) и на отражение (2)

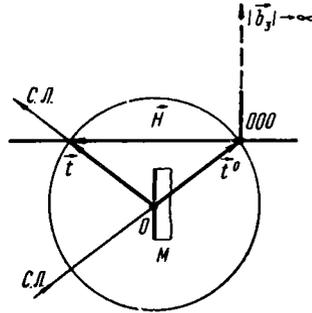


Рис. 14. Применение процедуры Эвальда для объяснения зеркального отражения от зеркала M при работе в диапазоне видимого света

Как видно, для решения задачи нужно воспользоваться рис. 13. Теперь вместо конусов возникнут максимумы, лежащие только в плоскости, образованной вектором \vec{t}^0 и нормалью к плоской решетке.

Не представляет труда использовать схему Эвальда для объяснения зеркального отражения светового пучка.

Если в отражательной дифракционной решетке с $q(x) = \delta(x)$ положить $|\vec{a}_3| \rightarrow 0$ при неизменном размере объекта, то $N_3 \rightarrow \infty$, $\frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2} \rightarrow$

$\rightarrow N_3 \delta(h_3)$ и $|\vec{b}_3| \rightarrow \infty$, так что в функции Ш (\vec{h}_3) останется только один узел 000,

в котором будет расположена «решеточная» функция $\delta(\vec{h}_3)$, а функция $\widehat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r})]$ примет вид $1(\vec{h}_1)\delta(\vec{h}_2)\delta(\vec{h}_3)N_3$; очевидно, область существования этой функции является прямой линией, параллельной \vec{b}_1 . Применяя к такому Фурье-образу построение Эвальда (рис. 14), сразу получим, что возникнет только один дифракционный дельта-максимум, расположенный в соответствии с законом «угол падения равен углу отражения».

Ввиду чрезвычайной важности функции $I(\vec{h})$, описывающей (в одномерном варианте) распределение интенсивности после дифракции на дифракционной решетке и равной

$$I(h) = \frac{\sin^2 \pi N h}{\sin^2 \pi h} \quad (67)$$

$$\text{либо } I(h) = \frac{\sin^2 \pi N h}{(\pi h)^2} \oplus \text{Ш}(h), \quad (67a)$$

рассмотрим подробнее ее свойства.

Как видно из рис. 7, главные максимумы функции (67) расположены на расстоянии $|\vec{b}| = \lambda |\vec{a}|^{-1}$ друг от друга, если изображать ее по шкале $h|\vec{b}|$, или на расстоянии единица, если изображать функцию по шкале h .

Высота главных максимумов оказывается равной

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\sin^2 \pi N h}{(\pi h)^2} = N^2,$$

а высоты побочных максимумов, располагающихся при $h = \pm \frac{3}{4} N^{-1}, \pm \frac{5}{2} N^{-1}$

и т. д., равным $\left(\frac{2}{3}\right)^2 \pi^{-2} N^2, \left(\frac{2}{5}\right)^2 \pi^{-2} N^2$ и т. д., т. е. $0,045 N^2, 0,016 N^2$ и т. д.

Как видно, в одномерном случае высота первого побочного максимума составляет всего около 5% от высоты главного максимума.

Энергия, отвечающая главному максимуму и всем принадлежащим ему побочным, может быть найдена с помощью соотношения Парсиваля (21a).

Так как при задании функции $\Pi(\vec{r})$ на отрезке $(-N/2, N/2)$

$$\widehat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r})] = \frac{\sin \pi N h}{\pi h},$$

$$\text{то } \int_{-\infty}^{\infty} I(h) dh = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \pi N h}{(\pi h)^2} dh = \int_{-\infty}^{\infty} |\Pi(\vec{r})|^2 dr = \int_{-N/2}^{N/2} 1(\vec{r}) dr = N.$$

Любопытно, что площадь главного максимума, найденная приближенно как площадь треугольника высотой N^2 и длиной основания $2N^{-1}$, оказывается как раз равной N .

Как видно из соотношения (67a), при увеличении N главные максимумы обостряются, и в пределе, при $N \rightarrow \infty$, функция $(\pi h)^{-2} \sin^2 \pi N h$ превращается в дельта-функцию веса N , так что в итоге распределение интенсивности $I(\vec{h})$ будет описываться решеточной функцией $\text{Ш}(\vec{h})$, равной

$$\text{Ш}(\vec{h}) = \sum_{\{h^0\}=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{h} - \vec{H}),$$

где $\vec{H} = h_i \vec{b}_i$.

Очевидно, множество узлов с координатами $\{h_i^0\}$, т. е. множество $\{\vec{H}\}$, образует в трехмерном случае пространственную решетку, описывающую реально существующее распределение дельта-образных максимумов интенсивности в пространстве.

Метрика этой части пространства, в которой располагаются дифракционные максимумы, такова, что расстояния между максимумами, равные $|\vec{b}|$, оказываются обратно пропорциональными расстоянию между рассеивающими элементами дифракционной решетки

$$|\vec{b}| = \lambda |\vec{a}|^{-1}, \quad (676)$$

и поэтому длина дифракционного вектора $|\vec{H}|$ оказывается обратно пропорциональной $|\vec{a}|$ в одномерном случае или обратно пропорциональной некоторой комбинации длин $\{|\vec{a}_i|\}$ в трехмерном случае. Это обстоятельство дает основание несколько неудачно назвать дифракционный вектор обратным вектором, а H -решетку обратной решеткой.

По большей части понятие об «обратной» решетке вводится априорно, до рассмотрения особенностей дифракционного пространства, получающегося при дифракции на R -решетке, и в этом случае у человека, впервые приступающего к изучению дифракции, появляется стойкое убеждение в том, что обратная решетка является некоторой ненаблюдаемой фикцией, математическим приемом, который совместно со сферой Эвальда дает правильный рецепт решения некоторых задач, но без применения которого можно легко обойтись.

В действительности, при работе в оптическом диапазоне R -решетку, т. е. штрихи на дифракционной решетке, можно наблюдать в микроскоп, а H -решетку, т. е. дифракционные максимумы на фотопластинке, — невооруженным глазом. При работе в рентгеновском диапазоне R -решетку, т. е. трансляционную периодичность кристалла, можно в отдельных случаях наблюдать при помощи электронного микроскопа, а H -решетку, т. е. расположение дифракционных максимумов, — невооруженным глазом на рентгенограмме или на флюоресцирующем экране. Конечно, при работе как в оптическом, так и в рентгеновском диапазоне мы наблюдаем некоторое сечение Фурье-пространства в соответствии со схемой Эвальда.

ГЛАВА II

ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ НА ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

1. Рассеяние электромагнитной волны на свободном электроне

Из электродинамики известно, что заряд e , колеблющийся в точке O с ускорением \vec{a} , создает в точке M (\vec{r}) электрическое поле, которое для расстояний $|\vec{r}| \gg \lambda$, где λ — длина волны возникающего излучения, может быть записано как

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{e}{c^2} \frac{\vec{a}_\perp \left(t - \frac{|\vec{r}|}{c} \right)}{|\vec{r}|}, \quad (68)$$

здесь \vec{a}_\perp — компонента вектора \vec{a} , перпендикулярная \vec{r} и лежащая в плоскости, образованной векторами \vec{r} и \vec{a} (рис. 15).

Выражение (68) показывает, что для нахождения поля в момент t необходимо брать значение ускорения \vec{a}_\perp в момент времени $\left(t - \frac{|\vec{r}|}{c} \right)$, чтобы учесть конечное время прохождения волны из O в M .

Как видно, колеблющийся электрон излучает сферическую волну. Если поместить электрон в поле плоской электромагнитной волны с напряженностью $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega t}$ и считать электрон свободным, то уравнение его движения в поле \vec{E} будет иметь вид $m\vec{a} = e\vec{E}$, так что

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{e^2}{mc^2} |\vec{E}_0| \frac{\sin \psi}{|\vec{r}|} e^{i\omega \left(t - \frac{|\vec{r}|}{c} \right)} \frac{\vec{a}_\perp}{|\vec{a}_\perp|}. \quad (68a)$$

Обозначая модуль комплексной амплитуды поля (68a) через A_s , получим

$$A_s(\vec{r}) = \frac{e^2}{mc^2} |\vec{E}_0| \frac{\sin \psi}{|\vec{r}|}.$$

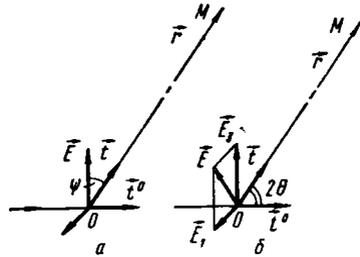


Рис. 15. Рассеяние электромагнитной волны на электроне:
а — случай линейно поляризованной волны; б — случай неполяризованной волны

Интенсивность поля в точке M оказывается равной

$$I_3(\vec{r}) = \frac{c}{4\pi} A_3^2(\vec{r}) = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{\sin^2 \psi}{|\vec{r}|^2}, \quad (69)$$

где через $I_0 = \frac{c}{4\pi} |\vec{E}_0|^2$ обозначена интенсивность поля, действующего на электрон.

Если падающая на электрон волна плоско поляризована, то формула (69) позволяет непосредственно определить интенсивность поля, рассеянного электроном.

Для неполяризованной волны разложим вектор \vec{E} , ориентированный в некоторый момент времени так, как показано на рис. 15, на две компоненты: $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_3$.

При усреднении по времени наблюдения, значительно превышающем период колебаний:

$$\langle |\vec{E}_1|^2 \rangle = \langle |\vec{E}_3|^2 \rangle$$

и всегда $|\vec{E}|^2 = |\vec{E}_1|^2 + |\vec{E}_3|^2$, поэтому

$$\langle |\vec{E}_1|^2 \rangle = \langle |\vec{E}_3|^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle |\vec{E}|^2 \rangle.$$

Пусть точка M (\vec{r}) лежит в плоскости, образованной векторами \vec{e}_2, \vec{e}_3 . Тогда компонента \vec{E}_1 вызовет в точке M поле интенсивностью

$$I_1(\vec{r}) = \frac{1}{2} I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1}{|\vec{r}|^2},$$

а компонента \vec{E}_3 — поле интенсивностью

$$I_3(\vec{r}) = \frac{1}{2} I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{\cos^2 2\theta}{|\vec{r}|^2}.$$

Суммарная интенсивность

$$I_3(\vec{r}) = I_1(\vec{r}) + I_3(\vec{r}) = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2|\vec{r}|^2}. \quad (70)$$

Интенсивность в единице телесного угла будет равна

$$I_3 = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}. \quad (70a)$$

Полярная диаграмма распределения интенсивности в пространстве аксиально симметрична относительно оси \vec{e}_2 , а поверхность $I = \text{const}$ является конусом, соосным \vec{e}_2 , так что ориентировка \vec{r} в плоскости \vec{e}_2, \vec{e}_3 не ограничивает общности формулы (70a).

Так как напряженность поля рассеянной волны зависит только от компоненты ускорения \vec{a}_\perp , то даже в том случае, когда падающая на электрон волна не поляризована, в рассеянной волне будет наблюдаться поляризация.

Поляризующее действие рассеивателя-поляризатора может быть обнаружено при помощи второго рассеивателя, играющего роль анализатора. Интенсивность после первого рассеивателя должна определяться по формуле (70), после второго рассеивателя — по формуле (69).

Эксперименты показывают, что при достаточно тонких рассеивателях, в которых многократное рассеяние не играет существенной роли, поляризация рентгеновских лучей является почти полной.

Доля энергии, рассеянной одним электроном в единицу телесного угла, оказывается весьма малой, так как $(e^2/mc^2)^2 \approx 7,9 \times 10^{-26}$.

2. Дифракция на решеточной структуре

После того, как мы установили, что рассеяние падающей волны происходит на электроне, не представляет труда найти амплитуду дифрагированной волны для объекта, состоящего из атомов и обладающего трансляционной симметрией, т. е. кристалла.

В самом общем случае амплитуда волны сразу за объектом с электронной плотностью $\rho(\vec{r})$ будет равна $E_s \rho(\vec{r})$ для единицы объема объекта.

Амплитуда поля в области дифракции Фраунгофера в соответствии с формулой (53) оказывается равной

$$A(\vec{h}) = E_s \hat{\mathcal{F}}[\rho(\vec{r})], \quad (71)$$

причем, как и ранее, необходимо предположить, что вне объекта $\rho(\vec{r}) = 0$.

Легко видеть, что выражение (71) можно получить непосредственно, суммируя амплитуды волн, рассеянных элементарными объемами dV , и учитывая фазовый множитель $\exp -i\varphi$, где

$$\varphi = 2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r} \right):$$

$$A(\vec{h}) = E_s \int_{\text{по объекту}}^{(3)} \rho(\vec{r}) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r} \right)} dV,$$

причем пределы интегрирования опять могут быть расширены на интервал $(-\infty, \infty)$ из-за того, что функция $\rho(\vec{r})$ ограниченная и вне объекта равна 0.

Распределение электронной плотности по объекту удобно записать так, чтобы в явной форме была видна трансляционная периодичность кристалла и то, что кристалл содержит атомы (или ионы).

Электронная плотность, содержащаяся в одной элементарной ячейке кристалла, равна сумме плотностей, принадлежащих атомам ячейки:

$$\rho_{\text{яч}}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^n \rho_j(\vec{r} - \vec{r}^{(j)}), \quad (72)$$

где j — номер атома в ячейке (рис. 16).

Электронная плотность в кристалле конечных размеров может быть записана как свертка $\rho_{\text{яч}}(\vec{r})$ с функцией Ш (\vec{r}) , описываю-

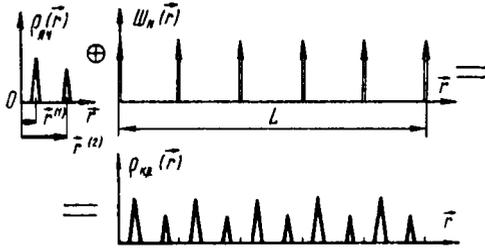


Рис. 16. Распределение электронной плотности в кристалле размером L

щей решетку. Так как кристалл имеет конечные размеры, то свертку необходимо модулировать функцией окна $\Pi(\vec{r})$:

$$\rho(\vec{r}) = [\rho_{\text{яч}}(\vec{r}) \oplus \text{Ш}(\vec{r})] \Pi(\vec{r}). \quad (72a)$$

В итоге получим из соотношений (72) и (72a)

$$A(\vec{h}) = E_0 \hat{\mathcal{F}} \left\{ \left[\sum_{j=1}^n \rho_j(\vec{r} - \vec{r}^{(j)}) \oplus \text{Ш}(\vec{r}) \right] \Pi(\vec{r}) \right\}. \quad (73)$$

Так как $\hat{\mathcal{F}} \sum_j f(x, x^{(j)}) = \sum_j \hat{\mathcal{F}} f(x, x^{(j)})$,

то, учитывая свойство сдвига (16), из соотношения (73) сразу получим

$$A(\vec{h}) = E_0 \left[\sum_{j=1}^n \hat{\mathcal{F}} [\rho_j(\vec{r})] e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r}^{(j)} \right)} v_a^{-1} \text{Ш}(\vec{h}) \right] \oplus \hat{\mathcal{F}} [\Pi(\vec{r})]. \quad (73a)$$

В этом выражении $\rho_j(\vec{r})$ относится теперь уже к атому, помещенному в начало координат, так что $\hat{\mathcal{F}} [\rho_j(\vec{r})]$ есть не что иное, как амплитуда рассеяния j -тым атомом, измеренная в единицах E_0 .

Принято называть $\widehat{\mathcal{F}}[\rho_j(\vec{r})] = f_j$ атомной амплитудой, или атомной рассеивающей способностью.

Легко видеть, что сумма

$$\sum_{j=1}^n f_j e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda} \cdot \vec{r}(j) \right)}$$

имеет простой смысл. Очевидно, эта сумма дает амплитуду волны, дифрагированной одной элементарной ячейкой, так как суммируются с учетом фазовых множителей амплитуды f_j , соответствующие рассеянию отдельными атомами.

Эта амплитуда, измеренная в единицах E_s , называется структурной и обозначается через F . При вычислении $F(\vec{h})$ достаточно взять вместо текущего значения \vec{h} его значение в узле H -решетки, т. е. положить $\vec{h} = \vec{H}$, тогда окончательно получим

$$F(\vec{H}) = \sum_{j=1}^n f_j e^{-i2\pi (h_1^0 x_1^{(j)} + h_2^0 x_2^{(j)} + h_3^0 x_3^{(j)})}, \quad (74)$$

где $\{h_i^0\}$ — индексы интерференции;

$\{x_i^{(j)}\}$ — координаты j -того атома.

Иногда термин «структурная амплитуда» сохраняют только для величины $|F(\vec{H})|$, называя комплексную амплитуду $F(\vec{H})$ структурным фактором.

Формула (74) может быть применена и в том случае, когда в ячейке содержится некоторое сложное образование (мотив) из атомов или ионов; в этом случае под f_j надо понимать амплитуду (рассеивающую способность) этого мотива, а под $\{x_i^{(j)}\}$ — координаты центра мотива в ячейке.

Обозначив фактор формы

$$\widehat{\mathcal{F}}[\Pi(\vec{r})] = v_a G(\vec{h})$$

и используя обозначение (74), запишем формулу (73а) в виде

$$A(\vec{h}) = E_s F(\vec{H}) \mathcal{H}(\vec{h}) \oplus G(\vec{h}).$$

Интенсивность в точке $\{h_i\}$ будет равна

$$I(\vec{h}) = I_s |F(\vec{H})|^2 \mathcal{H}(\vec{h}) \oplus |G(\vec{h})|^2. \quad (75)$$

Это выражение, описывающее интенсивность дифрагированной на объекте с решеткой волны, имеет чрезвычайно прозрачный смысл. Функция $\mathcal{H}(\vec{h})$, описывающая расположение дельта-об-

разных максимумов интенсивности, образующих \vec{H} -решетку, определяется только функцией $\text{Ш}(\vec{r})$, описывающей трансляционную периодичность объекта, т. е. его R -решетку. Таким образом, расположение дифракционных максимумов, т. е. геометрия дифракционной картины, зависит только от пространственной решетки объекта.

Выражение $|F(\vec{H})|^2 \text{Ш}(\vec{h})$ означает, что каждый узел H -решетки модулирован квадратом структурной амплитуды, так что высоты дельта-образных максимумов интенсивности оказываются различными.

Вся информация о расположении вещества в пределах ячейки содержится только в множителе $|F(\vec{H})|^2$ и отражается только на высотах максимумов интенсивности. Изменение расположения атомов или их числа, или, наконец, их атомного номера не влияет на геометрию дифракционной картины, описываемую функцией $\text{Ш}(\vec{h})$, а вызывает лишь изменение величины $|F(\vec{H})|^2$.

Свертка $|F(\vec{H})|^2 \text{Ш}(\vec{h}) \oplus |G(\vec{h})|^2$ означает, что в каждом из узлов H -решетки в действительности располагаются не дельта-образные пики интенсивности, модулированные функцией $|F(\vec{H})|^2$, а пики, профиль которых описывается функцией формы $|G(\vec{h})|^2$, равной для объекта с ромбическим базисом $\{\vec{a}_i\}$ функции

$$G^2(\vec{h}) = |G(\vec{h})|^2 = \frac{\sin^2 \pi N_1 h_1}{(\pi h_1)^2} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2}.$$

Таким образом, размер объекта отражается только на форме дифракционного максимума и не влияет на геометрию дифракционной картины и на множитель $|F(\vec{H})|^2$, модулирующий пики интенсивности.

Как и ранее, в п. 7 гл. 1, при рассмотрении дифракции на объекте конечных размеров можно обойтись без функции окна $\Pi(\vec{r})$, введя ограниченную решеточную функцию $\text{Ш}_N(\vec{r})$.

В этом случае для $I(\vec{h})$ получим

$$I(\vec{h}) = I_0 |F(\vec{H})|^2 \cdot \frac{\sin^2 \pi N_1 h_1}{\sin^2 \pi h_1} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{\sin^2 \pi h_2} \frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{\sin^2 \pi h_3}. \quad (75a)$$

Эквивалентность выражений (75) и (75a) рассматривалась ранее, в п. 4 гл. I.

Важная особенность процесса дифракции заключается в том, что расположение атомов в ячейке (собственно структура), трансляционная периодичность объекта (пространственная решетка) и размеры объекта по-разному влияют на различные характеристики дифракционной картины. Это влияние может быть прослежено в выражении (75).

3. Геометрия дифракционной картины для объекта с одно-, двух- и трехмерными решетками

Особенности формулы (75) позволяют изучать геометрию дифракционной картины, не рассматривая структуру объекта, т. е. расположение атомов в пределах элементарной ячейки.

Дифракция на одномерной решетке рассматривалась уже в п. 7 гл. I, здесь мы снова рассмотрим одномерную решетку, записывая соответствующие соотношения в форме, позволяющей легко обобщить их на двух- и трехмерные решетки.

Для объекта с одномерной решеткой, имеющего конечную длину L_3 и пренебрежимо малые размеры L_1 и L_2 (см. рис. 11), функцию формы надо записать как

$$v_a G(\vec{h}) = \hat{\mathcal{F}} [\Pi(\vec{r}_3) \delta(\vec{r}_1) \delta(\vec{r}_2)],$$

$$\text{где } \Pi|\vec{r}_3| = \begin{cases} 1 & \text{при } |\vec{r}_3| \leq \frac{L_3}{2} \\ 0 & \text{при } |\vec{r}_3| > \frac{L_3}{2}, \end{cases}$$

а решеточную функцию — как

$$\mathcal{H}(\vec{r}) = \sum_{u_3=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r}_3 - \vec{R}_3),$$

$$\text{где } \vec{r}_3 = r_3 \vec{a}_3; \quad \vec{R}_3 = u_3 \vec{a}_3.$$

Если нас интересует только геометрия дифракционной картины, создаваемой объектом ограниченных размеров, можно положить $|F(\vec{H})|^2 = 1$, так что квадрат амплитуды, измеренный в единицах E_3^2 , оказывается равным

$$|A(\vec{h})|^2 = \sum_{h_3^0=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{h}_3 - \vec{H}_3) \oplus \frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2} \mathbf{1}(\vec{h}_1) \mathbf{1}(\vec{h}_2),$$

где $\vec{h}_3 = h_3 \vec{b}_3$ и $\vec{H} = h_3^0 \vec{b}_3$, так что Фурье-образом одномерной R -решетки является одномерная H -решетка.

Функцию $\frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2} \mathbf{1}(\vec{h}_1) \mathbf{1}(\vec{h}_2)$ изобразить в трехмерном пространстве невозможно, для этого нужно четырехмерное пространство, однако область существования этой функции изобразить легко (см. рис. 11).

Комбинируя Фурье-образ, а точнее говоря квадрат модуля Фурье-образа рассматриваемого объекта со сферой Эвальда, мы

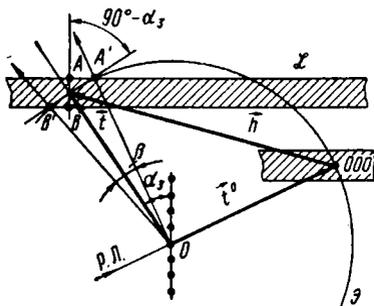


Рис. 17. К расчету угловой ширины максимума при дифракции на одномерном объекте с решеткой.

\mathcal{L} -область существования функции

$$I(h_1) I(h_2) (\pi h_2)^{-2} \sin^2 \pi N_3 h_2$$

Объект помещен в точку O , центр Фурье-образа — в точку 000 . Полностью все построение, касающееся дифракции на одномерном объекте, изображено на рис. 11

причем принято, что ширина \mathcal{L} -области на половине высоты, обозначенная AB , равна $|\vec{b}_3| N_3^{-1}$.

Так же просто получить дифракционную картину для объекта в виде пластинки, толщина которой пренебрежимо мала (рис. 18). В этом случае решеточная функция имеет вид

$$\text{Ш}(\vec{r}) = \sum_{u_1, u_2=-\infty}^{\infty} \delta(\vec{r} - \vec{R}),$$

где $\vec{r} = r_1 \vec{a}_1 + r_2 \vec{a}_2$, $\vec{R} = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2$, а функция щели $\Pi(\vec{r})$ равна

$$\Pi(\vec{r}) = \Pi(\vec{r}_1) \Pi(\vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2),$$

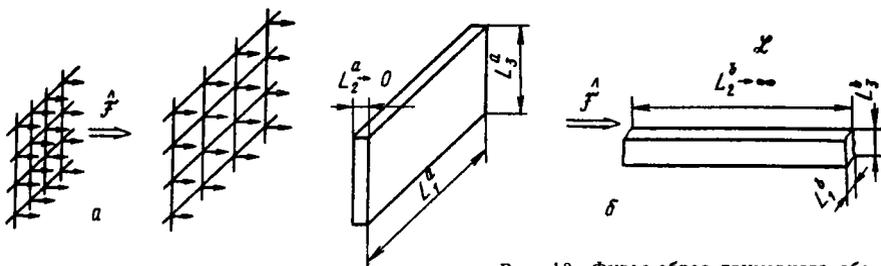


Рис. 18. Фурье-образ двумерного объекта с решеткой:

a — соотношение между решеточной функцией в объекте и Фурье-пространстве; b — соотношение между внешней формой объекта и областью существования \mathcal{L} квадрата модуля Фурье-образа функции формы объекта; α — соотношение между объектом с решеткой и областью существования квадрата модуля Фурье-образа объекта. Область \mathcal{L} изображена только для одного из узлов H -решетки

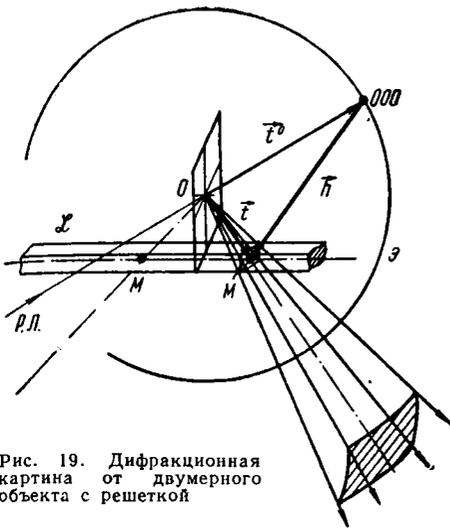


Рис. 19. Дифракционная картина от двумерного объекта с решеткой

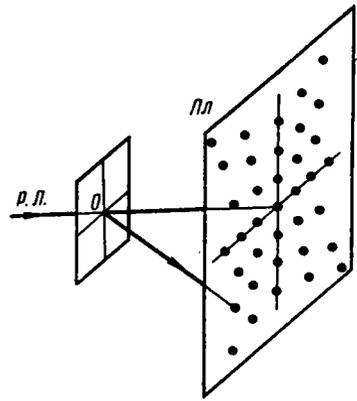


Рис. 20. Расположение дельта-образных максимумов на пленке, помещенной параллельно неограниченному плоскому объекту

так что в предположении $E_3^2 = |F(H)|^2 = 1$

$$|A(\vec{h})|^2 = \sum_{h_1^0, h_3^0}^{(2)} \delta(\vec{h} - \vec{H}) \oplus \frac{\sin^2 \pi N_1 h_1}{(\pi h_1)^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2} 1(h_2),$$

где $\vec{h} = h_1 \vec{b}_1 + h_3 \vec{b}_3$; $\vec{H} = h_1^0 \vec{b}_1 + h_3^0 \vec{b}_3$.

Таким образом, областью существования функции $G^2(\vec{h})$ будет стержень с размерами по осям \vec{b}_1 , \vec{b}_2 и \vec{b}_3 , равными соответственно $|\vec{b}_1| N_1^{-1}$, ∞ и $|\vec{b}_3| N_3^{-1}$.

Комбинация Фурье-образа со сферой Эвальда позволяет построить дифракционную картину (рис. 19). На этом рисунке изображена часть Фурье-образа, причем область существования функции $|G(\vec{h})|^2$ указана только для одного из узлов H -решетки в виде бесконечно длинного стержня. Если такой стержень пересекает сферу Эвальда, то возникают два рефлекса по направлению $\vec{i}^{(1)}$ и $\vec{i}^{(2)}$. Расположение рефлексов на экране, поставленном параллельно плоскости объекта, изображено на рис. 20.

В рассматриваемом случае дифракционный вектор \vec{H} , описывающий положение максимума, должен одновременно удовлетворять двум уравнениям типа

$$\left. \begin{aligned} \left(\vec{i} - \vec{i}^0, \frac{\vec{b}_1}{|\vec{b}_1|} \right) &= h_1^0 |\vec{b}_1|; \\ \left(\vec{i} - \vec{i}^0, \frac{\vec{b}_3}{|\vec{b}_3|} \right) &= h_3^0 |\vec{b}_3|, \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

и поэтому множество дифракционных максимумов, получающихся на плоском экране, поставленном параллельно пластинке-объекту, может быть описано как результат наложения двух семейств гипербол, образовавшихся от пересечения конусов вида (76) с экраном.

При таком описании нужно не забывать, что никаких следов гипербол на экране не обнаруживается, так как уравнения (76) образуют систему и для двумерного объекта порознь смысла не имеют.

Для трехмерного объекта с трехмерной R -решеткой решеточная функция запишется в виде

$$\text{Ш}(\vec{r}) = \sum_{\{u_i\}=-\infty}^{\infty} {}^{(3)}\delta(\vec{r} - \vec{R}),$$

где $\vec{R} = u_i \vec{a}_i$.

Функция $\Pi(\vec{r})$ для объекта с ромбическим базисом $\{\vec{a}_i\}$ имеет вид

$$\Pi(\vec{r}) = \Pi(\vec{r}_1) \Pi(\vec{r}_2) \Pi(\vec{r}_3),$$

так что

$$|A(\vec{h})|^2 = \sum_{\{h_i^0\}=-\infty}^{\infty} {}^{(3)}\delta(\vec{h} - \vec{H}) \oplus \frac{\sin^2 \pi N_1 h_1}{(\pi h_1)^2} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 h_3}{(\pi h_3)^2},$$

где $\vec{h} = h_i \vec{b}_i$, $\vec{H} = h_i^0 \vec{b}_i$.

Переход от функций, описывающих объект, к соответствующим Фурье-образам для трехмерного объекта показан на рис. 21.

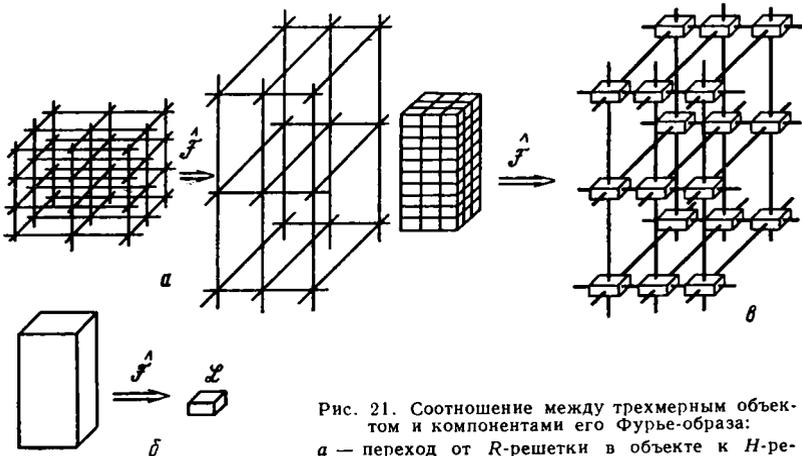


Рис. 21. Соотношение между трехмерным объектом и компонентами его Фурье-образа:

a — переход от R -решетки в объекте к H -решетке в Фурье-пространстве; b — переход от внешней формы объекта к области существования \mathcal{L} Фурье-образа функции формы; δ — переход от объекта с решеткой к области существования его Фурье-образа. В узлах H -решетки помещены области \mathcal{L}

Комбинация Фурье-образа со сферой Эвальда (рис. 22) позволяет построить дифракционную картину. Первое, что бросается в глаза при сравнении случая трехмерного объекта со случаями одно- и двухмерного объектов, — это отсутствие дифрагированных пучков при неблагоприятном расположении сферы Эвальда, не пересекающей ни один из узлов H -решетки, т. е. ни одну из областей существования дельта-образного Фурье-образа.

При заданных $\{\vec{a}_i\}$, λ и $\vec{t}^0 = (\cos \alpha_1^0, \cos \alpha_2^0, \cos \alpha_3^0)$, этот случай соответствует отсутствию целочисленных h_1^0, h_2^0, h_3^0 , удовлетворяющих системе уравнений Лауэ для бесконечно протяженного объекта:

$$\left. \begin{aligned} \cos \alpha_1 - \cos \alpha_1^0 &= h_1^0 \frac{\lambda}{|\vec{a}_1|}; \\ \cos \alpha_2 - \cos \alpha_2^0 &= h_2^0 \frac{\lambda}{|\vec{a}_2|}; \\ \cos \alpha_3 - \cos \alpha_3^0 &= h_3^0 \frac{\lambda}{|\vec{a}_3|}. \end{aligned} \right\} \quad (76a)$$

Для объекта конечных размеров в системе (76a) надо заменить $\{h_i^0\}$ на величины $\{h_i = h_i^0 \pm \Delta h_i\}$, где $|\Delta h_i|$ определяется размерами области существования функции $|G(\vec{h})|^2$. Ясно, что и в этом случае дифракционные максимумы могут отсутствовать.

Таким образом, для получения дифракционных максимумов в случае трехмерного объекта нужно применять специальные меры. При использовании монохроматического излучения $\lambda = \text{const}$ пересечение сферой Эвальда областей существования функции $|G(\vec{h})|^2$ можно обеспечить либо изменением ориентировки объекта (способ вращения и его модификации, способ порошка), либо изменением направления вектора \vec{t}^0 (способ расходящегося пучка).

При неизменной ориентировке объекта и условии $\vec{t}^0 = \text{const}$ применение полихроматического излучения $\lambda = \text{var}$ также обеспечивает обязательное появление дифракционных максимумов (способ Лауэ).

На рис. 22 изображен случай удачного расположения сферы Эвальда, при котором в рассматриваемом сечении возникают диф-

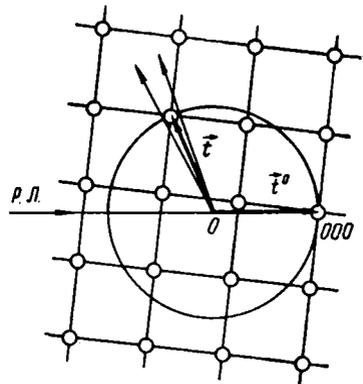


Рис. 22. Пересечение сферы Эвальда с областью существования квадрата модуля Фурье-образа трехмерного ограниченного объекта

рациональные максимумы, ширина и форма которых обуславливаются пересечением сферой Эвальда областей существования функции $|G(\vec{h})|^2$, причем конец вектора \vec{h} во всех случаях остается на поверхности сферы Эвальда.

4. Представление дифракции на трехмерном объекте с решеткой как отражения от узловых плоскостей

Подведем некоторые итоги предыдущего рассмотрения процесса рассеяния электромагнитной волны на объекте. Падающая на объект волна заставляет колебаться с той же частотой электроны объекта. Колеблющиеся электроны излучают в пространство вторичные волны. Если эти вторичные (рассеянные или дифрагированные) волны оказываются когерентными, то они могут интерферировать.

Распределение интенсивности дифрагированных волн в пространстве, т. е. собственно дифракционную картину, можно наблюдать различными способами.

Представляющую для нас наибольший интерес фраунгоферовскую дифракцию можно наблюдать при работе в оптическом диапазоне на большом удалении от объекта непосредственно либо вблизи от объекта при помощи линзы, переносящей дифракционную картину из бесконечности в свою фокальную плоскость.

При работе в рентгеновском диапазоне фраунгоферовскую дифракцию можно наблюдать на экране в непосредственной близости от объекта. Метрика дифракционной картины отличается от метрики объекта. Если в объекте действует метрика, описываемая тензором \hat{g} , то для описания дифракционной картины надо применять метрику, определяемую тензором $\hat{p} = \lambda^2 \hat{g}^{-1}$.

Базисные векторы $\{\vec{a}_i\}$, описывающие трансляционную периодичность в объекте, и векторы $\{\vec{b}_i\}$, описывающие распределение дельта-образных максимумов интенсивности на дифракционной картине, находятся в простом соотношении $(\vec{a}_i, \vec{b}_j) = \lambda \delta_{ij}$.

Амплитуда дифрагированной волны, измеренная в единицах E_0 , оказывается равной $A(\vec{h}) = \hat{\mathcal{F}}[\rho(\vec{r})]$, а интенсивность $I(\vec{h}) = |\hat{\mathcal{F}}[\rho(\vec{r})]|^2$.

Таким образом, функция, описывающая интенсивность дифракционной картины, находится при помощи известной операции, называемой Фурье-преобразованием.

Если нас интересует только трансляционная периодичность объекта, то функцию $\rho(\vec{r})$ можно заменить решеточной функ-

На этапе 1 мы определяем положение максимумов рентгенограммы относительно центра O' , на этапе 2 пользуемся соотношением типа (77), на этапе 3 используем соотношение $\vec{H}^{(1)} = h_i^0 \vec{b}_i$, на этапе 4 — соотношение нормировки $(\vec{a}_i, \vec{b}_j) = \lambda \delta_{ij}$, на этапе 5 — соотношение $\vec{R} = u_i \vec{a}_i$.

Хотя уже на этапе 1, т. е. на этапе обмера рентгенограммы, равно как и на этапах 2 и 3, мы имеем дело с метрикой, описываемой при помощи обратных векторов $\{\vec{b}_i\}$, а переход к метрике объекта, т. е. к векторам $\{\vec{a}_i\}$, совершается лишь на четвертом этапе, все же то, что рентгенограмма принадлежит к «обратному» пространству, часто не осознается.

По в высшей степени компетентному утверждению Н. В. Белова [6] «Многим, впервые вступающим в непривычный мир понятий рентгеновского анализа, представления об обратной решетке, об обратном пространстве кажутся чуть ли не полумистическими. Полагаю, что сейчас значительная часть лиц, расшифровывающих сложнейшие структуры с числом параметров, достигающим 200, ни разу и не вспоминает об обратной решетке. .»

Как видно, в этом случае упоминаемые Н. В. Беловым специалисты уподобляются герою Мольера, который всю жизнь говорил прозой, не подозревая об этом — ведь как только экспериментатор берет в руки рентгенограмму для ее обмера, он непосредственно соприкасается с «обратным» пространством.

Нельзя ли перейти от дифракционной картины непосредственно к объекту, минуя процедуры 1—5? Такой способ указал У. Л. Брегг, рассматривавший «отражение» рентгеновских лучей от соседних узловых плоскостей с индексами $(h_1 h_2 h_3)$, находящимися на расстоянии d друг от друга (рис. 23).

Если предположить, что действует обычный закон отражения от зеркальной плоскости, то максимумы интенсивности отраженных лучей будут наблюдаться в тех направлениях, для которых разность хода $AB + BC$ равна целому числу длин волн $n\lambda$, где n — целое число. Из рис. 23 сразу получаем, что

$$AB + BC = 2d \sin \theta = n\lambda. \quad (78)$$

Как видно, соотношение (78) непосредственно связывает геометрию дифракционной картины, описываемую множеством углов $\{\theta\}$, с такой важной характеристикой объекта, как множество межплоскостных расстояний $\{d\}$, причем «страшная» обратная решетка в явном виде совсем не используется.

Значительную трудность при подробном рассмотрении соотношения (78) представляет доказательство того, что индексы дифракции $\{h_i^0\}$, определяющие положение максимума на рентгенограмме, каким-то образом связаны с индексами семейства «отра-

жающих» плоскостей ($h_1 h_2 h_3$). У Л. Брегг тщательно проанализировал эту проблему и показал, что

$$\{h_i^0\} = n \{h_i\},$$

где $\{h_i\}$ — взаимно простые индексы плоскости;
 n — целое число.

При попытке согласовать трактовку дифракции на кристалле как «отражения» от плоскости с трактовкой, основанной на использовании Фурье-преобразования, мы сразу же обнаруживаем противоречие. Действительно, взаимодействие плоской волны с узловой плоскостью, если его описывать в терминах Фурье-преобразования, дает множество максимумов, расположенных так, как это изображено на рис. 20. Присутствие второй плоскости, находящейся на расстоянии d от первой (рис. 23), ничего не меняет в геометрии дифракционной картины.

Если же описать это взаимодействие как отражение, то получается один рефлекс, положение которого определяется соотношением (78) и законом отражения.

Противоречие легко разрешается, если учесть, что хотя вывод соотношения (78) сделан при помощи всего двух соседних плоскостей, на самом деле выражение (78) справедливо только для трехмерного объекта, геометрия дифракционной картины которого может быть описана тремя уравнениями Лауэ.

На это обстоятельство впервые обратил внимание Ю. В. Вульф, получивший выражение, аналогичное (78), из уравнений Лауэ, записанных для объекта с ромбическим базисом. Связь между уравнениями Лауэ (58) или (76а) и соотношением (78) легко установить в общем случае, не ограничиваясь какой-либо определенной сингонией.

В п. 7 гл. I мы уже получили соотношение между текущим дифракционным вектором \vec{h} и единичными векторами падающей и дифрагированной волны в форме $\vec{h} = \vec{i} - \vec{i}^0$. Так как сейчас мы рассматриваем только дельта-максимумы, то вектор \vec{h} можно заменить на \vec{H} , координаты которого равны (h_1^0, h_2^0, h_3^0) , и получить условие

$$\vec{H} = \vec{i} - \vec{i}^0, \quad (79)$$

из которого видно (рис. 23), что модуль вектора \vec{H} равен

$$|\vec{H}| = 2 \sin \theta_0. \quad (79a)$$

В условии (79) свойства объекта в явном виде не фигурируют. Для введения в условие (79) свойства объекта установим гомоморфное соответствие между множеством индексов дифракции $\{h_i^0\}$ и координатами ковариантного вектора \vec{R} , принадлежащего объекту и равного $\vec{R} = h_i \vec{b}_i$.

Учитывая свойства множества $\{h_i^0\}$ и множества взаимно простых целочисленных координат вектора \vec{R} , легко установить, что существует отображение

$$\{h_i^0\} \rightarrow n \{h_i\}; \quad (80)$$

это значит, что вектор \vec{R} должен быть ориентирован параллельно вектору \vec{H} , а модули этих векторов должны быть связаны соотношением

$$|\vec{H}| = n |\vec{R}|. \quad (80a)$$

Ориентируя вектор \vec{R} параллельно \vec{H} в точке O (центр объекта), мы тем самым получаем возможность построить в точке O «отражающую» плоскость, свойства которой определяются вектором \vec{R} : эта плоскость перпендикулярна \vec{R} и отстоит от ближайшей плоскости этого же семейства на расстоянии d , причем

$$d = \frac{\lambda}{|\vec{R}|}. \quad (81)$$

Таким образом, пользуясь отображением (80) и учитывая (80a) и (81), получим из отношения (79a) условие дифракции Вульфа—Брегга (78)

$$n\lambda = 2d \sin \theta_0.$$

При записи в такой форме d является межплоскостным расстоянием «хороших» узловых плоскостей, индексы которых связаны с d соотношением

$$d^{-1} = (h_i h_j g_{ij}^{-1})^{\frac{1}{2}},$$

а целочисленный множитель n равняется порядку «отражения».

Чаще используется запись уравнения Вульфа—Брегга в виде

$$\lambda = 2d \sin \theta_0, \quad (78a)$$

причем теперь величина d/n переобозначена как d . Очевидно, в этом случае

$$d^{-1} = (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{\frac{1}{2}},$$

и не делается различия между индексами дифракции $\{h_i^0\}$ и индексами системы плоскостей $\{h_i\}$.

Таким образом, дифракционный максимум с координатами 642 будет в первом случае рассматриваться как результат «отраже-

ния» во втором порядке ($n = 2$) от системы «хороших» плоскостей (321); во втором случае мы получаем отражение в первом порядке от системы плоскостей (642); очевидно, в этом случае система плоскостей будет не совсем «хорошей», так как узловые плоскости будут перемежаться с плоскостями, на которых узлы отсутствуют.

Представление дифракции на трехмерном объекте как «отражения» от узловых плоскостей в ряде случаев оказывается очень полезным, позволяя быстро устанавливать соответствие между геометрией дифракционной картины и R -решеткой объекта, однако всегда нужно помнить, что это представление является чисто формальным, и в действительности никакого отражения не происходит.

Очень часто изложение того, что происходит при дифракции на кристаллическом объекте, делается так.

Выводится соотношение Брегга (78а), подробно обсуждается то, что происходит при отражении падающей волны от двух соседних плоскостей. Далее говорится, что направления дифрагированных пучков можно получить и при помощи обратной решетки. Как ее построить? Отложим по перпендикуляру к каждой из отражающих плоскостей отрезок $1/d$. Концы этих отрезков образуют обратную решетку. Если пересечь таким образом построенную обратную решетку сферой Эвальда радиусом $1/\lambda$, то для дифрагированных лучей получим те же направления, какие дает закон Брегга, что и подтверждает правильность и правомерность использования обратной решетки совместно со сферой Эвальда для описания дифракции.

Иногда обратная решетка вводится иначе, непосредственно при помощи векторов $\{\vec{a}_i^*\}$, находящихся с векторами $\{\vec{a}_i\}$ в соотношении $\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = \delta_{ij}$, но и в этом случае она трактуется как чисто геометрический образ, позволяющий формально получить те же результаты, что и с помощью закона Брегга (78а), который якобы только и имеет прямой физический смысл в отличие от абстрактного понятия обратной решетки, описывающей несуществующее реально обратное пространство.

Как видно, при таком подходе действительное положение вещей поставлено с ног на голову. В действительности реально существующим является дифракционное пространство, сечение которого сферой Эвальда легко наблюдать на дифракционном экране (флюоресцирующий экран, фотографическая эмульсия, различные счетчики и пр.). Обратная решетка описывает расположение в пространстве дельта-образных дифракционных максимумов, получаемых при рассеянии электромагнитной волны на неограниченном объекте с R -решеткой. Метрику дифракционного пространства удобно (но не обязательно!) описывать при помощи векторов сопряженного базиса $\{\vec{b}_i\}$, обладающих свойствами обратности (67б); реально существующее расположение макси-

мумов (H -решетка) не зависит от того, при помощи каких базисных векторов мы будем его описывать.

Брегговское представление дифракции как «отражения» является наглядным и простым, но не более чем модельным описанием действительного положения вещей, которое дает правильный результат, но не соответствует тому, что происходит в действительности при дифракции волны на трехмерном объекте.

5. Влияние типа ячейки Браве, винтовых осей и плоскостей скользящего отражения на дифракционную картину

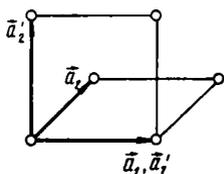
R -решетку объекта в ряде случаев целесообразно описывать при помощи непримитивных (центрированных) ячеек Браве.

Как отразится использование непримитивных ячеек на дифракционной картине?

Так как H -решетка однозначно определяется R -решеткой, то ни число дифракционных максимумов, ни их расположение не изменятся при замене P -ячейки в объекте на центрированную ячейку. Изменится только способ описания геометрии дифракционной картины, т. е. векторы $\{\vec{b}_i\}$ и индексы дифракции $\{h_i^0\}$.

Рассмотрим, что получится при замене P -ячейки с векторами $\{\vec{a}_i\}$ на C -ячейку с векторами $\{\vec{a}'_i\}$ (рис. 24).

Как видно:



$$\vec{a}'_1 = \vec{a}_1;$$

$$\vec{a}'_2 = \vec{a}_1 + 2\vec{a}_2;$$

$$\vec{a}'_3 = \vec{a}_3,$$

так что матрица α в соотношении

$$\vec{a}'_i = \alpha_{ij} \vec{a}_j \quad (82)$$

Рис. 24. Описание заданного множества узлов $\{R\}$ в терминах примитивной P и центрированной C -ячейки

$$\text{будет равна } \alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В соответствии с этим мы будем при описании дифракционной картины от объекта, R -решетка которого построена при помощи C -ячейки, применять векторы $\{\vec{b}'_i\}$, равные $\vec{b}'_i = \tilde{\alpha}_{ij}^{-1} \vec{b}_j$, т. е.

$$\begin{pmatrix} \vec{b}'_1 \\ \vec{b}'_2 \\ \vec{b}'_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix},$$

и индексы дифракции $\{h_i^{0'}\}$, равные $h_i^{0'} = \alpha_{ij}h_j^0$, т. е.

$$\begin{pmatrix} h_1^{0'} \\ h_2^{0'} \\ h_3^{0'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1^0 \\ h_2^0 \\ h_3^0 \end{pmatrix}. \quad (83)$$

Из соотношения (83) сразу получаем, что

$$h_1^{0'} + h_2^{0'} = 2(h_1^0 + h_2^0). \quad (83a)$$

Индексы $\{h_i^{0'}\}$, соответствующие описанию R -решетки объекта в терминах P -ячейки, являются любыми целыми числами, следовательно, два индекса $h_1^{0'}$ и $h_2^{0'}$, в соответствии с условием (83a), должны при использовании C -ячейки быть одинаковой четности.

Одно и то же множество максимумов, соответствующее объекту, будет проиндексировано в терминах P -ячейки как 100, 010, 001, 110, 011, 111 и т. д. (для простоты не учитываются знаки $\{h_i^{0'}\}$), а в терминах C -ячейки — как 001, 110, 111, 200, 020, 201, 021 и т. д.

Как видно, при переходе от P -множества индексов дифракции к C -множеству исчезают («погасают») комбинации 100, 010, 101, 011 и т. д., но эти «погасания» являются следствием различных способов описания одного и того же множества дифракционных максимумов.

Для того чтобы понять, что происходит при переходе от P -ячейки к F - и I -ячейкам, используем ромбоэдрические P -ячейки с углом между любыми двумя векторами в 60° и $109^\circ 28'$.

В первом случае ячейка с векторами $\{\vec{a}_i\}$ оказывается кубической F -ячейкой, причем векторы $\{\vec{a}_i\}$ ромбоэдрической P -ячейки оказываются направленными соответственно по диагоналям граней F -ячейки [011], [101], [110], а во втором случае — кубической I -ячейкой, в которой векторы $\{\vec{a}_i\}$ ромбоэдрической P -ячейки направлены по $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ и $[11\bar{1}]$, т. е. по пространственным диагоналям трех кубических ячеек, соседствующих с рассматриваемой кубической ячейкой.

Из рис. 25 видно, что для ромбоэдрической 60° -град P -ячейки

$$\left. \begin{aligned} \vec{a}'_1 &= -\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3; \\ \vec{a}'_2 &= \vec{a}_1 - \vec{a}_2 + \vec{a}_3; \\ \vec{a}'_3 &= \vec{a}_1 + \vec{a}_2 - \vec{a}_3, \end{aligned} \right\}$$

так что матрица α в соотношении (82) равна

$$\alpha = \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \\ 1 & 1 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

и

$$\begin{pmatrix} h_1^{0'} \\ h_2^{0'} \\ h_3^{0'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \\ 1 & 1 & \bar{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1^0 \\ h_2^0 \\ h_3^0 \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что

$$\left. \begin{aligned} h_1^{0'} + h_2^{0'} &= 2h_3^0, \\ h_2^{0'} + h_3^{0'} &= 2h_1^0, \\ h_3^{0'} + h_1^{0'} &= 2h_2^0. \end{aligned} \right\} \quad (84)$$

т. е. сумма любых двух индексов дифракции, соответствующих описанию R -решетки при помощи кубической F -ячейки, должна быть четным числом, что может быть только в том случае, если все три индекса $\{h_i^{0'}\}$ будут одинаковой четности.

Аналогично, для ромбоэдрической P -ячейки с углом $109^\circ 28'$ получим из рис. 26

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

что дает соотношение

$$h_1^{0'} + h_2^{0'} + h_3^{0'} = 2(h_1^0 + h_2^0 + h_3^0). \quad (84a)$$

В этом случае при индцировании R -решетки в терминах I -ячейки «выживают» только те максимумы, для которых сумма всех трех индексов четная.

Точно такой же вывод может быть сделан и для F - и I -ячеек, присущих другим сингониям, так что закономерности (84) и (84a) всегда справедливы.

Приведенное рассуждение оставляет открытым вопрос о том, каковы векторы $\{\vec{b}_i\}$, описывающие H -решетку в том случае, когда R -решетка описывается при помощи кубических I - и F -ячеек.

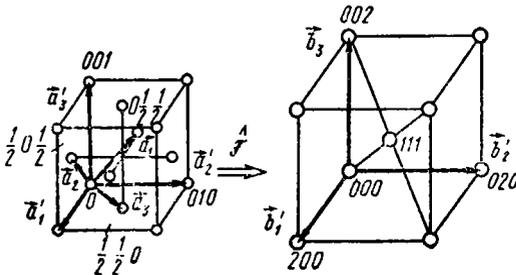
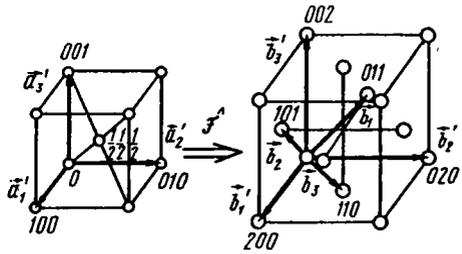


Рис. 25. Взаимоотношение между областью существования решеточной функции в объекте и в Фурье-пространстве. Область существования в объекте описывается при помощи F -ячейки кубической сингонии;

$\{\vec{a}_i\}$ — векторы ромбоэдрической P -ячейки; $\{\vec{a}'_i\}$ — векторы кубической F -ячейки

рис. 26. Взаимоотношение между областью существования решеточной функции в объекте и в Фурье-пространстве. Область существования в объекте описывается при помощи I -ячейки кубической сингонии с векторами $\{\vec{a}_i\}$; $\{b_i\}$ — базисные векторы P -ячейки ромбической сингонии в Фурье-пространстве; $\{\vec{b}'_i\}$ — векторы I -ячейки в Фурье-пространстве



Для того чтобы отыскать векторы $\{\vec{b}_i\}$, необходимо сначала построить элементарную ячейку в R -решетке для случая, когда R -решетка описывается при помощи ромбоэдрической P -ячейки, или, иначе говоря, найти решеточную функцию в Фурье-пространстве, пользуясь нештрихованными векторами $\{\vec{a}_i\}$ и $\{\vec{b}_i\}$, а затем перейти от векторов $\{\vec{b}_i\}$, описывающих P -ячейку в Фурье-пространстве, к векторам $\{\vec{b}'_i\}$, описывающим центрированную ячейку.

Метрическая матрица g для 60-град ячейки равна

$$g_{60} = \frac{a^2}{2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

а для ячейки с углом $109^\circ 28'$

$$g_{109} = \frac{a^2}{2} \begin{pmatrix} 3 & \bar{1} & \bar{1} \\ \bar{1} & 3 & \bar{1} \\ \bar{1} & \bar{1} & 3 \end{pmatrix}.$$

Метрическая матрица g^{-1} , описывающая H -решетку, в первом случае оказывается равной

$$g_{60}^{-1} = \frac{a^{-2}}{2} \begin{pmatrix} 3 & \bar{1} & \bar{1} \\ \bar{1} & 3 & \bar{1} \\ \bar{1} & \bar{1} & 3 \end{pmatrix},$$

а во втором

$$g_{109}^{-1} = \frac{3}{4} a^{-2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, ромбоэдрическая 60-град ячейка в R -решетке переходит в 109-град ромбоэдрическую ячейку в H -решетке,

а 109-град ромбоэдрическая ячейка R -решетки переходит в 60-град ромбоэдрическую ячейку в H -решетке.

Переходя к описанию R - и H -решеток в терминах кубической сингонии, получим, что гранецентрированная R -ячейка превращается в объемноцентрированную H -ячейку, а объемноцентрированная R -ячейка — в гранецентрированную H -ячейку.

Легко проверить, что в обоих случаях параметр H -ячейки оказывается в два раза больше, чем это было бы при переходе от кубической P -ячейки в R -решетке к кубической P -ячейке в H -решетке.

Такой же метод, использующий инвариантность дифракционной картины по отношению к замене

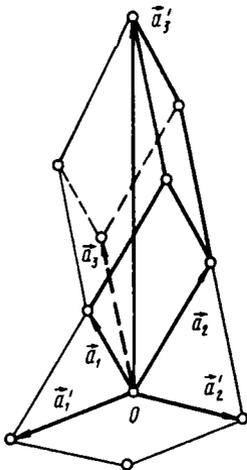


Рис. 27 Описание заданного множества узлов (R) при помощи ромбоэдрических векторов $\{a_i\}$ и гексагональных векторов $\{a'_i\}$

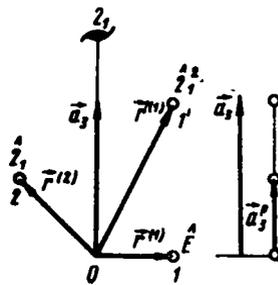


Рис. 28. Действие оператора симметрии вида $\hat{\sigma}_2$: атом из положения 1 переходит в положение 2, а затем в положение 1', эквивалентное 1

базисных векторов, может быть применен при описании ромбоэдрической P -ячейки в гексагональных осях (рис. 27).

Как видно из рисунка;

$$\vec{a}'_1 = \vec{a}_1 - \vec{a}_2;$$

$$\vec{a}'_2 = \vec{a}_2 - \vec{a}_3;$$

$$\vec{a}'_3 = \vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3.$$

Таким образом, матрица α в преобразовании (82) равна

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

откуда получается соотношение $-h_1^{0'} + h_2^{0'} + h_3^{0'} = 3h_3^0$.

Так как h_2^0 — любое целое число, то получается, что комбинация — $h_1^{0'} + h_2^{0'} + h_3^{0'}$, составленная из новых, «гексагональных» индексов, должна быть кратна трем.

Аналогично рассматриваются и другие случаи, связанные с переобозначением индексов дифракции, вызванным заменой базисных осей. Легко видеть, что все, что было здесь разобрано, может рассматриваться и с другой точки зрения. Так, например, ситуация, возникающая с объемноцентрированной I -ячейкой, может трактоваться как введение нецелочисленной трансляции с вектором $\vec{i}^R = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ в примитивную ячейку, так что в обоих случаях форма и размеры ячеек остаются неизменными, но в одном случае ячейка примитивная, а в другом центрирована по объему. В первом случае мы получим множество индексов дифракции $\{100, 110, 111, 200, 210, 211\}$ и т. д., а во втором $\{110, 200, 211\}$ и т. д., причем максимумы с индексами 110, 200, 211 и т. д. будут в обоих случаях расположены в пространстве одинаково.

Ясно, что здесь имеет место действительное исчезновение («погасание») части рефлексов, так как в первом и втором случаях речь идет о различных R -решетках.

Похожая ситуация возникает при введении в структуру нецелочисленной трансляции, кооперирующейся с операцией поворота либо с операцией отражения в плоскости.

Рассмотрим, что происходит, если в структуре имеется винтовая ось 2_1 (рис. 28), расположенная вдоль направления $[001]$, так что в операторе $\hat{2}_1 = (\hat{2} | \vec{i}^R)$ вектор $\vec{i}^R = \left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$.

Действие оператора $\hat{2}_1$ на атом 1, находящийся на расстоянии \vec{r}^1 от начала координат (точка O в объекте), приводит к появлению второго атома 2, находящегося на расстоянии $\vec{r}^{(2)} = -\vec{r}^{(1)} + \vec{a}_3/2$. Повторное действие оператора $\hat{2}_1$ на второй атом переводит его в идентичное положение $1'$.

Рассмотрим дифракционный вектор \vec{H} , ориентированный параллельно \vec{a}_3 . Так как обычно винтовые оси существуют в структурах, у которых $\vec{b}_3 \parallel \vec{a}_3$, то

$$\vec{H} = h_3^0 \vec{b}_3. \quad (85)$$

При работе с вектором \vec{H} типа (85) вектор $\vec{r}^{(1)}$ не вызывает появления фазового множителя в рассеянной волне, так как

$$\varphi(\vec{r}^{(1)}) = 2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(1)} \right) = 2\pi h_3^0 \left(\frac{\vec{b}_3}{\lambda}, \vec{r}^{(1)} \right) = 0.$$

Смещение атома 2 из начала координат приводит к изменению фазы на

$$\varphi(\vec{r}^{(2)}) = 2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(2)} \right) = 2\pi \left(h_3^0 \frac{\vec{b}_3}{\lambda}, -\vec{r}^{(1)} + \frac{\vec{a}_3}{2} \right) = \pi h_3^0. \quad (85a)$$

Таким образом, при нечетных h_3^0 волна, рассеянная атомом 2, находится в противофазе с волной, рассеянной атомом 1, и во множестве индексов дифракции, соответствующих рассматриваемой структуре, сохраняются только те из индексов типа $00h_3^0$, у которых h_3^0 — четное.

Если рассматривать дифракционный вектор \vec{H} , направленный произвольно по отношению к оператору $\hat{2}_1$, то никаких закономерных погасаний наблюдаться не будет.

Аналогично рассматривается влияние операции \hat{g} , т. е. отражения в плоскости совместно с трансляцией на долю периода идентичности.

Рассмотрим действие плоскости скользящего отражения (010) со скольжением $\vec{t}^R = \left(0, \frac{1}{2}, 0\right)$, направленным вдоль \vec{a}_2 (рис. 29).

Здесь также нужно выбрать вектор \vec{H} перпендикулярно вектору $\vec{r}^{(1)}$, определяющему положение атома 1 в объекте. Так как векторы $\{\vec{b}_i\}$ тоже будут относиться к ромбической сингонии, то

$$\vec{H} = (0, h_2^0, h_3^0) = h_2^0 \vec{b}_2 + h_3^0 \vec{b}_3.$$

Вычисляя фазу для волны, рассеянной первым атомом, получим

$$\varphi(\vec{r}^{(1)}) = 2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(1)} \right) = 0,$$

а для второго атома

$$\varphi(\vec{r}^{(2)}) = 2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(2)} \right) = 2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, -\vec{r}^{(1)} + \frac{\vec{a}_2}{2} \right) = \pi h_2^0.$$

Таким образом, при наличии в структуре плоскости скользящего отражения рассмотренного типа нужно из всего множества индексов дифракции $\{h_1^0 h_2^0 h_3^0\}$ обращать внимание только на подмножество вида $\{0h_2^0 h_3^0\}$. Если в этом подмножестве присутствуют только комбинации с четным h_2^0 , то в структуре имеется плоскость (100) со скольжением вдоль \vec{a}_2 на половину периода. Скольжение вдоль \vec{a}_3 дало бы четное h_3^0 , скольжение по диагонали $\vec{a}_2 + \vec{a}_3$

дало бы рефлексы с четной суммой $h_2^0 + h_3^0$, а скольжение по этой же диагонали на четверть периода дало бы комбинации с суммой $h_2^0 + h_3^0$, кратной четырем.

Так же просто могут быть получены закономерности и для других ориентировок плоскостей скользящего отражения и других винтовых осей, если учесть, что во всех случаях необходимо рассматривать только дифракционный вектор, ориентированный так, чтобы смещение исходного атома из начала координат в объекте не вызывало изменения фазы в рассеянной волне.

Для анализа влияния такого оператора, как \hat{b}_1 , нужно подсчитать амплитуду $A(\vec{H})$, суммируя вклады от каждого

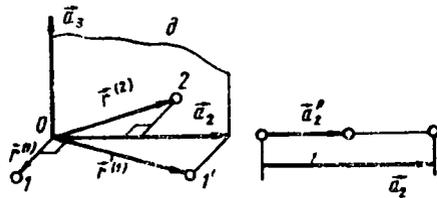


Рис. 29. Действие оператора \hat{g}

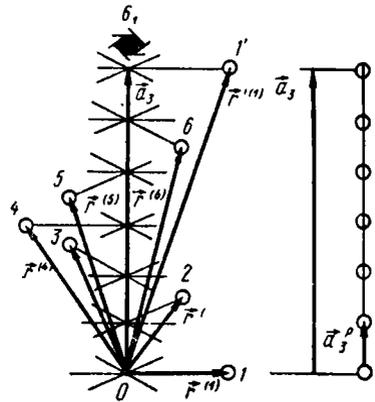


Рис. 30. Действие оператора \hat{b}_1 . Множество атомов в положениях 1, 2, 3, 4, 5, 6, полученных из исходного атома, находящегося в положении 1

из шести атомов, получившихся из начального под действием оператора \hat{b}_1 (рис. 30):

$$A(\vec{H}) = \sum_{j=1}^6 e^{-i\varphi_j}, \quad (856)$$

$$\text{где } \varphi_j = 2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(j)} \right),$$

$\vec{r}^{(j)}$ определяет положение каждого из шести атомов, получившихся под действием оператора \hat{b}_1 .

Если учесть, что фаза рассеянной волны определяется скалярным произведением векторов \vec{H} и $\vec{r}^{(j)}$, то можно вообще обойтись без вычислений типа (856), сразу отбрасывая во всех векторах $\vec{r}^{(j)}$ составляющие, перпендикулярные вектору \vec{H} .

Как видно, по отношению к дифракции, описываемой вектором (85), атомы 1—6 можно расположить вдоль \vec{a}_3 , так как смещение их перпендикулярно \vec{H} , или, что то же, перпендикулярно \vec{a}_3 , не влияет на фазу, а это значит, что «дифракционный» период

идентичности вдоль [001] уменьшился в шесть раз, и «примитивной» по отношению к вектору \vec{H} ячейкой будет ячейка с

$$\vec{a}_3^P = \vec{a}_3/6.$$

Таким образом, описание дифракции в терминах P -ячейки с вектором \vec{a}_3^P дает дифракционный вектор с координатами $00h_3^P$, где h_3^P — любое целое число, так как элементарная ячейка примитивная, а описание этого же максимума в терминах исходной ячейки с вектором \vec{a}_3 дает дифракционный вектор с координатами $00h_3^0$, где $h_3^0 = 6h_3^P$, так что третий индекс дифракции должен быть кратен шести.

Аналогичный прием может быть применен и к анализу влияния оператора \hat{g} (рис. 29), а также всех операторов \hat{n}_s .

6. Влияние расположения атомов в ячейке на дифракционную картину

Структура формулы, описывающей интенсивность дифрагированной волны, такова, что влияние расположения атомов в элементарной ячейке сказывается лишь на одном множителе $|F(\vec{H})|^2$, изменяющем только интенсивность дифракционного максимума, но не влияющем на геометрию дифракционной картины.

В выражение для структурной амплитуды $F(\vec{H})$, равной

$$F(\vec{H}) = \sum_{j=1}^n f_j e^{-i2\pi (h_1^0 x_1^{(j)} + h_2^0 x_2^{(j)} + h_3^0 x_3^{(j)})}, \quad (86)$$

входит атомная рассеивающая способность (атомная амплитуда), равная

$$f_j = \hat{\mathcal{F}}[\rho_j(\vec{r})], \quad (86a)$$

где $\rho_j(\vec{r})$ — электронная плотность, создаваемая в точке \vec{r} j -тым атомом, равная квадрату модуля функции Шредингера $|\psi(\vec{r})|^2$.

Для атома с одним электроном основное состояние описывается сферически симметричной орбиталью $1s$, так что при вычислениях можно положить $\rho(\vec{r}) = \rho(r)$, где обозначено $|\vec{r}| = r$.

Введя сферические координаты (r, ψ, φ) , где ψ — угол между \vec{r} и осью \vec{e}_3 , а φ — азимутальный угол, отсчитываемый от оси \vec{e}_1 , запишем элемент объема в виде

$$dV = r^2 \sin \psi \, dr \, d\psi \, d\varphi,$$

после чего выражение (86а) примет вид

$$f = \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \rho(r) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r} \right)} r^2 \sin \psi dr d\psi d\varphi.$$

Так как интегрирование по ψ и φ охватывает телесный угол 4π , то вектор \vec{h} можно ориентировать относительно \vec{r} любым способом; удобно направить \vec{h} по \vec{e}_3 , так что

$$(\vec{h}, \vec{r}) = hr \cos \psi,$$

где $|\vec{h}| = h$.

В итоге получим из соотношения (86а)

$$f = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin sr}{sr} dr, \quad (86б)$$

где $2\pi \frac{|\vec{h}|}{\lambda} = s$.

Для атомов с порядковым номером $z > 1$ в первом приближении пренебрегают угловой частью волновой функции $\psi(\vec{r})$ и учитывают только радиальное распределение электронной плотности в соответствующей орбитали.

В этом случае формула (86б) может быть применена для расчета рассеяния на каждой из орбиталей атома, а суммарная амплитуда когерентного рассеяния будет определяться как

$$f(h, \lambda) = \sum_{j=1}^z f_j(h, \lambda). \quad (86в)$$

На рис. 31 приведены вычисленные по формуле (86б) значения $f_j \left(\frac{2 \sin \theta}{\lambda} \right)$ и суммарная атомная амплитуда, найденная

по формуле (86в). Параметр $\frac{2 \sin \theta}{\lambda} = \frac{|\vec{h}|}{\lambda}$. Как видно, при $|\vec{h}| = 0$ $f \left(\frac{2 \sin \theta}{\lambda} \right) = Z$, что непосредственно следует из соотношения (86а), так как

$$\int_0^{\infty} \rho^{(3)}(\vec{r}) dV = Z.$$

При росте $\frac{|\vec{h}|}{\lambda}$ атомная амплитуда быстро уменьшается, что приводит к падению интенсивности дифракционных максимумов, удаленных от центра Фурье-образа.

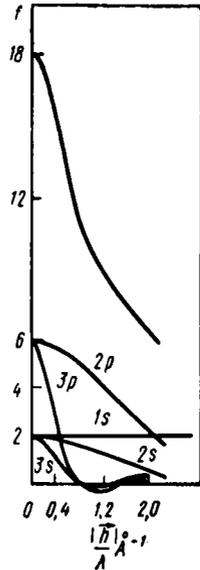


Рис. 31. Атомная амплитуда для иона K^+ . В нижней части графика приведены вклады в амплитуду, создаваемые различными орбиталями иона K^+

После того как мы выяснили смысл множителя f_j в формуле (86), можно перейти к непосредственному рассмотрению структурной амплитуды $F(\vec{H})$.

Прежде всего, легко выделить в соотношении (86) часть, зависящую только от типа ячейки Браве, принятого при описании рассматриваемой структуры.

Обозначив через $\{x_i^{(ol)}\}$ координаты l -ного атома, принадлежащего к нулевому узлу ячейки, и через $\{x_i^{(Bk)}\}$ — координаты k -того узла в ячейке Браве, мы сможем найти координаты любого атома в ячейке как

$$x_i^{(j)} = x_i^{(ol)} + x_i^{(Bk)}. \quad (87)$$

Подставляя соотношение (87) в (86), получим

$$\begin{aligned} F(\vec{H}) &= \sum_{j=1}^n f_j e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{r}\right)} = \\ &= \sum_{k=1}^{n_B} e^{-i2\pi (h_1^0 x_1^{(Bk)} + h_2^0 x_2^{(Bk)} + h_3^0 x_3^{(Bk)})} \times \\ &\times \sum_{l=1}^{n_0} f_l e^{-i2\pi (h_1^0 x_1^{(l)} + h_2^0 x_2^{(l)} + h_3^0 x_3^{(l)})}, \end{aligned} \quad (88)$$

где n_B — число узлов в ячейке Браве;

n_0 — число атомов, принадлежащих одному узлу.

Соотношение (88) может быть переписано в виде

$$F(\vec{H}) = F^B(\vec{H}) F^0(\vec{H}), \quad (88a)$$

где $F^{(B)}(\vec{H})$ — «решеточная» часть амплитуды;

$F^0(\vec{H})$ — амплитуда рассеяния, обусловленная атомами, принадлежащими нулевому узлу.

Используя только $F^B(\vec{H})$, мы снова можем получить правила «погасаний» для центрированных ячеек Браве. Так, например, для I -ячейки с координатами узлов

$$\{x^{Bk}\} = \left(000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$$

получим из соотношения (88) известный результат

$$F^B(\vec{H}) = 1 + e^{-i\pi (h_1^0 + h_2^0 + h_3^0)} = \begin{cases} 2 & \text{при } h_1^0 + h_2^0 + h_3^0 \text{ — четное} \\ 0 & \text{» } h_1^0 + h_2^0 + h_3^0 \text{ — нечетное.} \end{cases}$$

Так же легко может быть исследовано влияние преобразований симметрии, связанных с нулевым узлом элементарной ячейки.

Прежде всего рассмотрим влияние преобразований симметрии точечной группы, сводящихся к простым поворотам под действием оператора \hat{n} и к преобразованию инверсии (центру инверсии) \hat{I} .

Как было установлено ранее, в п. 4, поворот объекта на некоторый угол вызывает поворот Фурье-образа на тот же угол, так что если объект инвариантен по отношению к преобразованию \hat{n} , то и Фурье-образ будет инвариантен по отношению к этому преобразованию.

Если в объекте действует, например, ось симметрии 4, направленная вдоль [001], то структурные амплитуды и интенсивности максимумов с индексами дифракции $h_1^0 h_2^0 h_3^0$, $\bar{h}_2^0 h_1^0 h_3^0$, $\bar{h}_1^0 \bar{h}_2^0 \bar{h}_3^0$, $h_2^0 \bar{h}_1^0 h_3^0$ будут одинаковыми, так как в дифракционном пространстве ось 4 ориентирована перпендикулярно плоскости \bar{b}_2 , \vec{b}_3 и преобразование индексов дифракции, соответствующее максимумам с одинаковой интенсивностью, будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} h_1^{0'} \\ h_2^{0'} \\ h_3^{0'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1^0 \\ h_2^0 \\ h_3^0 \end{pmatrix}.$$

Отсутствие в структуре преобразования $\hat{4}$ не изменит расположения максимумов с индексами $h_1^0 h_2^0 h_3^0$, $\bar{h}_2^0 h_1^0 h_3^0$, $\bar{h}_1^0 \bar{h}_2^0 \bar{h}_3^0$, $h_2^0 \bar{h}_1^0 h_3^0$ по сравнению с предыдущим вариантом, но их интенсивности теперь будут отличаться друг от друга.

Некоторые неприятности возникают при действии операции \hat{I} . При наличии в структуре операции \hat{I} максимумы с индексами $h_1^0 h_2^0 h_3^0$ и $\bar{h}_1^0 \bar{h}_2^0 \bar{h}_3^0$ будут иметь одинаковую интенсивность, т. е.

$$|F(\vec{H})|^2 = |F(-\vec{H})|^2$$

из-за того, что преобразование \hat{I} , переводящее вектор \vec{H} в вектор $-\vec{H}$, является преобразованием симметрии как для объекта, так и для Фурье-образа.

При вычислении величин $|F(\vec{H})|^2$ и $|F(-\vec{H})|^2$ для объекта, не содержащего операции \hat{I} , получим

$$\begin{aligned} |F(\vec{H})|^2 &= F(\vec{H}) F^*(\vec{H}) = \\ &= \sum_{j=1}^n f_j e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(j)} \right)} \sum_{k=1}^n f_k e^{i2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(k)} \right)} \end{aligned} \quad (89)$$

и

$$\begin{aligned}
 |F(-\vec{H})|^2 &= F(-\vec{H}) F^*(-\vec{H}) = \\
 &= \sum_{j=1}^n f_j e^{-i2\pi \left(-\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(j)}\right)} \sum_{k=1}^n f_k e^{i2\pi \left(-\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^{(k)}\right)} \quad (89a)
 \end{aligned}$$

Сравнивая соотношение (89) с (89a), можно видеть, что опять

$$|F(\vec{H})|^2 = |F(-\vec{H})|^2,$$

хотя в объекте оператор \hat{I} отсутствует.

Таким образом, на множестве интенсивностей (но не амплитуд!) всегда действует оператор \hat{I} независимо от того, имеется он в объекте или нет.

Эта особенность процесса дифракции, установленная Фриделем, приводит к тому, что вместо 32-точечных групп симметрии, описывающих симметрию объекта, при помощи дифракционной картины можно идентифицировать только те 11 групп из 32, которые имеют в числе генераторов операцию \hat{I} $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $4/m$, $4/mmm$, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $6/m$, $6/mmm$, $m\bar{3}$, $m\bar{3}m$.

Эти группы обычно называются лауэвскими.

Перенос начала координат в объекте на величину \vec{r}^0 приводит к появлению у структурной амплитуды множителя

$$e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{H}}{\lambda}, \vec{r}^0\right)},$$

исчезающего при вычислении $F(\vec{H}) F^*(\vec{H})$.

Рассмотрим, наконец, что получится, если в объекте действуют операции симметрии \hat{n}_s или \hat{g} .

При наличии в структуре винтовой оси 2_1 , находящейся на расстоянии \vec{r}^0 от начала координат и параллельной \vec{a}_3 , надо, как и ранее, в п. 5, рассматривать дифракционный вектор $\vec{H} = (0, 0, h_3^0)$.

Преобразование координат, совершаемое операцией \hat{n}_s над вектором $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$, запишется в виде

$$\vec{r} = \hat{n} (\vec{r} - \vec{r}^0) + \vec{r}^0 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{s}{n} \end{pmatrix},$$

где для операции $\hat{2}_1 \frac{s}{n} = \frac{1}{2}$.

При работе на векторе $\vec{H} = (0, 0, h_3^0)$ каждая пара точек, связанная преобразованием $\hat{2}_1$, даст два слагаемых в выражении (86):

$$f_j e^{-i2\pi h_3^0 x_3} + f_j e^{-i2\pi h_3^0 (x_3 + \frac{1}{2})} = f_j e^{-i2\pi h_3^0 x_3} (1 + e^{-i\pi h_3^0}). \quad (90)$$

Выражение (90) обращается в нуль при нечетном h_3^0 , что совпадает с ранее полученным результатом (85а).

Аналогично могут быть рассмотрены все операции вида \hat{n}_s и \hat{g} .

Обозначая $\varphi_j = 2\pi (h_1^0 x_1^{(j)} + h_2^0 x_2^{(j)} + h_3^0 x_3^{(j)})$, можно переписать формулу (86) в виде

$$F(\vec{H}) = \sum_j f_j \cos \varphi_j + i \sum_j f_j \sin \varphi_j \quad (91)$$

$$|F(\vec{H})|^2 = \left(\sum_j f_j \cos \varphi_j \right)^2 + \left(\sum_j f_j \sin \varphi_j \right)^2$$

При наличии в структуре операции $\hat{1}$, расположенной в нулевом узле в ячейке с n атомами, $n/2$ атомов будут иметь координаты $\vec{r}^{(j)}$ и $n/2$ атомов — координаты $-\vec{r}^{(j)}$, поэтому соотношение (91) может быть записано в этом случае как

$$F(\vec{H}) = 2 \sum_{j=1}^{n/2} f_j \cos \varphi_j,$$

так как сумма синусных членов $\sum_j f_j \sin \varphi_j = 0$.

Выражение (86) для структурной амплитуды может быть записано в виде

$$F(\vec{H}) = |F(\vec{H})| e^{-i\Phi} = A + iB = |F(\vec{H})| \cos \Phi + i |F(\vec{H})| \sin \Phi,$$

$$\text{причем } \cos \Phi = \frac{\sum_j f_j \cos \varphi_j}{|F(\vec{H})|}; \quad \sin \Phi = \frac{\sum_j f_j \sin \varphi_j}{|F(\vec{H})|}.$$

Как видно, для centrosимметричного кристалла фаза Φ может принимать только два значения: 0 либо π , а амплитуда $F(\vec{H})$ — только значения $F(\vec{H}) = |F(\vec{H})|$ либо $F(\vec{H}) = -|F(\vec{H})|$.

При использовании формулы (86) для конкретного кристалла общее выражение может быть модифицировано с учетом пространственной группы, описывающей симметрию этого кристалла.

Рассмотрим пространственную группу для двумерного пространства $Pmm2$ с генераторами $\{\hat{P}, \hat{m}^{(x)}, \hat{2}\}$. Эта группа состоит из четырех элементов $\{\hat{E}, \hat{m}^{(x)}, \hat{2}, \hat{2}\hat{m}^{(x)}\}$, размещенных в примитивной элементарной ячейке.

Элементы группы $Pmm2$ изоморфно отображаются на множество точек с координатами $\{x_1x_2; \bar{x}_1x_2; x_1\bar{x}_2; \bar{x}_1\bar{x}_2\}$ так, что если в ячейке появится атом в положении x_1x_2 , то одновременно должны быть атомы в остальных трех положениях.

Структурная амплитуда в этом случае будет равна

$$\begin{aligned}
 F(\vec{H}) &= f [e^{-i2\pi (h_1^0x_1 + h_2^0x_2)} + e^{-i2\pi (h_1^0x_1 - h_2^0x_2)} + \\
 &+ e^{-i2\pi (-h_1^0x_1 - h_2^0x_2)} + e^{-i2\pi (-h_1^0x_1 + h_2^0x_2)}] = \\
 &= 2f [\cos 2\pi (h_1^0x_1 + h_2^0x_2) + \cos 2\pi (h_1^0x_1 - h_2^0x_2)] = \\
 &= 4f \cos 2\pi h_1^0x_1 \cos 2\pi h_2^0x_2. \tag{92}
 \end{aligned}$$

Обычно выражения типа (92) приводятся в справочниках для всех пространственных групп.

7. Способы анализа распределения интенсивности в брегговских дифракционных максимумах

Соотношение (75) показывает, что дифракционная картина объекта с R -решеткой представляет собой множество максимумов, каждый из которых может быть описан интерференционной функцией

$$I(\Delta\vec{h}) = I_0 |F(\vec{H})|^2 |G(\Delta\vec{h})|^2.$$

Вектор \vec{h} , определяющий положение дифракционного максимума, может быть записан в виде $\vec{h} = h_i \vec{b}_i$, где координаты $\{h_i\}$ равны $h_i = h_i^0 + \Delta h_i$ и $\frac{|\Delta h_i|}{h_i^0} \ll 1$, так что отличная от нуля интенсивность наблюдается вблизи узлов H -решетки с координатами $\{h_i^0\}$. Такие максимумы обычно называются брегговскими.

При анализе брегговских максимумов удобно применять ромбические базисные векторы $\{\vec{r}\vec{b}_i\}$, ориентируя $\vec{r}\vec{b}_3$ вдоль рассматриваемого дифракционного вектора \vec{h} (рис. 32) и полагая длину вектора $\vec{r}\vec{b}_3$ равной $|\vec{r}\vec{b}_3| = |\vec{H}^{(1)}|$, т. е. расстоянию от начала координат до первого узла на векторе \vec{h} . Теперь узлы \vec{h} вектора, в обычном базисе имеющие координаты $000, h_1^0 h_2^0 h_3^0, 2h_1^0 2h_2^0 2h_3^0$ и т. д., будут индексироваться соответственно как $000, 001, 002$ и т. д.

Очень важно уяснить, что выбор ромбического базиса $\{\vec{r}b_i\}$ при переходе от одного \vec{h} -вектора к другому делается каждый раз заново.

Таким образом, в варьируемом базисе $\{\vec{r}b_i\}$ узлы 111, 321, 132, 320 и т. д. будут обозначаться одинаково, как 001, а узлы



Рис. 32. Соотношение между обычными и ромбическими базисами:

a — «привязка» ромбического базиса $\{\vec{r}b_i\}$ к дифракционному вектору \vec{h} в общем случае; b — в «кубическом» базисе узлы по направлению $[111]$ имеют координаты 000, 111, 222 и т. д.; d_{111}^b — расстояние между соседними узловыми плоскостями в Фурье-пространстве; σ — в ромбическом базисе те же узлы имеют координаты 000, 001, 002 и т. д.; a — в объекте вектор $\{\vec{r}a_i\}$ равен расстоянию между соседними узловыми плоскостями d_{111}^a и не является вектором решетки; δ — вектором решетки является вектор $\vec{r}R_{001}$, равный вектору \vec{R}_{111} , записанному в обычном «кубическом» базисе

264 и 640, как 002 и т. д., независимо от того, к какой сингонии относится рассматриваемый кристалл.

$|\vec{r}b_3|$ определяется как

$$|\vec{r}b_3| = \lambda (h_i^0 h_i^0 g_{ij}^{-1})^{\frac{1}{2}}, \quad (93)$$

где $\{h_i^0\}$ — координаты первого узла на \vec{h} -векторе, т. е. взаимно простые числа;

$\{g_{ij}^{-1}\}$ и $\{h_i^0\}$ найдены в базисе $\{\vec{b}_i\}$, сопряженном обычному кристаллографическому базису объекта $\{\vec{a}_i\}$.

Если кристалл относится к кубической сингонии, то

$$|\vec{r}b_3| = \frac{\lambda \sqrt{h_1^{02} + h_2^{02} + h_3^{02}}}{|\vec{a}|}.$$

Очевидно, в объекте базису $\{\vec{r}b_i\}$ будут соответствовать векторы $\{\vec{r}a_i\}$, также образующие ромбический базис, причем ориентировка векторов $\{\vec{r}a_i\}$ определяется очень просто — как

$$\vec{r}a_i \parallel \vec{r}b_i,$$

а длины этих векторов — как

$$|\vec{r}_{a_i}| = \frac{\lambda}{|\vec{r}_{b_i}|}. \quad (93a)$$

Учитывая изоморфизм $\{h_i^0\} \leftrightarrow \{h_i\}$,

где $\{h_i^0\}$ — взаимно простые индексы дифракции;

$\{h_i\}$ — индексы узловой плоскости,

мы легко устанавливаем, что $|\vec{r}_{b_3}| = \frac{\lambda}{d}$,

где d — межплоскостное расстояние для системы плоскостей с индексами $\{h_i\}$, равными координатам первого узла на дифракционном векторе \vec{h} .

Из формулы (93a) сразу получается, что

$$|\vec{r}_{a_3}| = d.$$

Таким образом, вектор \vec{r}_{a_3} в объекте оказывается ориентированным перпендикулярно системе плоскостей с индексами, равными индексам первого узла на \vec{h} -векторе, а длина этого вектора равна межплоскостному расстоянию для этой системы плоскостей.

Направления векторов \vec{r}_{b_1} и \vec{r}_{b_2} выбираются в зависимости от того, в каких сечениях мы собираемся анализировать дифракционное пространство. Если эти направления выбраны, то длины $|\vec{r}_{b_1}|$, $|\vec{r}_{b_2}|$ и соответственно $|\vec{r}_{a_1}|$ и $|\vec{r}_{a_2}|$ определяются так же, как для векторов \vec{r}_{b_3} и \vec{r}_{a_3} .

Изложенная процедура годится для кристаллов любой сингонии. При работе со специально выбираемыми ромбическими базисами $\{\vec{r}_{a_i}\}$ и $\{\vec{r}_{b_i}\}$ важно учитывать, что векторы $\{\vec{r}_{a_i}\}$, как правило, не являются векторами решетки, а векторы $\{\vec{r}_{b_i}\}$ всегда будут векторами H -решетки.

Для того чтобы понять, в чем здесь дело, рассмотрим дифракцию на структуре, описываемой P -ячейкой кубической сингонии.

Пусть мы хотим рассмотреть множество дифракционных максимумов, расположенных по направлению $[111]$ в Фурье-пространстве (рис. 32). В этом случае по формуле (93)

$$|\vec{r}_{b_3}| = \frac{\lambda \sqrt{3}}{a},$$

где a — параметр P -ячейки в объекте.

В объекте

$$|\vec{r}_{a_3}| = \frac{\lambda}{|\vec{r}_{b_3}|} = \frac{a \sqrt{3}}{3} = d_{111}^a.$$

Как видно из рис. 32, трансляционная периодичность по направлению $[111]$ в кристалле описывается вектором \vec{R}_{111} , равным

$$|\vec{R}_{111}| = a\sqrt{3},$$

так что узлы R -решетки по направлению $[111]$ в кристалле располагаются на расстояниях, в три раза больших длины вектора $|a_3|$.

Таким образом, трансляционная периодичность Фурье-пространства отображается на множество узловых плоскостей в объекте. В полном соответствии со свойством симметрии (21) трансляционная периодичность в пространстве объекта, т. е. период идентичности $I_{111}^a = |\vec{R}_{111}|$, отображается на узловые плоскости в Фурье-пространстве, след которых указан на рис. 32 и расстояние между которыми равно d_{111}^b , так что одновременно имеют место соотношения

$$\left. \begin{aligned} I^b d^a &= \lambda \\ I^a d^b &= \lambda \end{aligned} \right\}, \quad (936)$$

где $I^b = |r_{b_3}^{\rightarrow}|$ и $I^a = |\vec{R}|$.

Рассмотренные здесь соотношения показывают, что простое отображение узловой прямой объекта на узловую прямую Фурье-пространства с плоскостями, проходящими только через узлы Фурье-пространства, как это изображено на рис. 11, будет иметь место только в случае одномерного объекта.

Для трехмерного кристалла подобное отображение будет иметь место только для направлений типа $\langle 100 \rangle$ в том случае, если для описания R -решетки применяется P -ячейка, образованная тремя наименьшими векторами.

Рассмотрим, каким образом можно получить информацию о распределении интенсивности в брегговском максимуме.

На рис. 33 дифракционный вектор ориентирован так, что удовлетворяется условие дифракции $\vec{t} - \vec{t}^0 = \vec{h}$, т. е. область суще-

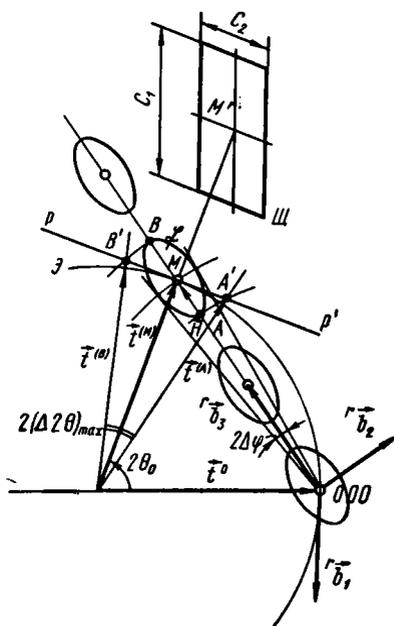


Рис. 33. К методам сканирования \mathcal{L} -области счетчиком:

pp' — след плоскости, касательной к сфере Эвальда в точке M ; $\vec{t}(M)$ — вектор дифрагированной волны, отвечающий наибольшей интенсивности в максимуме; \mathcal{L} — щель счетчика, имеющая размеры $c_1 \times c_2$ и отстоящая от объекта на расстоянии R . Длинная сторона щели c_1 перпендикулярна плоскости рисунка и параллельна вектору $r_{b_3}^{\rightarrow}$,

ствования \mathcal{L} -функции $I(\vec{h})$ пересекается сферой Эвальда, причем на рисунке изображен момент, когда на сферу Эвальда выведен узел 002 (как видно, работа проводится в ромбическом базисе).

Возможны три различных способа исследования функции $I(\vec{h})$.

Способ первый — 2θ сканирование. Объект неподвижен и, следовательно, неподвижен \vec{h} -вектор. Счетчик с узкой щелью \mathcal{C} вращается с угловой скоростью 2ω , сканируя угол $\Delta 2\theta$ (рис. 34).

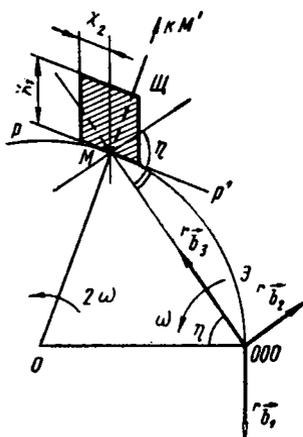


Рис. 34. Методика θ - 2θ -сканирования.

При θ - 2θ -сканировании счетчик следит за лучом OM' .

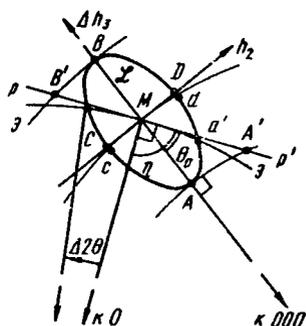


Рис. 35. Пересечение области \mathcal{L} сферой Эвальда (дуга ЭЭ). В увеличенном масштабе показано пересечение частью окружности Эвальда ЭЭ области существования функции интенсивности \mathcal{L} . При записи интенсивности в терминах переменной Δh координаты h_1 , h_2 и Δh_3 отсчитываются от точки M .

Если абсолютная высота щели \mathcal{C} равна c_1 , то угловая высота щели $2\chi_1$ равна $2\chi_1 = c_1/R$, где $R = OM'$ — расстояние от образца до счетчика.

При 2θ сканировании узкой щелью (ширина щели $2\chi_2 = c_2/R$ мала) регистрируется распределение интенсивности вдоль дуги $b'a'$ с учетом интегрирования в счетчике по высоте щели (рис. 35):

$$I(\Delta 2\theta)_{b'a'} = I_0 |F(\vec{H})|^2 \int_{-\chi_1}^{\chi_1} G^2(h_1, h_2, \Delta h_3)_{b'a'} d\chi_1,$$

причем $d\chi_1 = |r\vec{b}_1| dh_1$.

Если дуга $b'a'$ проходит через узел с координатами $00h_3^0$, как это изображено на рис. 35, то $Mb' = \Delta 2\theta$ и

$$|r\vec{b}_3| \Delta h_3 = \Delta 2\theta \cos \theta_0$$

$$- |r\vec{b}_2| h_2 = \Delta 2\theta \sin \theta_0.$$

При регистрации дифракционного максимума на неподвижную пленку на ней отобразится распределение интенсивности в сече-

нии области \mathcal{L} плоскостью, касательной к сфере Эвальда в точке M , причем $\Delta\theta = f(h_2, \Delta h_3)$.

Второй способ $\theta \div 2\theta$ -сканирование. Счетчик вращается с угловой скоростью 2ω , кристалл синхронно со счетчиком вращается с угловой скоростью ω . Если перед счетчиком стоит узкая щель с размерами $c_1 \times c_2$, то в тот момент, когда область \mathcal{L} коснется сферы Эвальда в точке A' , счетчик будет ориентирован на вектор $\vec{i}^{(A)}$; при соприкосновении \mathcal{L} со сферой Эвальда в точке B' счетчик будет ориентирован на вектор $\vec{i}^{(B)}$.

В итоге будет зарегистрировано распределение интенсивности вдоль \vec{h} -вектора на отрезке AB , причем за счет конечного размера щелей произойдет интегрирование в области с размерами $2\chi_1 \times 2\chi_2 \sin \theta_0$ (рис. 34), а переход от угловых размеров этой области к абсолютным может быть проделан при помощи соотношений

$$\begin{aligned} \overline{OM}\chi_1 &= h_1^c |r\vec{b}_1|; \\ \overline{OM}\chi_2 \sin \theta_0 &= h_2^c |r\vec{b}_2| = OM \cdot \chi_2', \end{aligned}$$

где $\overline{OM} = 1$.

Таким образом, получим распределение интенсивности

$$\begin{aligned} I(\Delta 2\theta) &= I_s |F(\vec{H})|^2 \int_{-\chi_1'}^{\chi_1} \int_{-\chi_2'}^{\chi_2} G^2(h_1, h_2, \Delta h_3) d\chi_1 d\chi_2 = \\ &= I_s |F(\vec{H})|^2 |r\vec{b}_1| |r\vec{b}_2| \int_{-h_1^c}^{h_1^c} \int_{-h_2^c}^{h_2^c} G^2(h_1, h_2, \Delta h_3) dh_1 dh_2. \end{aligned} \quad (94)$$

В том случае, когда высота щели $2\chi_1$ такова, что $2\chi_1 \gg L_1^b$, где L_1^b — размер \mathcal{L} -области в направлении первой оси, пределы интегрирования можно расширить на интервал $(-\infty, \infty)$ и получить

$$I(\Delta 2\theta) = \frac{I_s |F(\vec{H})|^2 |r\vec{b}_1| |r\vec{b}_2| N_1 \sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2} \int_{-h_2^c}^{h_2^c} \frac{\sin^2 \pi N_3 h_2}{(\pi h_2)^2} dh_2. \quad (94a)$$

В рассматриваемом случае угол $\Delta 2\theta$ зависит только от переменной Δh_3 :

$$\Delta 2\theta = \frac{|r\vec{b}_3|}{\cos \theta_0} \Delta h_3.$$

Третий способ — ϕ -сканирование, называемое также ω -сканированием, при котором счетчик неподвижен, а кристалл

вращается с угловой скоростью ω , сканируя угол $\Delta\varphi$. Счетчик может быть предварительно ориентирован на любой из векторов \vec{i} , лежащих в промежутке $(\vec{i}^{(A)}, \vec{i}^{(B)})$. Если ориентировать счетчик на вектор $\vec{i}^{(M)}$, то при вращении кристалла и соответствующем вращении Фурье-образа будет регистрироваться распределение интенсивности $I(\Delta\varphi)$ вдоль дуги cd (рис. 35), причем снова будет происходить интегрирование щелью счетчика по площади размером $2\chi_1 \cdot 2\chi_2 \cos \theta_0$, (рис. 34)

причем $1 \cdot \chi_1 = h_1^c |r_{b_1}^{\vec{}}|$ и

$$1 \cdot \chi_2 \cos \theta_0 = \Delta h_3^c |r_{b_3}^{\vec{}}| = 1 \cdot \chi_2',$$

так что

$$I(\Delta\varphi) = I_3 |F(\vec{H})|^2 \int_{-\chi_1}^{\chi_1} \int_{-\chi_2'}^{\chi_2'} G^2(h_1, h_2, \Delta h_3) d\chi_1 d\chi_2' = \\ \Rightarrow I_3 |F(\vec{H})|^2 |r_{b_1}^{\vec{}}| |r_{b_3}^{\vec{}}| \int_{-h_1^c}^{h_1^c} \int_{-\Delta h_3^c}^{\Delta h_3^c} G^2(h_1, h_2, \Delta h_3) dh_1 d\Delta h_3. \quad (94б)$$

Связь между $\Delta\varphi$ и координатой h_2 легко устанавливается из рис. 33:

$$\Delta\varphi = \frac{h_2 |r_{b_2}^{\vec{}}|}{|\vec{H}|} = \frac{h_2 |r_{b_2}^{\vec{}}|}{2 \sin \theta_0}. \quad (94в)$$

При очень высокой и широкой щели, когда $2\chi_1 \gg L_1^b$ и $2\chi_2 \cos \theta_0 \gg L_3^b$, получим

$$I(\Delta\varphi) = \frac{I_3 |F(\vec{H})|^2 |r_{b_1}^{\vec{}}| |r_{b_3}^{\vec{}}|}{\cos \theta_0} N_1 N_3 \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2}. \quad (94г)$$

Практически при проведении эксперимента зависимости $I(\Delta\theta)$ и $I(\Delta\varphi)$ можно строить либо по точкам, отсчитывая углы по шкалам дифрактометра, либо при непрерывном вращении счетчика с угловой скоростью 2ω и образца со скоростью ω (при $\theta \div 2\theta$ -сканировании) или только образца со скоростью ω (при φ -сканировании).

В последнем случае аппаратура регистрирует зависимость интенсивности от времени $I(t)$.

Если приемная щель счетчика $Щ$ настолько велика, что при любом положении кристалла дифрагированный пучок полностью улавливается счетчиком, то при сканировании угла $\Delta\varphi$ будет измерена полная мощность

$$I = \int_{\Delta\varphi} I(\Delta\varphi) d\Delta\varphi,$$

т. е. интегральная интенсивность (рис. 36).

Если запись ведется при непрерывном вращении кристалла со скоростью ω , то регистрируется величина

$$E = \int I(t) dt = \int I \left(\frac{\Delta\varphi}{\omega} \right) d \left(\frac{\Delta\varphi}{\omega} \right),$$

и в этом случае для получения интегральной интенсивности надо учитывать зависимость масштаба по оси абсцисс от ω , т. е. положить $I = \omega E$.

Остановимся еще на очень важном случае, когда в освещенном объеме кристалла имеется некоторое множество областей малого

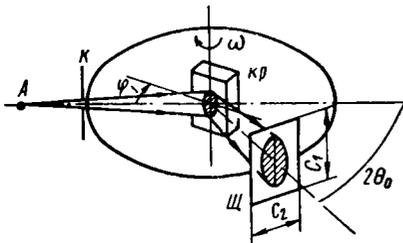


Рис. 36. Одна из возможных схем измерения интегральной интенсивности: Kp — кристалл; \mathcal{C}_2 — приемная щель неподвижного счетчика, ориентированного на угол $2\theta_0$; K — коллиматор, ограничивающий расходимость первичного пучка; A — анод рентгеновской трубки

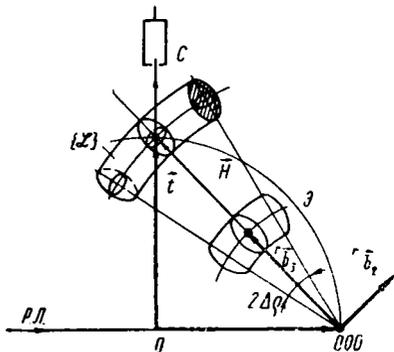


Рис. 37. Разориентировка Фурье-образов, при которой множество областей $\{\mathcal{L}\}$ образует трубку длиной $|\vec{H}| 2\Delta\rho$

размера с различной ориентировкой. Такая ситуация может возникнуть в кристалле с дислокационной структурой, когда дислокационные скопления образуют границы между блоками (доменами), либо в поликристаллическом (порошковом) образце, образованном различно ориентированными кристалликами малого размера.

Очевидно, каждому домену будет соответствовать свой Фурье-образ и всему объекту — множество Фурье-образов, каждый из которых ориентирован так же, как соответствующий прообраз.

Если на множестве прообразов задана функция распределения по разориентировкам $\varphi(\Delta\rho)$, то эта же функция будет действовать и на множестве Фурье-образов, производя множество функций $\{G^2(\Delta\vec{h})\}$, области существования которых $\{\mathcal{L}\}$ образуют множество, изображаемое трубкой, длина которой равна $|\vec{H}| 2\Delta\rho$ (рис. 37), причем принято, что разориентировка имеет место только в плоскости, образованной векторами \vec{r}_2, \vec{r}_3 (рис. 37), так что связь между разориентировкой $\Delta\rho$ и координатой h_2 задается соотношением (94'), в котором надо положить $\Delta\varphi = \Delta\rho$, и поэтому вместо функции $\varphi(\Delta\rho)$ можно рассматривать функцию $\varphi(h_2)$.

Пусть $\varphi(h_2)$ имеет вид колоколообразной функции (рис. 38) и пусть распределение интенсивности для одного из Фурье-образов $I(\Delta\vec{h})$ также представляется колоколообразной функцией $I(h_2)$. В этом случае легко получить распределение интенсивности $I_\Sigma(h_2)$ рассматриваемого множества Фурье-образов (рис. 38).

Очевидно, действие функции $\varphi(\tau)$, имеющей смысл плотности вероятности, на функцию $I(h_2)$ сводится к переносу этой функции в точку τ , так что вместо $I(h_2)$ надо писать $I(h_2 - \tau)$, и к умножению этой функции на величину $\varphi(\tau) d\tau$, т. е. на вероятность, соответствующую интервалу $d\tau$ в точке τ (см. рис. 38).

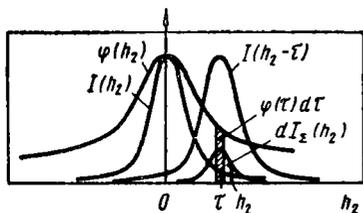


Рис. 38. Образование наблюдаемого дифракционного профиля в результате свертки индивидуального профиля одной из областей и функции распределения по разориентировкам

В итоге вклад $dI_\Sigma(h_2)$ в суммарную зависимость $I_\Sigma(h_2)$ будет равен

$$dI_\Sigma(h_2) = I(h_2 - \tau) \varphi(\tau) d\tau,$$

а искомая зависимость $I_\Sigma(h_2)$ запишется как

$$I_\Sigma(h_2) = \int_{-\infty}^{\infty} I(h_2 - \tau) \varphi(\tau) d\tau = I(h_2) \oplus \varphi(h_2). \quad (95)$$

Таким образом, если в объекте действует функция распределения по разориентировкам, то при φ -сканировании наблюдаемый дифракционный профиль будет сверткой этой функции распределения и индивидуального профиля, соответствующего одной из рассматриваемых областей.

Само собой разумеется, что действие функций распределения $\varphi(h_1)$ и $\varphi(\Delta h_2)$ также будет описываться соотношениями типа (95).

8. Интегральная отражательная способность кристалла

При анализе дифракционной картины мы пользуемся либо дифрактометром со счетчиком, либо рентгеновской камерой с пленкой. В том и другом случае полезный сигнал, содержащий информацию о дифракционном максимуме, искажается из-за влияния измерительной системы, регистрирующей интенсивность дифрагированных пучков.

Если обозначить регистрируемое системой распределение интенсивности через $I^h(\Delta\vec{h})$, инструментальную функцию через $I^s(\Delta\vec{h})$ и истинное распределение интенсивности в максимуме (полезный сигнал) через $I^i(\Delta\vec{h})$, то

$$I^h(\Delta\vec{h}) = I^i(\Delta\vec{h}) \oplus I^s(\Delta\vec{h}). \quad (96)$$

Используя свойство свертки (11) и обозначая мощность дифрагированного пучка, измеренную системой (интегральную интенсивность), через I , мощность первичного пучка, измеренную системой в отсутствие дифракции на образце, через I_0 , мощность полезного сигнала через ρ :

$$\rho = \int_{\mathcal{L}} I^i(\Delta \vec{h}) dV_b, \quad (97)$$

получим из соотношения (96)

$$I = I_0 \rho.$$

Наиболее простой и точный способ отыскания интегральной отражательной способности ρ связан с применением φ -сканирования.

Если взять неподвижный счетчик, ориентированный на вектор \vec{i}^M , т. е. на угол $2\theta_0$ (рис. 33), и расположить перед ним прямоугольную щель таких размеров, чтобы при любом пересечении области существования функции $G^2(\Delta \vec{h})$ (в дальнейшем для краткости называемой \mathcal{L} -областью) со сферой Эвальда все дифрагированные лучи попадали в счетчик, то интегрирование по плоскости, касательной к сфере Эвальда в точке M , будет происходить в самом счетчике, и для получения всей энергии, отвечающей дифракционному максимуму, необходимо при помощи φ -сканирования «прогнать» всю \mathcal{L} -область через поверхность сферы Эвальда (рис. 33 и 39).

При отыскании ρ из соотношения (97) необходимо иметь в виду, что интенсивность в точке с координатами $\{h_i\}$

$$I(\Delta \vec{h}) = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 G^2(\Delta \vec{h}) P$$

записана для единицы телесного угла, под которым видно сечение \mathcal{L} -области из центра сферы Эвальда.

В телесном угле $d\Delta\Omega$ (рис. 39) рассеивается интенсивность $I(\Delta \vec{h}) d\Delta\Omega$, а при повороте кристалла на угол $d\Delta\varphi$ выделяется мощность

$$dP = I(\Delta \vec{h}) d\Delta\Omega d\Delta\varphi.$$

Так как объем \mathcal{L} -области, заметаемый сферой Эвальда при повороте кристалла на угол $d\Delta\varphi$, равен (рис. 39)

$$dV_b = dS \cos \theta_0 |\vec{H}| d\Delta\varphi,$$

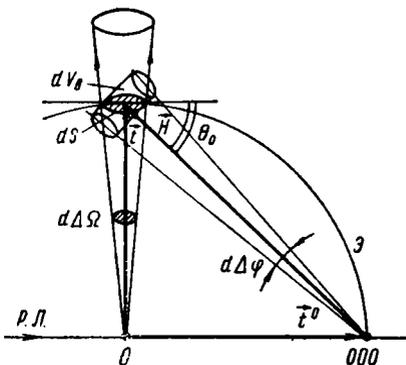


Рис. 39. Соотношение между телесным углом $d\Delta\Omega$ и объемом dV_b при φ -сканировании угла $d\Delta\varphi$

где $dS = 1^2 d \Delta \Omega$, то интегральная интенсивность, приходящаяся на единицу объема \mathcal{L} -области, равна

$$\frac{dP}{dV_b} = \frac{I(\Delta \vec{h})}{\sin 2\theta_0} = I^f(\Delta \vec{h}).$$

В итоге из формулы (97) получим, что

$$\rho = \int_{\mathcal{L}}^{(3)} \frac{I(\Delta \vec{h})}{\sin 2\theta_0} |r \vec{b}_1| |r \vec{b}_2| |r \vec{b}_3| dh_1 dh_2 dh_3. \quad (97a)$$

Так как \mathcal{L} -область локализована вблизи узла H -решетки, пределы интегрирования можно взять для всех $\{h_i\}$ от $-\infty$ до ∞ .

Вводя число ячеек в кристалле rN : $rN = rN_1 rN_2 rN_3$ и число ячеек в единице объема кристалла: $r_n = r v_a^{-1} = rN/\Delta V$ и принимая во внимание соотношение $r v_b = |r \vec{b}_1| |r \vec{b}_2| |r \vec{b}_3| = \lambda^3 r_n$, получим из соотношения (97a), что

$$\rho = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 r_n^2 PL \Delta V, \quad (97b)$$

где $L = (\sin 2\theta_0)^{-1}$.

Легко видеть, что этот же результат для ρ может быть получен с использованием соотношения

$$\rho = \frac{I}{I_0} = \frac{\int I(\Delta \Phi) d\Delta \Phi}{I_0}$$

где $I(\Delta \Phi)$ — в условиях работы с широкой щелью выражается формулой (94б), а $\Delta \Phi$ записано в форме (94а).

Отнеся ρ к объему кристалла ΔV , создающему дифракционную картину, получим удельную отражательную способность (удельную мощность) Q , равную

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 r_n^2 PL. \quad (98)$$

Для получения интегральной интенсивности мы проводили интегрирование по всей области существования функции интенсивности \mathcal{L} , и поэтому конечный результат не должен зависеть от выбора базисных осей $\{r \vec{b}_i\}$. На первый взгляд, этому заключению противоречит то, что в выражении (98) фигурирует множитель r_n^2 , явно зависящий от способа выбора базисных осей $\{r \vec{b}_i\}$.

В действительности инвариантной по отношению к выбору базисных осей является величина $|F(\vec{H})|^2 r_n^2$, так что на самом деле величина ρ , равно как и Q , не зависит от способа выбора элементарной ячейки.

При расчете интегральной интенсивности мы применили ромбический базис лишь затем, чтобы максимально упростить связь

между углами $\Delta\Omega$, $\Delta 2\theta$, $\Delta\varphi$ и координатами дифракционного пространства $\{h_i\}$. Обычно в формулах (97б) и (98) объем V_a , число элементарных ячеек в единице объема n , равно как и величина $|F(\vec{H})|^2$, вычисляются в терминах обычной ячейки Браве.

Приведенный расчет выполнен в предположении плоской падающей на объект волны, т. е. параллельного пучка первичных рентгеновских лучей с интенсивностью I_0 .

Такое предположение является нереализуемой на практике идеализацией, и в действительности всегда имеется либо расходящийся, либо сходящийся пучок первичных рентгеновских лучей.

Пусть распределение интенсивности по направлениям \vec{i}^0 в первичном пучке описывается функцией распределения $\varphi(\Delta\rho)$, где $\Delta\rho$ — отклонение от некоторой средней ориентировки вектора \vec{i}^0 . Вариация вектора \vec{i}^0 приведет к тому, что в дифракционном пространстве возникнет множество функций $\{G^2(\Delta\vec{h})\}$, на котором будет действовать та же функция распределения $\varphi(\Delta\rho)$.

Примем для простоты, что вариация вектора \vec{i}^0 происходит только в плоскости, образованной векторами $\vec{r}b_2$ и $\vec{r}b_3$. В этом случае вместо функции распределения $\varphi(\Delta\rho)$ можно брать функцию $\varphi(h_2)$ и при φ -сканировании в соответствии с формулой (95) получим вместо функции $I(\Delta\vec{h})$ функцию

$$I(\Delta\vec{h}) \oplus \varphi(h_2) = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 P \frac{\sin^2 \pi N_1 h_1}{(\pi h_1)^2} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2} \oplus \varphi(h_2).$$

Если $\varphi(h_2)$ имеет вид колоколообразной функции, то в силу свойства (11)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{I(\Delta\vec{h})}{\sin 2\theta_0} \oplus \varphi(h_2) \right] dV_b = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I(\Delta\vec{h})}{\sin 2\theta_0} dV_b \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(h_2) dV_b = \rho,$$

так как интеграл от функции распределения нормирован на единицу. Аналогичный результат получается при вариации \vec{i}^0 в плоскости, образованной векторами $\vec{r}b_1$ и $\vec{r}b_3$.

Таким образом, вариация вектора \vec{i}^0 в первичном пучке не влияет на величину интегральной отражательной способности, определяемой методом φ -сканирования.

Конечно, все приведенные здесь рассуждения годятся и для того случая, когда функция $\varphi(\Delta\rho)$ описывает особенности строения кристалла, например вариацию ориентировок, вызванную действием дислокационной структуры.

Особый интерес представляет случай, когда функция распределения по телесному углу $\Delta\rho$ является постоянной величиной:

$$\varphi(\Delta\rho) = \frac{1}{4\pi} \mathbf{1}(\Delta\rho). \quad (99)$$

Такая функция распределения действует в порошковом или поликристаллическом образце, не обладающем текстурой.

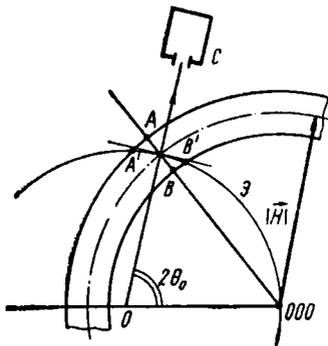


Рис. 40. Одна из областей существования Фурье-образа порошкового образца. Для образца без преимущественной ориентировки функция интенсивности зависит только от координаты Δh_3 , измеряемой вдоль отрезка AB при помощи счетчика C , работающего в режиме 2θ -сканирования

Легко показать, что в этом случае для определения интегральной отражательной способности достаточно работать счетчиком с узкой щелью, сканируя при этом только угол $\Delta 2\theta$ и оставляя образец неподвижным.

Для поликристаллического образца множество \mathcal{L} -областей образует сферический слой со средним радиусом $|\vec{H}|$ (рис. 40).

Установим, что будет регистрировать счетчик с узкой щелью при 2θ -сканировании.

На первый взгляд кажется, что повторяется рассмотренная в п. 7 ситуация и будет регистрироваться распределение интенсивности вдоль дуги $a'b'$ (рис. 35).

На самом деле это не так. Распределение интенсивности, зависящее от h_2 , будет пропорционально величине

$$\frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} \oplus \mathbf{1}(h_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} dh_2 = N_2.$$

Аналогично распределение интенсивности по h_1 пропорционально N_1 .

Таким образом, действие функции распределения типа (99) сводится к интегрированию функции $G^2(\Delta \vec{h})$ по h_1 и h_2 , так что перемещение в плоскости, касательной к вектору \vec{H} , не влияет на регистрируемую счетчиком интенсивность, зависящую только от координаты вдоль \vec{h} -вектора, т. е. от Δh_3 . В итоге счетчик при 2θ -сканировании узкой щелью позволяет регистрировать распределение интенсивности $I(\Delta 2\theta)$, пропорциональное $N_1 N_2 I(\Delta h_3)$, и для отыскания полной мощности остается проинтегрировать только по координате Δh_3 или, что то же, по координате $\Delta 2\theta$.

Эти расчеты будут выполнены в п. 8 гл. III.

ГЛАВА III

МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ И РЕГИСТРАЦИИ ДИФРАКЦИОННОЙ КАРТИНЫ

1. Некоторые соображения о различных возможностях получения дифракционной картины

Ранее, в гл. I, мы уже смогли убедиться, что для получения дифракционного максимума, положение которого в дифракционном пространстве определяется вектором \vec{h} , необходимо, чтобы область существования \mathcal{L} -функции, описывающей распределение интенсивности в этом максимуме, пересекалась сферой Эвальда.

Радиус сферы Эвальда постоянен и равен единице, положение сферы Эвальда определяется вектором \vec{t}^0 .

Модуль вектора \vec{h} и его ориентировка при заданных координатах в дифракционном пространстве $\{h_i\}$ зависят от векторов $\{\vec{b}_i\}$ или, переходя к объекту, от векторов $\{\vec{a}_i\}$ и от длины волны применяемого излучения.

Таким образом, для того чтобы вывести конец вектора \vec{h} (не обязательно узел обратной решетки!) на сферу Эвальда, необходимо изменить хотя бы один из упомянутых параметров — \vec{t}^0 , $\{\vec{a}_i\}$, λ .

Понятно, что в случае работы с кристаллом вариация векторов $\{\vec{a}_i\}$ сводится только к изменению ориентировки кристалла, т. е. к комбинации

$$\{\vec{a}_i\} = \text{var при } \{|\vec{a}_i|\} = \text{const.} \quad (100)$$

Случай изменения размеров ячейки в процессе дифракции (например, при быстропротекающих фазовых превращениях) не требует специального рассмотрения.

В соответствии с тем, какой из трех параметров варьируется, можно классифицировать методы получения дифракционной картины.

Комбинация

$$\lambda = \text{var; } \{\vec{a}_i\}, \vec{t}^0 = \text{const} \quad (100a)$$

реализуется в способе Лауэ;

комбинация

$$\vec{t}^0 = \text{var}; \quad \{\vec{a}_i\}, \quad \lambda = \text{const} \quad (100б)$$

— в способе расходящегося пучка (способ линий Косселя);

$$\{\vec{a}_i\} = \text{var}; \quad \{|\vec{a}_i|\}, \quad \lambda, \vec{t}^0 = \text{const} \quad (100в)$$

— в способе вращения или колебания кристалла.

Комбинация (100в) реализуется в способе порошка (или поликристалла) с той лишь разницей, что в способе вращения изменение ориентировки достигается принудительно в результате вращения монокристалльного образца, а в способе порошка — естественным путем из-за того, что отдельные кристаллиты имеют в образце различную ориентировку и тем самым обеспечивают выполнение условия (100в). Как видно, в этом случае образец может оставаться неподвижным, хотя в действительности (например, для крупнокристаллического порошка) его приходится иногда слегка колебать или даже вращать, чтобы получить хорошие дифракционные линии.

Во всех указанных случаях регистрация дифракционной картины осуществляется на неподвижную пленку.

Несколько более сложными являются случаи, когда синхронно с вращением монокристалльного образца движется рентгеновская пленка; эти способы являются модификацией варианта (100в).

Такая программа реализуется в рентгеновских гониометрах, работающих по схемам Саутера, Де-Ионга—Боумана, Вейсенберга и др., а также в прецессионных камерах, работающих по схемам Бургера, Линника и др.

В наиболее прозрачном виде реализация варианта (100в) осуществляется в дифрактометрах, снабженных очень прецизионной механикой для вывода области существования функции интенсивности на сферу Эвальда.

Понятно, что исследование порошкового образца также может осуществляться при помощи дифрактометра. Преимущество фотографической регистрации дифракционной картины перед регистрацией счетчиком заключается в том, что на рентгеновской пленке сразу регистрируется некое двумерное сечение дифракционного пространства со всеми его особенностями, которые могут быть пропущены при работе на дифрактометре со счетчиком.

Крупным недостатком фотографического метода является малая точность при измерении интенсивности максимумов, связанная с необходимостью денситометрических измерений на проявленной рентгеновской пленке. Можно полагать, что при усовершенствовании фотографического процесса точность измерения интенсивности при помощи пленки будет того же порядка, что и при работе со счетчиком.

2. Особенности изображения решеточных Фурье-образов идеального монокристалла и поликристаллического (порошкового) объекта

Рассмотрим подробнее, какой вид будут иметь Фурье-образы монокристаллических и поликристаллических объектов, размеры которых неограниченны. Такой подход свидетельствует о том, что мы будем интересоваться только геометрией дифракционной картины, т. е. распределением в пространстве дельта-образных максимумов, не обращая внимания на действительную форму этих максимумов, связанную с конечными размерами объекта.

Ограничимся также пока случаем монохроматического излучения, т. е. условием $\lambda = \text{const}$, и плоской падающей волной, т. е. условием $\vec{t}^0 = \text{const}$.

В дальнейшем, если это не сможет вызвать недоразумения, мы будем в ряде случаев для краткости называть решеточным Фурье-образом не саму функцию $\text{Ш}(\vec{h})$, а только область существования этой функции, т. е. множество узлов $\{\vec{H}\}$ или H -решетку. При анализе геометрии дифракционной картины мы должны иметь дело с квадратом модуля амплитуды; так как для решеточной функции $|\text{Ш}(\vec{h})|^2 = \text{Ш}(\vec{h})$, то мы будем также для упрощения говорить о решеточном Фурье-образе, а не о квадрате модуля Фурье-образа.

Удобно изобразить решеточный Фурье-образ монокристалла так, чтобы можно было сразу увидеть координаты узлов H -решетки.

Из условий нормировки векторов прямого и сопряженного базиса следует, что плоскость, образованная векторами \vec{b}_1 и \vec{b}_2 в дифракционном пространстве, будет перпендикулярна вектору \vec{a}_3 , построенному в пространстве объекта.

Учитывая, что угол между \vec{a}_3 и \vec{b}_3 равен

$$\widehat{\vec{a}_3, \vec{b}_3} = \cos^{-1} \frac{1}{g_{33}^{1/2} (g_{33}^{-1})^{1/2}}, \quad (101)$$

легко видеть, что в кубической, тетрагональной, гексагональной и ромбической сингониях вектор \vec{b}_3 оказывается параллельным \vec{a}_3 .

В ромбоэдрической сингонии

$$\widehat{\vec{a}_3, \vec{b}_3} = \cos^{-1} \sqrt{1 - 2(1 - \cos \alpha) \text{ctg}^2 \alpha},$$

в моноклинной сингонии

$$\cos(\widehat{\vec{a}_3, \vec{b}_3}) = \sin \alpha_2,$$

где α_2 — угол между векторами \vec{a}_1 и \vec{a}_3 ; таким образом, в этом случае

$$\widehat{\vec{a}_3, \vec{b}_3} = 90^\circ - \alpha_2.$$

В итоге возможны всего два типа решеточных Фурье-образов. В первом случае плоские сетки, образованные узлами $\{h_1^0\}$ при $h_3^0 = \text{const}$, перпендикулярны вектору $h_3^0 \vec{b}_3$, а во втором эти сетки остаются, как и в первом случае, перпендикулярными вектору \vec{a}_3 , но они уже не перпендикулярны вектору $h_3^0 \vec{b}_3$ (рис. 41).

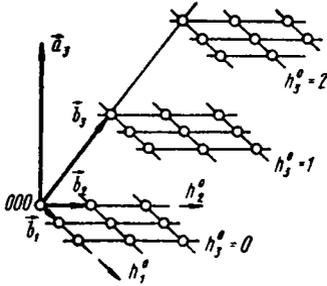


Рис. 41. Область существования решеточного Фурье-образа кристалла

В пределах каждой сетки $h_3^0 = \text{const}$ и в любом узле, находящемся на векторе $h_3^0 \vec{b}_3$, $h_1^0 = h_2^0 = 0$, так что отсчет координат h_1^0 и h_2^0 в пределах каждой сетки начинается от узла типа $00h_3^0$, лежащего на векторе $h_3^0 \vec{b}_3$, независимо от того, каков угол между векторами \vec{a}_3 и \vec{b}_3 .

В ряде случаев удобно вектор $\vec{H} = (h_1^0, h_2^0, h_3^0)$ представить в цилиндрической системе координат как сумму двух векторов, один из которых $\vec{\zeta}$ направлен по \vec{a}_3 , т. е. перпендикулярно плоским сеткам, а второй $\vec{\xi}$ лежит в плоскости сетки

$$\vec{H} = (\xi, \zeta) = \vec{\xi} + \vec{\zeta}.$$

При этом, очевидно:

$$\zeta = |\vec{\zeta}| = \left(\vec{H}, \frac{\vec{a}_3}{|\vec{a}_3|} \right) = \left(h_3^0 \vec{b}_3, \frac{\vec{a}_3}{|\vec{a}_3|} \right)$$

$$\text{и } \vec{\xi} = h_1^0 \vec{b}_1 + h_2^0 \vec{b}_2.$$

Для чего нужно такое изображение H -решетки, в котором специально выделяются плоские сетки, координаты узлов которых удовлетворяют условию

$$h_3^0 = \text{const}$$

Оказывается, в ряде случаев представляется возможным найти на дифракционной картине множество максимумов, тесно связанное именно с множеством узлов такой плоской сетки. В большинстве случаев наблюдается гомоморфное отображение узлов сетки на дифракционную картину.

В методах рентгеновских гониометров и в прецессионных камерах осуществляется изоморфное, т. е. точное отображение, а в способе Де-Йонга—Боумана на рентгеновской пленке попросту отображается без геометрических искажений часть плоской сетки.

Как мы уже неоднократно отмечали, для заданного объекта с трансляционной периодичностью R -решетка, представляемая как множество узлов $\{R\}$, также является однозначно заданной независимо от того, какие базисные векторы $\{\vec{a}_i\}$ применяются для ее описания. Ясно, что H -решетка, т. е. множество узлов $\{H\}$, получаемое по правилу

$$\{R\} \langle \equiv \rangle \{H\},$$

также будет задана однозначно.

Таким образом, выбирая новые базисные векторы \vec{a}'_i , мы не изменим положения узлов H -решетки на рис. 41, но вектор \vec{a}_3 будет теперь уже обозначаться как вектор \vec{R} с координатами $\{u'_i\}$; вместо векторов $\{\vec{b}_i\}$ появятся новые векторы $\{\vec{b}'_i\}$ и координаты h_1^0 и h_2^0 не обязательно будут отсчитываться в плоскостях сеток, изображенных на рис. 41.

Любая узловая прямая в объекте может быть представлена как линия пересечения некоторого множества плоскостей с индексами $\{h_1^{(j)}h_2^{(j)}h_3^{(j)}\}$, причем между индексами прямой $\{u_1u_2u_3\}$ и индексами плоскостей этого множества существует очевидное соотношение, называемое уравнением зоны

$$h_i^{(j)}u_i = 0.$$

В базе $\{\vec{a}_i\}$ вектор \vec{a}_3 является осью зоны $[001]$, к которой принадлежат все плоскости, имеющие индексы типа (h_1h_20) , (100) , (010) , (110) .

В итоге мы приходим к важному выводу о том, что каждой узловой прямой объекта (оси зоны) соответствует в решеточном Фурье-образе множество узловых плоскостей, перпендикулярных этой оси.

Легко проверить, что в объекте индексы оси зоны $\{u_1u_2u_3\}$, соответствующей множеству узловых плоскостей с малыми индексами $\{h_i\}$, также будут малыми числами. Воспользовавшись изоморфизмом $\{h_i\} \leftrightarrow \{h_i^0\}$, где $\{h_i^0\}$ — множество взаимно простых индексов дифракции, мы сразу приходим к выводу о том, что низкоиндексированной оси зоны $\{u_1u_2u_3\}$ соответствует в Фурье-образе множество узловых плоскостей с ячейками малых размеров, т. е. с большой плотностью узлов.

Построение плоских H -сеток, перпендикулярных направлению $[001]$ объекта, не составляет труда, так как длины векторов

\vec{b}_1 и \vec{b}_2 , а также углы между ними сразу отыскиваются по известным формулам.

В более сложных случаях форму и размер сеток можно найти графически, проводя соответствующее сечение H -решетки.

Рассмотрим теперь, какой вид имеет Фурье-образ поликристаллического (порошкового) объекта.

Для одного из кристаллитов, образующих образец, Фурье-образ описывается решеточной функцией $\text{Ш}(\vec{h})$. В соответствии с соотношением (95), для множества кристаллитов, ориентировка которых задана функцией распределения $\varphi(\Delta\rho)$, Фурье-образ будет равен $\varphi(\Delta\rho) \oplus \text{Ш}(\vec{h})$.

Для случая квазизотропного образца функция распределения по углам $\varphi(\Delta\rho)$ является постоянной величиной (99), причем, как обычно, интеграл по всей области существования функции распределения нормирован на единицу:

$$\int_0^{4\pi} \varphi(\Delta\rho) d\Delta\rho = 1.$$

Функция, описывающая распределение интенсивности в одном из узлов Фурье-образа монокристалла, равна

$$\delta[(h_1 - h_1^0) \vec{b}_1] \delta[(h_2 - h_2^0) \vec{b}_2] \delta[(h_3 - h_3^0) \vec{b}_3]. \quad (102)$$

Если воспользоваться для простоты ромбическим базисом и направить вектор \vec{b}_3 вдоль интересующего нас \vec{h} -вектора, то $\Delta\rho$ будет зависеть только от координат h_1 и h_2 , так что свертка функций (99) и (102) даст функцию

$$\text{const } \delta[(h_3 - h_3^0) \vec{b}_3]. \quad (102a)$$

Таким образом, вместо функции (102), областью существования которой является узел с координатами (h_1^0, h_2^0, h_3^0) , появляется функция (102a), областью существования которой является поверхность сферы радиуса $|\vec{H}| = h_3^0 |\vec{b}_3|$, а вместо Фурье-образа монокристалла, описываемого функцией $\text{Ш}(\vec{h})$, появляется функция

$$\text{const } \sum_{h_3^0=0}^{\infty} \delta[(h_3 - h_3^0) \vec{b}_3] \quad (102b)$$

с областью существования в виде поверхностей сфер радиусов $|\vec{H}^{(1)}|$, $|\vec{H}^{(2)}|$ и т. д.

Величину постоянной в соотношении (100a) мы найдем в п. 8 при вычислении удельной мощности, соответствующей дифракционному максимуму в методе порошка.

Из формулы (102б) и рис. 40 видно, что в Фурье-образе начисто утеряна информация об ориентировках \vec{H} -векторов, а содержится только информация о их модулях $\{|\vec{H}^{(i)}|\}$.

Кроме этой неприятности, появляется еще одна, связанная с действием группы перестановок индексов $\{h_i^0\}$, оставляющей неизменной величину модуля $|\vec{H}^{(i)}|$. Действие этой группы перестановок, являющейся подгруппой точечной группы кристалла, приводит к тому, что каждому кристаллиту соответствует на поверхности рассматриваемой H -сферы не один узел с индексами $h_1^0 h_2^0 h_3^0$, а p узлов с индексами вида $\{h_1^0 h_2^0 h_3^0\}$, причем правило перестановок индексов определяется группой перестановок, а число p , называемое фактором повторяемости, равняется порядку группы перестановок и является тем самым делителем порядка точечной группы кристалла.

В табл. 2, заимствованной из книги М. Бургера [7], приведены сведения о точечных группах кристаллов, о лауэвских группах, о симметрии ячеек Браве и о факторах повторяемости p для поликристаллических объектов.

После того как мы рассмотрели, какой вид имеют решеточные Фурье-образы при работе в монохроматическом излучении, рассмотрим, что произойдет с Фурье-образами, если используется полихроматический (белый) спектр, в котором выполняется условие $\lambda = \text{var}$.

Типичный белый спектр изображен на рис. 42. Коротковолновая граница спектра определяется из соотношения

$$\lambda_{\min} = \frac{12,39}{U_{\text{кв}}} \text{ \AA}. \quad (103)$$

Для вольфрамового анода можно взять $U = 50$ кВ, при этом получим $\lambda_{\min} \approx 0,25$ \AA. Длина волны, соответствующая наибольшей интенсивности в спектре, оценивается как $1,5\lambda_{\min}$ и

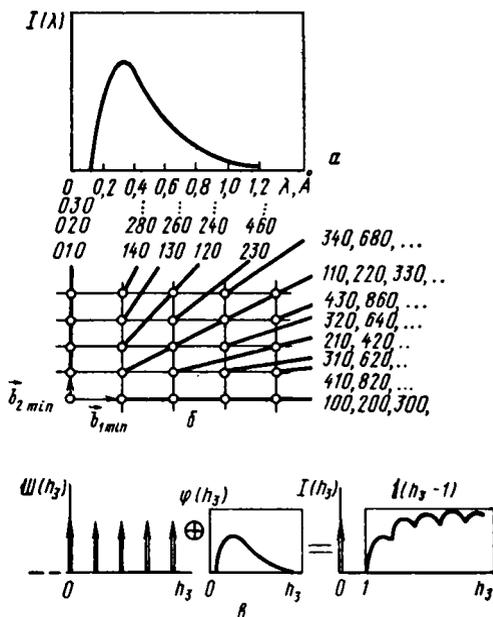


Рис. 42. Фурье-образ при работе в «белом» спектре: а — сплошной (белый) рентгеновский спектр при напряжении на аноде 100 кВ; б — область существования решеточного Фурье-образа; в — свертка решеточной функции с функцией распределения $\Phi(h_3)$

ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ, ЛАУЭВСКИЕ ГРУППЫ И ФАКТОРЫ
ПОВТОРЯЕМОСТИ В МЕТОДЕ ПОРОШКА

Сингония	Точечная группа	Лауэвская группа	Индексы дифракции	Фактор повторяемости
1	2	3	4	5
Триклинная	$\frac{1}{1}$	$\bar{1}$	$h_1^0 \quad h_2^0 \quad h_3^0$	2
Моноклинные	2	$\frac{2}{m}$	$h_1^0 \quad h_2^0 \quad h_3^0$	2
	m		$h_1^0 \quad 0 \quad h_3^0$	2
	$\frac{2}{m}$		$0 \quad h_2^0 \quad 0$	2
Ромбическая	222	$\frac{2}{m} \quad \frac{2}{m} \quad \frac{2}{m}$	$h_1^0 h_2^0 h_3^0$	8
	$mm2$		$h_1^0 h_2^0, \quad h_1^0 \quad 0 h_3^0, \quad 0 h_2^0 h_3^0$	4
	$\frac{2}{m} \quad \frac{2}{m} \quad \frac{2}{m}$		$h_1^0 0 0, \quad 0 h_2^0, \quad 0 0 h_3^0$	2
Тетрагональная	4	$\frac{4}{m}$	$h_1^0 \quad h_2^0 \quad h_3^0$	8
			$h_1^0 \quad h_1^0 \quad h_3^0$	8
			$h_1^0 \quad 0 \quad h_3^0$	8
			$h_1^0 \quad h_2^0 \quad 0$	4
			$h_1^0 \quad h_1^0 \quad 0$	4
			$h_1^0 \quad 0 \quad 0$	4
			$0 \quad 0 \quad h_3^0$	2
	$\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m} \quad \frac{2}{m} \quad \frac{2}{m}$	$h_1^0 \quad h_2^0 \quad h_3^0$	-16
			$h_1^0 \quad h_1^0 \quad h_3^0$	8
			$h_1^0 \quad 0 \quad h_3^0$	8
			$h_1^0 \quad h_2^0 \quad 0$	8
			$h_1^0 \quad h_1^0 \quad 0$	4
			$h_1^0 \quad 0 \quad 0$	4
$0 \quad 0 \quad h_3^0$	2			

Сингония	Точечная группа	Лауэвская группа	Индексы дифракции	Фактор повторности	
1	2	3	4	5	
Гексагональная	3	$\bar{3}$	$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 h_3^0$	6	
			$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 h_3^0$	6	
			$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 h_3^0$	6	
			$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 0$	6	
			$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 0$	6	
			$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 0$	6	
	$0 0 0 h_3^0$	2			
	32	$\bar{3} \frac{2}{m}$	$\bar{3} \frac{2}{m}$	$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 h_3^0$	12
				$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 h_3^0$	12
				$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 h_3^0$	6
				$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 0$	12
				$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 0$	6
				$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 0$	6
	$0 0 0 h_3^0$	2			
	6	$\bar{6}$	$\frac{6}{m}$	$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 h_3^0$	12
$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 h_3^0$				12	
$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 h_3^0$				12	
$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 0$				6	
$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 0$				6	
$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 0$				6	
$0 0 0 h_3^0$	2				
622	$\bar{6}m2$	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 h_3^0$	24	
			$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 h_3^0$	12	
			$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 h_3^0$	12	
			$h_1^0 h_2^0 h_2'^0 0$	12	
			$h_1^0 h_1^0 2\bar{h}_1^0 0$	6	
			$h_1^0 0 \bar{h}_1^0 0$	6	
$0 0 0 h_3^0$	2				

Сингония	Точечная группа	Лауэвская группа	Индексы дифракции	Фактор повторяемости
1	2	3	4	5
Кубическая	23 $\frac{2}{m} \bar{3}$	$\frac{2}{m} \bar{3}$	$h_1^0 \ h_2^0 \ h_3^0$	24
			$h_1^0 \ h_1^0 \ h_3^0$	24
			$h_1^0 \ h_2^0 \ 0$	12
			$h_1^0 \ h_1^0 \ 0$	12
			$h_1^0 \ h_1^0 \ h_1^0$	8
			$h_1^0 \ 0 \ 0$	6
	432 $\bar{4}3m$ $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$	$\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$	$h_1^0 \ h_2^0 \ h_3^0$	48
			$h_1^0 \ h_1^0 \ h_3^0$	24
			$h_1^0 \ h_2^0 \ 0$	24
			$h_1^0 \ h_1^0 \ 0$	12
			$h_1^0 \ h_1^0 \ h_1^0$	8
			$h_1^0 \ 0 \ 0$	6

Примечание. В гексагональной сингонии $h_2^0 = -h_1^0 - h_3^0$.

в нашем случае будет равна $\approx 0,4 \text{ \AA}$. По-видимому, длинноволновая граница спектра, если не принять специальных мер для борьбы с поглощением в воздухе и материале, из которого сделана защита рентгеновской пленки, лежит где-то между тремя и четырьмя ангстремами.

Таким образом, в создании дифракционной картины будут участвовать компоненты спектра, отвечающие условию

$$\lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\min} + \Delta\lambda,$$

где $\Delta\lambda \approx 3 \text{ \AA}$ и $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 10$.

Так как длина решеточного дифракционного вектора равна

$$|\vec{H}| = \lambda (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2},$$

то при работе с белым спектром вместо H -решетки, являющейся Фурье-образом R -решетки при $\lambda = \text{const}$, появится H -объект, построенный следующим образом (рис. 42).

В качестве опорного взят Фурье-образ, отвечающий λ_{\min} , т. е. построена H -решетка минимальных размеров. При работе в ромбическом базисе векторы $\{\vec{b}_i\}_{\min}$ будут иметь длины

$$|\vec{b}_{i \min}| = \frac{\lambda_{\min}}{|\vec{a}_i|}.$$

В этой опорной «минимальной» H -решетке все решеточные векторы будут иметь длины

$$|\vec{H}_{\min}| = \lambda_{\min} (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2}$$

При вариации длины волны λ_{\min} на $\Delta\lambda$, в соответствии с условием (103), все решеточные векторы получают приращение длины

$$\Delta |\vec{H}| = \Delta\lambda (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} |\vec{H}_{\min}|. \quad (104)$$

Как видно, при работе с вольфрамовым анодом и напряжении на трубке 50 кВ, $\Delta |\vec{H}| / |\vec{H}_{\min}| \approx 10$, так что на рис. 42 длинно-волновые концы H -стержней выходят за пределы чертежа.

Таким образом, вместо H -решетки при работе с белым спектром возникает множество радиально ориентированных стержней, начинающихся в узлах опорной H -решетки, имеющих взаимно простые индексы.

Как нетрудно показать, эти стержни являются областью существования функции интенсивности $I(h_1, h_2, \Delta h_3)$.

Перейдем для простоты снова к ромбическому базису $\{\vec{b}_i\}$, в котором \vec{b}_3 направлен вдоль рассматриваемого \vec{h} -вектора (стержня).

Функция распределения по длинам волн $\varphi(\lambda)$, являющаяся не чем иным, как нормированным спектральным распределением $I(\lambda)$, изображенным на рис. 42, может быть, в соответствии с соотношением (104), записана как $\varphi(h_3)$.

Таким образом, Фурье-образ при работе в белом спектре будет находиться как свертка «опорного» Фурье-образа, найденного для $\lambda = \lambda_{\min}$, с функцией распределения по длинам волн, или, что то же, по координате h_3 , отсчитываемой вдоль дифракционного \vec{h} вектора:

$$\begin{aligned} & \sum_{h_1^0} \delta[(h_1 - h_1^0) \vec{b}_{1\min}] \sum_{h_2^0} \delta[(h_2 - h_2^0) \vec{b}_{2\min}] \times \\ & \times \sum_{h_3^0} \delta[(h_3 - h_3^0) \vec{b}_{3\min}] \oplus \varphi(\vec{h}_3). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что распределение интенсивности поперёк \vec{h} -стержня будет описываться дельта-функцией, а вдоль стержня, т. е. при изменении координаты h_3 , — функцией, получившейся от свертки гребенки Дирака с функцией распределения интенсивности в спектре (рис. 42).

Так как расстояние между узлами решеточной функции определяется длиной волны $\lambda_{\text{реш}}$, то при выполнении свертки функция $\varphi(\vec{h}_3)$ впервые появляется не при $h_3^0 = 0$, а при $h_3^0 = 1$ (рис. 42); действительное распределение интенсивности $I(h_3)$ можно заменить распределением $\delta(h_3) + \mathbf{1}(h_3 - 1)$, изображенным на рис. 42.

В итоге если при $\lambda = \text{const}$ распределение интенсивности вблизи узла H -решетки описывается интерференционной функцией $I(h_1, h_2, \Delta h_3)$, имеющей конечную область существования \mathcal{L} , то при переходе к белому спектру распределение интенсивности должно отыскиваться как свертка функции $I(h_1, h_2, \Delta h_3)$ с функцией $\mathbf{1}(\Delta\lambda)$. Так как существует очевидное соотношение

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta h_3}{h_3}, \quad (104a)$$

то распределение интенсивности запишется как

$$I(h_1, h_2, \Delta h_3) \oplus \mathbf{1}(\Delta h_3) = \text{const } I(h_1, h_2).$$

Как видно, при работе в белом спектре полностью теряется информация, связанная с изменением координаты дифракционного пространства, отсчитываемой вдоль \vec{h} -вектора, так как это изменение, вызванное не «физикой» объекта, а видом применяемого спектра, содержится уже в Фурье-образе неискаженного кристалла. В частности, всякого рода упругие деформации объекта отражаются только на длине \vec{h} -вектора, и поэтому они не могут быть выявлены на дифракционной картине, полученной в белом спектре. Как мы увидим дальше, на геометрии дифракционной картины не отражаются даже размеры элементарной ячейки объекта.

Разобравшись в том, как выглядит Фурье-образ R -решетки в белом спектре, легко понять, что произойдет, если эксперимент ведется на неотфильтрованном излучении, в котором, кроме K_α -компоненты спектра, присутствует и K_β -компонента; влияние белого спектра в данном случае уже можно не рассматривать.

Спектральное распределение интенсивности $I(\lambda)$ в этом случае может быть записано как сумма δ -функций: $\delta(\lambda - \lambda_\alpha) + \delta(\lambda - \lambda_\beta)$ или, если перенести начало отсчета в точку λ_α , как $\delta(\lambda) + \delta(\lambda + \Delta\lambda)$, где $\Delta\lambda = \lambda_\alpha - \lambda_\beta$.

В итоге Фурье-образ, полученный на K_β -излучении, получается сверткой Фурье-образа, полученного на K_α -излучении, с функ-

цией распределения вида $\delta(\lambda \pm \Delta\lambda)$. Так как изменение длины волны сказывается только на модуле вектора \vec{h} , то β -образ оказывается попросту уменьшенной копией α -образа.

Поскольку $\vec{h} = \lambda (h_i h_j g_i^{-1})^{1/2}$

то для точ.к Фурье-образа с $\{h_i\} = \text{const}$ коэффициент уменьшения равен

$$\frac{|\vec{h}_\beta|}{|\vec{h}_\alpha|} = \frac{\lambda_\beta}{\lambda_\alpha} = \frac{\sin \theta_\beta}{\sin \theta_\alpha}.$$

3. Метод вращения

Рассмотрим практические способы получения дифракционной картины методом вращения, в котором реализуется вариант (100в), причем регистрация дифракционных максимумов, получаемых в монохроматическом излучении от вращающегося образца, происходит на неподвижную пленку.

Чаще всего применяется цилиндрическая пленка, соосная вращающемуся образцу; можно использовать также и плоскую пленку, перпендикулярную либо первичному пучку рентгеновских лучей, либо оси вращения образца (рис. 43).

Для того чтобы понять, какой вид должна иметь рентгенограмма вращения, достаточно пересечь вращающийся решеточный Фурье-образ кристалла сферой Эвальда (рис. 44). На этом рисунке изображен самый благоприятный для анализа вариант, когда объект с ортогональной R -решеткой ориентирован направлением $[001]$ вдоль оси вращения; при этом вектор \vec{t}^0 направлен перпендикулярно $[001]$. Если мы внимательно разберем этот случай, переход к другим Фурье-образам и неортогональному падению первичного пучка на ось вращения не представит сколько-нибудь серьезных затруднений.

Рассмотрим, как появляются брегговские максимумы, соответствующие H -сетке, на которой $h_3^0 = 3$. Номер слоя (этажа), отсчитываемый вдоль оси вращения, обычно обозначается через n ; в рассматриваемом случае $n = h_3^0$.

При вращении Фурье-образа H -сетка с $n = 3$ пересекает сферу Эвальда на высоте ξ_n от экваториальной плоскости, образуя на поверхности сферы окружность радиусом $\sqrt{1 - \xi_n^2}$. Все дифрагированные пучки, соответствующие узлам H -плоскости, располагаются на поверхности конуса, вершина которого находится

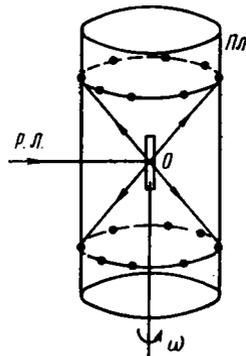


Рис. 43. Регистрация дифракционных максимумов в способе вращения

в центре объекта, а основанием является упомянутая окружность. Эти пучки располагаются на поверхности конуса дискретно в соответствии с тем, в каком месте на окружности оказывается узел H -сетки при вращении Фурье-образа.

Из рис. 44 видно, что на H -сетке получается «слепая» область радиуса $1 - \sqrt{1 - \xi_n^2}$, так что узлы сетки, находящиеся внутри этой области, не могут попасть на поверхность сферы Эвальда; очевидно, это обстоятельство является недостатком рассматриваемой схемы.

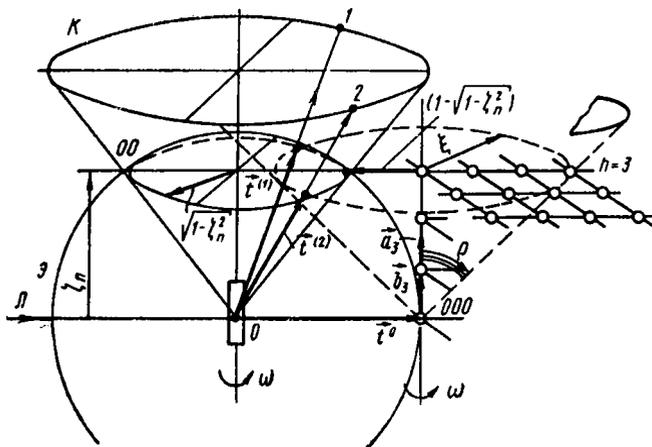


Рис. 44. Взаимодействие решеточного Фурье-образа со сферой Эвальда в способе вращения:

K — конус, образованный множеством $\{\vec{t}\}$; 00 — опорная окружность

На рис. 44, кроме конуса, на котором располагаются дифрагированные лучи, изображен также конус с вершиной в центре Фурье-образа и углом при вершине 2ρ . На поверхности этого конуса располагается множество дифракционных векторов $\{\vec{H}^{(i)}\}$, характеризуемое для каждой из H -сеток условием

$$\vec{H} = \text{var при } \xi, \zeta = \text{const.} \quad (105)$$

Пересечение этого конуса с опорной окружностью определяет направление двух дифрагированных лучей $\vec{t}^{(1)}$ и $\vec{t}^{(2)}$, для которых справедливо условие (105). Кроме того, на самой H -сетке узлам 033 и 123 отвечает одно и то же значение ξ .

Это обстоятельство приводит к тому, что максимуму, получающемуся по направлению $\vec{t}^{(1)}$, и максимуму, получающемуся по направлению $\vec{t}^{(2)}$, будут приписаны индексы (координаты) 033 , 123 . Как видно, здесь возникает двойная неопределенность.

Во-первых, двум максимумам мы вынуждены приписать одни и те же индексы, и, во-вторых, в определении индексов также нет полной однозначности.

Ликвидировать слепую область, радиус которой равен $1 - \sqrt{1 - \zeta_n^2}$, можно, ориентируя первичный пучок под некоторым углом μ к плоскости экватора (рис. 45). Как всегда, центр Фурье-образа, т. е. точка с координатами 000, находится в точке выхода вектора \vec{t}^0 на сферу Эвальда. Схема, изображенная на рис. 45, называется эквинаклонной; при работе по такой схеме слепая область на H -сетке с координатой ζ_n ликвидируется целиком, если, как это видно из рис. 45:

$$\sin \mu = -\frac{\zeta_n}{2}.$$

Задавая значение n , легко найти угол μ , если известна связь между n и ζ_n . В случае, приведенном на рис. 45:

$$\zeta_n = n |\vec{b}_3|.$$

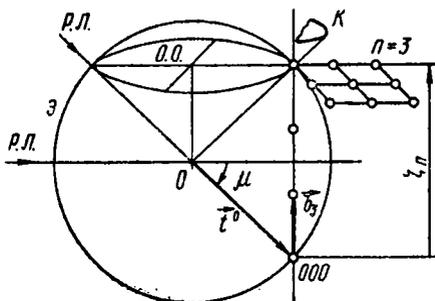


Рис. 45. Эквинаклонная схема регистрации дифракционных максимумов. Изображена только H -сетка третьего этажа, узлы которой отображаются на дифракционные максимумы рентгенограммы

Конечно, помимо «эквинаклонного», существуют и другие способы ориентировки первичного пучка относительно оси вращения. Практически в большинстве случаев на обычных камерах вращения применяется только перпендикулярная съемка, косая же съемка реализуется в более сложных камерах, где она объединяется с движением пленки.

Неопределенность в индцировании дифракционных максимумов, связанную с тем, что через точки 1 и 2 на рис. 44 проходит при вращении несколько узлов, для которых $\xi = \text{const}$, можно уменьшить, применяя вместо поворота кристалла (и Фурье-образа) на 360° поворот на меньший угол. Такая модификация называется способом колебаний. Выбирая амплитуду колебания кристалла около некоторого среднего положения (порядка $\pm 10^\circ \div \pm 15^\circ$) для кристаллов с размерами ячейки в несколько ангстрем, можно в значительной степени уменьшить неопределенность в индцировании.

Наиболее общий способ анализа рентгенограммы, полученной по способу вращения, состоит в том, что сначала мы строим решеточный Фурье-образ типа, изображенного на рис. 41, а затем приписываем каждому пятну на рентгенограмме соответствующие индексы дифракции, т. е. находим координаты $\{h_i^0\}$ узлов H -решетки, пересечение которых со сферой Эвальда вызвало появление максимумов на рентгенограмме.

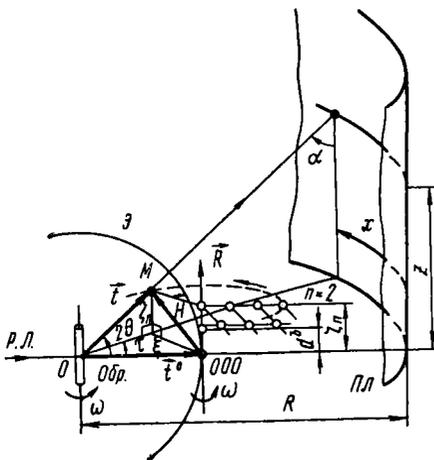


Рис. 46. Отображение одного из узлов H -сетки второго этажа на дифракционный максимум, регистрируемый цилиндрической пленкой. Рассматриваемый узел пересекает сферу Эвальда в точке M , давая на пленке пятно с координатами (x, z)

На рис. 46 показано, как получается дифракционный максимум на цилиндрической пленке в камере вращения, когда узел H -сетки второго этажа ($n = 2$) попадает на сферу Эвальда.

Видно, что

$$nd^b = \zeta_n = \cos \alpha = \frac{z}{\sqrt{z^2 + R^2}}.$$

Учитывая соотношение (936), получим выражение для отыскания периода идентичности вдоль оси вращения:

$$l^a = |\vec{R}| = \frac{\lambda}{d^b} = n\lambda \sqrt{\frac{R^2}{z^2} + 1}$$

Как видно, для определения периода идентичности вдоль оси вращения кристалла нужно измерить расстояние от n -ной слоевой линии до экватора; так как каждая H -сетка дает на пленке четкую слоевую линию (рис. 47), то число n определяется без труда прямо по рентгенограмме.

Если мы приступили к исследованию неизвестного кристалла, то координаты вектора $\vec{R} = (u_1, u_2, u_3)$, направленного по оси вращения, нам неизвестны, неизвестны также и базисные векторы $\{\vec{a}_i\}$.

Рис. 47. Рентгенограмма, полученная в камере вращения с цилиндрической пленкой от кристалла NaCl , ориентированного вдоль оси вращения направлением $[001]$. Применялось неотфильтрованное KCu -излучение

Как мы увидим далее, способ Лауэ позволяет легко найти направления в кристалле, являющиеся осями важных зон и имеющие тем самым малые $\{u_i\}$.

Таким образом, ориентируя при помощи метода Лауэ кристалл одним из низкоиндцированных направлений вдоль оси вращения и найдя тем самым период идентичности I_1^a , мы должны повторить эту процедуру не менее трех раз, определив в итоге \vec{R}_1 , \vec{R}_2 и \vec{R}_3 . Если векторы $\{\vec{R}_i\}$ не лежат в одной плоскости, то можно положить $\vec{R}_i = \vec{a}_i^R$

Выбранная таким способом элементарная ячейка не обязательно будет ячейкой Браве. Переход от векторов $\{\vec{a}_i^R\}$ к «хорошим» векторам $\{\vec{a}_i\}$, описывающим ячейку Браве, может быть сделан аналитически и принципиальных трудностей не представляет [8].

Легко также можно установить, является ли найденная ячейка Браве примитивной либо имеется центрировка. Так, например, для проверки центрировки типа *C* достаточно определить $I_{110}^{\text{экспер.}}$.

Если в кристалле с ромбической сингонией окажется, что

$$I_{110}^{\text{экспер.}} = \sqrt{|\vec{a}_1|^2 + |\vec{a}_2|^2}$$

то ячейка примитивная;

$$\text{если } I_{110}^{\text{экспер.}} = \frac{1}{2} \sqrt{|\vec{a}_1|^2 + |\vec{a}_2|^2}$$

то имеет место центрировка по грани (001) и т. д.

После того как векторы $\{\vec{a}_i\}$ и, следовательно, векторы $\{\vec{b}_i\}$ найдены, не составляет труда построить решеточный Фурье-образ. Эта возможность построения решеточного Фурье-образа без предварительного определения индексов дифракции максимумов выгодно отличает способ вращения (равно как и родственные ему способы рентгеновских гониометров) от других способов исследования (способ Лауэ, способ порошка).

Построив Фурье-образ, мы можем перейти к индцированию рентгенограммы.

Из рис. 46 видно, что

$$\begin{aligned} \xi^2 &= 1^2 + \left(\sqrt{1 - \zeta_n^2}\right)^2 - 2 \cdot 1 \sqrt{1 - \zeta_n^2} \cos \tau = \\ &= 2 - \zeta_n^2 - 2 \sqrt{1 - \zeta_n^2} \cos \tau, \end{aligned}$$

$$\text{где } \tau = \frac{x}{R} \cdot \frac{360^\circ}{2\pi}.$$

Таким образом, непосредственно из рентгенограммы легко определяются цилиндрические координаты вектора \vec{H} :

$$\xi = \left(2 - \zeta_n^2 - 2 \sqrt{1 - \zeta_n^2 \cos \tau} \right)^{1/2}.$$

$$\zeta_n = \left(\frac{R^2}{z^2} + 1 \right)^{-1/2}$$

Непосредственно из рис. 46 видно, что ξ и ζ_n меняются в пределах

$$0 \leq \xi \leq 2;$$

$$-1 \leq \zeta_n \leq 1.$$

Вычисление ξ и ζ_n по найденным из рентгенограммы x и z не представляет труда, однако, если эту работу предстоит делать многократно, удобнее определять ξ и ζ_n при помощи сетки Бернала, представляющей собой семейство кривых

$$x = x(\xi, \zeta_n) \quad \text{при } \xi = \text{const};$$

$$z = z(\xi, \zeta_n) \quad \text{при } \zeta_n = \text{const},$$

и заданном радиусе камеры R .

Форму этих кривых легко отыскать, найдя пересечение поверхностей $\xi = \text{const}$ и $\zeta_n = \text{const}$ со сферой Эвальда.

После того, как найдены цилиндрические координаты ξ и $\{\zeta_n\}$, можно перейти к отысканию координат узла $\{h_i^0\}$.

Если мы смогли построить решетчатую H -сетку, соответствующую рассматриваемой слоевой линии, по которой определялись значения ξ_j , где j — номер пятна на слоевой линии, то переход от цилиндрической координаты ξ_j к координатам узлов H -сетки происходит при помощи процедуры, в точности воспроизводящей то, что происходит с Фурье-образом при вращении кристалла в пучке рентгеновских лучей.

На рис. 44 изображен случай, когда \vec{b}_3 параллелен вектору \vec{a}_3 . При этом все узлы типа $00h_3^0$ находятся на оси вращения Фурье-образа. Построив на H -сетке окружность радиуса ξ_j с центром в узле $00h_3^0$, мы тем самым отыскиваем множество узлов, отобразившихся при вращении на дифракционное пятно на пленке. Таким способом отыскиваются только две первые координаты $h_1^0(k)$ и $h_2^0(k)$.

Можно получить полезное соотношение, связывающее координаты узла на H -сетке n -ного этажа с координатами $\{u_i\}$ вектора \vec{R} в объекте, проектируя \vec{H} -вектор на ось вращения, совпадающую с вектором \vec{R} :

$$\frac{(\vec{H}^{(k)}, \vec{R})}{|\vec{R}|} = nd^b.$$

Учитывая формулу (93б), получим, что

$$h_1^{0(k)} u_1 + h_2^{0(k)} u_2 + h_3^{0(k)} u_3 = n \quad (106)$$

для всех узлов с координатами $\{h_i^{0(k)}\}$, принадлежащих сетке n -ного этажа.

При вращении кристалла вокруг направления $[001]$ соотношение (106) особенно упрощается:

$$h_3^{0(k)} = n.$$

При вращении вокруг направления $[111]$

$$h_1^{0(k)} + h_2^{0(k)} + h_3^{0(k)} = n$$

и т. д.

При работе с «косым» Фурье-образом, когда \vec{b}_3 образует с \vec{a}_3 некоторый угол, определяемый из соотношения (101), центр всех окружностей с радиусами ξ_j уже не будет находиться в узле $00h_3^0$ (рис. 48).

Расстояние Δ_n от узла $00h_3^0$ до оси вращения или, что то же, до общего центра поисковых окружностей радиуса ξ_j найти легко; при вращении кристалла вокруг $[001]$, как видно из рис. 48:

$$\Delta_n = n |\vec{b}_3| \sin(\widehat{\vec{a}_3, \vec{b}_3}).$$

Чтобы найти азимут φ , определяющий направление смещения Δ_n по отношению к вектору \vec{b}_1 , необходимо спроектировать $n\vec{b}_3$ на плоскость, образованную векторами \vec{b}_1 и \vec{b}_2 , получая величину Δ_n , и на вектор \vec{b}_1 (рис. 48).

Из построения видно, что

$$\varphi = \cos^{-1} \frac{(n\vec{b}_3, \vec{b}_1)}{\Delta_n} = \cos^{-1} \frac{\cos(\widehat{\vec{b}_3, \vec{b}_1})}{\sin(\widehat{\vec{b}_3, \vec{a}_3})}.$$

Таким образом, центр вращения для H -сетки n -ного этажа ($h_3^0 = n$) находится простым построением (рис. 49). При желании длина вектора \vec{H} может быть выражена через углы α и τ :

$$|\vec{H}|^2 = \zeta_n^2 + \xi^2 = 2 - 2 \sin \alpha \cos \tau,$$

и так как $2 \sin^2 \theta = 1 - \cos 2\theta$, то

$$\cos 2\theta = \sin \alpha \cos \tau.$$

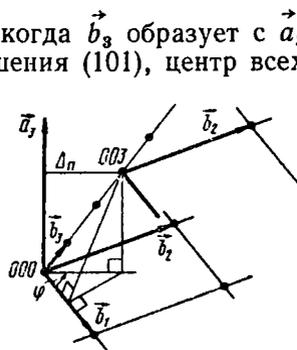


Рис. 48. Схема расчета смещения Δ_n начального узла H -сетки n -ного этажа для «косого» Фурье-образа. Отыскание смещения Δ_n и азимута φ

Индицирование рентгенограммы можно ускорить, используя, кроме сеток $\xi = \text{const}$ и $\zeta_n = \text{const}$, также сетку постоянного $\rho = \text{const}$, происхождение которой легко понять, рассмотрев пересечение конуса $\rho = \text{const}$ со сферой Эвальда.

Так как на поверхности конуса $\rho = \text{const}$ выполняется условие

$$h_i^0 = nh_i^{01}, \text{ где } \{h_i^{01}\} \text{ — координаты первого узла, то максимумы}$$

на рентгенограмме, индексы дифракции которых отличаются только общим множителем (дифракция разных порядков h_1^0, h_2^0, h_3^0 ,

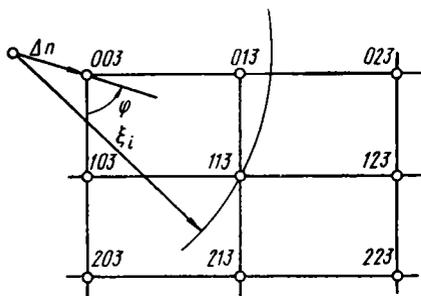


Рис. 49. Смещение начального узла $00h_3^0$ по отношению к центру вращения при графическом индицировании. Рисунок сделан для сетки третьего этажа, у которой $n = 3$

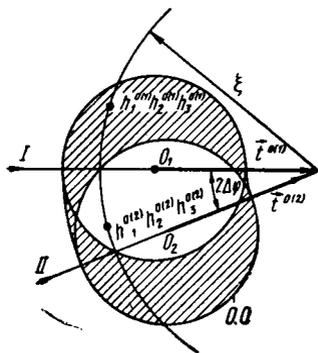


Рис. 50. Устранение неопределенности при индицировании в методе колебаний образца

$2h_1^0, 2h_2^0, 2h_3^0$ и т. д.), расположатся на одной кривой $\rho = \text{const}$.

Из того, что говорилось в п. 2 об особенностях Фурье-образа, построенного в белом или неотфильтрованном излучении, ясно, что при работе с таким излучением на кривых $\rho = \text{const}$ будут располагаться как пятна с одинаковыми индексами дифракции, полученные в α - и β -излучении, так и «белые хвосты», особенно заметные вблизи центра рентгенограммы, полученные в результате пересечения «белых» стержней, находящихся на поверхности конуса $\rho = \text{const}$, со сферой Эвальда.

При желании уменьшить неопределенность в индицировании, связанную с тем, что на окружности $\xi = \text{const}$ может находиться несколько узлов H -сетки с различными координатами $\{h_i^0\}$, можно вместо вращения кристалла применить его колебание в интервале $\pm \Delta\varphi$ около оси камеры. Само собой разумеется, что предварительно должна быть построена нужная для индицирования H -сетка и кристалл должен быть ориентирован относительно вектора \vec{t}^0 определенным образом.

На рис. 50 изображен случай, когда при полном вращении кристалла одному пятну на рентгенограмме будут соответствовать, по крайней мере, две комбинации индексов дифракции h_1^0, h_2^0, h_3^0 и h_1^0, h_2^0, h_3^0 .

Ориентируя в этом случае подходящим образом кристалл относительно вектора $\vec{t}^0(1)$ и выбирая интервал колебания $\pm \Delta\varphi$ так, чтобы узел с координатами $h_1^0(2)h_2^0(2)h_3^0(2)$ не пересекался опорной окружностью сферы Эвальда, мы сможем проверить, с каким из узлов, $\{h_i^0(1)\}$ или $\{h_i^0(2)\}$, связано появление пятна на пленке. Понятно, что при наличии на окружности $\xi = \text{const}$ не двух, а большего числа узлов с «криминальными» комбинациями координат $\{h_i^0\}$ процедура проверки должна повторяться многократно с различными парами узлов.

Если вращение кристалла происходило вокруг направления $[001]$, то слоевые плоскости будут проходить только через узлы 001, 002 и т. д. Фурье-пространства, как это уже обсуждалось в п. 2, и для индирования любой слоевой линии достаточно пользоваться одной и той же H -плоскостью, образованной векторами \vec{b}_1, \vec{b}_2 . В том случае, когда вращение происходит вокруг направления типа $[u_1u_2u_3]$, необходимо рассматривать расположение узлов H -решетки отдельно в каждой из слоевых плоскостей.

4. Методы рентгенгонометров

Основной недостаток метода вращающегося кристалла в сочетании с неподвижной пленкой состоит в том, что H -сетка Фурье-образа отображается гомоморфно на множестве пятен слоевой линии. Неопределенность в индировании, возникающая при этом, может быть частично устранена заменой полного вращения кристалла на колебание его в некотором интервале углов.

Существует возможность получить изоморфное, т. е. точное, отображение множества узлов H -сетки на множество максимумов рентгенограммы; при этом, очевидно, индирование будет осуществляться однозначно. Для осуществления этой возможности необходимо одновременно с изменением ориентировки кристалла перемещать рентгеновскую пленку так, чтобы в момент прохождения нового узла H -сетки через поверхность сферы Эвальда на пути дифрагированного пучка оказывался новый участок пленки. Реализация этой идеи проводится по-разному.

Наибольшее распространение получили схемы Вейсенберга, Де-Ионга—Боумана и Бургера.

Не рассматривая метода Вейсенберга, подробное описание которого содержится в работе [9], остановимся на методе Де-Ионга—Боумана [9], особенностью которого является получение на плоской пленке неискаженного изображения плоской H -сетки.

На рис. 51 изображен один из возможных вариантов реализации схемы Де-Ионга—Боумана, называемый методом постоянного конуса.

В том случае, когда \vec{i}^0 образует угол μ с экватором, а ось вращения вертикальна, H -сетка n -ного этажа, отстоящая от центра Фурье-образа на ζ_n , будет пересекать сферу Эвальда, образуя опорную окружность FBC .

Для того чтобы исследовать только дифракционную картину, обязанную пересечению узлов рассматриваемой H -сетки с опорной

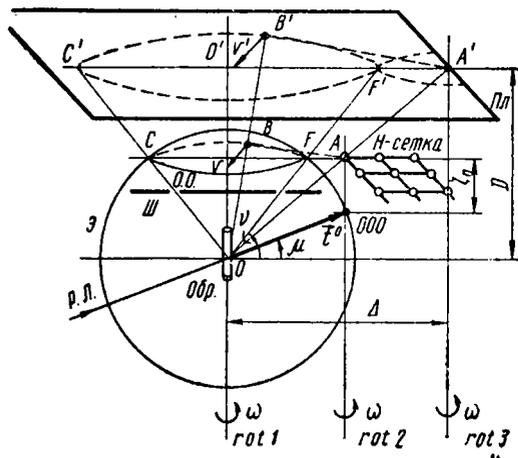


Рис. 51. Способ Де-Ионга—Боумана. Фотографирование H -сетки n -ного этажа в способе Де-Ионга—Боумана:

rot 1, rot 2, rot 3 — оси вращения образца, Фурье-образа и пленки; Ш — ширма с кольцевой щелью, пропускающая на пленку только конус дифрагированных лучей

окружностью, в камере помещена ширма Ш с кольцевой щелью, выделяющая конус с углом при вершине $2(90^\circ - \nu)$.

Из конструктивных соображений угол ν удобно оставлять неизменным и равным 45° (метод постоянного конуса).

Если бы можно было положить сверху на H -сетку рентгеновскую пленку, то на ней бы попросту отпечатались все те узлы H -сетки, которые лежат внутри кольцевой области с центром в точке A с наружным и внутренним радиусами, равными соответственно

$$r_{\max} = AC = \cos \mu + \cos \nu;$$

$$r_{\min} = AF = \cos \mu - \cos \nu,$$

так как при вращении Фурье-образа со скоростью ω именно указанная область будет замечаться на H -сетке опорной окружностью.

Практически поместить пленку так близко от экватора не удастся, однако в этом нет необходимости. Расположив ось вращения пленки на расстоянии Δ от оси вращения Фурье-образа и на высоте D , считая от плоскости экватора, так, чтобы центр вращения пленки A' находился на прямой OA , проведенной из центра объекта O через центр вращения H -сетки A , мы получим на вращающейся с той же угловой скоростью ω пленке увеличенную и неискаженную копию той части H -сетки, которая располагается

внутри упомянутой кольцевой области с радиусами r_{\max} и r_{\min} (рис. 52).

Для того чтобы окрестности точки B на H -сетке проектировались без искажения на пленку в окрестностях точки B' , достаточно, чтобы окружная скорость точки B' , равная v' (рис. 51), относилась к скорости v точки B как отрезки OB' OB .

Так как

$$v' = \omega A'B';$$

$$v = \omega AB,$$

и из подобия треугольников $OA'B'$ и OAB следует, что

$$\frac{A'B'}{AB} = \frac{OB'}{OB},$$

то в итоге мы получаем нужное для проектирования H -сетки без искажений соотношение

$$\frac{v'}{v} = \frac{A'B'}{AB} = \frac{OB'}{OB}.$$

Для выделения нужной H -сетки с заданным ζ_n достаточно при известном угле ν так подобрать угол μ , чтобы

$$\zeta_n + \sin \mu = \sin \nu,$$

как это видно непосредственно из рис. 51.

Обычно, хотя и не обязательно, высота пленки над экватором D сохраняется постоянной; для настройки камеры необходимо выбрать расстояние между осью вращения кристалла и пленки Δ так, чтобы

$$\frac{\Delta}{D} = \frac{\cos \mu}{\sin \mu + \zeta_n} \quad \text{или} \quad \Delta = D \frac{\sqrt{1 - (\sin \nu - \zeta_n)^2}}{\sin \nu}.$$

Если вращение кристалла происходит вокруг направления $[001]$, угол между векторами \vec{b}_1 и \vec{b}_2 определяется непосредственно на пленке, так же как и координаты h_1^0 и h_2^0 (рис. 52).

Для отыскания длин $|\vec{b}_1|$ и $|\vec{b}_2|$ необходимо учесть коэффициент увеличения при переходе от H -сетки к пленке, равный $A'B'/AB$.

Как видно из рис. 51, этот коэффициент определяется как

$$\frac{A'B'}{AB} = \frac{D}{\sin \nu}.$$

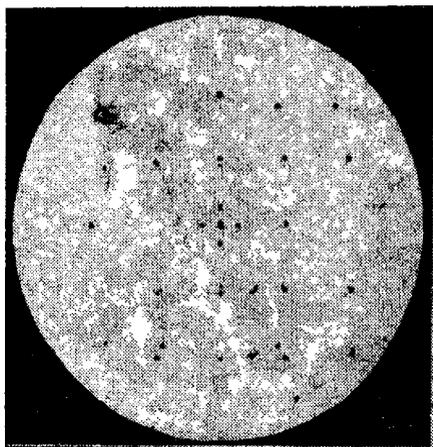


Рис. 52. Рентгенограмма, полученная в камере, работающей по способу Де-Ионга—Боумана (КФОР). Образец NaCl, ориентированный направлением $[001]$ вдоль оси вращения. Применялось неотфильтрованное КСu-излучение

Таким образом, например, переход от длины $|\vec{b}_1|_{\text{пл}}$, измеренной на пленке, к истинной длине вектора $|\vec{b}_1|$ осуществляется при помощи соотношения

$$|\vec{b}_1| = |\vec{b}_1|_{\text{пл}} \frac{\sin \nu}{D}$$

и т. д.

Рентгенограммы, полученные по методу Де-Ионга—Боумана, особенно наглядно показывают, что обратная решетка не такая страшная и непонятная вещь, как это кажется с первого взгляда.

5. Метод Лауэ

В способе Лауэ реализуется вариант (100а) — неподвижный монокристалл освещается параллельным пучком рентгеновских лучей, причем применяется полихроматическое («белое») излучение. Как правило, регистрация осуществляется на плоскую пленку, перпендикулярную вектору \vec{i}^0 (рис. 53).

Рентгенограмма, полученная при съемке «вперед», т. е. в области углов дифракции $\theta < 45^\circ$, называется лауэграммой; рентгенограмма, полученная при съемке «назад», т. е. в области $\theta > 45^\circ$, называется эпиграммой.

Как мы могли убедиться в п. 3, в способе вращения целесообразно ориентировать кристалл каким-либо важным направлением, имеющим малые индексы $\{u_i\}$, вдоль оси вращения. В этом случае дифракционные максимумы располагаются на рентгенограмме вдоль слоевых линий, что облегчит ее расшифровку. Наиболее просто индцирование рентгенограммы происходит в том случае, когда вдоль оси вращения ориентировано направление $[001]$.

Похожая ситуация наблюдается и в методе Лауэ. Если ориентировать кристалл каким-либо важным кристаллографическим направлением вдоль вектора \vec{i}^0 (а не перпендикулярно к нему, как в методе вращения!), то дифракционные максимумы на рентгенограмме будут располагаться вдоль кривых, называемых зональными; в том случае, когда вектор \vec{i}^0 направлен вдоль оси $[001]$ кристалла, индцирование пятен происходит особенно просто.

Мы уже имели возможность убедиться в том, что при работе с белым спектром области существования интерференционных функций Фурье-образа изображаются стержнями, ориентированными радиально из центра Фурье-образа (рис. 42).

Для каждого из направлений в дифракционном пространстве, характеризуемого индексами $\{h_i^0\}$, начало стержня отстоит от центра на величину

$$|\vec{H}|_{\text{min}} = \lambda_{\text{min}} (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2} \quad (107)$$

а длина самого стержня примерно на порядок больше, чем $|\vec{H}|_{\text{min}}$.

На рис. 54 изображен случай, когда H -стержень пересекает сферу Эвальда в точке A , находящейся за вертикальной плоскостью, совпадающей с плоскостью рисунка; при этом на пленке, расположенной перпендикулярно вектору \vec{t}^0 , возникает пятно в точке A'

Из рентгенограммы легко определяется модуль вектора $|\vec{H}_\lambda|$:

$$|\vec{H}_\lambda| = \lambda (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2} = 2 \sin \theta, \quad (107a)$$

причем $\theta = \frac{1}{2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{|\vec{r}_\lambda|}{R_\lambda}$, (107б)

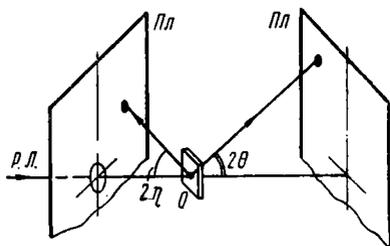


Рис. 53. Схема получения лауэграммы

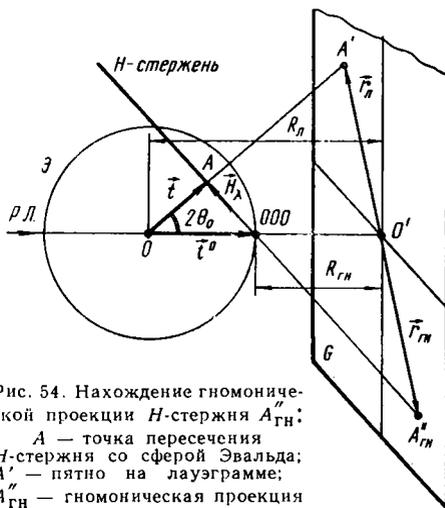


Рис. 54. Нахождение гномонической проекции H -стержня $A''_{ГН}$: A — точка пересечения H -стержня со сферой Эвальда; A' — пятно на лауэграмме; $A''_{ГН}$ — гномоническая проекция H -стержня; G — плоскость гномонической проекции

где R_λ — расстояние от кристалла до пленки;

$|\vec{r}_\lambda|$ — расстояние от центра рентгенограммы O' до пятна A'

В тех методах, где используется мономатрическое излучение $\lambda = \text{const}$, можно из соотношения типа (107а), зная $\{\vec{H}\}$ и $\{h_i^0\}$, определить \hat{g}^{-1} и, в конечном итоге, \hat{g} и $\{\vec{a}_i\}$, т. е. найти форму и размеры элементарной ячейки.

В методе Лауэ может быть определена форма элементарной ячейки, так как изменение ориентировки вектора \vec{H} отражается на положении пятна на рентгенограмме, однако размеры ячейки и тем самым размеры Фурье-образа на рентгенограмме не отражаются.

Действительно, одному и тому же модулю $|\vec{H}_\lambda|$, т. е. одному и тому же пятну на рентгенограмме, будут соответствовать при заданных $\{h_i^0\}$ различные компоненты спектра $\lambda = \text{var}$ и различные g_{ij}^{-1} , лишь бы только выполнялось условие

$$\lambda (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2} = \text{const.}$$

Очень часто лауэвский метод применяется для построения стереографической проекции точечного комплекса кристалла.

Указанная нечувствительность геометрии дифракционной картины к размерам элементарной ячейки кристалла облегчает построение этой проекции.

Рассмотрим на рис. 54 треугольники $A'O'O'$ и $A'AA''_{гн}$, в которых точка A' является центром дифракционного максимума, а точка $A''_{гн}$ соответствует гномонической проекции вектора $-\vec{H}_\lambda$, т. е. точкой пересечения прямой $A'O'O'$ с плоскостью гномонической проекции; для простоты плоскость пленки совмещена с плоскостью гномонической проекции, что не влияет на общность получаемых выводов.

Как видно из рисунка, дифракционный максимум, положение которого описывается вектором \vec{H}_λ , и гномоническая проекция этого вектора лежат на одной прямой $A'O'A''_{гн}$, проходящей через центр рентгенограммы O' , а это обстоятельство позволяет указать рецепт построения гномонической проекции H -стержня, принадлежащих Фурье-образу и образующих точечный Фурье-комплекс.

Для того чтобы найти гномоническую проекцию H -стержня, ответственного за появление пятна на рентгенограмме, достаточно соединить это пятно прямой линией с центром рентгенограммы. Гномоническая проекция H -стержня будет находиться по другую сторону от центра рентгенограммы (на продолжении указанной прямой) и отстоять от центра на расстоянии

$$|\vec{r}_{гн}| = R_{гн} \operatorname{tg} \eta, \quad (107в)$$

где $R_{гн}$ — постоянная гномонической проекции (длина гномона $O'O'O'$);

$$\eta = 90^\circ - \theta.$$

Формулы (107а) и (107в) позволяют отыскать $|\vec{r}_{гн}|$, а направление этого вектора определяется указанным построением; как видно, совсем не обязательно всегда совмещать плоскость гномонической проекции и плоскость пленки. Обычно $R_{гн}$ в формуле (107в) выбирается таким, чтобы получить удобные размеры гномонической проекции.

Разобравшись в том, как находится гномоническая проекция H -стержня, легко понять, как построить стереографическую проекцию этого стержня (рис. 55).

Если совместить центр Фурье-комплекса с центром сферы проекций радиуса $R_{ст}$, то вектор $\vec{r}_{ст}$, вектор $\vec{r}_{гн}$ и H -стержень будут лежать в одной плоскости, причем $\vec{r}_{ст}$ оказывается параллельным $\vec{r}_{гн}$.

Таким образом, точка $A''_{ст}$, являющаяся стереографической проекцией H -стержня, находится точно так же, как и точка $A''_{гн}$,

с той лишь разницей, что на продолжении прямой $A'O'$ надо откладывать величину

$$|\vec{r}_{ст}| = R_{ст} \operatorname{tg} \frac{\eta}{2}. \quad (108)$$

При работе в области углов дифракции $\theta > 45^\circ$ гномоническая проекция H -стержня, ответственного за появление пятна A' на пленке, опять оказывается находящейся на прямой $A'O'$, соединяющей центр эпиграммы с рассматриваемым пятном (рис. 56), причем точки A' и $A'_{гн}$ будут расположены не с разных сторон от центра рентгенограммы O' , как это имеет место на лауэграмме, а по одну сторону.

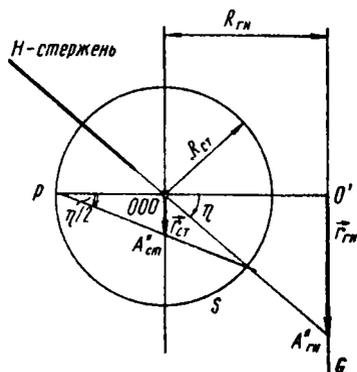


Рис. 55. Нахождение стереографической проекции H -стержня. Центр проекции совмещен с центром Фурье-образа:

S — плоскость стереографической проекции; G — плоскость гномонической проекции; $R_{гн}$ — постоянная гномонической проекции (длина гномона); $R_{ст}$ — постоянная стереографической проекции. Все построение сделано для плоскости, образованной векторами

$$\vec{H}_A, \vec{i}^0 \text{ и } \vec{i}$$

Как видно из рис. 56:

$$\eta = \frac{1}{2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{|\vec{r}_{л}|}{R_{л}}$$

$$\text{и } |\vec{r}_{гн}| = R_{гн} \operatorname{tg} \eta.$$

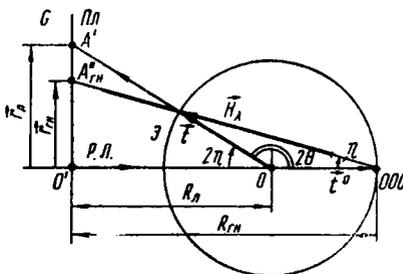


Рис. 56. Построение гномонической проекции H -стержня при работе в области углов $\theta > 45^\circ$:

A' — лауэское пятно на пленке; $A'_{гн}$ — гномоническая проекция H -стержня

Понятно, что для построения стереографической проекции H -стержня надо снова пользоваться соотношением (108) и рис. 55.

На рис. 57 изображена лауэграмма, полученная на кристалле SiC , ориентированном направлением $[001]$ вдоль вектора \vec{i}^0 .

На лауэграмме ясно видно, что пятна располагаются на эллипсах, имеющих общую точку в O' ; кроме того, на рентгенограмме прослеживается симметрия $\hat{6}$, совпадающая с симметрией направления $[001]$, вдоль которого был направлен первичный пучок рентгеновских лучей.

Для того чтобы понять происхождение эллипсов на рентгенограмме, рассмотрим некоторое важное направление в кристалле (ось зоны), имеющее малые индексы $\{u_i\}$ и образующее малый

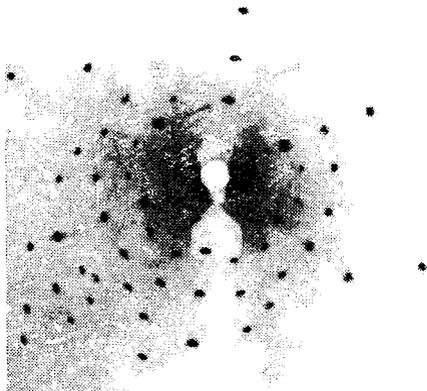


Рис. 57. Лауэграмма, полученная от кристалла SiC, ориентированного направлением $[001]$ вдоль оси вращения

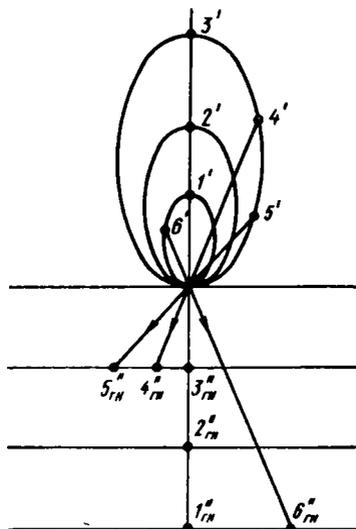


Рис. 59. Отображение множества точек, принадлежащих зональному эллипсу, на множество точек, принадлежащих прямой, перпендикулярной оси симметрии эллипса

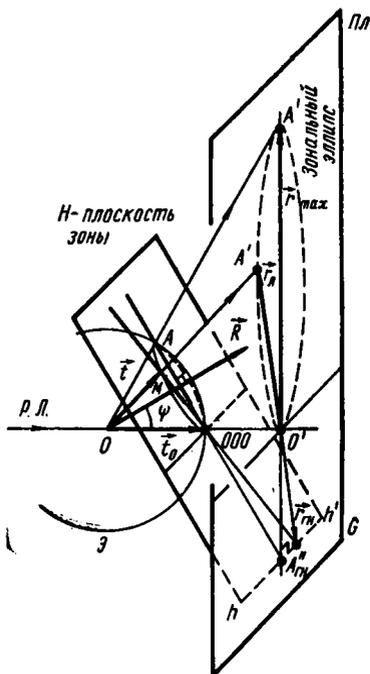


Рис. 58. Происхождение зональных эллипсов на лауэграмме:

\vec{R} — вектор зоны координатами $\{u_i\}$; A' — лауэское пятно на пленке; A''_H — гномоническая проекция H -стержня, пересекающего сферу Эвальда в точке M ; G — плоскость гномонической проекции

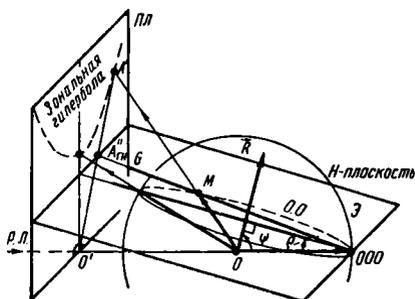


Рис. 60. Лауэграмма при $\theta > 45^\circ$.

Дифрагированные лучи располагаются по поверхности конуса с вершиной в точке O ; в основании конуса лежит опорная окружность OO , получившаяся от пересечения H -плоскости зоны со сферой Эвальда

угол с направлением первичного пучка (рис. 58). Как мы уже убедились, в дифракционном пространстве такому вектору $\vec{R} = (u_1, u_2, u_3)$ будет соответствовать Фурье-образ типа, изображенного на рис. 41. Учитывая, что в данном случае используется белый спектр, и рассматривая только H -плоскость, проходящую через центр Фурье-образа, мы получим, что в результате пересечения сферы Эвальда с H -стержнянами, лежащими в рассматриваемой H -плоскости, все векторы $\vec{t}^{(i)}$ расположатся на поверхности конуса с вершиной в точке O , опирающегося на окружность, получившуюся от пересечения H -плоскости, перпендикулярной вектору \vec{R} (оси зоны), со сферой Эвальда.

В итоге на пленке, ориентированной перпендикулярно вектору \vec{t}^0 , каждому направлению $\{u_i\}$ с малыми индексами будет соответствовать множество дифракционных максимумов, располагающихся на эллипсе, большая ось которого лежит в плоскости, образованной векторами \vec{t}^0 и \vec{R} (рис. 58). Если длину большой оси эллипса r_{\max} удастся определить, то легко может быть найден угол ψ между \vec{R} и \vec{t}^0 :

$$\psi = \frac{1}{2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{r_{\max}}{R_n}.$$

Если имеется множество векторов $\{\vec{R}^{(i)}\}$, лежащих в одной плоскости, то на лауэграмме можно построить множество эллипсов с совпадающим направлением длинных осей и общей точкой O'

Рассматривая рис. 58, можно видеть, что след H -плоскости зоны hh' оказывается перпендикулярным длинной оси эллипса $A'O'$; так как проекции всех H -стержней, лежащих в H -плоскости, также должны попасть на след hh' , то в итоге множество пятен, расположенных на зональном эллипсе при перестройке с использованием формулы (107в), даст множество точек, являющихся гномоническими проекциями H -стержней зоны, расположенное на оси эллипса (рис. 59).

Легко также понять, как будет ориентировано множество точек стереографических проекций H -стержней по отношению к большой оси эллипса. Так как H -плоскость, проходящая через центр Фурье-образа, даст на проекции дугу большого круга (меридиан сетки Вульфа), то в итоге семейство эллипсов типа, изображенного на рис. 59, даст множество дуг больших кругов.

При работе в области больших углов дифракции $\theta > 45^\circ$ мы должны обращать внимание на важные направления, образующие с \vec{t}_0 углы, близкие к 90° (рис. 60). Легко видеть, что при съемке на плоскую пленку, перпендикулярную \vec{t}^0 , дифракционные максимумы, обязанные своим появлением H -плоскости зоны, ось которой совпадает с вектором \vec{R} , расположатся на гиперболе с осью

симметрии $A'O'$, лежащей в плоскости, образованной векторами \vec{i}^0 и \vec{R} .

Как видно, след H -плоскости перпендикулярен оси симметрии гиперболы $A'O'$ и располагается в отличие от варианта $\theta < 45^\circ$ по ту же сторону от точки O' , что и зональная гипербола.

Таким образом, гномоническая проекция H -стержня (точка $A''_{\text{ГН}}$) расположится на прямой $A'O'$ по ту же сторону от центра рентгенограммы O' , что и лауэвское пятно A' .

При построении стереографической проекции множество зональных гипербол отобразится на множество дуг больших кругов.

Перейдем теперь к индцированию рентгенограмм вращения необходимо знать форму и размеры элементарной ячейки кристалла, причем эти сведения могут быть получены опять же из рентгенограммы вращения. Поскольку в методе Лауэ размеры элементарной ячейки не влияют на дифракционную картину, для индцирования достаточно знать только форму элементарной ячейки, однако эти сведения не могут быть получены из лауэграммы. Так же как и в методе вращения, индцирование происходит наиболее просто, если вектор \vec{i}^0 направлен вдоль $[001]$ в кристалле.

В этом случае для построения точечного Фурье-комплекса кристалла, состоящего из множества H -стержней, достаточно воспользоваться в качестве опорной только H -сеткой, на которой $h_3^0 = 1$ (рис. 61). В этом случае на плоскости гномонической проекции без искажений отобразится опорная H -сетка, координаты узлов которой равны $\{h_1^0 h_2^0 1\}$.

Размеры элементарной ячейки опорной сетки на плоскости гномонической проекции найти легко:

$$|\vec{b}_1|_{\text{ГН}} = R_{\text{ГН}} \frac{|\vec{b}_1|_{\text{min}}}{|\vec{b}_3|_{\text{min}}}.$$

Если в качестве примера взять кристалл, принадлежащий к ортогональной сингонии, то

$$\frac{|\vec{b}_1|_{\text{min}}}{|\vec{b}_3|_{\text{min}}} = \frac{\lambda_{\text{min}}/|\vec{a}_1|}{\lambda_{\text{min}}/|\vec{a}_3|} = \frac{|\vec{a}_3|}{|\vec{a}_1|},$$

так что в этом случае для построения на плоскости гномонической проекции опорной сетки, при помощи которой можно индцировать рентгенограмму, достаточно знать только отношение длин векторов, образующих элементарную ячейку кристалла.

В итоге процедура индцирования рентгенограммы сводится в наиболее благоприятном случае к построению гномонической проекции множества H -стержней с использованием формул (107б) и (107в) и определению координат точек в терминах системы осей $\vec{b}_{\text{ГН}}$ и $\vec{b}_{2\text{ГН}}$; третий индекс у всех точек оказывается равным $h_3^0 = 1$

жено множество зональных гиперболол, на которых располагаются дифракционные максимумы, соответствующие различным зонам (см. рис. 60). Горизонтальные гиперболы принадлежат зонам, оси которых располагаются в вертикальной плоскости; вертикально ориентированные гиперболы соответствуют осям зон, расположенных в горизонтальной плоскости.

Для того чтобы правильно пользоваться сеткой Гронингера, нужно усвоить только одно обстоятельство: угол между пятнами A' и B' , расположенными на одной гиперболе, равный 2α , на сетке помечен как α , т. е. как угол между H -стержнями, лежащими в H -плоскости, дающей гномо-ническую проекцию в виде прямой hh' ,

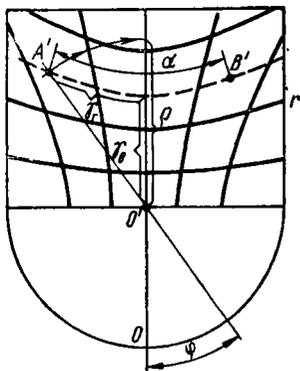


Рис. 62. Применение сетки Гронингера

так что все угловые характеристики, получаемые при помощи сетки, относятся не к пятнам рентгенограммы, а к тем H -стержням, которые ответственны за появление этих пятен.

Так как угол между двумя прямыми измеряется в плоскости, проведенной через эти прямые, для измерения угла α между двумя пятнами (а на самом деле между двумя соответствующими H -стержнями) эти пятна необходимо вывести на одну горизонтальную гиперболу вращением пленки относительно сетки, оставляя при этом центры сетки и пленки совмещенными. Как

легко увидеть из рис. 60, ось зоны \vec{R} при этом расположится в вертикальной плоскости, и угол ψ может быть найден как

$$\psi = 90^\circ - \rho_3,$$

где ρ_3 находится непосредственно на сетке: $\rho_3 = \gamma_b$.

Координаты (ρ, φ) H -стержня, которые нужно знать для построения стереографической проекции, находятся просто. Нужно вывести пятно на вертикальную или горизонтальную прямую сетки (см. рис. 62) и найти расстояние до центра сетки, равное ρ ; азимут φ отсчитывается при этом непосредственно по градусному лимбу сетки.

Если нас не интересуют координаты (ρ, φ) , то можно еще больше упростить процедуру переноса точки с рентгенограммы на стереографическую проекцию, измеряя в градусах длину вертикального пути γ_a и горизонтального γ_r из центра рентгенограммы к пятну (см. рис. 62) и повторяя этот путь соответствующим образом на сетке Вульфа. Так как гипербола сетки Гронингера соответствует меридиану сетки Вульфа, эта упрощенная процедура позволяет правильно перенести пятно рентгенограммы на стереографическую проекцию, но при этом надо помнить, что $\gamma_b \neq \rho$

и $\gamma_r \neq \varphi$, так что в случае необходимости координаты (ρ, φ) все равно приходится определять на стереографической проекции обычным способом.

На рентгенограмме, полученной в области больших $(\theta > 45^\circ)$ углов дифракции, всегда можно обнаружить несколько пятен с большой плотностью почернения (рис. 63); через эти пятна проходят хорошо выраженные гиперболы, и каждое из этих пятен окружено «мертвой зоной», внутри которой пятна отсутствуют. Каждому такому пятну соответствует H -стержень, являющийся общей линией пересечения нескольких H -плоскостей.

Изоморфизм, существующий между прямыми (плоскостями) в объекте и плоскостями (прямыми) в Фурье-образе, позволяет установить следующее обстоятельство.

Как известно, в объекте линия пересечения узловых R -плоскостей с малыми индексами (ось зоны) также будет иметь малые индексы $\{u_i\}$. Как мы уже отмечали, хорошо выраженным зональным кривым (в случае эпиграммы — гиперболам) соответствуют H -плоскости с малыми индексами; очевидно, пересечение H -плоскостей с малыми индексами происходит по H -стержню (ось

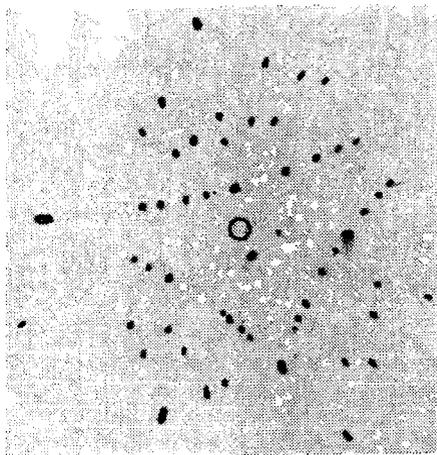


Рис. 63. Рентгенограмма, полученная по способу Лауэ от образца молибдена в области «задних» углов $\theta > 45^\circ$

зоны в Фурье-пространстве), имеющему малые индексы $\{h_i^0\}$. Это обстоятельство объясняет причину появления «мертвой зоны», окружающей низкоиндексированное пятно, так как вблизи направления с малыми индексами $\{h_i^0\}$ находятся H -стержни с индексами $h_1^0 h_2^0 h_3^0$, из которых хотя бы один индекс имеет большую величину, так что начало области существования интерференционной функции (т. е. начало H -стержня) лежит в этом случае за пределами сферы Эвальда и дифракционный максимум не возникает.

Таким образом, пятно, являющееся местом пересечения хорошо выраженных гипербол, как правило, может быть проиндексировано как $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$, $\{210\}$, $\{211\}$ и т. д. В случае кристалла кубической сингонии на эпиграмме почти всегда получают две из трех возможных точек с индексами $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$, которые могут быть использованы как опорные.

Измерив при помощи сетки Гронингера углы между опорной точкой и несколькими сильными максимумами, можно попытаться

проиндцировать рентгенограмму, не обращаясь к стереографической проекции, а прямо назначая индексы пятен в соответствии с измеренными углами. При работе с кристаллами кубической сингонии таблица углов может быть взята из справочника [10], для остальных случаев такую таблицу приходится рассчитывать заранее, сообразуясь с конкретными значениями компонент тензора \hat{g} для данного кристалла.

6. Метод расходящегося пучка

В этом методе условия дифракции удовлетворяются благодаря вариации направления вектора \vec{t}^0 , причем эксперимент ведется в монохроматическом излучении, при неподвижном монокристаллическом образце, т. е. реализуется вариант (100б).

Хотя первые работы, использующие эту схему, были проделаны на заре рентгеноструктурного анализа (см. библиографию в работах [11, 12]), применение метода до последнего времени сильно тормозилось отсутствием удобных источников, дающих первичный пучок с большой расходимостью.

Часто дифракционные максимумы, получаемые в расходящемся пучке, называют линиями Косселя. Обычно различают истинно-косселевский метод и псевдо-косселевский метод получения дифракционной картины.

В истинно-косселевском методе источник рентгеновских лучей S возбуждается в материале самого образца пучком ускоренных частиц (обычно электронов) или пучком жестких рентгеновских лучей, падающим на поверхность монокристаллического образца. В этом случае источник S располагается внутри образца, вблизи от его поверхности, и дифракционная картина получается в характеристическом излучении самого образца.

В псевдо-косселевском методе источник S либо вынесен над поверхностью образца, либо находится на самой поверхности, но возбуждается в тонком слое материала — эмиттера (обычно небольшой кусочек тонкой фольги).

С точки зрения геометрии дифракционной картины имеет смысл различать только случаи источника, находящегося вблизи от поверхности и вынесенного источника; если же рассматривать тонкую структуру дифракционного профиля, то особняком стоит истинно-косселевский метод, при реализации которого ярко проявляется динамическое взаимодействие между первичной волной и вторичными, рассеянными волнами, что приводит к появлению у дифракционной линии светлой каймы, интенсивность которой меньше интенсивности фона рентгенограммы.

В том случае, когда источник S находится внутри образца, дифракционные максимумы, регистрируемые плоской пленкой, являются кривыми второго порядка; если источник S вынесен, то на плоской пленке в общем случае получаются кривые четвер-

того порядка, и расшифровка рентгенограммы несколько усложняется.

Во всех случаях, когда используется параллельный пучок рентгеновских лучей $\vec{i}^0 = \text{const}$ и точка, в которой первичный пучок пересекает рентгеновскую пленку, может быть найдена на рентгенограмме ($\theta_0 = 0$), расшифровка дифракционной картины облегчается. На рентгенограмме, полученной в камере вращения, в точке $\theta_0 = 0$ пересекаются кривые $\rho = \text{const}$, в случае полного вращения и перпендикулярного падения первичного пучка на ось вращения дифракционная картина симметрична относительно горизонтальной и вертикальной прямых, проведенных через точку $\theta_0 = 0$. На лауэграмме точка $\theta_0 = 0$ является общей для всех зональных эллипсов; в способе порошка направление $\vec{i}^0 = \text{const}$ является общей осью всех дифракционных конусов.

На косселеграмме никаких «особых» точек, аналогичных точке $\theta_0 = 0$ в методах параллельного пучка, не имеется; дифракционная картина жестко «привязана» только к образцу, и это обстоятельство в значительной степени затрудняет анализ геометрии косселевских линий и расшифровку рентгенограммы (рис. 64).

При работе с вынесенным источником на рентгенограмме может быть найдена точка выхода перпендикуляра, опущенного на плоскость пленки из источника, и в некоторых случаях наличие такой «особой» точки может облегчить обработку рентгенограммы.

Рассмотрим, что получается, когда внутри кристалла располагается точечный источник S . В этом случае вектор \vec{i}^0 варьируется в пределах телесного угла 4π .

В отличие от случая $\vec{i}^0 = \text{const}$, когда центр Фурье-образа (точка 000) имеет одно, вполне определенное положение (конец вектора \vec{i}^0), в случае $\vec{i}^0 = \text{var}$ положение центра Фурье-образа будет изменяться в соответствии с изменением вектора \vec{i}^0 .

Пусть решетчатый Фурье-образ кристалла имеет вид, изображенный на рис. 65. Не составляет труда найти дифракционный максимум, соответствующий каждому из векторов Фурье-образа.

Рассмотрим, как находится дифракционный максимум для вектора $\vec{H}^{(2)}$ (рис. 65). Центр объекта, как всегда, совмещен

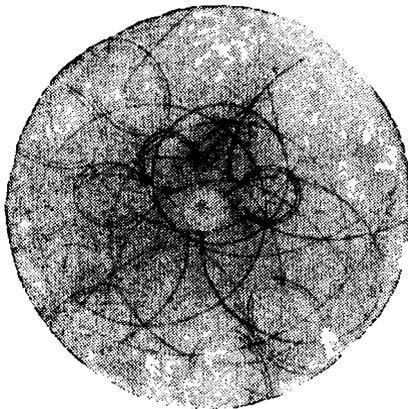


Рис. 64. Косселеграмма, полученная на монокристалле алюминия при вынесенном источнике

Очевидно, конус дифрагированных лучей будет соосен вектору $R^{(2)}$, т. е. нормали к R -плоскости объекта с индексами $(h_1^{(2)} h_2^{(2)} h_3^{(2)})$.

Аналогичное построение может быть сделано для любого из \vec{H} -векторов Фурье-образа, который может быть вписан в сферу Эвальда, т. е. модуль которого удовлетворяет соотношению $|\vec{H}| \leq 2$.

Таким образом, дифракционные максимумы, полученные в расходящемся пучке на монокристаллическом образце, образуют множество конусов с углом при вершине $2\eta_j$; каждый из конусов соосен нормали к системе узловых плоскостей кристалла, индексы которых равны координатам первого узла на дифракционном векторе.

На стереографической проекции множество дифракционных конусов даст множество окружностей радиуса η_j с центрами в точках выхода нормалей к соответствующим системам узловых плоскостей на плоскость стереографической проекции (рис. 66).

Таким образом, если стереографическая проекция полярного комплекса кристалла известна, то для построения стереографической проекции косселевской дифракционной картины достаточно вокруг каждой точки проекции с координатами $\{h_i^{(j)}\}$ построить окружность радиуса

$$\eta_j = \cos^{-1} \frac{\lambda}{2d_j},$$

памятуя лишь о том, что вокруг точки 100 можно провести окружности с радиусами η_{100} , η_{200} , η_{300} и т. д.

Если нам удастся построить по рентгенограмме стереографическую проекцию косселевских линий, то точки с координатами $\{h_i^{(j)}\}$ на проекции могут быть отысканы как центры соответствующих окружностей.

На рис. 65 легко учитывается влияние ограничения области вариации векторов \vec{i}^0 , т. е. ограничение расходимости первичного пучка, и эффекты, связанные с вынесением источника во вне образца или помещение его на самой поверхности; очевидно, последний вариант осуществляется тогда, когда метод реализуется в сильно поглощающем образце независимо от того, чем вызвано появление источника — наличием постороннего эмиттера на поверхности либо действием первичного пучка электронов или рентгеновских лучей.

Так, для плоского образца с источником S , расположенным на поверхности, от полного конуса $\vec{i}^0 = \text{var}$ останется только часть, на которой векторы \vec{i}^0 направлены внутрь образца (рис. 67). В соответствии с этим от цилиндра $\vec{H} = \text{const}$ будет отрезана некоторая часть плоскостью, параллельной оси цилиндра, что

приведет к образованию части дифракционного максимума, как это показано на рис. 67. Если образец имеет большую толщину, то часть дифракционного конуса, для которой векторы $\vec{r}^{(1)}$ направлены внутрь образца, не будет видна из-за поглощения. В итоге на пленке, находящейся сверху от образца, появится только часть максимума в виде двух дуг, ограниченных с одной стороны поглощением в образце и с другой — тем, что источник находится на самой поверхности образца.

Всю процедуру отыскания действительной формы и размеров максимума очень удобно изобразить на стереографической проекции (см. рис. 67). На этом рисунке стереографическая проекция

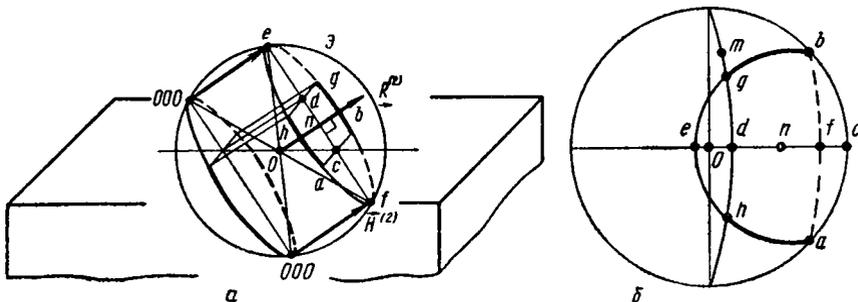


Рис. 67. Эффекты ограничения коселевских конусов:

a — исчезновение части конуса в результате поглощения в образце и нахождения источника на поверхности образца; *б* — отыскание реально наблюдаемой части конуса при помощи стереографической проекции; *т* — меридиан сетки Вульфа

нормали к R -плоскостям кристалла с индексами $(h_1^{(2)} h_2^{(2)} h_3^{(2)})$ изображена точкой n . Коселевская окружность радиуса η_2 изображена дугами aeb (дуга, соответствующая верхней части дифракционного конуса) и afb (часть конуса, расположенная под поверхностью образца).

Часть коселевской окружности geh , которая отрезается из-за того, что источник находится на поверхности образца, отыскивается следующим образом. Из рис. 67 видно, что отрезанная часть geh в точности равна части коселевской окружности afb , расположенной ниже поверхности образца, причем geh и afb симметрично расположены по отношению к центру окружности n , так что расстояние точки c от n равно расстоянию точки d от n .

Найдя таким образом точку d на стереографической проекции, мы легко отыскиваем точки g и h , ограничивающие действительно наблюдаемые участки коселевского конуса, при помощи дуги большого круга (меридиана сетки Вульфа), проведенной через d .

Таким образом, в случае тонкого образца получится часть коселевской окружности $gbfah$, а в случае толстого образца — только две дуги gb и ha .

В итоге при расположении источника S внутри образца или на самой поверхности на плоской пленке получатся сечения кос-

селевских конусов плоскостью, т. е. кривые второго порядка, форма и расположение которых при данной длине волны λ и заданном положении пленки зависят только от ориентировки образца и условий поглощения.

Несколько более сложная геометрия дифракционной картины имеет место при работе с вынесенным источником.

Рассмотрим, что получится, если на расстоянии R_S от образца помещен точечный источник S , дающий расходящийся пучок рентгеновских лучей. Такой источник обычно выполняется

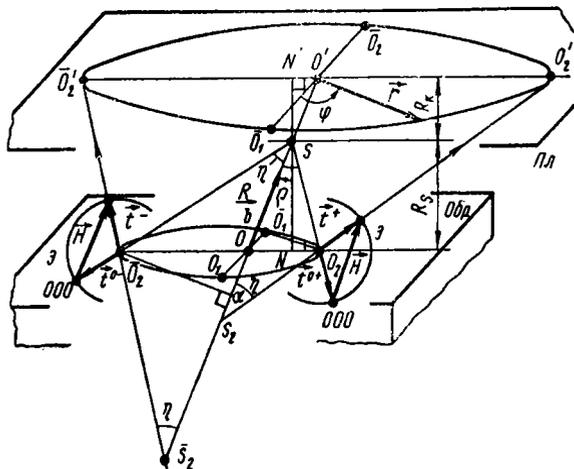


Рис. 68. Геометрия коселевской дифракционной картины в случае вынесенного источника

в виде длинной и тонкой трубки, на торце которой укреплена тонкая фольга из подходящего материала (Cu, Fe, Mo и т. д.). Расходимость первичного пучка 2η в таком случае близка к 2π и практически ограничивается только конечными размерами образца.

Допустим, что нас интересует дифракционный максимум, соответствующий множеству векторов $\{\vec{H}\}$, один из которых изображен на рис. 68. В этом случае необходимо предварительно найти способом, рассмотренным на рис. 65, угол при вершине конуса $\vec{t}^0 = \text{var}$, равный 2η . Этот конус, пересекаясь с поверхностью образца, даст опорный эллипс $O_1O_2\bar{O}_1\bar{O}_2$, на котором располагаются центры всех сфер Эвальда, описывающие дифракцию, характеризующую множеством $\{\vec{H}\}$.

Вектор \vec{t}^- , соответствующий точке \bar{O}_2 , будет направлен по прямой $\vec{S}_2\bar{O}_2$, вектор \vec{t}^+ , соответствующий точке O_2 , — по прямой S_2O_2 . Способ отыскания точек O_2 и \bar{O}_2 понятен из рис. 68. Опустив перпендикуляры \bar{O}_2a и O_2b на прямую SO , мы получим

точки a и b , после чего положение точек \bar{S}_2 и S_2 находится из соотношений $S\bar{S}_2 = 2Sa$ и $SS_2 = 2Sb$.

Таким образом, множество дифрагированных лучей образует поверхность псевдоконуса. В отличие от обычного конуса с постоянной вершиной, из которой проводятся все образующие, в случае псевдоконуса вершины расположены на отрезке \bar{S}_2S_2 .

Пересекаясь с плоской пленкой, параллельной поверхности образца, псевдоконус дает кривую четвертого порядка, которую мы назовем псевдоэллипсом. Конечно, при соответствующей ориентировке оси псевдоконуса по отношению к плоской пленке на ней можно получить дифракционную кривую в виде псевдопараболы и псевдогиперболы.

Не составляет труда написать выражение для радиуса-вектора \vec{r} , определяющего положение точки на дифракционной кривой [12]¹:

$$|\vec{r}| = \frac{(R_K + 2R_S) \frac{\sin 2\eta}{2 \cos \rho} \sqrt{1 - \sin^2 \rho \cos^2 \varphi}}{\cos^2 \eta - \sin^2 \rho \cos^2 \varphi} - R_K \frac{\operatorname{tg} \rho \sin^2 \eta \cos \varphi}{\cos^2 \eta - \sin^2 \rho \cos^2 \varphi}.$$

Иногда бывает удобнее вести измерения не относительно точки O' , а относительно точки N' , являющейся местом выхода на пленку перпендикуляра, опущенного из источника на плоскость пленки (см. рис. 68). В этом случае, как легко видно из рис. 68:

$$\left. \begin{aligned} r^+ &= R_S [\operatorname{tg}(\eta + \rho) + \operatorname{tg}(\eta - \rho)] + R_K \operatorname{tg}(\eta + \rho); \\ r^- &= R_S [\operatorname{tg}(\eta + \rho) + \operatorname{tg}(\eta - \rho)] + R_K \operatorname{tg}(\eta - \rho). \end{aligned} \right\} \quad (109)$$

Точку N' на пленке можно найти, учитывая, что в ней пересекаются все прямые, на которых располагаются большие оси псевдоэллипсов.

Более точный способ отыскания точки N' связан с применением специальной реперной сетки, помещаемой между источником и рентгеновской пленкой. Теневое изображение этой сетки в «отраженных» лучах позволяет с достаточной точностью определить координаты точки N' .

При $\rho = 0$ псевдоэллипс превращается в окружность радиуса r ; в этом случае соотношение (109) дает

$$r = (R_K + 2R_S) \operatorname{tg} \eta.$$

При работе с вынесенным источником угол расходимости первичного пучка определяется размерами образца и расстоянием

¹ См. также: Иванов С. А. Дифракция в расходящемся пучке рентгеновских лучей. Автореф. канд. дис. Л., ЛПИ, 1974.

от образца до анода рентгеновской трубки. Ограничение угла расходимости приводит к тому, что часть косселевских конусов может вообще не появиться, а некоторые конусы будут неполными. Эффекты, вызванные ограничением угла расходимости, проще всего проследить на стереографической проекции (рис. 69).

Из полного конуса $l^0 = \text{var}$ реализуется только часть, изображаемая на стереографической проекции дугой acb . Благодаря этому вместо полной косселевской окружности $acba'b'$ будет наблюдаться только ее часть $a'c'b'$, полученная при помощи дуг больших кругов m и m' , отображающих точки a и b на точки a' и b' через центр косселевской окружности n_1 . Окружность с центром в точке n_2 вообще не дает дифракционного максимума.

Схема, изображенная на рис. 65, строилась так же, как и для всех прочих методов получения дифракционной картины: центр

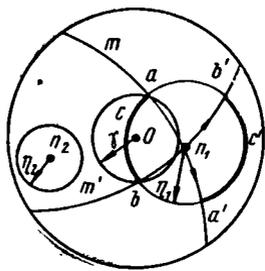


Рис. 69. Влияние угла расходимости первичного пучка 2γ на форму дифракционных максимумов

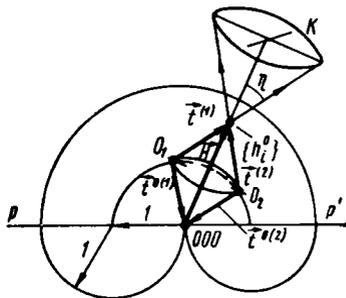


Рис. 70. Схема для отыскания косселевских конусов. Приведен случай, когда источник находится на границе полупространства PP'

объекта находится в центре сферы Эвальда; на расстоянии, равном единице, располагается центр Фурье-образа. Помимо этой стандартной схемы, известны еще некоторые приемы, придуманные только для способа расходящегося пучка.

Коссель [14] помещает центр точечного Фурье-образа в центр сферы радиуса 2; если при этом провести плоскость, проходящую через конец \vec{H} -вектора, перпендикулярно к нему, то конус с вершиной в точке 000 , опирающийся на окружность, по которой эта плоскость пересекает сферу радиуса 2, будет иметь при вершине нужный угол 2η .

Как видно, в этом случае

$$\eta = \cos^{-1} \frac{|\vec{H}|}{2}.$$

Такое построение облегчает нахождение пересечений косселевских конусов.

Другой способ также предусматривает использование одного общего центра Фурье-образа, помещаемого в центре сферы ради-

уса 2; при этом центры сфер Эвальда приходится располагать по поверхности сфер радиуса 1. На рис. 70 изображено плоское сечение схемы, соответствующей точечному источнику, расположенному на границе полупространства (источник на поверхности сильно поглощающего кристалла). Для любого из \vec{H} -векторов, не выходящего за пределы верхней полусферы радиуса 2 и нижней половины тора радиуса 1, можно построить конус дифрагированных лучей с углом при вершине, равным 2η , расположенной в узле с координатами $\{h_i^0\}$. С помощью этой компактной схемы можно решать различные задачи, связанные с геометрией дифракционной картины [12, 13]. Следует только помнить, что в случае источника, находящегося внутри образца, в действительности неподвижным оказывается центр сферы Эвальда (точка O на рис. 65), а перемещаются центры Фурье-образов (точки 000); в случае вынесенного источника центры сфер Эвальда располагаются на окружности радиусом η , как это изображено на рис. 68.

Так как вследствие свойства (16) параллельный перенос объекта не влияет на интенсивность и геометрию дифракционной картины, схему, изображенную на рис. 70, можно получить из схемы, приведенной на рис. 65, совмещая при помощи трансляции все центры Фурье-образов, отвечающих различно ориентированным векторам \vec{i}^0 .

Рассмотрим, как строится стереографическая проекция коселевских линий (рис. 71). Из рисунка видно, что коселевский эллипс, полученный на плоской пленке в случае источника, находящегося внутри образца, есть не что иное, как гномоническая проекция коселевского конуса, вершина которого находится в точке O .

Стереографическую проекцию точки M' , находящейся на эллипсе, т. е. точку $m(\psi, \varphi)$, можно найти без труда, так как азимут φ отыскивается прямо на пленке, а полярный угол ψ равен

$$\psi = \operatorname{tg}^{-1} \frac{|\vec{r}|}{R_K},$$

так что расстояние точки m от центра стереографической проекции O равно

$$Om = R_{\text{ст}} \operatorname{tg} \frac{\psi}{2}.$$

Построение стереографической проекции для случая вынесенного источника (см. рис. 68) несколько более кропотливо потому, что в этом случае не только различные конусы не имеют общей вершины, но и в каждом из конусов вершина смещается в зависимости от азимута φ , так как построение, изображенное на рис. 68,

необходимо проделывать заново для каждого из различным образом ориентированных векторов R .

Для того чтобы найти проекцию \vec{R} косселевского конуса, т. е. косселевскую окружность, достаточно найти проекцию двух образующих $\vec{S}_2\vec{O}_2$ и S_2O_2 (точки \vec{O}'_2 и O'_2). Эти две точки лежат на диаметре косселевской окружности, проходящем через точку N' (см. рис. 65), на угловом расстоянии от нее, равном соответственно $\eta - \rho$ и $\eta + \rho$.

Если положение этих двух точек определено, косселевская окружность на стереографической проекции проводится через них известным способом.

Наиболее просто углы $\eta - \rho$ и $\eta + \rho$ находятся способом повторной съемки на одну и ту же пленку (рис. 72). Как видно, для

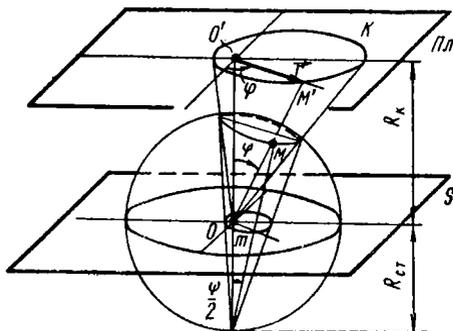


Рис. 71. К анализу косселевской дифракционной картины.

Стереографическая проекция косселевской окружности К. Центр сферы проекций совмещен с центром образца О

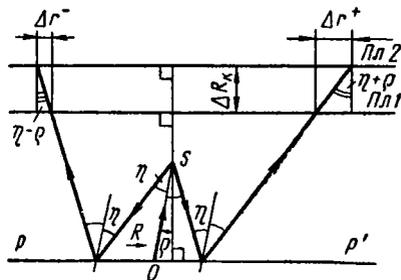


Рис. 72. Способ повторной съемки. Два последовательных снимка на одну и ту же пленку, помещаемую в положения ПЛ1 и ПЛ2, позволяют найти углы ρ и η ;

PP' — поверхность кристалла

определения $\eta - \rho = b$ и $\eta + \rho = a$ достаточно всего двух снимков, сделанных со смещением пленки на ΔR_K :

$$\left. \begin{aligned} a &= \operatorname{tg}^{-1} \frac{\Delta r^+}{\Delta R_K}; \\ b &= \operatorname{tg}^{-1} \frac{\Delta r^-}{\Delta R_K} \end{aligned} \right\} \quad (110)$$

Для повышения точности применяется многократное смещение пленки.

Из формул (110) могут быть отдельно определены радиус косселевской окружности η и полярный угол ρ нормали к R -плоскости кристалла. Так как азимут точки n определяется прямо из рентгенограммы, то каждый псевдоэллипс, имеющийся на пленке, дает возможность найти стереографическую проекцию нормали к соответствующей узловой плоскости кристалла.

К сожалению, число полных псевдоэллипсов на косселеграммах обычно очень невелико. При работе с вынесенным источником и съемке «на отражение» псевдоэллипсы, находящиеся целиком по одну сторону от отверстия в пленке, через которое проходит анод рентгеновской трубки, имеют обрыв на стороне, ближайшей к источнику (см. рис. 64), что объясняется экранирующим действием анодного патрубков.

В работах [15—17] описан достаточно общий способ отыскания углов η и ρ по произвольному отрезку псевдоэллипса с использованием техники двух съемок на одну пленку (рис. 73).

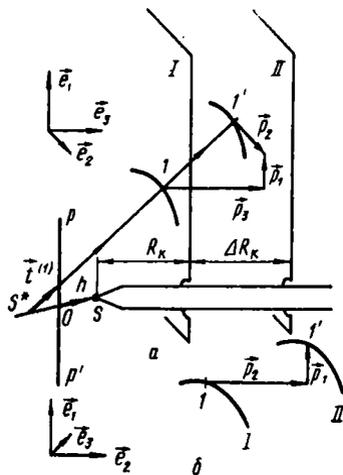


Рис. 73. Применение техники повторной съемки на одну пленку для работы с произвольным отрезком псевдоэллипса:

a — I , II — первое и второе положения пленки; PP' — поверхность образца; S^* — мнимый источник для луча, дифрагированного по направлению $\vec{t}^{(1)}$; b — определение компонент p_1 и p_2 непосредственным измерением на пленке. Векторы \vec{e}_1 и \vec{e}_2 расположены в плоскости пленки

Для некоторого вектора $\vec{t}^{(1)}$, дающего точки I и I' на отрезке псевдоэллипса, получаемом на пленке при двух ее положениях, можно записать соотношение

$$(\vec{t}^{(1)}, \vec{n}) = \cos \eta = c, \quad (111)$$

$$\text{где } \vec{n} = \frac{\vec{R}}{|\vec{R}|}.$$

Вектор \vec{p} , соединяющий точки I и I' , может быть записан в виде $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$, где координата p_3 равна смещению пленки между первым и вторым снимками, т. е. $p_3 = \Delta R_K$, а компоненты p_1 и p_2 определяются прямо из рентгенограммы (рис. 73).

$$\text{Так как } \vec{t}^{(j)} = \frac{\vec{p}^{(j)}}{|\vec{p}^{(j)}|},$$

то компоненты вектора $\vec{t}^{(j)}$ находятся как

$$t_i^{(j)} = \frac{p_i^{(j)}}{\sqrt{(p_1^{(j)})^2 + (p_2^{(j)})^2 + (p_3^{(j)})^2}}.$$

Записывая \vec{n} в виде $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$, получим из соотношения (111) систему уравнений

$$t_1^{(j)} \frac{n_1}{c} + t_2^{(j)} \frac{n_2}{c} + t_3^{(j)} \frac{n_3}{c} = 1 \quad j = 1, 2, 3 \quad n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1.$$

из которой легко отыскиваются неизвестные $\{n_i\}$ и c :

$$\frac{n_1}{c} = \frac{\begin{vmatrix} 1 & t_2^{(1)} & t_3^{(1)} \\ 1 & t_2^{(2)} & t_3^{(2)} \\ 1 & t_2^{(3)} & t_3^{(3)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} t_1^{(1)} & t_2^{(1)} & t_3^{(1)} \\ t_1^{(2)} & t_2^{(2)} & t_3^{(2)} \\ t_1^{(3)} & t_2^{(3)} & t_3^{(3)} \end{vmatrix}};$$

аналогично находятся n_2/c и n_3/c ;

$$\frac{1}{c^2} = \left(\frac{n_1}{c}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{c}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{c}\right)^2$$

В итоге радиус косселевской окружности оказывается равным

$$\eta = \cos^{-1}c,$$

а координаты (ρ, φ) центра окружности — равными

$$\rho = \cos^{-1}n_3;$$

$$\varphi = \cos^{-1} \left[1 + \left(\frac{n_2}{n_1} \right)^2 \right]^{-1/2}$$

Как видно, для решения задачи достаточно иметь три точки на отрезке псевдоэллипса и правильно найти соответствующие точки при повторной экспозиции со сдвигом пленки на ΔR_K . При работе с вынесенным источником последняя процедура нетривиальна, так как каждой точке на псевдоэллипсе соответствует новое положение мнимого источника S_i , и поэтому отыскание эквивалентных точек типа I и I' несколько осложняется. Как и при нахождении центра рентгенограммы N' , целесообразно отыскивать эквивалентные точки при помощи теневого изображения реперной сетки, помещаемой между источником и пленкой. Использование в качестве опорных точек различных пересечений косселевских дуг может привести к значительным ошибкам из-за вариации точек S_i .

Понятно, что изложенный способ может применяться и при источнике, находящемся внутри образца, однако в этом случае трудно преодолимой преградой является очень малая контрастность рентгенограммы, затрудняющая получение повторных снимков на одной пленке.

Индексирование косселеграмм не представляет большого труда, если предварительно построена стереографическая проекция, содержащая достаточно большое число точек n_j , т. е. проекций векторов $\vec{R}^{(i)}$

В случае кристалла кубической сингонии можно сравнить полученную стереографическую проекцию с различными стандартными проекциями либо, как в методе Лауэ, подобрать правильные индексы $\{h_i^{(j)}\}$, исходя из углов между точками n_j . Если размеры и форма элементарной ячейки известны, целесообразно сравнить экспериментально найденные значения η_j с рассчитанными из соотношения

$$\eta_j = \cos^{-1} \frac{|\vec{H}^{(j)}|}{2}.$$

В наиболее общем случае можно использовать тот же метод, что и в способе вращения, проиндицировав рентгенограмму при помощи трех некопланарных векторов $\vec{H}^{(1)}$, $\vec{H}^{(2)}$, $\vec{H}^{(3)}$, обозначенных как \vec{b}_1 , \vec{b}_2 и \vec{b}_3 , а затем перейти известным способом к одной из ячеек Браве.

7. Метод порошка

В этом методе используется образец, составленный из большого количества очень малых кристаллов. Такой образец можно приготовить, измельчая кристалл вплоть до получения тонкого порошка. В ряде случаев удается приготовить монолитный поликристаллический образец, в котором функция распределения кристаллитов (зерен) по разориентировкам $\Delta\rho$ оказывается постоянной величиной 1 ($\Delta\rho$). Очевидно, по отношению к геометрии дифракционной картины такой образец может быть уподоблен порошковому

Освещая порошок образцом монохроматическим пучком рентгеновских лучей, мы реализуем вариант (100 в). Как было показано в п. 2, Фурье-образ такого образца, или, точнее говоря, область существования решеточного Фурье-образа, представляет собой множество концентрических сфер с радиусами $|\vec{H}^{(i)}|$; пересекая этот образ сферой Эвальда, мы тотчас получаем множество дифракционных максимумов в виде конусов с углом при вершине $4\theta_j$, где

$$\theta_j = \sin^{-1} \frac{|\vec{H}^{(j)}|}{2},$$

соосных вектору \vec{i}^0 (рис. 74).

Для углов $\theta > 45^\circ$ конус «смотрит» назад, в сторону падающего пучка, и имеет при вершине угол 4η .

Как мы уже видели в п. 6, метод расходящегося пучка также дает множество дифракционных конусов, но конусы эти пол-

ностью «привязаны» к R -решетке кристалла и имеют угол при вершине $2\eta_j$, где

$$\eta_j = \cos^{-1} \frac{|\vec{H}^{(j)}|}{2},$$

и соосны нормали к R -плоскостям кристалла, т. е. соосны ковариантному вектору R .

В методе порошка дифракционные конусы жестко «привязаны» к первичному пучку рентгеновских лучей, т. е. к вектору \vec{i}^0 , и поэтому информация об ориентировке векторов $\vec{H}^{(i)}$, соответствующих отдельным кристаллитам, в этом методе исчезает.

При укрупнении отдельных кристаллитов векторы \vec{i} могут располагаться по поверхности дифракционного конуса дискретно, и в этом случае снова можно получить некоторую информацию об ориентировке векторов $\vec{H}^{(i)}$, если в процессе эксперимента не вращать образец.

Регистрация дифракционной картины может осуществляться различными способами, приспособленными для решения различных задач. При использовании фотографической регистрации чаще всего применяется цилиндрическая пленка с осью, перпендикулярной вектору \vec{i}^0 (способ Дебай—Шерера), либо плоская пленка, нормаль к которой совпадает с вектором \vec{i}^0 (рис. 75).

В первом случае целесообразно использовать цилиндрический образец, во втором — образец в виде пластинки. В отличие от других способов, в которых прямое измерение угла дифракции либо не может быть сделано с высокой точностью из-за особенностей геометрии дифракционной картины (способ Лауэ и расходящегося пучка), либо из-за неблагоприятной формы дифракционного максимума (способ вращения и его модификации), в способе порошка определение угла дифракции сводится к измерению на пленке расстояния $2r$, которое может быть проведено с высокой точностью.

Для цилиндрической пленки $\theta = 2r/4R$,

$$\text{для плоской } \theta = \frac{1}{2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{2r}{2R} \text{ и } \eta = \frac{1}{2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{2r'}{2R'}.$$

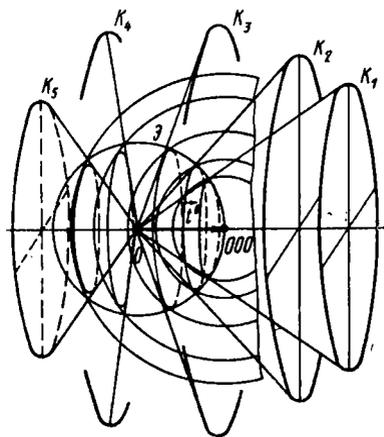


Рис. 74. Пересечение сферы Эвальда с областью существования решетчатого Фурье-образа порошкового образца: K_1, K_2, K_3 — дифракционные конусы, соосные вектору \vec{i}^0

Как можно было убедиться в п. 3 и 6, метод вращения и его модификации, равно как и метод расходящегося пучка, позволяют найти размеры элементарной ячейки и координаты дифракционных максимумов $\{h_i^0\}$, т. е. проиндцировать рентгенограмму в случае кристалла любой сингонии.

Смысл этой операции сводится к тому, что в дифракционном пространстве вводятся базисные векторы $\{\vec{b}_i\}$, при помощи которых и находятся координаты дифракционных максимумов $\{h_i^0\}$, т. е. индексы дифракции.

Такой прямой путь не может быть реализован при анализе

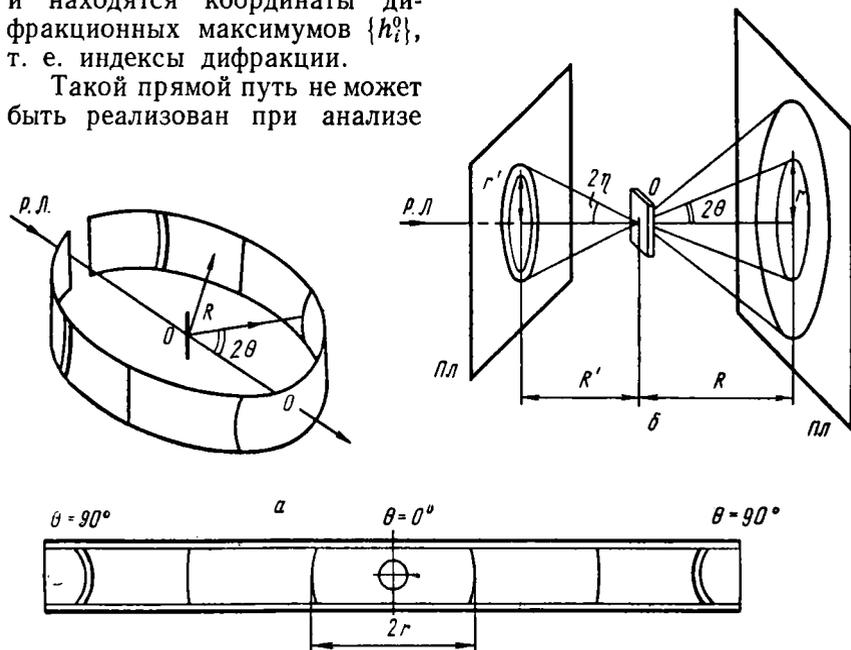


Рис. 75. Различные схемы получения рентгенограмм от порошкового образца: а — схема Дебая—Шерера; б — съемка на плоскую пленку «вперед» и «назад». Вариант «назад» называется рентгенограммой по Заксу

дифракционной картины в методе порошка, так как здесь утеряна информация об ориентировке векторов $\vec{H}^{(i)}$, а сохранилась только информация об их модулях $|\vec{H}^{(i)}|$.

Это обстоятельство приводит к тому, что индцирование дифракционной картины в методе порошка приходится проводить методом проб и ошибок, угадывая правильные комбинации индексов дифракции; при переходе от кристаллов кубической сингонии к кристаллам низших сингоний объем работы, затраченной на индцирование, возрастает с одновременным уменьшением надежности индцирования.

Для кристаллов кубической, тетрагональной, гексагональной и ромбической сингоний наиболее простым является графический метод. Запишем для этих сингоний соотношения, связывающие

модуль дифракционного вектора $|\vec{H}|$ с индексами дифракции и модулями векторов $\{\vec{a}_i\}$.

Кубическая сингония

$$\frac{|\vec{H}|}{2} = \sin \theta = \frac{\lambda}{2a} [(h_1^0)^2 + (h_2^0)^2 + (h_3^0)^2]^{1/2}. \quad (112)$$

Тетрагональная сингония

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2a_1} [(h_1^0)^2 + (h_2^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2 (h_3^0)^2]^{1/2} \quad (112a)$$

Гексагональная сингония

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2a_1} \left\{ \frac{4}{3} [(h_1^0)^2 + (h_2^0)^2 + h_1^0 h_2^0] + \left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2 (h_3^0)^2 \right\}^{1/2} \quad (112б)$$

Ромбическая сингония

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2a_1} \left[(h_1^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2 (h_2^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2 (h_3^0)^2 \right], \quad (112в)$$

причем во всех случаях обозначено $|\vec{a}_i| = a_i$.

Из формулы (112a) получим, что

$$\lg \sin \theta = \lg \frac{\lambda}{2a_1} + \frac{1}{2} \lg [(h_1^0)^2 + (h_2^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2 (h_3^0)^2].$$

Построив заранее множество функций вида

$$\frac{1}{2} \lg [(h_1^0)^2 + (h_2^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2 (h_3^0)^2] = f\left(\frac{a_1}{a_3}\right)$$

при заданных значениях $\{h_i^0\}$ и нанеся на горизонтальную линейку значения $\lg \sin \theta_j$, найденные из рентгенограммы, мы сможем отыскать множество индексов $\{h_i^{0(j)}\}$, передвигая линейку параллельно самой себе, пока не будет достигнуто совпадение меток на линейке с кривыми $f\left(\frac{a_1}{a_3}\right)$ при $\{h_i^0\} = \text{const}$. Горизонтальное смещение линейки соответствует смещению нуля, и тем самым учету неизвестного слагаемого $\lg \lambda/2a$, а вертикальное смещение — вариации величины a_1/a_3 .

Как видно, для кристаллов кубической сингонии подвижная линейка расположится на уровне $a_1/a_3 = 1$; аналогичный график может быть применен для кристаллов гексагональной сингонии, равно как и для кристаллов ромбоэдрической сингонии, которые в этом случае будут индцироваться в гексагональной установке.

Как показывает уравнение (112 в), индцирование кристаллов ромбической сингонии требует множества графиков вида

$$\frac{1}{2} \lg [(h_1^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^2 (h_2^0)^2 + \left(\frac{a_1}{a_3}\right)^2 (h_3^0)^2] = f\left(\frac{a_1}{a_3}\right)$$

при $\{h_i^0\} = \text{const}$ и заданном значении a_1/a_2 . Варьируя значение a_1/a_2 в разумных пределах, можно охватить широкий круг материалов.

Помимо разобранных здесь кривых, называемых кривыми Хелла, существуют и другие аналогичные графики (кривые Банна, Бьерстрема, Бонда, Харрингтона), отличающиеся лишь в деталях от кривых Хелла. При неизменной точности в определении значений $\sin \theta$ неопределенность в индицировании кристаллов одной и той же сингонии возрастает с увеличением размеров элементарной ячейки кристалла, так как при большом числе близко отстоящих друг от друга линий на рентгенограмме очень трудно добиться однозначного индицирования.

Разумеется, рассмотренный здесь метод графического индицирования не может быть применен к кристаллам моноклинной и трехклинной сингоний. В этом случае наиболее общим является метод Ито, подробное изложение которого можно найти в работе [8]. В методе Ито реализуется уже известная нам идея: выбрать в дифракционном пространстве три некопланарных вектора \vec{b}_1 , \vec{b}_2 и \vec{b}_3 и с их помощью найти координаты дифракционных максимумов.

Целесообразно выбрать в качестве длин базисных векторов длины трех наименьших \vec{H} -векторов, т. е. положить

$$|\vec{b}_1| = |\vec{H}^{(1)}|;$$

$$|\vec{b}_2| = |\vec{H}^{(2)}|;$$

$$|\vec{b}_3| = |\vec{H}^{(3)}|,$$

и проиндицировать три первых линий на рентгенограмме как 100, 010, 001.

Для того чтобы полностью определить элементарную ячейку в дифракционном пространстве, надо найти углы между векторами $\{\vec{b}_i\}$

Известно, что

$$|\vec{H}|^2 = h_1^0 h_j^0 \rho_{ij} = (h_1^0)^2 \rho_{11} + (h_2^0)^2 \rho_{22} + (h_3^0)^2 \rho_{33} + \\ + 2h_1^0 h_3^0 \rho_{13} + 2h_2^0 h_3^0 \rho_{23} + 2h_1^0 h_2^0 \rho_{12},$$

где $\rho_{ij} = (\vec{b}_i, \vec{b}_j) = \lambda^2 g_{ij}^{-1}$.

Рассмотрим множество максимумов с индексами $h_1^0 h_2^0 0$. Для такого множества

$$|\vec{H}(h_1^0 h_2^0 0)|^2 = (h_1^0)^2 |\vec{b}_1|^2 + (h_2^0)^2 |\vec{b}_2|^2 + \\ + 2h_1^0 h_2^0 |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \cos \beta_3, \quad (113)$$

где β_3 — угол между векторами \vec{b}_1 и \vec{b}_2 .

Для максимумов с индексами $h_1^0 \bar{h}_2^0 0$

$$\begin{aligned} |\vec{H}(h_1^0 \bar{h}_2^0 0)|^2 &= (h_1^0)^2 |\vec{b}_1|^2 + (h_2^0)^2 |\vec{b}_2|^2 - \\ &- 2h_1^0 h_2^0 |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \cos \beta_3. \end{aligned} \quad (113a)$$

Вычитая соотношение (113a) из (113), получим уравнение для определения β_3 :

$$\beta_3 = \cos^{-1} \frac{|\vec{H}(h_1^0 h_2^0 0)|^2 - |\vec{H}(h_1^0 \bar{h}_2^0 0)|^2}{4h_1^0 h_2^0 |\vec{b}_1| |\vec{b}_2|}. \quad (113b)$$

Непосредственно этим выражением воспользоваться нельзя, так как в формуле (113b) известны только $|\vec{b}_1|$ и $|\vec{b}_2|$.

Складывая соотношения (113) и (113a), получим

$$\frac{|\vec{H}(h_1^0 h_2^0 0)|^2 + |\vec{H}(h_1^0 \bar{h}_2^0 0)|^2}{2} = (h_1^0)^2 |\vec{b}_1|^2 + (h_2^0)^2 |\vec{b}_2|^2.$$

Таким образом, если мы отыщем в списке значений $\{|\vec{H}^{(i)}|^2\}$ такие два, чтобы их полусумма равнялась комбинации $(h_1^0)^2 |\vec{b}_1|^2 + (h_2^0)^2 |\vec{b}_2|^2$, где $|\vec{b}_1|$ и $|\vec{b}_2|$ известны, а h_1^0 и h_2^0 — целые числа, то тем самым уьем сразу двух зайцев — отыщем угол β_3 из соотношения (113b) и индексы дифракции h_1^0 и h_2^0 для двух максимумов.

Понятно, что аналогичная процедура позволит найти углы β_1 и β_2 , т. е. полностью определить векторы $\{\vec{b}_i\}$, после чего индцирование проводится без труда и сводится просто к сравнению рассчитанных по заданным $\{\vec{b}_i\}$ значений $|\vec{H}^{(i)}|$ с найденными экспериментально.

Так как в качестве векторов $\{\vec{b}_i\}$ были выбраны три минимальных значения $\vec{H}^{(i)}$, то ячейка должна быть примитивной, и все найденные экспериментально максимумы должны иметь целочисленные индексы дифракции. Ошибки будут возникать в том случае, если хотя бы один из векторов $\{\vec{b}_i\}$, например \vec{b}_1 , будет пропущен и вместо модуля $|\vec{b}_1|$ будет взята величина $|\vec{H}(200)| = 2|\vec{b}_1|$ и т. д.

Такие пропуски могут иметь место либо из-за малости значений $|F(100)|^2$, т. е. из-за особенностей структуры кристалла, либо из-за отсутствия винтовой оси, параллельной $[100]$, что вызывает погасание максимума с индексами 100.

В случае удачного индцирования последним этапом работы является переход от использованной P -ячейки в дифракционном пространстве к P -ячейке в пространстве объекта и к замене (в случае необходимости) этой ячейки одной из центрированных ячеек Браве.

Учитывая большие трудности, с которыми приходится сталкиваться при индцировании порошковых рентгенограмм, надо пользоваться любой имеющейся возможностью для облегчения этой работы. Так, если вещество оказывается известным, то значения $\{|\vec{H}^{(i)}|\}$ целесообразно рассчитать заранее по формуле

$$|\vec{H}| = \lambda (h_i^0 h_j^0 g_{ij}^{-1})^{1/2},$$

либо в более простых случаях по формулам (112), а затем сравнить эти значения с найденными экспериментально, отыскивая тем самым индексы дифракции.

В настоящее время имеются систематизированные данные о рентгенограммах большого числа мелкокристаллических материалов, содержащихся в картотеке американского общества испытания материалов (картотека ASTM). В качестве кодового признака, по которому опознается вещество, используются значения $d = \lambda |\vec{H}|^{-1}$ трех самых интенсивных линий рентгенограммы. Далеко не все рентгенограммы, содержащиеся в картотеке, проиндцированы, однако всегда есть вероятность найти сведения об индексах дифракции интересующего нас вещества в картотеке.

Прежде чем приступить к отысканию индексов по способу Ито, нужно проверить, не относится ли вещество к кубической сингонии. Такую проверку проделать очень просто, составляя отношение $|\vec{H}^{(1)}|^2 : |\vec{H}^{(2)}|^2 : |\vec{H}^{(3)}|^2 : |\vec{H}^{(4)}|^2$: и т. д. Легко видеть из формулы (112), что для кристаллов кубической сингонии это отношение будет выглядеть как 1 : 2 : 3 4 5 6 8 : 9 и т. д. в случае *P*-ячейки; как 3 4 8 11 12 16 = 1 1, 33 : 2, 66 : 3,67 4 и т. д. в случае *F*-ячейки и как 2 4 6 : 8 10 12 14 : 16 = 1 2 3 4 : 5 6 7 и т. д. в случае *I*-ячейки.

Разумеется, некоторые члены этих рядов могут исчезнуть из-за особенностей структуры кристалла, однако это обстоятельство по большей части не препятствует отнесению исследуемого вещества к кубической сингонии. Аналогичные методы проверки, использующие поиск закономерностей среди величин $|\vec{H}^{(i)}|^2$, могут быть применены для обнаружения кристаллов тетрагональной и гексагональной сингоний [18].

8. Определение удельной отражательной способности в различных методах получения дифракционной картины

В п. 8 гл. II мы получили формулу для удельной отражательной способности Q в виде (98)

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 n^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta_0}{2 \sin 2\theta_0},$$

причем предполагалось, что кристалл вращается с некоторой угловой скоростью ω , а интегральная интенсивность измеряется при помощи неподвижного счетчика с широкой щелью (метод φ - или ω -сканирования).

Необходимо рассмотреть, каким образом будет определяться Q при других способах получения дифракционных максимумов, рассмотренных в п. 3—7

Легко видеть, что в камере вращения с цилиндрической пленкой условия получения дифракционных максимумов, расположенных на нулевой слоевой линии, в точности соответствуют схеме, примененной при выводе соотношения (98), а интегральная интенсивность, регистрируемая системой, может быть определена из интегральной плотности почернения пятна на пленке, измеренной при помощи денситометра.

При работе с первой, второй и т. д. слоевыми линиями, равно как и в случае неперпендикулярного падения первичного пучка на ось вращения кристалла, в выражение (98) необходимо внести изменения.

$$\text{Обозначив } \frac{1}{\sin 2\theta_0} = L, \quad (114)$$

запишем соотношение (98) в виде

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 n^2 LP.$$

Фактор поляризации P равен

$$P = \frac{1 + \cos^2 2\theta_0}{2} \quad (114a)$$

для неполяризованного первичного пучка; при работе с монохроматором, расположенным на первичном пучке, происходит частичная поляризация пучка на монохроматоре, и в этом случае формула для P получается более сложной, чем (114a), так как здесь уже приходится учитывать не только углы дифракции для монохроматора и исследуемого кристалла, но также и то, что первичный пучок, дифрагированный на монохроматоре, и пучок, дифрагированный на образце, могут не лежать в одной плоскости [19].

При использовании неполяризованного монохроматического излучения выражения для удельной мощности Q в различных методах будут отличаться только различными значениями фактора Лоренца L .

Не составляет труда получить выражение для фактора Лоренца, годное в случае методов вращения, колебания методов Вайсенберга, Де-Ионга—Боумана, а также для дифрактометров, позволяющих измерять интенсивность в плоскостях, отличных от экваториальной.

В этом случае L удобно рассматривать как «кинематический» фактор, учитывающий время прохождения t области существования интерференционной функции через сферу Эвальда, т. е. время, в течение которого интенсивность дифракционного максимума отлична от нуля.

При перпендикулярном падении первичного пучка на ось вращения и работе в экваториальной плоскости (рис. 76, а) L оказывается равным отношению угловой скорости вращения кристалла ω

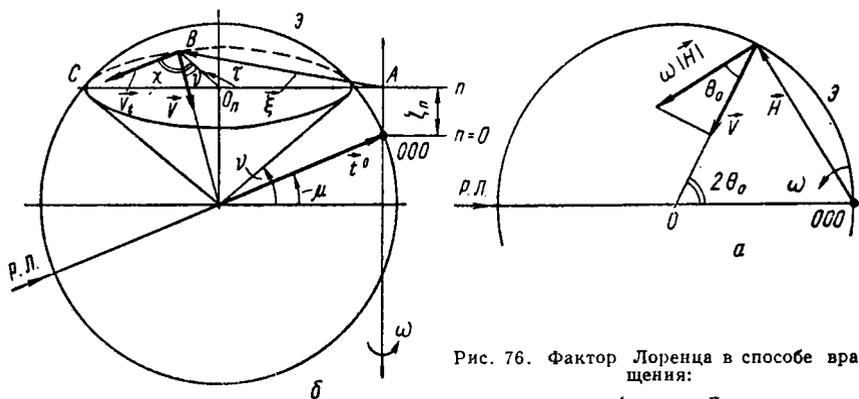


Рис. 76. Фактор Лоренца в способе вращения:

а — вычисление фактора Лоренца при работе в экваториальной плоскости. Фурье-образ вращается вокруг оси, перпендикулярной плоскости чертежа; б — к расчету фактора Лоренца при работе на n -ной слоевой линии

к составляющей скорости конца вектора \vec{H} , направленной к центру сферы Эвальда, обозначенной на рис. 76, а через \vec{V} :

$$L = \frac{\omega}{V}. \quad (115)$$

Действительно, тангенциальная скорость конца \vec{H} -вектора равна $V_t = \omega |\vec{H}| = \omega 2 \sin \theta_0$, а скорость

$$V = \omega |\vec{H}| \cos \theta_0 = \omega \sin 2\theta_0,$$

откуда и следует соотношение (114).

Обозначив наибольший размер области существования интерференционной функции по направлению \vec{V} через L_V^b , можно видеть, что время t , равное

$$t = \frac{L_V^b}{V} = L_V^b \omega L, \quad (115a)$$

оказывается пропорциональным фактору Лоренца L . Естественно, что соотношения (115) и (115а) справедливы и в общем случае, а не только при работе в экваториальной плоскости.

При работе с ненулевой слоевой линией и наклонном падении первичного пучка на ось вращения (рис. 76, б) для вычисления L

нужно снова найти компоненту скорости конца \vec{H} -вектора V , направленную к центру сферы Эвальда.

На рис. 76, б видно, что искомая компонента скорости V равна

$$V = V_t \cos \chi \cos \nu,$$

где окружная скорость конца \vec{H} -вектора (точка B) равна $V_t = \omega |\vec{\xi}|$, а $\vec{\xi}$, как и в п. 3, — горизонтальная составляющая \vec{H} -вектора, равного $\vec{H} = \vec{\xi} + \vec{\xi}_n$.

Применяя к треугольнику ABO_n теорему синусов (см. рис. 76, б), получим

$$\frac{\sin \tau}{\sin (90^\circ - \chi)} = \frac{|\vec{\xi}|}{AO_n}.$$

Так как $AO_n = \cos \mu$, то

$$|\vec{\xi}| \cos \chi = \cos \mu \sin \nu,$$

откуда

$$V = \omega \cos \nu \cos \mu \sin \tau. \quad (115б)$$

Таким образом, фактор Лоренца оказывается равным

$$L = \frac{1}{\cos \nu \cos \mu \sin \tau}. \quad (116)$$

Как видно, для экваториальной плоскости, где $\tau = 2\theta_0$, и перпендикулярного падения первичного пучка на ось вращения соотношение (116) совпадает с (115).

Найдем, чему будет равна удельная мощность Q в случае поликристалла.

Для облегчения вычислений снова введем ромбический базис $\{\vec{b}_i\}$, в котором \vec{b}_3 направлено вдоль рассматриваемого дифракционного вектора; индекс r в дальнейшем можно опустить как несущественный.

Очевидно, что при подсчете Q мы вместо сферы радиусом $|\vec{H}|$ должны взять сферический слой со средним радиусом $|\vec{H}|$, толщина которого определяется областью существования функции

$$\frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2},$$

как это изображено на рис. 77.

Пересечение сферического слоя со сферой Эвальда приводит к появлению дифракционного максимума в виде конуса, профиль

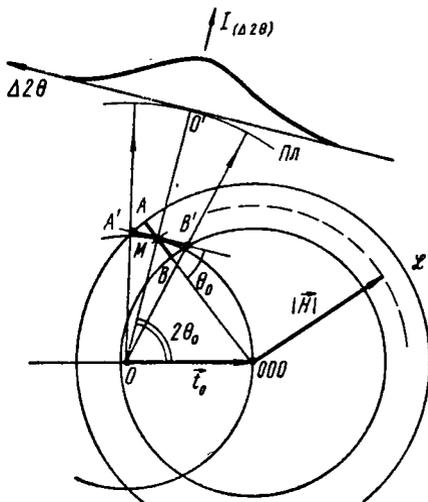


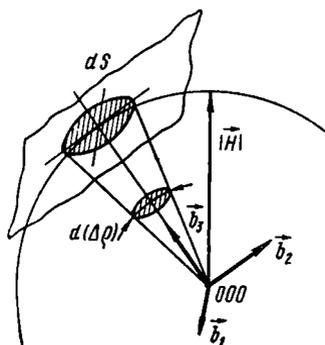
Рис. Фактор Лоренца в способе порошка.

Форма дифракционного максимума $I(\Delta 2\theta)$ для случая, когда область существования \mathcal{E} является сферическим слоем толщиной AB

интенсивности которого $I'(\Delta 2\theta)$ изображен на рис. 77. Эту функцию $I'(\Delta 2\theta)$ можно получить, работая счетчиком с узкой щелью в режиме 2θ -сканирования либо фотометрируя при помощи денситометра с узкой щелью рентгеновскую линию на пленке. Хотя при этом происходит изменение только одной координаты $\Delta 2\theta$, оказывается, что интеграл

$$\int I'(\Delta 2\theta) d\Delta 2\theta$$

дает значение интегральной интенсивности, так как интегрирование по двум координатам h_1 и h_2 происходит за счет свертки интерференционной функции $I(h_1, h_2, \Delta h_3)$ с функцией распределения по разориентировкам, равной



$$\varphi(\Delta\rho) = \frac{1}{4\pi} \mathbf{1}(\Delta\rho).$$

Для того чтобы перейти от координаты $\Delta\rho$ к координатам h_1 и h_2 , достаточно принять во внимание, что плоскость, в которой измеряются h_1 и h_2 , касательна к поверхности сферы радиуса $|\vec{H}|$ (рис. 78), так что

Рис. 78. К расчету телесного угла $d\Delta\rho$

$$d\Delta\rho = \frac{dS}{|\vec{H}|^2} = \frac{|\vec{b}_1||\vec{b}_2| dh_1 dh_2}{|\vec{H}|^2}.$$

Таким образом, распределение интенсивности в максимуме, вычисленное как свертка функции интенсивности $I(h_1, h_2, \Delta h_3)$ с постоянной функцией $1/4\pi \mathbf{1}(\Delta\rho)$, будет равно

$$\begin{aligned} I'(\Delta 2\theta) &= I(h_1, h_2, \Delta h_3) \oplus \frac{1}{4\pi} \mathbf{1}(\Delta\rho) = \\ &= \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 \rho P \frac{|\vec{b}_1||\vec{b}_2|}{4\pi |\vec{H}|^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \pi N_1 h_1 \sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_1)^2 (\pi h_2)^2} dh_1 dh_2, \end{aligned} \quad (117)$$

причем при вычислении свертки учтено свойство (13).

В выражение (117) введен фактор повторяемости ρ , смысл которого рассматривался в п. 2. В итоге соотношении (117) дает

$$I'(\Delta 2\theta) = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 \rho P \frac{|\vec{b}_1||\vec{b}_2| N_1 N_2}{4\pi |\vec{H}|^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2}. \quad (117a)$$

Выражение (117a) показывает, что при 2θ -сканировании счетчиком с узкой щелью либо при использовании неподвижной

пленки, расположенной так, как это показано на рис. 77, регистрируется распределение интенсивности, зависящее только от координаты Δh_3 , измеряемой вдоль дифракционного вектора, т. е. вдоль отрезка AB . Зависимость от h_1 и h_2 исчезла из-за выполнения свертки (117).

Так как

$$M'A' = \Delta 2\theta \cdot 1;$$

$$M'A = |\vec{b}_3| \Delta h_3;$$

$$M'A' = \frac{M'A}{\cos \theta_0},$$

то связь между координатой на пленке $\Delta 2\theta$ и координатой вдоль h -вектора Δh_3 задается в виде

$$\Delta 2\theta = \frac{|\vec{b}_3| \Delta h_3}{\cos \theta_0}. \quad (118)$$

Здесь получилось в точности то же соотношение между $\Delta 2\theta$ и Δh_3 , что и при $\theta \div 2\theta$ -сканировании, однако при работе с поликристаллом поворот образца не обязателен, и если он и делается совместно с поворотом счетчика, то лишь для получения более контрастной дифракционной линии. При регистрации на пленку обычно неподвижны и образец и пленка.

С учетом соотношения (118) мощность ρ будет вычисляться как

$$\rho = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 pP \frac{|\vec{b}_1| |\vec{b}_2| N_1 N_2}{4\pi |\vec{H}|^2} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2} \frac{|\vec{b}_3| d(\Delta h_3)}{\cos \theta_0},$$

что дает

$$\rho = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 \frac{v_b N P p}{16\pi \sin^2 \theta_0 \cos \theta_0}, \quad (119)$$

где $v_b = |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| |\vec{b}_3|$; $N = N_1 N_2 N_3$,

и учтено, что $|\vec{H}| = 2 \sin \theta_0$.

Вводя, как и ранее, число ячеек в единице объема n и используя соотношения

$$v_b = \lambda^3 n, \quad N = n \Delta V,$$

получим из формулы (119), что

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 n^2 p L P, \quad (119a)$$

где $L = \frac{1}{16\pi \sin^2 \theta_0 \cos \theta_0}$.

Интегральная мощность ρ и удельная мощность Q , записанные в форме (119) и (119а), соответствуют единице длины дифракционной окружности, расположенной на поверхности сферы Эвальда, т. е. на расстоянии единица от кристалла, в окрестностях точки M на рис. 77. При измерениях на пленке, отстоящей на расстоянии R от кристалла, т. е. в окрестностях точки O' , в формулы (119) и (119а) для мощности, приходящейся на единицу длины рентгеновской линии, нужно вводить множитель L , равный

$$L = \frac{1}{16\pi R \sin^2 \theta_0 \cos \theta_0}$$

Рассмотрим теперь, каким образом будет вычисляться величина Q в случае источника, находящегося внутри образца (метод расходящегося пучка).

Как было показано в п. 6, в этом случае множество $\{\vec{H}\}$ располагается по поверхности цилиндра с радиусом $OO_1 = \sin \eta$ (рис. 65); очевидно, такое множество может быть получено при помощи свертки функции $I(h_1, h_2, \Delta h_3)$ с функцией распределения по углу $\Delta\chi$, равной постоянной величине

$$\Phi(\Delta\chi) = \frac{1}{2\pi} \mathbb{1}(\Delta\chi).$$

Так как

$$d\Delta\chi = \frac{|\vec{b}_1| dh_1}{\sin \eta_0} = \frac{|\vec{b}_1| dh_1}{\cos \theta_0},$$

то свертка $I(h_1, h_2, \Delta h_3) \oplus \Phi(\Delta\chi)$ сводится к интегрированию по h_1 :

$$\begin{aligned} I'(h_2, \Delta h_3) &= I(h_1, h_2, \Delta h_3) \oplus \Phi(\Delta\chi) = \\ &= \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 P \frac{|\vec{b}_1| N_1}{2\pi \cos \theta_0} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2}. \end{aligned} \quad (120)$$

Свертка (120) получается за счет вариации вектора \vec{t}^0 , при которой он движется по поверхности конуса с углом при вершине $2\eta_0$ и центром в точке O (рис. 79). Для того чтобы обеспечить полную вариацию \vec{t}^0 в телесном угле 4π , достаточно на втором этапе варьировать вектор \vec{t}^0 в плоскости, образованной векторами \vec{b}_2 и \vec{b}_3 (рис. 80). При такой вариации \vec{t}_0 центр Фурье-образа будет двигаться по дуге aa' , являющейся частью окружности Эвальда, а область существования функции интенсивности будет последовательно пересекаться дугой bb' окружности Эвальда. В итоге

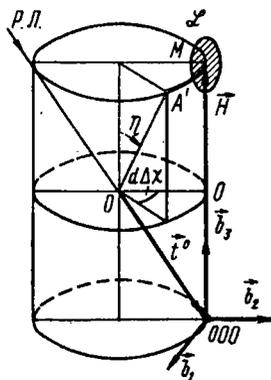


Рис. 79. Вариация угла $\Delta\chi$ в способе Косселя

вся область существования замечается окружностью Эвальда и площадь функции $I(\Delta\eta)$, получаемой на пленке, будет равна интегральной интенсивности.

Получение дифракционного максимума на пленке, расположенной так, как это изображено на рис. 80, обеспечивается вариацией вектора \vec{t}^0 в плоскости чертежа в пределах угла $2\Delta\eta$. Как видно, при такой вариации все центры Фурье-образов будут рас-

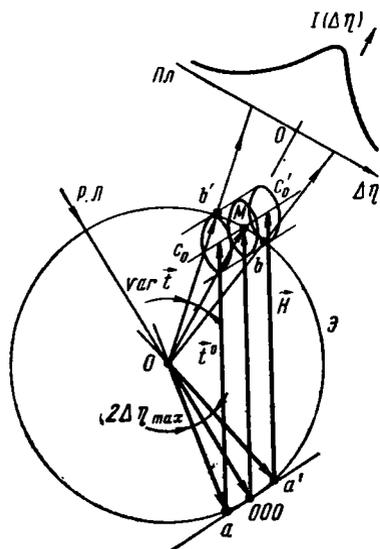


Рис. 80. Вариация \vec{t}^0 в вертикальной плоскости

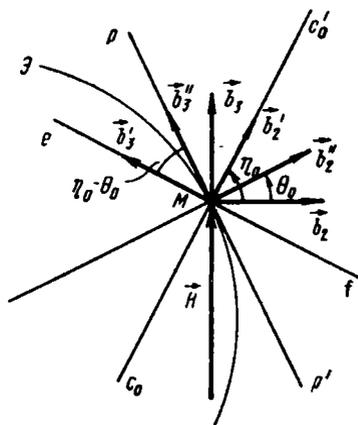


Рис. 81. Ориентировка базисных осей $\{\vec{b}_i\}$, $\{\vec{b}'_i\}$ и $\{\vec{b}''_i\}$ в Фурье-пространстве для описания дифракции в расходящемся пучке

полагаться на части окружности Эвальда aa' , а конец вектора \vec{H} , т. е. узел с координатами $\{h_i^0\}$, будет двигаться по дуге $c_0c'_0$, параллельной aa' . При этом на пленке будет регистрироваться профиль интенсивности $I(\Delta\eta)$. В точке O , отвечающей максимуму линии, т. е. значению $\Delta\eta = 0$, мы получим интенсивность в результате сканирования области \mathcal{L} вдоль дуги $c_0c'_0$, так как все точки этой дуги при движении узла 000 по пути aa' последовательно пройдут через точку M на сфере Эвальда. Точно так же любое значение $I(\Delta\eta)$ будет результатом сканирования области \mathcal{L} по соответствующей дуге cc' , параллельной aa' (см. рис. 100).

Таким образом, регистрируемый на пленке дифракционный максимум будет описываться как

$$I(\Delta\eta) = \int_{\text{по дугам } cc'} I'(h_2, \Delta h_3) |\vec{b}'_2| dh'_2, \quad (120a)$$

где $I'(h_2, \Delta h_3)$ равно (120), а расположение векторов $\{\vec{b}_i\}$, $\{\vec{b}'_i\}$, $\{\vec{b}''_i\}$ дано на рис. 81.

Фотометрируя при помощи денситометра функцию $I(\Delta\eta)$, полученную на пленке, мы можем найти ρ как

$$\rho = \int_{\Delta\eta} I(\Delta\eta) d\Delta\eta. \quad (121)$$

Вычисление функции (121) можно сильно облегчить, записав $I'(h_2, \Delta h_3)$ в виде (120)

$$I'_2(h_2) I'_3(\Delta h_3) = \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2}.$$

В этом случае сканирование области \mathcal{L} сферой Эвальда, приводящее к соотношению (121), сведется к отображению функций $I'_2(h_2)$ и $I'_3(\Delta h_3)$ на ось \vec{b}_3'' , касательную к сфере Эвальда в точке M , с соответствующим изменением масштаба только по оси абсцисс, равным

$$\left. \begin{aligned} \frac{|\vec{b}_2| h_2}{\vec{b}_3'' |\Delta h_3''} &= \frac{\cos(\eta_0 - \theta_0)}{\sin \eta_0} = 2 \cos \eta_0 = \kappa_2 |\vec{b}_2|; \\ \frac{|\vec{b}_3| \Delta h_3}{|\vec{b}_3'' |\Delta h_3''} &= \frac{\cos(\eta_0 - \theta_0)}{\cos \eta_0} = 2 \sin \eta_0 = \kappa_3 |\vec{b}_3|; \\ |\vec{b}_3'' |\Delta h_3'' &= \Delta\eta. \end{aligned} \right\} \quad (121a)$$

После отображения на ось \vec{b}_3'' получаемые функции надо свертывать, так как они обе будут зависеть от одной и той же координаты $\Delta\eta$:

$$I(\Delta\eta) = I'_2(\Delta\eta) \oplus I'_3(\Delta\eta),$$

Учитывая свойство (11) и масштабные множители (121a), получим

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{\Delta\eta} I(\Delta\eta) d\Delta\eta = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 P \frac{|\vec{b}_1| N_1}{2\pi \sin \eta_0} \times \\ &\times |\vec{b}_2| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2 2 \cos \eta_0} dh_2 |\vec{b}_3| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \pi N_3 \Delta h_3}{(\pi \Delta h_3)^2 2 \sin \eta_0} d\Delta h_3 = \\ &= \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 |F(\vec{H})|^2 P \frac{N v_b}{8\pi \cos^2 \theta_0 \sin \theta_0}, \end{aligned}$$

где $N = N_1 N_2 N_3$; $v_b = |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| |\vec{b}_3|$.

Это выражение получено для единицы длины косселевской линии, находящейся на расстоянии единица от центра кристалла (точка O).

Вводя, как обычно, $v_a = \lambda^3 v_b^{-1} = n^{-1}$, получим, что на расстоянии R от точки O удельная отражательная способность может быть

подсчитана по формуле

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 n^2 LP,$$

$$\text{где } L = \frac{1}{8\pi R \cos^2 \theta_0 \sin \theta_0}.$$

Выведем, наконец, выражение для Q в методе Лауэ.

Как мы могли убедиться в п. 2, распределение интенсивности в этом случае описывается функцией

$$I'(h_1, h_2) = I(h_1, h_2, \Delta h_3) \oplus \mathbf{1}(\Delta \lambda),$$

$$\text{где } \Delta \lambda = \lambda \frac{\Delta h_3}{h_3} \approx \frac{\lambda}{h_3^0} \Delta h_3 = \frac{\lambda |\vec{b}_3|}{2 \sin \theta_0} \Delta h_3.$$

Используя свойство (13), получим

$$I'(h_1, h_2) = \int_{-\infty}^{\infty} I(h_1, h_2, \Delta h_3) \frac{\lambda |\vec{b}_3|}{2 \sin \theta_0} d\Delta h_3. \quad (122)$$

Как видно из рис. 82, интегральная мощность ρ запишется в виде

$$\rho = \int_{\Delta \Omega} I'(h_1, h_2) d\Delta \Omega, \quad (122a)$$

где $\Delta \Omega$ — телесный угол, в котором интенсивность отлична от нуля.

$$\text{Так как } \Delta \Omega = \frac{S'}{r^2} = \frac{S}{\sin^2 \theta_0},$$

где S — поперечное сечение области существования \mathcal{L} функции (122),

$$\text{а } dS = |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| dh_1 dh_2,$$

то из формул (122) и (122a) получим, что

$$\rho = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 PN \frac{\lambda v_b}{2 \sin^2 \theta_0}$$

и

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(\vec{H})|^2 \lambda^3 n^2 LP, \quad (123)$$

$$\text{где } L = \frac{\lambda}{2 \sin^2 \theta_0}$$

Практическая ценность формулы (123) невелика, так как точное значение длины волны λ , соответствующей наблюдаемому максимуму, обычно остается неизвестным.

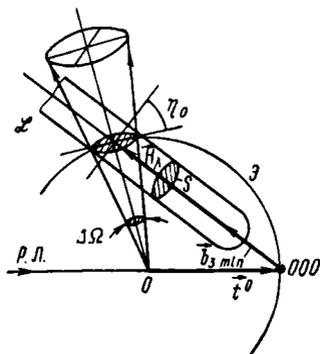


Рис. 82. Пересечение области \mathcal{L} со сферой Эвальда в способе Лауэ

ДИФРАКЦИЯ НА РЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

1. Искажения структуры первого и второго рода

Трансляционная периодичность кристалла, описываемая пространственной решеткой, является важнейшей его характеристикой, полностью определяющей расположение дифракционных максимумов в пространстве.

Что происходит с дифракционной картиной, если трансляционная периодичность кристалла нарушается? Для рассмотрения этой проблемы целесообразно ввести некоторую классификацию искажений, приводящих к нарушению идеальной трансляционной периодичности кристалла. Искажения первого рода не нарушают трансляционную периодичность кристалла «в среднем». Если для простоты рассматривать кристалл, содержащий всего один атом на ячейку, то в случае искажений первого рода положение атомов в различных ячейках одномерной решетки может быть изображено рис. 83.

Особенностью этого расположения является то, что малые смещения атома из «правильного» положения не зависят от того, на каком расстоянии находится этот атом от начала координат (точка O). Смещение атома из «правильного» положения, описываемого вектором $\vec{r}^{(0i)}$, может быть охарактеризовано вектором

$$\Delta \vec{r}^{(i)} = \vec{r}^{(i)} - \vec{r}^{(0i)},$$

где $\vec{r}^{(i)}$ — вектор, описывающий действительное положение атома.

Множество смещений $\{\Delta \vec{r}\}$ всех первых соседей любого из атомов кристалла может быть описано функцией распределения $\varphi_1(\Delta \vec{r})$; множество смещений всех вторых соседей — функцией $\varphi_2(\Delta \vec{r})$ и т. д. Очевидно, при наличии искажений первого рода все $\varphi_j(\Delta \vec{r})$ равны друг другу, и функция распределения, описывающая смещения всех соседей данного атома, может быть записана в виде

$$\Phi_1(\vec{r}) = \varphi(\Delta \vec{r}) \oplus \Psi(\vec{r}),$$

как это изображено на рис. 83.

Искажения 1-го рода возникают при тепловых колебаниях, а также при образовании твердых растворов замещения и внедре-

ния. В первом случае вместо атома матрицы на его место помещается атом другого сорта с несколько отличающимися размерами, во втором атом примеси внедряется в поры, образованные атомами матрицы. В том и другом случае возникает локальное возмущение, быстро затухающее по мере удаления от его центра, однако распределение этих возмущений по объему кристалла приводит к появлению искажений первого рода и сохранению дальнего порядка.

В случае искажений второго рода смещение $\Delta \vec{r}$ растет по мере удаления от точки O , так что область существования функции рас-

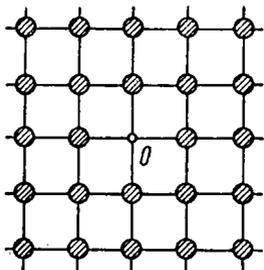


Рис. 83. Модель искажений первого рода и области существования функции распределения для смещений

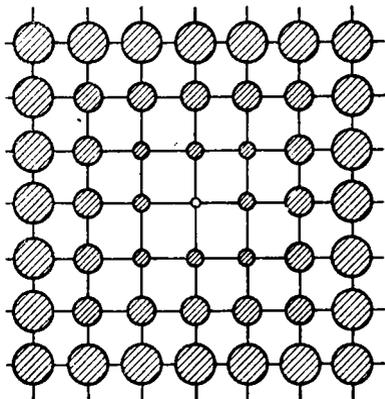


Рис. 84. Области существования функции распределения для искажений второго рода

пределения $\varphi_j(\Delta \vec{r})$ начиная с некоторого расстояния может превысить постоянную решетки; очевидно, в структуре при этом сохраняется только ближний порядок.

Таким образом, функция распределения для смещений будет записываться в виде

$$\Phi_2(\vec{r}) = \varphi_j(\Delta \vec{r}) \oplus \Pi(\vec{r}). \quad (124)$$

Ее область существования изображена на рис. 84.

Конечно, при помощи функций $\Phi_1(\vec{r})$ и $\Phi_2(\vec{r})$ нельзя описать все возможные типы нарушений структуры кристаллов. Отдельно должны быть рассмотрены деформационные искажения для случаев, когда в кристалле существует тензорное поле деформаций, разориентировки малых областей кристалла и разбиение кристалла на малые области, каждая из которых обладает «правильным» строением, но отделена от своих соседей «плохим» материалом. Все эти нарушения могут быть описаны в терминах дислокационных представлений.

2. Дифракция на кристалле с искажениями первого рода

Сохранение «в среднем» размеров R -решетки кристалла при наличии искажений первого рода сильно облегчает вычисление амплитуды дифрагированного излучения в кристалле с искажениями. В этом случае кристалл можно представить сложным из элементарных ячеек, каждая из которых находится на своем месте, т. е. там, где она была бы в кристалле без искажений. Размеры всех ячеек «в среднем» остаются также без изменений, но расположение атомов от ячейки к ячейке изменяется в соответствии с функцией распределения $\Phi_1(\vec{r})$.

Каждая из ячеек, отстоящая на расстоянии $R_u = u_i \vec{a}_i$ от начала отсчета, даст амплитуду

$$A_u(\vec{h}) = E_0 F_u(\vec{h}) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda} \cdot \vec{R}_u \right)}, \quad (125)$$

где через u обозначено множество $\{u_i\} = u_1, u_2, u_3$.

Структурная амплитуда $F_u(\vec{h})$ будет теперь изменяться от ячейки к ячейке в соответствии с конкретным расположением атомов в ячейке с координатами $\{u_i\}$; кроме того, без специального рассмотрения нет оснований заменять текущий вектор \vec{h} его средним значением \vec{H} , как это мы делали ранее, при работе с неискаженным кристаллом.

Учитывая соотношение (125), мы сразу можем записать выражение для интенсивности, рассеянной кристаллом, содержащим $N = N_1 N_2 N_3$ ячеек; как обычно, для облегчения расчетов всю работу будем вести в ромбическом базисе $\{\vec{r}_i\}$, отбрасывая в дальнейшем индекс r , т. е. полагая $\{\vec{r}_i\} = \{\vec{a}_i\}$:

$$\begin{aligned} I(\vec{h}) &= \sum_{\{u\}}^{(3)} \sum_{\{u'\}}^{(3)} A_u(\vec{h}) A_{u'}^*(\vec{h}) = \\ &= I_0 \sum_{u=0}^{N-1} \sum_{u'=0}^{N-1} F_u(\vec{h}) F_{u'}^*(\vec{h}) e^{-i2\pi \left[\frac{\vec{h}}{\lambda} \cdot (\vec{R}_u - \vec{R}_{u'}) \right]}. \end{aligned} \quad (125a)$$

Легко проверить, что в случае неискаженного кристалла из формулы (125a) получается стандартное выражение

$$I(\vec{h}) = I_0 |F(\vec{H})|^2 \prod_{j=1, 2, 3} \frac{\sin^2 \pi N_j h_j}{\sin^2 \pi h_j}, \quad (125b)$$

где для сокращения положено

$$\prod_{j=1, 2, 3} x_j = x_1 x_2 x_3.$$

Суммирование по координатам $\{u_i\}$ и $\{u'_i\}$ можно заменить суммированием по разности

$$u_i - u'_i = n_i$$

и по координатам $\{u'_i\}$, переписав формулу (125а) в виде

$$I(\vec{h}) = I_3 \sum_n \sum_{u'} F_{n+u'}(\vec{h}) F_{u'}^*(\vec{h}) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n\right)}, \quad (125в)$$

где

$$\vec{R}_n = n_i \vec{a}_i = \vec{R}_u - \vec{R}_{u'} = (u_i - u'_i) \vec{a}_i.$$

Удобно ввести среднее значение квадрата модуля структурной амплитуды $\langle |F(\vec{h})|^2 \rangle$ и обозначить $\langle F_{n+u'} F_{u'}^* \rangle = \langle |F_n(\vec{h})|^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle |F_n(\vec{h})|^2 \rangle &= \\ &= \frac{1}{N(n)} \sum_{u'} F_{n+u'}(\vec{h}) F_{u'}^*(\vec{h}) = C^\Delta(n, \vec{h}), \end{aligned} \quad (126)$$

где $N(n)$ — число слагаемых в $\sum_{u'}$.

В новых обозначениях соотношение (125в) примет вид

$$I(\vec{h}) = I_3 N \sum_n C^L(n) C^\Delta(n, \vec{h}) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n\right)} \quad (126а)$$

где вместо $N(n)$ введено

$$C^L(n) = \frac{N(n)}{N}.$$

Число слагаемых $N(n)$ в сумме $\sum_{u'} F_{n+u'} F_{u'}^*$ найти легко (рис. 85). Если кристалл содержит по направлению $[001]$ всего N_3 «средних» ячеек, то u'_3 может варьироваться от $u'_{3\min} = 0$ до значения $u'_{3\max}$, определяемого из соотношения $|n_3| + u'_{3\max} = N_3$, так как сумма $|n_3| + u'_{3\max}$ не может быть больше числа ячеек в кристалле, чтобы при суммировании по $n + u'$ не выйти за пределы кристалла.

Таким образом:

$$N(n) = u'_{\max} - u'_{\min} = N - |n|. \quad (127)$$

В формуле (127) надо брать абсолютное значение разности $|n|$; для трехмерного случая при работе в ромбическом базисе

$$C^L(n) = \left(1 - \frac{|n_1|}{N_1}\right) \left(1 - \frac{|n_2|}{N_2}\right) \left(1 - \frac{|n_3|}{N_3}\right). \quad (127а)$$

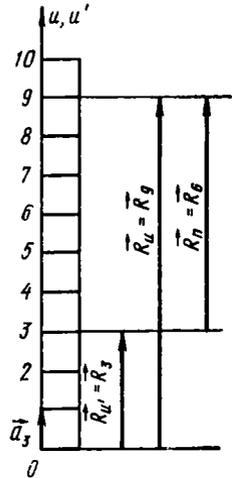


Рис. 85. К подсчету числа $N(n)$ в кристалле, состоящем из $N = 10$ ячеек. $N(6) = 4$, так как имеются четыре способа выбора вектора $\vec{R}_n = \vec{R}_6$ при $N = 10$: $6 = 10 - 4$; $6 = 9 - 3$; $6 = 8 - 2$ и $6 = 7 - 1$

Как видно, $C^L(n)$ непосредственно связана с числом ячеек в кристалле и, в конечном итоге, с размерами кристалла, что и подчеркивается индексом L . Функция $C^\Delta(n, \vec{h})$ отражает особенности структуры кристалла и, в частности, влияние смещений атомов из правильных положений.

Для кристалла без смещений $C^\Delta(n, \vec{h}) = |F(\vec{H})|^2$, и мы снова получаем из формулы (126а) выражение (125б).

Для более детального анализа выражения (126а) введем среднее значение структурной амплитуды, определенное для кристалла, содержащего N ячеек, как

$$\langle F(\vec{h}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_u F_u(\vec{h}),$$

и разность $\Delta F_u(\vec{h})$ между текущим значением амплитуды в ячейке с номером u и ее средним значением

$$\Delta F_u(\vec{h}) = F_u(\vec{h}) - \langle F(\vec{h}) \rangle. \quad (127б)$$

Вычисляя функцию $C^\Delta(n, \vec{h})$, получим из формулы (126)

$$C^\Delta(n, \vec{h}) = \langle (\langle F \rangle + \Delta F_{n+u'}) (\langle F^* \rangle + \Delta F_{u'}^*) \rangle. \quad (128)$$

Так как по определению (127б) $\langle \Delta F_u \rangle = 0$, то из соотношения (128) получим

$$C^\Delta(n, \vec{h}) = |\langle F(\vec{h}) \rangle|^2 + \Phi^\Delta(n, \vec{h}), \quad (128а)$$

где

$$\Phi^\Delta(n, \vec{h}) = \langle \Delta F_{n+u'}(\vec{h}) \Delta F_{u'}^*(\vec{h}) \rangle. \quad (128б)$$

Теперь можно переписать формулу (126а) в виде

$$I(\vec{h}) = I_3 N \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^L(n) |\langle F(\vec{h}) \rangle|^2 e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n \right)} + I_3 N \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^L(n) \Phi^\Delta(n, \vec{h}) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n \right)} \quad (129)$$

Хотя в объекте конечных размеров n не может быть равно бесконечности, выражение (129) записано как обычный ряд Фурье, в котором n принимает значение $(-\infty, \infty)$.

Легко видеть, что такая форма записи может быть принята потому, что начиная с некоторых n коэффициенты $C^L(n)$ становятся равными нулю, если только кристалл имеет конечные размеры.

Так как в отсутствие искажений $|\langle F(\vec{h}) \rangle|^2 = |F(\vec{H})|^2$, то первый член в формуле (129) дает множество обычных брегговских максимумов, описываемых выражением (125а). Второй член в формуле (129) зависит от нарушений идеальной структуры.

Для того чтобы облегчить анализ выражения

$$I_2(\vec{h}) = I_3 N \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^L(n) \Phi^\Delta(n, \vec{h}) e^{-i2\pi(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n)} \quad (129a)$$

примем, что $\Phi^\Delta(n, \vec{h}) = \Phi^\Delta(n)$.

Если рассматривать распределение интенсивности вблизи брегговского максимума, т. е. вблизи точки с координатами $\{h_i^0\}$, то удобно ввести переменную $\Delta\vec{h}$; при работе в ромбическом базисе, когда \vec{b}_3 направлено вдоль \vec{h} , вектор

$$\Delta\vec{h} = \vec{h} - \vec{H}$$

будет иметь координаты $\Delta h_1 = h_1$, $\Delta h_2 = h_2$ и $\Delta h_3 = h_3 - h_3^0$, так как $h_1^0 = h_2^0 = 0$ (рис. 32).

Запишем $I_2(\Delta\vec{h})$ в виде интеграла Фурье:

$$I_2(\Delta\vec{h}) = I_3 N \int_{-\infty}^{\infty} C^L(n) \Phi^\Delta(n) e^{-i2\pi(\frac{\Delta\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n)} dn_1 dn_2 dn_3, \quad (129б)$$

рассматривая теперь $\{n_i\}$ не как целочисленные номера ячеек в объекте, а как текущие координаты в пространстве объекта.

Переписывая интеграл (129б) в виде

$$I_2(\Delta\vec{h}) = I_3 N \widehat{\mathcal{F}}[C^L(n) \Phi^\Delta(n)] = I_3 N \widehat{\mathcal{F}}[C^L(n)] \oplus \widehat{\mathcal{F}}[\Phi^\Delta(n)]$$

и используя табл. 1, получим отсюда

$$I_2(\Delta\vec{h}) = I_3 \prod_{j=1, 2, 3} \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2} \oplus \widehat{\mathcal{F}}[\Phi^\Delta(n)]. \quad (130)$$

Как видно, функция интенсивности $I_2(\Delta\vec{h})$ является сверткой профиля вида $(\pi \Delta h)^{-2} \sin^2 \pi N \Delta h$, описывающего влияние формы и размеров кристалла, с функцией $\widehat{\mathcal{F}}[\Phi^\Delta(n)]$, описывающей искажения в кристалле. Не обращая пока внимания на размеры кристалла, положим в формуле (130) $C^L(n) = \mathbf{1}(n)$, что соответствует неограниченному кристаллу, для которого $N \rightarrow \infty$.

В этом случае, согласно п. 2 гл. I:

$$\prod_{j=1, 2, 3} \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2} \rightarrow N \delta(\Delta\vec{h}),$$

и формула (130) дает возможность получить влияние искажений в чистом виде:

$$I_2(\Delta\vec{h}) = I_3 N \widehat{\mathcal{F}}[\Phi^\Delta(n)]. \quad (130a)$$

Теперь легко рассмотреть различные типы искажений, могущие встретиться в кристалле. Если корреляция между смещениями атомов отсутствует, то $\Phi^\Delta(n)$ будет отлично от нуля только при $n = 0$, т. е. когда усреднение происходит только по данной ячейке.

Иначе говоря, при отсутствии корреляции функция $\Phi^\Delta(n)$ должна быть дельта-функцией веса $\Phi^\Delta(0)$:

$$\Phi^\Delta(n) = \Phi^\Delta(0) \delta(n),$$

так что интенсивность $I_2(\Delta\vec{h})$ будет равна

$$I_2(\Delta\vec{h}) = I_3 N \Phi^\Delta(0), \quad (130б)$$

т. е. на рентгенограмме вдобавок к брегговским максимумам (125б) появится постоянный фон (130б), величину которого можно легко вычислить.

Учитывая соотношение (128а), получим

$$C^\Delta(0) = |\langle F \rangle|^2 + \Phi^\Delta(0),$$

а так как по формуле (126)

$$C^\Delta(0) = \langle |F_0|^2 \rangle,$$

то $\Phi^\Delta(0) = \langle |F_0|^2 \rangle - |\langle F \rangle|^2$.

Здесь F_0 — структурная амплитуда элементарной ячейки при $n = 0$.

При полной корреляции $\Phi^\Delta(n)$ должна быть постоянной независимо от того, на каком расстоянии находятся рассматриваемые ячейки в кристалле. Кристалл в этом случае может рассматриваться как идеальный, в котором атомы заняли новые правильные положения; очевидно, в этом случае $\widehat{\mathcal{F}}[\Phi^\Delta(n)]$ дает дельта-функцию и слагаемое $I_2(\Delta\vec{h})$ будет описывать обычный дельта-образный брегговский максимум типа (125б).

Очень важным для различных приложений представляется случай, когда функцию $\Phi^\Delta(n)$ можно представить в виде плоской волны вида

$$\Phi^\Delta(n) = \Phi_0 \cos(\vec{k}^\Delta, \vec{R}_n), \quad (131)$$

характеризуемой амплитудой Φ_0 и волновым вектором

$$\vec{k}^\Delta = \frac{2\pi}{\lambda^\Delta} \vec{i}^\Delta,$$

где \vec{i}^Δ — единичный вектор, нормальный к фронту волны; λ^Δ — длина «волны нарушения» в кристалле.

Так как \vec{t}^Δ задан в базисе $\{\vec{b}_i\}$, то

$$(\vec{k}^\Delta, \vec{R}_n) = 2\pi \frac{\lambda}{\lambda^\Delta} n$$

Обозначая $\frac{\lambda}{\lambda^\Delta} \vec{t}^\Delta = \Delta\vec{h}^\Delta$

и записывая формулу (131) в виде

$$\Phi^\Delta(n) = \Phi_0 \cos 2\pi \left(\frac{\Delta\vec{h}^\Delta}{\lambda}, \vec{R}_n \right), \quad (131a)$$

мы можем найти $I_2(\Delta\vec{h})$ из формул (130a) и (24) в виде

$$I_2(\Delta\vec{h}) = I_3 N \Phi_0 \frac{\delta(\Delta\vec{h} - \Delta\vec{h}^\Delta) + \delta(\Delta\vec{h} + \Delta\vec{h}^\Delta)}{2}. \quad (131b)$$

Таким образом, волна нарушения типа (131) приводит к появлению по обе стороны от конца \vec{H} -вектора двух дельта-максимумов, расположенных на расстоянии $\pm |\Delta\vec{h}^\Delta|$. Если в кристалле существует множество волн с векторами $\{\vec{k}^{\Delta(j)}\}$, то каждая волна дает вблизи конца \vec{H} -вектора два дельта-максимума, так что в итоге каждый брегговский максимум оказывается окруженным множеством пиков $I_{2j}(\Delta\vec{h})$, образующих «диффузный», т. е. сильно размытый максимум, в котором длинноволновые компоненты располагаются ближе к узлу $h_1^0 h_2^0 h_3^0$.

Во всех случаях, когда функцию корреляции $\Phi^\Delta(n)$ можно представить в виде суперпозиции плоских волн, т. е. в виде ряда Фурье, вокруг брегговского максимума появляется размытый «диффузный» пик, периферийные области которого обусловлены коротковолновыми, а центральные — длинноволновыми компонентами ряда Фурье.

3. Влияние тепловых колебаний на дифракцию

Одной из важнейших причин возникновения искажений первого рода в кристалле являются тепловые колебания. Наибольшие частоты в спектре тепловых колебаний твердого тела обычно на шесть порядков меньше частоты электромагнитных колебаний в рентгеновском диапазоне, и поэтому доплеровским эффектом при взаимодействии электромагнитной волны с колеблющимся атомом можно пренебречь.

Учет корреляций между колебаниями отдельных атомов позволяет обнаружить эффекты диффузного рассеяния, возникающие при дифракции. Как известно, при любой температуре колебания атомов кристалла можно описать при помощи упругих волн смещения.

Если рассматривать кристалл, содержащий один атом на элементарную ячейку, то понятия структуры и решетки совпадают, и в этом случае вместо того, чтобы говорить о колебаниях атомов, часто говорят о колебаниях решетки.

В простейшем случае кристалла, содержащего N ячеек и, следовательно, N атомов, спектр колебаний кристалла будет содержать $3N$ различных колебаний. В случае упруго-изотропной среды N колебаний будут продольными и $2N$ — поперечными. Для кристалла неограниченных размеров волны смещения будут бегущими, для кристалла конечных размеров — стоячими, так как на гранях кристалла смещения атомов должны быть равны нулю.

Это обстоятельство сразу позволяет установить, что наибольшая длина стоячей волны должна быть равна $2L$, где L — размер кристалла по направлению единичного вектора рассматриваемой волны \vec{t}_ϕ . Равным образом, спектр колебаний со стороны наименьших длин волн должен обрываться при значениях $\lambda_{\phi \min} = 2|\vec{a}|$, или, иначе говоря, полуволна коротковолновой компоненты не может быть меньше, чем расстояние между ближайшими атомами в кристалле, колеблющимися в этом крайнем случае в противофазе.

Если ячейка содержит n атомов, то спектр колебаний будет состоять из $3nN$ компонент, причем N атомов каждого сорта снова дадут систему из N продольных и $2N$ поперечных колебаний.

В упруго-анизотропных кристаллах колебания будут несколько отличаться от чисто продольных и чисто поперечных и тем сильнее, чем больше упругая анизотропия.

Рассматривая, как и ранее, кристалл с одним атомом в элементарной ячейке, мы можем записать выражение для структурной амплитуды ячейки, отстоящей на расстоянии \vec{R}_u от начала координат, в виде

$$F_u = f e^{-i2\pi\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \Delta\vec{R}_u\right)}, \quad (132)$$

где $\vec{\Delta R}_u$ — смещение рассматриваемой ячейки из правильного положения.

В этом выражении учтено только искажающее влияние отклонения от правильного положения $\Delta\vec{R}_u$; то, что ячейка номера u находится на расстоянии \vec{R}_u от начала координат, уже учтено в основной формуле (125) множителем

$$\exp - i2\pi\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_u\right).$$

Для вычисления (F) необходимо задать функцию распределения для смещений ΔR_u . Так как изменение фазы в формуле (132)

зависит только от проекции вектора $\Delta \vec{R}_u$ на вектор \vec{h} , введем угол α между $\Delta \vec{R}_u$ и \vec{h} , так что

$$\left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \Delta \vec{R}_u \right) = \frac{|\vec{h}|}{\lambda} |\Delta \vec{R}_u| \cos \alpha.$$

Обозначив $|\Delta \vec{R}_u| \cos \alpha = v$, запишем функцию распределения для v в виде

$$\varphi(v) = (2\pi \langle v^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} \exp -\frac{v^2}{2 \langle v^2 \rangle},$$

после чего среднее значение структурной амплитуды может быть найдено как

$$\langle F \rangle = f \int_{-\infty}^{\infty} (2\pi \langle v^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-i2\pi \frac{|\vec{h}|}{\lambda} v} e^{-\frac{v^2}{2 \langle v^2 \rangle}} dv = f e^{-M},$$

где $M = \frac{2\pi^2}{\lambda^2} \langle v^2 \rangle |\vec{h}|^2$.

Для нахождения функции $\Phi^\Delta(n)$ необходимо сначала вычислить по формуле (127б) $\Delta F_{n+u'}$ и $\Delta F_{u'}$. Используя формулу (132), получим

$$\Delta F_u = f \left(e^{-i2\pi v_u \frac{|\vec{h}|}{\lambda}} - e^{-2\pi^2 \langle v^2 \rangle \frac{|\vec{h}|^2}{\lambda^2}} \right).$$

Сохраняя в этом выражении только члены, содержащие v_u и $\lambda^{-1} |\vec{h}|$ в нулевой и первой степени, мы можем записать его в виде

$$\Delta F_u = -i f e^{-M} 2\pi v_u \frac{|\vec{h}|}{\lambda}.$$

Теперь $\Phi^\Delta(n)$ может быть вычислено как

$$\begin{aligned} \Phi^\Delta(n) &= \langle \Delta F_{n+u'} \Delta F_{u'}^* \rangle = \\ &= \frac{4\pi^2}{\lambda^2} f^2 e^{-2M} \cos^2 \alpha |\vec{h}|^2 \langle |\Delta \vec{R}_{n+u'}| |\Delta \vec{R}_{u'}| \rangle, \end{aligned} \quad (133)$$

где усреднение ведется по индексу u'

Формула (133) может быть применена к анализу любых процессов, связанных со смещением элементарных ячеек из правильных положений, если только «средняя» \vec{R} -решетка остается без изменений.

В случае тепловых колебаний множество смещений $\{\Delta \vec{R}_u\}$ описывается волной смещений

$$\Delta \vec{R}_u = \vec{A} \cos(\vec{k}^\Delta \cdot \vec{R}_u), \quad (133a)$$

так что

$$\langle |\Delta \vec{R}_{n+u'}| |\Delta \vec{R}_{u'}| \rangle = |\vec{A}|^2 \langle \cos(\vec{k}^\Delta, R_{n+u'}) \cos(\vec{k}^\Delta, \vec{R}_{u'}) \rangle. \quad (134)$$

Для отыскания среднего значения произведения косинусов можно записать каждый из сомножителей в виде

$$\cos(\vec{k}, \vec{R}) = \frac{1}{2} [\exp -i(\vec{k}, \vec{R}) + \exp i(\vec{k}, \vec{R})] \quad (134a)$$

и учесть, что $\vec{R}_{n+u'} = \vec{R}_n + \vec{R}_{u'}$.

Так как усреднение по u' и по $n + u'$ должно давать нуль, то в формуле (134) останется только член, не зависящий от u' :

$$\langle |\Delta \vec{R}_{n+u'}| |\Delta \vec{R}_{u'}| \rangle = \frac{1}{2} \cos(\vec{k}^\Delta, \vec{R}_n).$$

В итоге получим из формул (134) и (134a)

$$\Phi^\Delta(n) = \frac{2\pi^2}{\lambda^2} f^2 e^{-2M} |\vec{h}|^2 |\vec{A}|^2 \cos^2 \alpha \cos(\vec{k}^\Delta, \vec{R}_n). \quad (135)$$

Как видно, в случае тепловых колебаний корреляционная функция, описывающая волну нарушений, имеет вид

$$\Phi^\Delta(n) = \Phi_0 \cos(\vec{k}^\Delta, \vec{R}_n),$$

$$\text{где } \Phi_0 = \frac{2\pi^2}{\lambda^2} f^2 e^{-2M} |\vec{h}|^2 |\vec{A}|^2 \cos^2 \alpha. \quad (135a)$$

В этом случае, как видно из соотношения (131b), вблизи точки с координатами $00h_3^0$ появляются два спутника, положение которых определяется векторами $\vec{H} \pm \Delta \vec{h}^\Delta = \vec{H} \pm \Delta \vec{h}_\Phi$, причем вектор $\Delta \vec{h}_\Phi$ необходимо определить как

$$\Delta \vec{h}_\Phi = \frac{\lambda}{\lambda_\Phi} \vec{t}_\Phi.$$

Так как $\langle v^2 \rangle = \frac{|A|^2}{2} \cos^2 \alpha$, то M в формуле (135) может быть записано в виде

$$M = \frac{\pi^2}{\lambda^2} |\vec{A}|^2 |\vec{h}|^2 \cos^2 \alpha.$$

Для оценки величины Φ_0 в формуле (135a) можно положить $|\vec{h}| = |\vec{H}| = 2 \sin \theta_0$, а также учесть, что в любой точке с координатами $(h_1, h_2, \Delta h_3)$ находятся концы трех компонент векторов $\Delta \vec{h}_\Phi$: одной продольной компоненты $\Delta h_{\Phi 3}$ и двух поперечных (или близких к поперечным) $\Delta h_{\Phi 1}$ и $\Delta h_{\Phi 2}$, причем каждая из ком-

Коэффициент относится к различным векторам $\Delta \vec{h}_\Phi$, так что вместо $|\vec{A}|^2 \cos^2 \alpha$ в формуле (135) должно стоять выражение

$$s = \sum_{i=1}^3 A_i^2 \cos^2 \alpha_i; \quad A = |\vec{A}|.$$

Грубую оценку амплитуды A_i можно провести, приравняв полную энергию атома, совершающего гармонические колебания с частотой ω_i , тепловой энергии kT :

$$kT = \frac{1}{2} \omega_i A_i^2 m,$$

где m — масса атома.

В этом случае

$$s = \frac{2kT}{m} \sum_i \frac{\cos^2 \alpha_i}{\omega_i^2}.$$

Вводя для трех колебаний, соответствующих точке $(h_1, h_2, \Delta h_3)$, общую длину волны

$$\lambda_\Phi = 2\pi \frac{v_i}{\omega_i},$$

мы можем переписать формулу (135a) в виде

$$\Phi_0 = f^2 e^{-2M} \frac{|\vec{H}|^2}{|\Delta \vec{h}_\Phi|^2} \frac{kT}{m} \sum_i \frac{\cos^2 \alpha_i}{v_i^2}.$$

Если в кристалле имеет место множество длин волн $\{\lambda_\Phi^r\}$, то соответственно появится множество векторов $\{\Delta \vec{h}_\Phi^r\}$, причем каждой паре векторов $\pm \Delta \vec{h}_\Phi^r$ будет соответствовать коэффициент Φ_0^r .

Рассматривая, как и ранее, распределение интенсивности $I(\Delta \vec{h})$ вблизи узла с координатами $(0, 0, \Delta h_3)$, получим из формулы (129)

$$I(\Delta \vec{h}) = I_3 N |\langle F \rangle|^2 \widehat{\mathfrak{F}}[C^L(n)] + I_3 N \widehat{\mathfrak{F}}[C^L(n) \Phi^A(n)].$$

Так как

$$\widehat{\mathfrak{F}}[C^L(n)] = \frac{1}{N} \prod \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2},$$

то первое слагаемое

$$I_1(\Delta \vec{h}) = I_3 |\langle F \rangle|^2 \prod \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2}$$

описывает обычный брегговский максимум, высота которого в точке $(0, 0, h_3^0)$ равна $I_3 |\langle F \rangle|^2 N^2$.

Второе слагаемое, равное

$$I_2(\vec{\Delta h}) = I_3 \langle F \rangle^2 \prod \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2} \frac{|\vec{H}|^2}{|\vec{\Delta h}_\Phi|^2} \times \\ \times \frac{kT}{m} \sum_i \frac{\cos^2 \alpha_i^r}{v_i^2} \oplus [\delta(\vec{\Delta h} - \vec{\Delta h}_\Phi^r) + \delta(\vec{\Delta h} + \vec{\Delta h}_\Phi)],$$

описывает «диффузный» максимум.

Как видно, каждому вектору $\pm \vec{\Delta h}_\Phi^r$ соответствует дельта-образный пик, высота максимума которого в этой точке равна

$$I_3 \langle F \rangle^2 N^2 \frac{|\vec{H}|^2}{|\vec{\Delta h}_\Phi^r|^2} \frac{kT}{m} \sum_i \frac{\cos^2 \alpha_i^r}{(v_i^2)^2}. \quad (136)$$

Множитель $\frac{1}{2}$, имевшийся в формуле (134а), сейчас исчез, так как в действительности каждому вектору \vec{k}^Δ и, следовательно, каждому вектору $\vec{\Delta h}_\Phi^r$ соответствует не бегущая, а стоячая волна, получающаяся в результате суперпозиции двух волн с векторами \vec{k}^Δ и $-\vec{k}^\Delta$, что и приводит к удваиванию интенсивности по сравнению со случаем одной бегущей волны.

Характерной особенностью рассмотренных искажений, описываемых плоскими волнами, является появление множителя e^{-2M} как у береговского, так и у диффузного пика, а также появление множителя $|\vec{H}|^2$ у диффузного максимума (136). Совместное влияние множителей e^{-2M} и $|\vec{H}|^2$ приводит к тому, что диффузные эффекты оказываются равными нулю при $|\vec{H}| = 0$, затем возрастают с ростом $|\vec{H}|$ и снова начинают убывать, когда при больших $|\vec{H}|$ влияние множителя e^{-2M} перекрывает влияние множителя $|\vec{H}|^2$.

Выражение (136) позволяет исследовать анизотропию тепловых колебаний и скорость распространения упругих волн в кристалле по различным направлениям.

4. Влияние деформационных искажений и поворотов, вызванных разориентировками, на береговские максимумы

В предыдущих параграфах рассматривалось влияние искажений первого рода на диффузный фон. Экспериментальная процедура, связанная с анализом диффузного фона, весьма сложна, так как требует отделения истинного фона от фона, вызванного комптоновским рассеянием, излучением флюоресценции, немонохроматичностью падающего на образец излучения, рассеянием в воздухе и т. п.

Обширную информацию об искажениях структуры можно получить, работая с брегговскими максимумами; из-за того, что интенсивность этих максимумов, по крайней мере, на два порядка больше, чем интенсивность фона, требования к экспериментальной технике оказываются менее жесткими.

Рассмотрим прежде всего деформационные искажения, связанные с тем, что в кристалле задано некоторое тензорное поле \hat{e} , под действием которого происходит смещение элементарных ячеек из правильных положений. На этом этапе рассмотрения мы можем не интересоваться тем, что происходит внутри элементарной ячейки, полагая, что эти эффекты могут быть в принципе учтены способами, описанными в п. 2.

Пусть в исходном состоянии положение ячейки описывается вектором \vec{R}_u , а в кристалле с искажениями — вектором

$$\vec{r}_u = \vec{R}_u + \Delta\vec{R}_u.$$

Если две ячейки разделены между собой вектором

$$\vec{R}_n = \vec{R}_u - \vec{R}_{u'} = \vec{R}(n),$$

то в искаженном состоянии их будет разделять вектор $\vec{r}_{u'} - \vec{r}_u$, равный

$$\vec{r}_u - \vec{r}_{u'} = \vec{R}_n + \Delta\vec{R}_n,$$

где $\Delta\vec{R}_n = \Delta\vec{R}_u - \Delta\vec{R}_{u'} = \Delta\vec{R}(n)$.

Для характеристики поля искажений достаточно установить связь между $\Delta\vec{R}(n)$ и $\vec{R}(n)$; очевидно, в линейном приближении эта связь должна выглядеть как

$$\Delta\vec{R}(n) = \hat{e}\vec{R}(n), \quad (137)$$

где \hat{e} — тензор второго ранга, так что компоненты вектора $\Delta\vec{R}(n) = (\Delta R_1, \Delta R_2, \Delta R_3)$ могут быть найдены при помощи компонент тензора \hat{e} :

$$\Delta R_i(n) = e_{ij}R_j(n). \quad (137a)$$

Любой тензор второго ранга может быть представлен в виде суммы симметричного $\hat{\varepsilon}$ и асимметричного $\hat{\omega}$ тензоров второго ранга

$$\hat{e} = \hat{\varepsilon} + \hat{\omega}, \quad (137б)$$

$$\text{где } e_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}) \quad (137в)$$

$$\text{и } \omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}). \quad (137г)$$

Схема, изображенная на рис. 86, позволяет, воспользовавшись формулой (137), выяснить смысл компонент тензора $\hat{\epsilon}$: диагональные компоненты $e_{i,i}$ описывают растяжение или сжатие вдоль соответствующих осей 1, 2, 3, а недиагональные — повороты вокруг соответствующих осей. В правой системе координат компонента e_{32} соответствует повороту вокруг оси 1 против часовой стрелки на угол e_{32} (рис. 86):

$$e_{32} = \frac{\Delta R_3}{R_2}.$$

Рис. 86 иллюстрирует смысл введения тензоров $\hat{\epsilon}$ и $\hat{\omega}$: при чистом сдвиге все компоненты тензора $\hat{\omega}$ равны нулю, при чистом

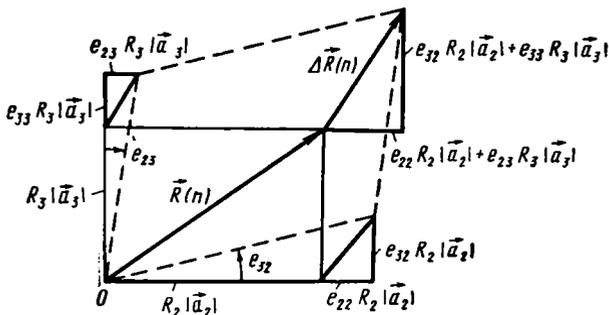


Рис. 86. К анализу поля деформаций в сплошной среде

повороте равны нулю все компоненты тензора $\hat{\epsilon}$. Таким образом, собственно деформации соответствует тензор $\hat{\epsilon}$, в котором диагональные компоненты описывают растяжения (сжатия), а недиагональные — сдвиги.

Как видно из определения (137в), тензор $\hat{\epsilon}$ является симметричным, т. е. для него $e_{ij} = e_{ji}$.

Тензор $\hat{\omega}$ описывает чистое вращение; как видно из соотношений (137г), диагональные компоненты этого тензора равны нулю, а сам тензор является антисимметричным:

$$\omega_{ij} = -\omega_{ji}.$$

В соответствии с теорией, развитой в п. 2, для учета влияния смещений элементарных ячеек на дифракционную картину необходимо найти значение функции $C^\Delta(n, \vec{h})$, равной

$$C^\Delta(n, \vec{h}) = \langle F_{n+u} F_u^* \rangle.$$

Так как мы собираемся анализировать дифракционную картину вблизи брегговского максимума, то достаточно положить $\vec{h} = \vec{H}$, так что снова

$$C^\Delta(n, \vec{h}) = C^\Delta(n).$$

Для упрощения расчетов целесообразно работать в ромбическом базисе $\{\vec{a}_i\}$ и $\{\vec{b}_i\}$, опуская в дальнейшем индекс r .

В этом случае $\vec{H} = (0, 0, h_3^0)$.

Для ячейки номера u , смещенной из своего правильного положения на вектор $\Delta\vec{R}_u$, получим

$$F_u = F_0 e^{-i2\pi\left(\frac{\vec{H}}{\lambda} \cdot \Delta\vec{R}_u\right)}$$

где $F_0 = F$ — структурная амплитуда несмещенной ячейки.

Вычисляя $C^\Delta(n)$, будем иметь

$$C^\Delta(n) = |F|^2 \left\langle e^{-i2\pi\left[\frac{\vec{H}}{\lambda} \cdot \Delta\vec{R}(n)\right]} \right\rangle, \quad (138)$$

где $\Delta\vec{R}(n) = \Delta\vec{R}_{n+u} - \Delta\vec{R}_u$.

Выражение (138) можно упростить, пользуясь записью \vec{H} в ромбическом базисе; если $\Delta\vec{R}(n) = (\Delta R_1, \Delta R_2, \Delta R_3)$ в этом базисе, то

$$C^\Delta(n) = |F|^2 \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \Delta R_3} \right\rangle. \quad (138a)$$

Проекцию вектора смещения на ось \vec{a}_3 , совпадающую по направлению с \vec{b}_3 , и, следовательно, с \vec{H} , можно легко найти из формулы (137a).

Зададим единичный вектор \vec{e}'_3 , равный

$$\vec{e}'_3 = (e'_1, e'_2, e'_3) = \frac{\vec{R}}{|\vec{R}|} = \frac{\vec{a}_3}{|\vec{a}_3|},$$

где $\{e'_i\}$ — косинусы углов, образуемых вектором \vec{e}'_3 с осями ортонормированного базиса $\{\vec{e}_i\}$, в котором определены компоненты тензора \hat{e} .

Проекцию $\Delta R_3(n)$ представим в виде комбинации компоненты ΔR_3^g , связанной с чистой деформацией, и компоненты ΔR_3^o , связанной с чистым поворотом.

В соответствии с формулами (137) и (137b)

$$\Delta R_3(n) = \Delta R_3 = \Delta R_3^g + \Delta R_3^o,$$

так что $C^\Delta(n)$ может быть записан в виде

$$C^\Delta(n) = |F|^2 C^\varepsilon(n) C^\omega(n), \quad (139)$$

$$\text{где } C^\varepsilon(n) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \Delta R_3^\varepsilon} \right\rangle \quad (139a)$$

$$\text{и } C^\omega(n) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \Delta R_3^\omega} \right\rangle. \quad (139b)$$

В итоге общее выражение (126a) примет вид

$$I(\vec{h}) = I_3 N |F|_3^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^L(n) C^\varepsilon(n) C^\omega(n) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda} \cdot \vec{R}_n \right)} \quad (140)$$

Рассмотрим сначала влияние тензорного поля деформации $\hat{\varepsilon}$.

Компонента ΔR_3^ε равна деформации, определенной по направлению \vec{e}_3' , умноженной на компоненту R_3 :

$$\Delta R_3^\varepsilon = \varepsilon(\vec{e}_3') R_3.$$

Так как $\vec{R}_n = n_i \vec{a}_i$, то компонента $R_3 = n_3$.

Деформация $\varepsilon(\vec{e}_3')$, равная относительному растяжению или сжатию столбика, состоящего из n_3 ячеек (рис. 87) длиной $n_3 |a_3|$, при неоднородной деформации будет зависеть от длины столбика, т. е. от базы, на которой она определяется:

$$\varepsilon(\vec{e}_3') = \varepsilon(n_3).$$

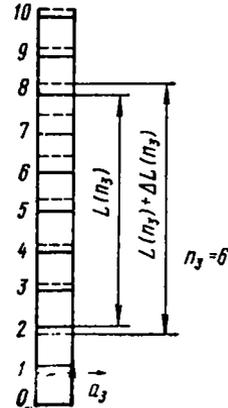


Рис. 87. Неоднородная деформация столбика с $N = 10$ ячейками. Для случая, изображенного на рисунке: $\varepsilon(n_3 = 6) = \Delta L(6)/L(6)$

Таким образом, под действием тензора деформаций $\hat{\varepsilon}$ в выражении (140) для $I(\vec{h})$ появится множитель

$$C^\varepsilon(n_3) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \varepsilon(n_3) n_3} \right\rangle. \quad (141)$$

Для вычисления $C^\varepsilon(n_3)$ нужно знать функцию распределения для деформаций $\varepsilon(n_3)$. При малых значениях $\varepsilon(n_3) n_3$ можно обойтись без знания функции распределения, разложив соотношение (141) в ряд и ограничившись первыми тремя членами:

$$C^\varepsilon(n_3) = 1 - i2\pi h_3^0 \langle \varepsilon(n_3) \rangle n_3 - 2\pi^2 (h_3^0)^2 \langle \varepsilon^2(n_3) \rangle n_3^2. \quad (141a)$$

Если, как и ранее, считать, что «в среднем» пространственная решетка не искажается, то $\langle \varepsilon(n_3) \rangle = 0$ и $C^\varepsilon(n_3)$ может быть записано в виде

$$C^\varepsilon(n_3) = e^{-2\pi^2 h_3^{02} \langle \varepsilon^2(n_3) \rangle n_3^2}. \quad (141b)$$

Легко видеть, что при задании функции распределения $\varphi[\varepsilon(n_3)]$ в виде «колокола» Гаусса

$$\varphi[\varepsilon(n_3)] = (2\pi \langle \varepsilon^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2 \langle \varepsilon^2 \rangle}}$$

мы при вычислении $C^\varepsilon(n_3)$ с помощью формулы (141) получим в точности выражение (141a) с той лишь разницей, что при этом не нужно будет накладывать ограничений на величину $\varepsilon(n_3) n_3$. Кстати говоря, разложение соотношения (141a) по малому параметру, позволяющее обойтись без знания функции распределения, могло быть использовано и ранее, при рассмотрении тепловых колебаний, где мы сразу задавали функцию распределения для смещений типа Гаусса.

Имея выражение для $C^\varepsilon(n_3)$, мы без труда можем разобраться в том, что будет происходить с брегговским максимумом при наличии в структуре деформаций, влияние которых учитывается функцией $C^\varepsilon(n_3)$, и отсутствии поля $\hat{\omega}$.

Используя соотношение (140), получим

$$I(\vec{h})^{L, \varepsilon} = I_3 N |F|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^L(n) C^\varepsilon(n_3) e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n \right)}$$

Если интересоваться распределением интенсивности около узла с координатами $(0, 0, h_3^0)$, то вместо этого нужно записать

$$I(\Delta \vec{h})^{L, \varepsilon} = I_3 N |F|^2 \hat{\mathcal{F}}[C^L(n) C^\varepsilon(n_3)].$$

Считая кристалл бесконечно большим, т. е. положив $C^L(n) = 1$, получим функцию $I^\varepsilon(\Delta \vec{h})$, в чистом виде отражающую влияние деформационных искажений в кристалле:

$$I^\varepsilon(\Delta \vec{h}) = I_3 N |F|^2 \hat{\mathcal{F}}[C^\varepsilon(n_3)]. \quad (142)$$

Так как в этом выражении справа стоит функция только от n_3 , то

$$I^\varepsilon(\Delta \vec{h}) = I^\varepsilon(\Delta h_3). \quad (142a)$$

Таким образом, мы приходим к очень важному выводу о том, что тензорное поле деформаций $\hat{\varepsilon}$ обуславливает изменение интенсивности только вдоль дифракционного вектора, так что область существования функции $I^\varepsilon(\Delta \vec{h})$ будет изображаться стержнем, всегда направленным только вдоль вектора \vec{h} (рис. 88) независимо от вида функции распределения $\varphi[\varepsilon(n_3)]$.

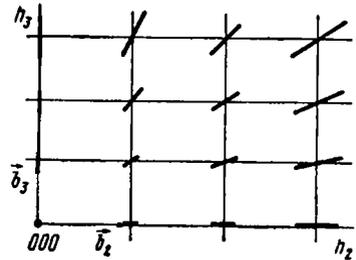


Рис. 88. Области существования функции $I^\varepsilon(\Delta \vec{h})$ для кристалла с искажениями

В отличие от метода порошка, когда соотношение типа $I(\Delta\vec{h}) = I(\Delta h_3)$ вызвано специфическими особенностями самого образца (наличием в нем кристаллитов со всевозможными ориентировками), соотношение (142а) обязано особенностям тензорного поля деформаций и будет поэтому справедливо как при работе с моно-, так и при работе с поликристаллическими образцами при том единственном условии, что используется монохроматическое излучение $\lambda = \text{const}$.

При работе с белым спектром вместо функции $I^e(\Delta h_3)$ мы получим функцию

$$I^e(\Delta h_3) \oplus 1(\Delta\lambda) = I^e(\Delta h_3) \oplus 1(\Delta h_3) = \text{const},$$

так что наличие в Фурье-образе \vec{H} -стержней (см. рис. 42) будет полностью маскировать эффекты, вызванные действием тензора $\hat{\epsilon}$ (рис. 88), поэтому способом Лауэ деформационные искажения изучать нельзя.

Рассмотрим подробнее, как измеряются деформации $\epsilon(n_3)$ в кристалле (см. рис. 87). В случае, изображенном на рис. 87:

$$|\Delta\vec{R}(n)| = \Delta R_3 |\vec{a}_3| = \Delta n_3 |\vec{a}_3| = \Delta L(n_3)$$

$$\text{и } |\vec{R}(n)| = R_3 |\vec{a}_3| = n_3 |\vec{a}_3| = L(n_3),$$

так что

$$\epsilon(n_3) = \frac{\Delta L(n_3)}{L(n_3)} = \frac{\Delta n_3}{n_3}. \quad (143)$$

В общем случае деформация ϵ зависит от длины базы $L(n_3)$, на которой она определяется, т. е.

$$\epsilon = f(n_3) = \epsilon(n_3).$$

Часто записывают $\epsilon(n_3)$ в виде

$$\epsilon = \frac{\Delta d}{d}; \quad (143a)$$

как видно из соотношения (143), такая форма записи может быть принята только при независимости деформации от n_3 :

$$\frac{\partial \epsilon(n_3)}{\partial n_3} = 0, \quad (143б)$$

когда в качестве базы может быть взято любое $L(n_3)$ и в том числе $L(1) = |\vec{a}_3| = d$, что соответствует форме записи (143а).

Функции $C^e(n_3)$ в форме (139а) соответствует в Фурье-пространстве распределение интенсивности $I^e(\Delta h_3)$. Легко найти связь между $\epsilon(n_3)$ и Δh_3 . Действительно, базе $L(n_3)$ в объекте соответствует база $\lambda L^{-1}(n_3)$ в Фурье-пространстве. Так как оператор $\hat{\mathcal{F}}$ — линейный, то относительное изменение базы в про-

странстве объекта и в Фурье-пространстве должно быть одинаковым (с точностью до знака).

Так как база $\lambda L^{-1}(n_3)$ может быть записана в виде

$$\lambda L^{-1}(n_3) = h_3 | \vec{b}_3 |,$$

то

$$\varepsilon(n_3) = \frac{\Delta L(n_3)}{L(n_3)} = \frac{\Delta n_3}{n_3} = - \frac{(\Delta h_3 | \vec{b}_3 |)}{h_3^0 | \vec{b}_3 |} = - \frac{\Delta h_3}{h_3^0}, \quad (144)$$

причем в знаменателе вместо h_3 стоит значение этой координаты в узле, так как область с размерами Δh_3 сосредоточена вблизи узла $00h_3^0$.

С учетом формулы (144) функция (139а) может быть записана в виде

$$C^\varepsilon(n_3) = \langle e^{-i2\pi\Delta h_3 n_3} \rangle, \quad (145)$$

причем при условии (143б) Δh_3 пропорционально h_3^0 , а при условии (143) зависит, кроме того, и от n_3 .

В том случае, когда справедливо разложение по малому параметру (141а), соотношение (145) может быть записано в виде

$$C^\varepsilon(n_3) = e^{-2\pi^2 \langle (\Delta h_3)^2 \rangle n_3^2}. \quad (145а)$$

Для описания деформации $\varepsilon(n_3)$ нужно ввести множество функций распределения $\{\varphi_j[\varepsilon(n_3)]\}$, где индекс j пробегает все значения n_3 . В том случае, когда R -решетка «в среднем» не изменяется, максимумы всех φ_j должны лежать при $\varepsilon(n_3) = 0$.

При условии (143 б) все φ_j равны друг другу, т. е.

$$\varphi_j[\varepsilon(n_3)] = \varphi(\varepsilon), \quad (145б)$$

отыскание этой единственной функции распределения не представляет труда, так как Δh_3 не зависит от n_3 :

$$\begin{aligned} I^\varepsilon(\Delta h_3) &= \widehat{\mathcal{F}}[C^\varepsilon(n_3)] = \widehat{\mathcal{F}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi\Delta h_3 n_3} \varphi(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{\mathcal{F}}[e^{-i2\pi\Delta h_3 n_3}] \varphi(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\Delta h + \Delta h_3) \varphi(\varepsilon) d\varepsilon, \end{aligned} \quad (146)$$

где Δh соответствует ν , а $\Delta h_3 - \nu_0$ из соотношения (23), так что здесь Δh нужно рассматривать как текущее значение Δh_3 .

В соответствии с этим и учитывая соотношение (144), Δh оказывается пропорциональным ε , поэтому интеграл (146) можно переписать в виде

$$I^\varepsilon(\Delta h_3) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\Delta h + \Delta h_3) \varphi(\Delta h) d\Delta h = \varphi(-\Delta h_3), \quad (146а)$$

так что функция распределения для деформаций (145б) оказывается не чем иным, как инвертированным дифракционным профилем $I^\varepsilon(\Delta h_3)$.

В общем случае определение функций φ_j сопряжено со значительными трудностями. Рассматривая некоторое значение n_3 , можно заменить $\varepsilon(n_3)$ на $\Delta n_3 = n_3 \varepsilon(n_3)$ и записать соотношение (139а) в виде

$$C^\varepsilon(n_3)|_{n_3} = f_j(h_3^0) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_j(\Delta n_3) e^{-i2\pi h_3^0 \Delta n_3} d(\Delta n_3),$$

где для определения $f(h_3^0)$ необходимо найти значение $C^\varepsilon(n_3)$ при нескольких значениях h_3^0 , т. е. из нескольких максимумов, принадлежащих одному направлению в Фурье-пространстве, а затем построить плавную кривую $f(h_3^0)$, считая, что h_3^0 теперь текущая координата, принимающая любые, а не только целочисленные значения.

Практически процедура отыскания функции $f(h_3^0)$ не может быть сделана сколько-нибудь надежно из-за отсутствия подходящего количества нужных дифракционных максимумов.

В том случае, когда $f(h_3^0)$ определена, отыскание $\varphi_j[\varepsilon(n_3)]$ не составляет труда:

$$\varphi_j[\varepsilon(n_3)] = \widehat{\mathcal{F}}^{-1}[f_j(h_3^0)].$$

Выражение (145а), полученное в предположении малости $\varepsilon(n_3) n_3$, позволяет в случае справедливости условия (143б) найти форму дифракционного максимума, обязанного только деформационным искажениям:

$$\begin{aligned} I^\varepsilon(\Delta h_3) &= \widehat{\mathcal{F}}[C^\varepsilon(n_3)] = \widehat{\mathcal{F}}\left[e^{-2\pi^2 \langle (\Delta h_3)^2 \rangle n_3^2}\right] = \\ &= (2\pi \langle (\Delta h_3)^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(\Delta h_3)^2}{\langle (\Delta h_3)^2 \rangle}}. \end{aligned}$$

Как видно, профиль интенсивности описывается в этом случае функцией Гаусса. Используя соотношение (146а), получим для функции распределения по деформациям

$$\varphi(\varepsilon) = (2\pi \langle \varepsilon^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2 \langle \varepsilon^2 \rangle}}$$

т. е. тоже функцию Гаусса.

Рассмотрим теперь, как отражается на дифракционной картине действие тензора вращения, роль которого учитывается в формуле (140) функцией (139б)

$$C^\omega(n) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \Delta R_3^\omega} \right\rangle,$$

где ΔR_3^ω — третья координата вектора $\Delta \vec{R}^\omega(n)$, происхождение которого связано только с вращением, описываемым тензором $\hat{\omega}$ (см. рис. 86).

Положим для простоты, что тензор $\hat{\omega}(\vec{e}')$ задан сразу в осях $\{\vec{e}'_i\}$, совпадающих с осями ромбического базиса; в случае необходимости всегда можно перейти к заданию тензора $\hat{\omega}(\vec{e})$ в исходном (физическом) базисе $\{\vec{e}_i\}$, используя соотношение

$$\omega_{ij}(\vec{e}) = \alpha_{ik} \alpha_{jl} \omega_{kl}(\vec{e}'),$$

где α — матрица перехода от осей $\{\vec{e}'_i\}$ к осям $\{\vec{e}_i\}$.

Так как тензор $\hat{\omega}$ задан в нормированном базисе, компоненту ΔR_3 нужно вычислять как

$$\Delta R_3 |\vec{a}_3| = \omega_{31} R_1 |\vec{a}_1| + \omega_{32} R_2 |\vec{a}_2|, \quad (147)$$

где слагаемое $\omega_{31} R_1 |\vec{a}_1|$ обусловлено поворотом вокруг оси \vec{e}'_2 , а слагаемое $\omega_{32} R_2 |\vec{a}_2|$ — поворотом вокруг оси \vec{e}'_1 (см. рис. 86), причем \vec{e}'_1 направлено по \vec{a}_1 , а \vec{e}'_2 — по \vec{a}_2 ; вектор \vec{a}_3 ориентирован так же, как и интересующий нас дифракционный вектор \vec{H} .

Если интересоваться только сечением дифракционной картины плоскостью \vec{b}_2, \vec{b}_3 , то поворот вокруг оси \vec{e}'_2 учитывать не нужно, и в этом случае

$$\Delta R_3 = \omega_{32} \frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_3|} n_2, \quad (147a)$$

где сразу положено $R_2 = n_2$.

В итоге из формул (139в) и (147a) получим

$$C^\omega(n) = C^\omega(n_2) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_3|} \omega_{32} n_2} \right\rangle \quad (148)$$

Очевидно, как и при вычислении $C^e(n)$, мы опять можем разложить соотношение (148) в ряд и получить в предположении малых поворотов и сохранения «в среднем» исходной R -решетки, что

$$C^\omega(n_2) = e^{-2\pi^2 \frac{|\vec{a}_2|^2}{|\vec{a}_3|^2} h_3^{02} \langle \omega_{32}^2 \rangle n_2^2} \quad (148a)$$

Если задать функцию распределения по разориентировкам (поворотам) в виде «колокола» Гаусса

$$\varphi(\omega) = (2\pi \langle \omega^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega^2}{2 \langle \omega^2 \rangle}},$$

то из соотношения (139а) получится в точности выражение (148а) без каких бы то ни было предположений о величине поворота.

Вычисляя поворот ω_{32} при помощи ковариантных координат (рис. 89), получим

$$\omega_{32} = -\frac{h_2 |\vec{b}_2|}{h_3^0 |\vec{b}_3|} = -\frac{h_2}{h_3^0} \frac{|\vec{a}_3|}{|\vec{a}_2|}, \quad (148б)$$

откуда $\left(\frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_3|}\right)^2 h_3^{02} \langle \omega_{32}^2 \rangle = \langle h_2^2 \rangle$,

так что функция (148а) может быть записана в виде, аналогичном формуле (145а):

$$C^\omega(n_2) = e^{-2\pi^2 \langle h_2^2 \rangle n_2^2}. \quad (148в)$$

Как видно из формулы (148в), функция $C^\omega(n)$, описывающая влияние разориентировок (поворотов) в объекте, при

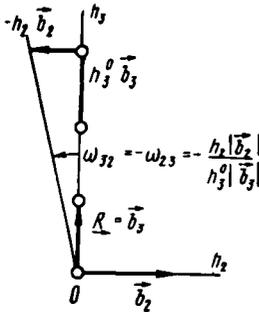


Рис. 89. Вычисление поворота объекта при помощи ковариантных координат (h_2, h_3)

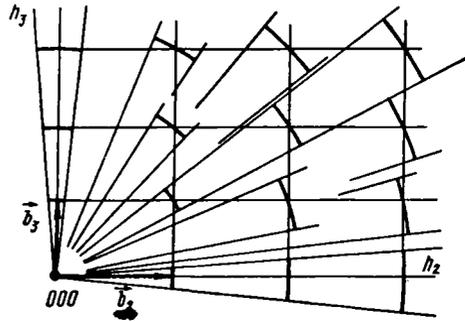


Рис. 90. Области существования функции $I^\omega(\Delta\vec{h})$ для кристалла с искажениями

поворотах только вокруг оси \vec{a}_1 зависит от n_2 :

$$C^\omega(n) = C^\omega(n_2),$$

и поэтому функция, описывающая дифракционный профиль, будет в этом случае зависеть только от h_2 :

$$I^\omega(\Delta\vec{h}) = \hat{\mathcal{F}}[C^\omega(n)] = \hat{\mathcal{F}}[C^\omega(n_2)] = I^\omega(h_2). \quad (149)$$

Вследствие этого область существования функции (149) изобразится отрезком, лежащим в плоскости \vec{b}_2, \vec{b}_3 перпендикулярно любому \vec{h} -вектору [нелишне напомнить, что для каждого \vec{h} -вектора базис $\{\vec{b}_i\}$ выбирается заново (рис. 90)].

Этот важный результат, равно как и соотношение (149), можно получить без всяких вычислений, если учесть изоморфизм, суще-

ствующий между ковариантным вектором объекта \vec{R} и дифракционным вектором \vec{h} : изменение вектора \vec{R} под действием тензорного поля \hat{e} вызывает точно такое же изменение вектора \vec{h} .

В общем случае при работе на векторе \vec{h} необходимо учитывать не только поворот вокруг оси \vec{a}_1 , характеризуемый компонентой ω_{32} , но и поворот вокруг оси \vec{a}_2 , характеризуемый компонентой ω_{31} , так что коэффициент $C^\omega(n)$, в соответствии с формулой (147), оказывается равным

$$C^\omega(n) = C^\omega(n_2) C^\omega(n_1),$$

$$\text{где } C^\omega(n_1) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \frac{|\vec{a}_1|}{|\vec{a}_2|} \omega_{31} n_1} \right\rangle,$$

или при малых $\omega_{31} n_1$

$$C^\omega(n_1) = e^{-2\pi^2 \langle h_1^2 \rangle n_1^2}.$$

Как видно, действие тензора $\hat{\omega}$ можно изучать при работе с белым спектром.

Все, что было сказано о функциях распределения $\varphi_j(n_3)$, относится в равной мере к функциям распределения $\varphi_j[\omega(n)]$. Так как в поликристаллическом (порошковом) образце, в объекте и в Фурье-пространстве действует функция распределения по разориентировкам вида $1(\Delta\rho)$, то анализ тензорного поля $\hat{\omega}$ в этом случае невозможен: в самом способе изготовления объекта уже заложены всевозможные повороты отдельных кристаллитов.

5. Сведения о размерах областей когерентного рассеяния и о функции распределения по размерам, получаемые из коэффициентов $C^L(n)$

Положив в формуле (140) $C^e(n) = C^\omega(n) = 1$, что соответствует отсутствию деформационных искажений и разориентировок в кристалле, мы получим в чистом виде функцию $I^L(\Delta\vec{h})$, отражающую влияние размеров в кристалле:

$$I^L(\Delta\vec{h}) = I_3 N |F|^2 \hat{\mathcal{F}}[C^L(n)].$$

Так как, в соответствии с формулой (127a):

$$C^L(n) = C^L(n_1) C^L(n_2) C^L(n_3),$$

то функция $I^L(\Delta\vec{h})$ может быть записана в виде

$$\begin{aligned} I^L(\Delta\vec{h}) &= I_3 N |F|^2 \widehat{\mathfrak{F}} [C^L(n_1) C^L(n_2) C^L(n_3)] = \\ &= I_3 N |F|^2 \widehat{\mathfrak{F}} [C^L(n_1)] \widehat{\mathfrak{F}} [C^L(n_2)] \widehat{\mathfrak{F}} [C^L(n_3)], \end{aligned}$$

так что $I^L(\Delta\vec{h})$ запишется в виде произведения трех функций $I_j(\Delta h_j)$:

$$I^L(\Delta\vec{h}) = I_3 N |F|^2 I_1^L(h_1) I_2^L(h_2) I_3^L(\Delta h_3),$$

где $N = N_1 N_2 N_3$.

В том случае, когда мы рассматриваем кристалл, размеры которого по j -той оси \vec{a}_j равны $L_j = N_j |\vec{a}_j|$, и строение этого кристалла оптически правильно, то

$$C^L(n_j) = 1 - \frac{|n_j|}{N_j},$$

откуда

$$\widehat{\mathfrak{F}} [C^L(n_j)] = \frac{I_j^L(\Delta h_j)}{I_3 N |F|^2} = \frac{1}{N_j} \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2}.$$

В реальных кристаллах с развитой дислокационной структурой в дифракции участвует множество доменов (областей когерентного рассеяния), отделенных друг от друга областями «плохого» материала. В этом случае под размерами $\{L_j\}$ нужно понимать размеры доменов.

Если на множестве $\{L_j\}$ действует функция распределения $\varphi(N)$, то $C^L(n_j)$ нужно определять с учетом этой функции распределения:

$$C^L(n_j) = \left\langle 1 - \frac{|n_j|}{N_j} \right\rangle = \int_{n_j+1}^{\infty} \left(1 - \frac{|n_j|}{N_j} \right) \varphi(N_j) dN_j. \quad (150)$$

Нижний предел интегрирования взят равным $n_j + 1$, так как при вычислении $C^L(n_j)$ не нужно принимать во внимание области, у которых $N_j < n_j + 1$.

Для кристалла, состоящего из одной ячейки, т. е. при $N_j = 1$, число $n_j = 0$ в соответствии с принятым способом подсчета (127), поэтому условие нормировки функций $\varphi(N_j)$ имеет вид

$$\int_1^{\infty} \varphi(N_j) dN_j = 1. \quad (150a)$$

При малых n , опуская здесь и в дальнейшем индекс j , разлагая функцию $C^L(n)$ в ряд и беря два первых члена, получим из формулы (150)

$$C^L(n) = 1 - |n| \langle N^{-1} \rangle. \quad (150б)$$

Дифференцируя два раза функцию (150) по параметру n , можно получить значение $\langle N^{-1} \rangle$ и $\varphi(N)$.

Правило дифференцирования интеграла по параметру c выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial c} \int_a^b f(x, c) dx = \int_a^b \frac{\partial f(x, c)}{\partial c} dx + f(b, c) \frac{\partial b}{\partial c} - f(a, c) \frac{\partial a}{\partial c}.$$

Используя это правило и принимая в формуле (150) $c = a = n$, получим

$$\frac{\partial C^L(n)}{\partial n} = - \int_{n+1}^{\infty} \frac{1}{N} \varphi(N) dN;$$

$$\frac{\partial^2 C^L(n)}{\partial n^2} = \frac{\varphi(n)}{n} \Big|_{n=N}. \quad (150в)$$

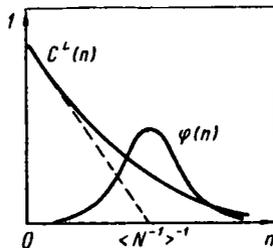


Рис. 91. Схема получения информации из функции $C^L(n)$

Как видно из формулы (150 в), вторая производная от функции (150) позволяет найти функцию распределения по размерам $\varphi(N)$.

Взяв значение первой производной при $n = 0$ и учтя соотношение (150а), получим

$$\frac{\partial C^L(n)}{\partial n} \Big|_{n=0} = - \langle N^{-1} \rangle. \quad (151)$$

Метод определения $\langle N^{-1} \rangle$ и $\varphi(N)$ показан на рис. 91. Как видно, касательная в нуле к кривой $C^L(n)$ отсекает на оси абсцисс отрезок $\langle N^{-1} \rangle^{-1} \approx \langle N \rangle$; этот результат мог бы быть получен сразу из формулы (150б), где

$$n |_{C^L(n)=0} = \langle N^{-1} \rangle^{-1} \approx \langle N \rangle.$$

В том случае, когда функция распределения $\varphi(N)$ является дельта-функцией вида

$$\varphi(N) = \delta(N - \langle N \rangle),$$

т. е. в кристалле имеются только области с одинаковым размером $\langle N \rangle$, из формулы (150) получим

$$C^L(n) = 1 - \frac{n}{\langle N \rangle},$$

и в этом случае функция распределения интенсивности в дифракционном максимуме описывается стандартным выражением

$$\frac{I^L(\Delta h)}{I_0 N |F|^2} = \frac{1}{\langle N \rangle} \frac{\sin^2 \pi \langle N \rangle \Delta h}{(\pi \Delta h)^2}. \quad (152)$$

Как только $\varphi(N)$ перестает быть дельта-функцией и в кристалле появляется множество областей с различными размерами, распределение интенсивности приходится вычислять как

$$\begin{aligned} \frac{I^L(\Delta h)}{I_0 N |F|^2} &= \widehat{\mathfrak{F}}[C^L(n)] = \widehat{\mathfrak{F}} \int_1^\infty \left(1 - \frac{|n|}{N}\right) \varphi(N) dN = \\ &= \int_1^\infty \widehat{\mathfrak{F}} \left[\left(1 - \frac{|n|}{N}\right) \right] \varphi(N) dN = \int_1^\infty \frac{1}{N} \frac{\sin^2 \pi N \Delta h}{(\pi \Delta h)^2} \varphi(N) dN = \\ &= \left\langle \frac{1}{N} \frac{\sin^2 \pi N \Delta h}{(\pi \Delta h)^2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (152a)$$

В трехмерном случае

$$\frac{I^L(\Delta \vec{h})}{I_0 N |F|^2} = \prod_{j=1, 2, 3} \left\langle \frac{1}{N_j} \frac{\sin^2 \pi N_j \Delta h_j}{(\pi \Delta h_j)^2} \right\rangle. \quad (152b)$$

Конечно, выражения, (152a), (152b) не равны и для вычисления соотношения (152a) необходимо знать $\varphi(N)$. В принципе $\varphi(N)$ определяется из формулы (150в), однако, как видно из рис. 91, для определения функции распределения необходимо использовать периферийную область функции $C^L(n)$, т. е. область, в которой $C^L(n)$ определяется с большими экспериментальными ошибками.

Как видно, область существования функции (152b) является трехмерной, причем размеры этой области не зависят от координат узла $(00 h_3^0)$; этим эта функция кардинально отличается от функций $I^e(\Delta \vec{h})$ и $I^\omega(\Delta \vec{h})$. Область существования функции $I^e(\Delta \vec{h})$ является одномерной и расположенной вдоль дифракционного вектора; у функции $I^\omega(\Delta \vec{h})$ область существования двумерная и расположена в плоскости, перпендикулярной дифракционному вектору \vec{h} , как это изображено на рис. 88 и 90, в обоих случаях размеры области существования линейно растут с увеличением длины вектора \vec{H} , как это следует из соотношений (144) и (148 б).

Так как надежное определение функции распределения $\varphi(N)$ практически невозможно, целесообразно ограничиться только определением $\langle N \rangle$. Для решения этой задачи нет необходимости знать $\varphi(N)$, а достаточно задать коэффициенты $C^L(n)$ в виде

$$C^L(n) = e^{-\frac{2\pi}{k} |n|} = e^{-\langle N^{-1} \rangle |n|}, \quad (153)$$

$$\text{где } k = \frac{2\pi}{\langle N^{-1} \rangle} \quad (153a)$$

При малых n функция (153) ведет себя так же, как функция (150); как видно, процедура определения $\langle N^{-1} \rangle$ дает в случае использования функции (153) правильный результат:

$$\left. \frac{\partial C^L(n)}{\partial n} \right|_{n=0} = -\langle N^{-1} \rangle,$$

а функция $\varphi(N)$, определенная с помощью соотношения (150в) и равная

$$\varphi(n)|_{n=N} = \langle N^{-1} \rangle^2 n e^{-\langle N^{-1} \rangle |n|} |_{n=N},$$

имеет максимум при $n = \langle N^{-1} \rangle^{-1} \approx \langle N \rangle$ (см. рис. 91).

При задании $C^L(n)$ в виде соотношения (153) функция, описывающая распределение интенсивности в дифракционном максимуме (когда речь идет только о влиянии размеров доменов), оказывается равной с точностью до $I_3 N |F|^2$.

$$I^L(\Delta h) = \frac{k}{\pi} \frac{1}{1 + k^2 (\Delta h)^2}. \quad (154)$$

Функция Коши (154) при больших Δh ведет себя точно так же, как функция (152) и как функция (152 а), т. е. убывает с расстоянием как $(\Delta h)^{-2}$. Так как при определении $\langle N^{-1} \rangle$ по формуле (153) нас интересует только поведение функции

$$C^L(n) = \widehat{\mathfrak{F}}[I^L(\Delta h)]$$

вблизи $n = 0$, а это поведение целиком определяется поведением функции $I^L(\Delta h)$ при $\Delta h \rightarrow \infty$, описание $C^L(n)$ и $I^L(\Delta h)$ функциями (153) и (154) оказывается очень удачным.

6. Совместное действие различных искажений структуры на дифракционную картину

В ряде структур (г. ц. к., г. п. у., о. ц. к., графит и т. п.) могут быть выделены плоскости, укладка атомов в которых более плотная, чем в других плоскостях. В некоторых случаях внешние воздействия на структуру могут приводить к нарушению правильной укладки плоскостей относительно друг друга и появлению дифракционных эффектов, связанных с ошибками укладки [20—23]. Функцию, описывающую ошибки укладки, можно записать в виде $C^{o.y}(n_1, n_2, n_3)$; конкретный вид этой функции может быть определен для каждой из реальных структур.

Если концентрация ошибок укладки не очень велика, $C^{o.y}(n_1, n_2, n_3)$ может быть описана как [20]

$$C^{o.y}(n) = e^{-\langle o.y N^{-1} \rangle |n|} \quad (155)$$

где $o.y N$ — некоторая безразмерная величина, по смыслу равная числу ячеек.

Опуская несущественный в данном случае множитель $I_3 N |F|^2$, можно записать функцию интенсивности в виде

$$I(\vec{h}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^e(n_3) C^\omega(n_1, n_2) C^L(n_1, n_2, n_3) C^{o.y}(n_1, n_2, n_3) \times e^{-i2\pi \left(\frac{\vec{h}}{\lambda}, \vec{R}_n \right)} \quad (156)$$

Все рассматриваемые искажения относятся к искажениям первого рода, т. е. оставляют «в среднем» размеры R -решетки неизменными, откуда следует, что и H -решетка также не изменяет своих размеров, так что при отсутствии искажений, т. е. когда все $C_j = 1$, выражение (156) дает множество брегговских дельта-максимумов, расположенных при $\vec{h} = \vec{H}$, т. е. в узлах H -решетки.

Распределение интенсивности вблизи узла с координатами $\{h_i^0\}$ может быть записано как

$$\begin{aligned} I(\Delta\vec{h}) &= \widehat{\mathcal{F}} [C^e(n_3) C^\omega(n_1, n_2) C^L(n_1, n_2, n_3) C^{o.y}(n_1, n_2, n_3)] = \\ &= \widehat{\mathcal{F}} [C^e(n_3)] \oplus \widehat{\mathcal{F}} [C^\omega(n_1, n_2)] \oplus \widehat{\mathcal{F}} [C^L(n_1, n_2, n_3)] \oplus \widehat{\mathcal{F}} \times \\ &\times [C^{o.y}(n_1, n_2, n_3)] = I^e(\Delta h_3) \oplus I^\omega(h_1, h_2) \oplus I^L \times \\ &\times (h_1, h_2, \Delta h_3) \oplus I^{o.y}(h_1, h_2, \Delta h_3), \end{aligned} \quad (156a)$$

причем для описания $I(\Delta\vec{h})$ выбран ромбический базис $\{\vec{b}_i\}$, у которого \vec{b}_3 направлено вдоль \vec{h} , а индекс r , как обычно, опущен.

Для того чтобы нагляднее представить область существования функции $I(\Delta\vec{h})$, рассмотрим еще раз, как выглядят области существования \mathcal{L}^e , \mathcal{L}^ω , \mathcal{L}^L и $\mathcal{L}^{o.y}$ функций, порознь описывающих искажения.

Нелишне еще раз обратить внимание на то, что область существования Фурье-образа кристалла с искажениями не образует H -решетки, и если начало координат в Фурье-пространстве выбрано, то в узлах H -решетки располагаются различные функции, так что в итоге Фурье-образ кристалла перестает быть решетчатым.

Как уже отмечалось в п. 4 и 5, область \mathcal{L}^e , равно как \mathcal{L}^ω , пропорциональна длине \vec{H} -вектора, т. е. в ромбическом базисе пропорциональна h_3^0 , область \mathcal{L}^L имеет одинаковые размеры во всех узлах H -решетки, а область $\mathcal{L}^{o.y}$ имеет различные размеры и различную протяженность (но одинаковую ориентацию) в зависимости от координат $\{h_i^0\}$.

Если задан кристалл с искажениями, т. е. заданы $\{R\}$ и $\{C\}$, то множество дифракционных максимумов $\{I(\Delta\vec{h})\}$, области существования которых изображены на рис. 92, оказывается также заданным однозначно при условии задания начального узла с координатами (000). На рис. 92 не указаны координаты узлов H -решетки, так как при работе в ромбическом базисе любой из интересующих нас узлов получит координаты $00h_3^0$, где h_3^0 попросту является номером узла на прямой, соединяющей этот узел с нулевым, т. е. с узлом (000).

На рис. 92 показано, как определяется область существования функции (156а), описывающей распределение интенсивности в максимуме у монокристалла и у поликристалла, когда вследствие действия функции $\mathbb{1}(h_1, h_2)$ получающаяся функция интенсивности, равная

$$I(\Delta\vec{h}) \oplus \mathbb{1}(h_1, h_2) = I(\Delta h_3), \quad (157)$$

оказывается зависящей только от координаты,

отсчитываемой вдоль \vec{h} -вектора, а ее область существования оказывается сферическим слоем.

Из соотношений (156а) и (157) сразу видно, что при работе с монокристалльным образцом метод $\theta \div 2\theta$ -сканирования, при котором $\Delta h_3 = \text{var}$, $h_1 = h_2 = \text{const}$, позволяет исследовать функции $I^e(\Delta h_3)$, а также функции $I^L(\Delta h_3)$ и $I^{o.y}(\Delta h_3)$, т. е. получать сведения о деформационных искажениях, о размерах доменов вдоль \vec{h} -вектора и об ошибках укладки. При работе в режиме φ -сканирования, при котором $h_1 = \text{var}$ (либо $h_2 = \text{var}$), $\Delta h_3 = \text{const}$, можно работать только поперек \vec{h} -вектора, т. е. исследовать функции

$$I^L(h_1), \quad I^o(h_1), \quad I^{o.y}(h_1).$$

В поликристаллическом образце полезную информацию можно получить только при работе в режиме 2θ -сканирования, когда исследуются функции $I^L(\Delta h_3)$, $I^e(\Delta h_3)$, $I^{o.y}(\Delta h_3)$.

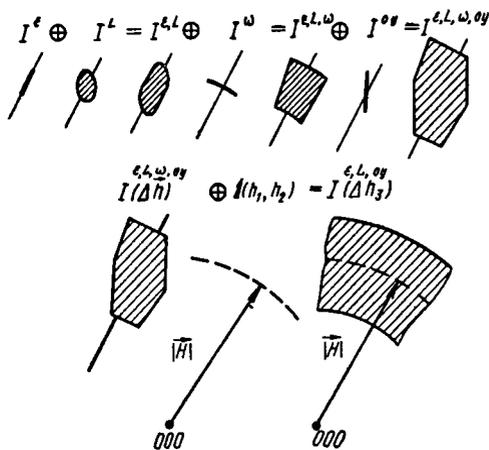


Рис. 92. Области существования функций $I(j)(\Delta\vec{h})$ и результирующей функции $I(\Delta\vec{h})$ в моно- и поликристаллических объектах

7. Отыскание параметров тонкой структуры кристалла по функциям $C(n)$, заданным в объекте

Распределение интенсивности в дифракционном максимуме, описываемое соотношением (156а), содержит информацию о параметрах тонкой структуры, т. е. о деформационных искажениях, искажениях, вызванных действием тензора поворота $\hat{\omega}$, о размерах областей когерентного рассеяния (доменах) и о вероятностях ошибок укладки.

Как уже мы отмечали в п. 5 гл. I, соотношения типа (156а) можно использовать различными способами.

Первый способ сводится к замене свертки умножением, для чего нужно применить к функции $I(\Delta\vec{h})$ обратное Фурье-преобразование, после чего получим

$$C^e(n_3) C^\omega(n_1, n_2) C^L(n_1, n_2, n_3) C^{o.y}(n_1, n_2, n_3) = \mathfrak{F}^{-1}[I \Delta\vec{h}]. \quad (158)$$

Смысл этой операции очевиден — от функции $I(\Delta\vec{h})$, экспериментально получаемой в Фурье-пространстве, мы переходим к функциям, заданным в пространстве объекта, и уже по этим функциям отыскиваем параметры тонкой структуры.

Второй способ сводится к использованию соотношения (11), также позволяющего заменить свертку умножением:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} I^{(3)}(\Delta\vec{h}) d(\Delta\vec{h}) &= \int_{-\infty}^{\infty} I^e d(\Delta\vec{h}) \int_{-\infty}^{\infty} I^\omega d(\Delta\vec{h}) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} I^L d(\Delta\vec{h}) \int_{-\infty}^{\infty} I^{o.y} d(\Delta\vec{h}). \end{aligned} \quad (158a)$$

Как видно, в этом случае мы работаем только в Фурье-пространстве, т. е. с дифракционным максимумом, и получаем информацию о параметрах тонкой структуры без перехода в пространство объекта.

Часто первый способ называется способом гармонического анализа формы рентгеновской линии (ГАФРЛ), а второй — способом аппроксимации, так как при использовании соотношения (158а) приходится аппроксимировать $I^{(i)}(\Delta\vec{h})$ аналитическими функциями.

Эта терминология не отражает принципиальных отличий рассматриваемых способов, тем более, что при использовании соотношения (158) можно аппроксимировать $C^{(i)}(n)$ аналитическими функциями, а при использовании соотношения (158а) применить гармонический анализ.

Третий способ, при котором мы также работаем только в Фурье-пространстве, сводится к использованию соотношения (47а), а также и аналогичных соотношений, получаемых для моментов функций $I^{(j)}(\Delta\vec{h})$ порядка выше второго.

Перейдем к рассмотрению первого способа.

Вообще говоря, функция $I(\Delta\vec{h})$ не обязательно должна быть симметричной относительно оси ординат. В ряде случаев особенности поля искажений структуры приводят к асимметрии дифракционного профиля, и в этом случае функция $C(n)$ должна быть комплексной:

$$C(n) = A(n) - iB(n),$$

где $A(n)$ и $B(n)$ — действительные функции.

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только $A(n)$, имея в виду, что рассмотрение $B(n)$ может быть проведено по аналогии с $A(n)$.

В случае монокристалла соотношение (158) дает при работе в режиме $\theta \div 2\theta$ -сканирования

$$A^e(n_3) A^L(n_3) A^{o.y}(n_3) = A(n_3), \quad (159)$$

где $\text{Re} \hat{\mathcal{F}}^{-1}[I(\Delta h_3)] = A(n_3)$.

В соответствии с формулами (141б), (153) и (155)

$$A^e(n_3) = C^e(n_3) = e^{-2\pi^2 h_3^{02} \langle \epsilon^2(n_3) \rangle n_3^2} \quad (159a)$$

$$A^L(n_3) = C^L(n_3) = e^{-\langle N_3^{-1} \rangle |n_3|}; \quad (159б)$$

$$A^{o.y}(n_3) = C^{o.y}(n_3) = e^{-\langle {}^{o.y}N_3^{-1} \rangle |n_3|}. \quad (159в)$$

Удобно ввести фиктивный (кажущийся) размер домена

$$*L_3 = *N_3 | \vec{a}_3 |,$$

$$\text{положив } \langle *N_3^{-1} \rangle = \langle N_3^{-1} \rangle + \langle {}^{o.y}N_3^{-1} \rangle, \quad (159г)$$

и переписать соотношение (159) в виде

$$A^e(n_3) A^{*L}(n_3) = A(n_3). \quad (160)$$

Основной прием, при помощи которого удобно анализировать соотношения типа (160), состоит в том, чтобы использовать различную зависимость функций A^e и A^{*L} от подходящего параметра.

Как видно из формул (159а), (159б) и (159в), $A^e(n_3)$ зависит от координаты h_3^0 , а $A^{*L}(n_3)$ не зависит.

Записывая соотношения (160) в виде

$$\ln A(n_3) = \ln A^{*L}(n_3) - 2\pi^2 \langle \epsilon^2(n_3) \rangle n_3^2 h_3^{02} \quad (160a)$$

и строя график $\ln A(n_3) = f(h_3^{02})$, мы легко отыскиваем (рис. 93) $\langle e^2(n_3) \rangle$ и $\ln A^{*L}(n_3)$:

$$\langle e^2(n_3) \rangle = \frac{\operatorname{tg} \alpha(n_3)}{2\pi^2 n_3^2};$$

$$\ln A^{*L}(n_3) = \ln A(n_3) \Big|_{h_3^{02}=0}.$$

Как видно, при реализации процедуры, изображенной на рис. 93, необходимо иметь, по крайней мере, два порядка дифракции, т. е. две точки на дифракционном векторе, либо работать

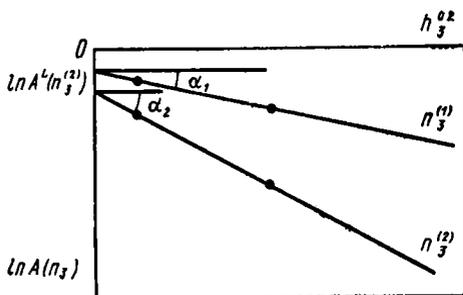


Рис. 93. Схема определения $\langle e^2(n_3) \rangle$ и $\ln A^{*L}(n_3)$

из зависимости $\ln A(n_3) = f[(h_3^0)^2]$:
 $n_3^{(1)}$ и $n_3^{(2)}$ — два значения переменной n_3

в предположении, что двум направлениям в кристалле, которым соответствуют два используемых дифракционных вектора, отвечают одни и те же значения $\langle e^2 \rangle$ и $*L_3$.

В том случае, когда в структуре имеются ошибки укладки, нужно принимать во внимание зависимость размера области существования функции $I^{o,y}(\Delta h_3)$ от h_3^0 , рассмотренную в работе [22].

Получив из семейства зависимостей (160а) множество значений $\{A^{*L}(n_3)\}$, мы сможем, используя процедуру (151), найти значение $\langle *N^{-1} \rangle$, а по нему, используя формулу (159г) и соотношения, рассмотренные в работе [22], отыскать как истинный размер домена L_3 , так и вероятности ошибок укладки.

При работе в режиме ф-сканирования получим, поворачивая кристалл вокруг \vec{a}_1 :

$$A^\omega(n_2) A^{*L}(n_2) = A(n_2),$$

где обозначено

$$\operatorname{Re} \hat{y}^{-1}[I(h_2)] = A(n_2)$$

$$\text{и } A^{*L}(n_2) = A^L(n_2) A^{o,y}(n_2).$$

Учитывая, что

$$A^\omega(n_2) = e^{-2\pi^2 \left(\frac{\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_1}{|\vec{a}_2| |\vec{a}_1|} \right)^2} h_3^{02} \langle \omega_{32}^2 \rangle n_2^2;$$

(161)

$$A^L(n_2) = e^{-\langle N_2^{-1} \rangle |n_2|};$$

$$A^{o,y}(n_2) = e^{-\langle {}^{o,y}N_2^{-1} \rangle |n_2|},$$

можно полностью повторить процедуру (160а) и отыскать как компоненту $\langle \omega_{32}^2 \rangle$, равную

$$\langle \omega_{32}^2 \rangle = \frac{\text{tg } \alpha (n_2)}{2\pi^2 \left(\frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_3|} \right)^2 n_2^2},$$

так и $\ln A^{*L}(n_2) = \ln A(n_2) \Big|_{h_3^{02}=0}$,

а затем, строя зависимость $A^{*L}(n_2) = f(n_2)$ и используя соотношение (151), можно отыскать $\langle N_2^{-1} \rangle$, откуда легко найти истинные размеры L_2 и вероятности ошибок укладки.

Как видно, и в этом случае необходимо иметь, по крайней мере, два порядка дифракции по какому-либо направлению в Фурье-пространстве.

Хотя $A^e(n_3)$ и $A^\omega(n_2)$ описываются очень похожими выражениями (159а) и (161), действие тензорного поля \hat{e} существенно отличается от действия поля $\hat{\omega}$. При переходе от одного направления в Фурье-пространстве к другому функция $A^e(n_3)$ изменяется в соответствии со значением $\langle e^2(n_3) \rangle$, отвечающим этому направлению, так что при анализе сечения Фурье-пространства плоскостью, образованной векторами \vec{b}_2, \vec{b}_3 (см. рис. 88), области существования функций $I^e(\Delta h_3)$ будут изменяться в соответствии со значениями тензора \hat{e} .

Иначе обстоит дело при действии тензора $\hat{\omega}$, так как при наличии разориентировок в кристалле все дифракционные максимумы, лежащие в плоскости, перпендикулярной оси, вокруг которой происходит поворот кристаллитов, также разворачиваются на один и тот же угол.

При работе в плоскости, образованной векторами \vec{b}_2, \vec{b}_3 , этот угол равен

$$\Delta\rho = \langle \omega_{32}^2 \rangle^{1/2}.$$

Используя особенности тензоров \hat{e} и $\hat{\omega}$, можно получить сведения о параметрах тонкой структуры, исследуя различные направления в Фурье-пространстве (направления $I-IV$ на рис. 94), причем два порядка дифракции достаточно иметь только на одном из направлений (направление I на рис. 94) [24]. Последовательность работы должна быть при этом следующей: $\theta \div 2\theta$ -сканирование двух максимумов, расположенных по направлению I , дает

$$\langle e^2 \rangle^I \text{ и } {}^*L_3^I; \quad (162)$$

Ф-сканирование этих же максимумов дает

$$\Delta\rho \text{ и } {}^*L_2^I; \quad (162a)$$

φ-сканирование максимума *III* дает

$${}^{III}A(n_2) = {}^{III}A^\omega(n_2) {}^{III}A^{*L}(n_2), \quad (162б)$$

причем n_2 соответствует здесь новой оси \vec{b}_2^{III} , ориентированной перпендикулярно направлению *III*, т. е. $\vec{b}_2^{III} = -\vec{b}_3^I$ (см. рис. 94).

В формуле (162б) ${}^{III}A^{*L}(n_2)$ отыскивается экспериментально по функции $I^{III}(h_2)$, полученной при φ-сканировании функции с областью существования \mathcal{L}^{III} :

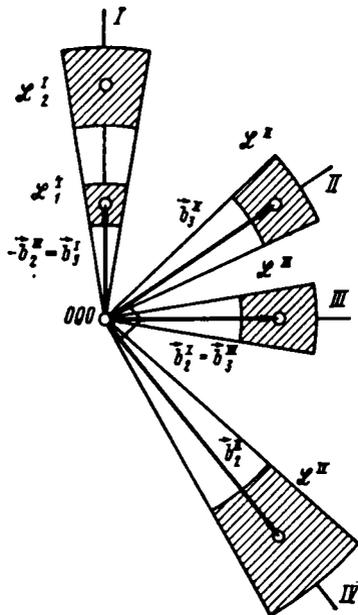


Рис. 94. К анализу искажений по дифракционной картине монокристалла

$${}^{III}A(n_2) = \hat{\mathcal{F}}^{-1}[I^{III}(h_2)].$$

Функцию ${}^{III}A^\omega(n_2)$ в формуле (162 б) легко определить из соотношения (161), так как нужный для этого определения параметр (ω_{32}^2) найден в соотношении (162а).

Таким образом, из формулы (162б) можно определить ${}^*L_3^{III}$, т. е. фиктивные размеры домена в направлении, перпендикулярном направлению *III*. Та же процедура, проведенная с максимумом, соответствующим направлению *II*, позволит определить ${}^*L_2^{II}$, т. е. фиктивные размеры домена в направлении, перпендикулярном направлению *II*.

Если пренебречь влиянием ошибок укладки, то можно принять, что $L_2^I = L_3^{III}$, т. е. положить

$${}^I A^L(n_2) = {}^{III}A^L(n_3), \quad (162в)$$

после чего, применяя $\theta \div 2\theta$ -сканирование к максимуму *III*, можно записать, что

$$\hat{\mathcal{F}}^{-1}[I^{III}(\Delta h_3)] = {}^{III}A(n_3) = {}^{III}A^e(n_3) {}^{III}A^L(n_3),$$

откуда легко находится ${}^{III}A^e(n_3)$, так как ${}^{III}A^L(n_3)$ известно из выражения (162в).

Равным образом, комбинируя максимумы *II* и *IV*, можно последовательно найти ${}^{IV}A^e(n_3)^{II}$, $A^e(n_3)$ и т. д.

Повернув кристалл и, следовательно, Фурье-образ вокруг направления *I*, можно исследовать другое сечение Фурье-образа, причем для получения всей информации о компонентах тензоров $\hat{\epsilon}$, $\hat{\omega}$ и о размерах доменов (областей когерентного рассеяния) достаточно иметь на интересующих нас направлениях только по одному максимуму.

При работе с поликристаллическим (порошковым) образцом использование φ -сканирования невозможно и работать имеет смысл только в режиме 2θ -сканирования или в режиме $\theta \div 2\theta$ -сканирования, что в данном случае одно и то же.

Таким образом, в случае поликристаллического образца может быть использовано только соотношение (160), позволяющее определить $\langle \varepsilon^2 (n_3) \rangle$ и фиктивные размеры домена $*L_3$ в направлении дифракционного вектора.

Для отыскания всех компонент тензора $\hat{\varepsilon}$, равно как и для раздельного определения истинных размеров доменов и вероятностей ошибок упаковки, нужно иметь множество векторов $\{\vec{h}\}$, причем на каждом из векторов должно быть, по крайней мере, два дифракционных максимума.

К сожалению, возможности, которыми обладает исследователь при работе с поликристаллическими веществами, имеющими г. ц. к. и о. ц. к. структуры, весьма ограничены. У материалов с г. ц. к. структурой могут быть использованы только максимумы с индексами 111—222—444, 200—400—800. У первого вектора пропадает максимум 333, так как радиус H -сферы для максимума 333 равен радиусу H -сферы для максимума 511; по этой же причине пропадает максимум 555 (перекрывается с 157). Во втором случае пропадает максимум 600 (перекрывается с 244).

У материалов с о. ц. к. структурой имеют место ряды 110—220—40, 200—400—800, 211—422—644, 310—620.

Три максимума в пределах каждого ряда могут быть получены только в коротковолновом (молибденовом) излучении; при работе в излучении $K\alpha$ Cu (Co, Fe, Cr) обычно получают в лучшем случае два порядка дифракции для некоторых из указанных направлений.

В связи с этим обстоятельством большое значение приобретают методы, позволяющие получить $\langle \varepsilon^2 \rangle$ и $*L_3$ из одного порядка дифракций.

Записывая $A^\varepsilon (n_3)$ и $A^{*L} (n_3)$ при малых n_3 в виде соотношений (159а), (159б) и (159в), получим, что

$$A(n_3) = A^\varepsilon (n_3) A^{*L} (n_3) \approx 1 - \langle *N_3^{-1} \rangle n_3 - 2\pi^2 h_3^{02} \langle \varepsilon^2 (n_3) \rangle n_3^2, \quad (163)$$

откуда

$$\left. \frac{\partial A(n_3)}{\partial n_3} \right|_{n_3=0} = - \langle *N_3^{-1} \rangle \quad (163а)$$

и

$$\left. \frac{\partial^2 A(n_3)}{\partial n_3^2} \right|_{n_3=0} = - 4\pi^2 h_3^{02} \langle \varepsilon^2 (n_3) \rangle, \quad (163б)$$

так что фиктивные размеры $*L_3$ и деформация $\langle \varepsilon^2 (n_3) \rangle$ могут быть определены из значений первой и второй производной от экспериментально определенной функции $A(n_3)$, взятых в начале координат.

К сожалению, практическая реализация соотношений (163а) и (163б) наталкивается на непреодолимые трудности, связанные

с тем, что поведение функции $A(n_3)$ в нуле определяется не особенностями структуры, а тем, как проведена линия фона, т. е. подошва дифракционного максимума, и размером области $2\Delta h_3$, в пределах которой фиксируется функция $I(\Delta h_3)$. Как правило, функция $A(n_3)$, определенная экспериментально, обнаруживает в нуле недопустимый загиб, в пределах которого первая производная положительна, что не имеет физического смысла (рис. 95).

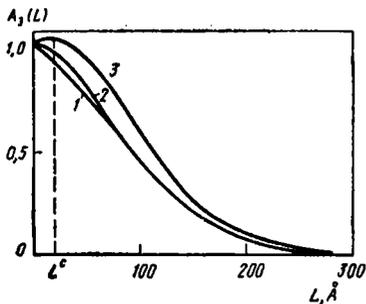


Рис. 95. Функции $A_3(n)$, вычисленные при различном обрыве «хвостов» функций $I^h(\Delta h)$ и $I^g(\Delta h)$:

1 — истинная функция $A^f(n)$; 2 — функции $I^h(\Delta h)$ и $I^g(\Delta h)$ оборваны там, где интенсивность составляла 6% от высоты максимума; 3 — $I^h(\Delta h)$ не оборвана, $I^g(\Delta h)$ оборвана в точке, интенсивность которой составляет 10% от высоты максимума [36]

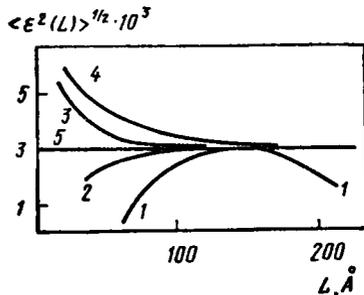


Рис. 96. Влияние различного обрыва функций $I^h(\Delta h)$ и $I^g(\Delta h)$ в первом и втором порядках на зависимость

$\frac{1}{\langle \epsilon^2(L) \rangle^2} = f(L)$:

1 — $\left(\frac{0}{0}\right)_1 \left(\frac{10}{0}\right)_2$; 2 — $\left(\frac{0}{0}\right)_1 \left(\frac{3}{0}\right)_2$;
 3 — $\left(\frac{3}{0}\right)_1 \left(\frac{0}{0}\right)_2$; 4 — $\left(\frac{10}{0}\right)_1 \left(\frac{0}{0}\right)_2$;
 5 — истинная зависимость.
 В числителе — величина обрыва функции $I^h(\Delta h)$, в знаменателе — функции $I^g(\Delta h)$ [36]

Мы отложим обсуждение причин появления «криминального» участка $(0, L^c)$ до обсуждения всех особенностей экспериментальной процедуры, связанной с определением функций $A(n_3)$ и дальнейшим их использованием.

Наиболее простым способом, позволяющим получить размеры $*L_3$ и деформацию $\langle \epsilon^2 \rangle$ в случае соблюдения соотношения (1436), является следующий.

Воспользуемся для функций $A^e(n_3)$ и $A^{*L}(n_3)$ выражениями (145а) и (153), т. е. примем, что $I^e(\Delta h_3)$ и $I^{*L}(\Delta h_3)$ описываются соответственно функциями Гаусса и Коши:

$$I^e(\Delta h_3) = (2\pi^2 \langle (\Delta h_3)^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(\Delta h_3)^2}{2 \langle (\Delta h_3)^2 \rangle}}$$

$$\text{и } I^{*L}(\Delta h_3) = \frac{k}{\pi} \frac{1}{1 + k^2 (\Delta h_3)^2}.$$

В этом случае

$$\ln A(n_3) = -2\pi^2 h_3^{02} \langle \epsilon^2 \rangle n_3^2 - \langle N_3^{-1} \rangle n_3, \quad (164)$$

и для отыскания $\langle \varepsilon^2 \rangle$ и $\langle N_3^{-1} \rangle$ нужно иметь, по крайней мере, два значения функции $A(n_3)$.

Экспериментально определенная зависимость $\langle \varepsilon^2(n_3) \rangle = f(n_3)$ обнаруживает, как правило, горизонтальный участок (рис. 96), в пределах которого и нужно выбирать значения n_3 для экспериментального определения функции $A(n_3)$ по формуле (164). Поскольку точность определения $A(n_3)$ падает с ростом n_3 , необходимо использовать малые n_3 , но такие, при которых мы заведомо не попадаем ни на «криминальный» участок $(0, n_3^c)$, ни в область непостоянного значения $\langle \varepsilon^2(n_3) \rangle$ (рис. 96), на котором нарушается условие (1436).

При работе с поликристаллами может быть использована только формула (164); у монокристаллов, помимо (164), аналогичный прием позволяет найти компоненту тензора $\hat{\omega}$ и размер $*L_2$:

$$\ln A(n_2) = -2\pi^2 \left(\frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_3|} \right)^2 h_3^{02} \langle \omega_{32}^2 \rangle n_2 - \langle N_2^{-1} \rangle n_2. \quad (164a)$$

8. Влияние практической процедуры анализа дифракционного профиля на значение параметров тонкой структуры при работе в пространстве объекта

Для того чтобы получить функции $C(n)$, описывающие действие различных факторов на структуру объекта, необходимо выделить из экспериментально полученного профиля $I^h(\Delta\vec{h})$ функцию $I^f(\Delta\vec{h})$, которая в формуле (156a) обозначалась просто как $I(\Delta\vec{h})$.

В соответствии с соотношением (44), если ввести в рассмотрение функцию $I^g(\Delta\vec{h})$, описывающую влияние регистрирующей системы на дифракционный профиль, получим, что

$$I^h(\Delta\vec{h}) = I^f(\Delta\vec{h}) \oplus I^g(\Delta\vec{h}). \quad (165)$$

Обозначив

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathcal{F}}^{-1} I^h(\Delta\vec{h}) &= C^h(n); \\ \hat{\mathcal{F}}^{-1} I^f(\Delta\vec{h}) &= C^f(n) = C(n); \\ \hat{\mathcal{F}}^{-1} I^g(\Delta\vec{h}) &= C^g(n), \end{aligned} \right\} \quad (165a)$$

получим из соотношения (165)

$$C(n) = \frac{C^h(n)}{C^g(n)}. \quad (165b)$$

Полагая в дополнение к обозначениям (165а)

$$C^h(n) = A^h(n) - iB^h(n);$$

$$C^g(n) = A^g(n) - iB^g(n),$$

получим из соотношения (165б)

$$A(n) = \frac{A^h(n) A^g(n) + B^h(n) B^g(n)}{[A^g(n)]^2 + [B^g(n)]^2};$$

$$B(n) = \frac{A^g(n) B^h(n) - A^h(n) B^g(n)}{[A^g(n)]^2 + [B^g(n)]^2}.$$

Импульсный отклик системы $I^g(\vec{\Delta h})$ получается при дифракции на образце, не содержащем искажений структуры. Выбор такого эталонного образца в ряде случаев представляет нелегкую задачу.

Следующая проблема, с которой мы неизбежно сталкиваемся, заключается в том, что экспериментально наблюдаемое распределение интенсивности зависит от $\Delta 2\theta$ при $\theta \div 2\theta$ или θ -сканировании (рис. 34) или от $\Delta\phi$ при ϕ -сканировании (рис. 33), в то время как все расчеты в п. 6 выполнены в терминах переменных $\{h_i\}$.

Переход от угловых величин к координатам $\{h_i\}$ уже обсуждался в гл. II п. 7. Используя, как обычно, специально выбранный ромбический базис, в котором $\{\vec{r}\vec{b}_3\}$ направлено вдоль дифракционного вектора, и опуская индекс r , получим при $\theta \div 2\theta$ -сканировании монокристалла счетчиком с достаточно высокой щелью (формула 94а), что

$$I^h(\Delta 2\theta) = I_s |F(\vec{H})|^2 |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| N_1 N_2 I^h(\Delta h_3),$$

где

$$N_2' = \int_{-h_2^c}^{h_2^c} \frac{\sin^2 \pi N_2 h_2}{(\pi h_2)^2} dh_2,$$

а вместо множителя $(\pi \Delta h_3)^{-2} \sin^2 \pi N_3 \Delta h_3$, учитывающего в соотношении (94а) влияние размеров кристалла, стоит функция $I^h(\Delta h_3)$, отражающая как влияние измерительной системы, так и влияние структурных несовершенств кристалла, включая сюда и влияние размеров.

Отбрасывая, как и ранее, несущественные в данном случае постоянные множители, получим

$$I^h(\Delta 2\theta) = I^h(\Delta h_3).$$

При переходе от экспериментально полученного профиля $I^h(\Delta 2\theta)$ к профилю $I^h(\Delta h_3)$, записанному в терминах перемен-

ной Δh_3 , нужно учесть изменения масштаба по оси абсцисс, имеющие место при $\theta \div 2\theta$ -сканировании, т. е. воспользоваться соотношением

$$\Delta h_3 = \frac{\cos \theta_0}{|\vec{b}_3|} \Delta 2\theta. \quad (166)$$

Переход от $\Delta 2\theta$ к Δh_3 по соотношению (166) годится для узкой линии; если линия широка, то нужно вместо дифференциальной формулы (166) пользоваться выражением

$$\Delta h_3 |\vec{b}_3| = (h_3 - h_3^0) |\vec{b}_3| = 2 \sin \theta - 2 \sin \theta_0. \quad (166a)$$

В случае φ -сканирования монокристалла получим из формулы (94г), опуская постоянные множители: $I^h(\Delta\varphi) = I^h(h_2)$, причем переход от шкалы $\Delta\varphi$ к шкале h_2 сопряжен с изменением масштаба

$$h_2 = \frac{2 \sin \theta_0}{|\vec{b}_2|} \Delta\varphi. \quad (166б)$$

При работе с поликристаллическим образцом в режиме $\theta \div 2\theta$ -сканирования получим из соотношения (117а), заменяя в этом выражении $(\pi\Delta h_3)^{-2} \sin^2 \pi N_3 \Delta h_3$ на $I^h(\Delta h_3)$:

$$I^h(\Delta 2\theta) = \frac{I^h(\Delta h_3)}{\sin^2 \theta},$$

причем при переходе от шкалы $\Delta 2\theta$ к шкале Δh_3 нужно по-прежнему пользоваться соотношениями (166) или (166а).

Как видно, переход от угловых координат Фурье-пространства $\Delta 2\theta$ или $\Delta\varphi$ к координатам $\{\Delta h_i\}$ не представляет труда. Наибольшие неприятности при работе доставляет невозможность проводить Фурье-преобразование дифракционного профиля

$$\widehat{\mathcal{F}}^{-1}[I(\Delta h)] = C(n) \quad (167)$$

в бесконечных пределах.

Так как распределение интенсивности в Фурье-пространстве равно (с точностью до несущественных в данном случае множителей)

$$\text{Ш}(h) \oplus I(\Delta h),$$

где периодическая функция $\text{Ш}(h)$ имеет период, равный единице, то самое большее, что мы можем сделать, это проводить Фурье-преобразование на ограниченной базе, равной $(-1/2, 1/2)$, и вместо точного соотношения (167) записать

$$C(n) \approx C_{\text{yc}}(n') = \widehat{\mathcal{F}}_{\text{yc}}^{-1}[I(\Delta h)], \quad (167a)$$

где $\widehat{\mathcal{F}}_{\text{yc}}^{-1}$ — символ усеченного Фурье-преобразования, рассмотренного в гл. I п. 4 и применяемого для анализа функций с ограниченным спектром.

В нашем случае спектр, т. е. функция $I(\Delta h)$, рассматривается только на участке $(-\kappa/2, \kappa/2)$, поэтому из формул (36) и (36а) получим

$$I(\Delta h) = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} C_{yc}(n') e^{-i2\pi n' \frac{\Delta h}{\kappa}} \quad (168)$$

$$C_{yc}(n') = \frac{1}{\kappa} \int_{-\frac{\kappa}{2}}^{\frac{\kappa}{2}} I(\Delta h) e^{i2\pi n' \frac{\Delta h}{\kappa}} d\Delta h, \quad (168a)$$

так что усеченный Фурье-образ функции $I(\Delta h)$ отыскивается как множество коэффициентов ряда Фурье (168). В идеальном случае, когда промежуток между двумя соседними узлами на \vec{h} -векторе может быть использован полностью, $\kappa = 1$.

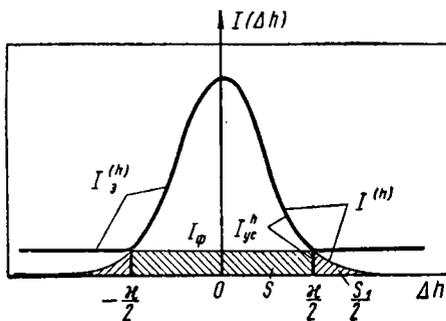


Рис. 97. Экспериментальная процедура обработки дифракционного профиля $I(\Delta h)$

В реальных условиях исследовать распределение интенсивности на таком большом интервале не удастся, так как этому мешают «чужие» максимумы.

При работе с поликристаллическим алюминием на K_α Си-излучении линия 111 получается при $\theta_0 \approx 19^\circ$; линия 200 — при $\theta_0 \approx 22^\circ$; линия 220 — при $\theta_0 \approx 33^\circ$; линия 311 — при $\theta_0 \approx 39^\circ$; линия 222 — при $\theta_0 \approx 41^\circ$; линия 400 — при $\theta_0 \approx 49^\circ$; линия 331 — при $\theta_0 \approx 56^\circ$.

При работе с поликристаллическим алюминием на K_α Си-излучении линия 111

Угловой интервал в Фурье-пространстве $\Delta 2\theta(1)$, отвечающий $\kappa = 1$, может быть найден из соотношения

$$\Delta 2\theta(1) = 4 \left[\sin^{-1} \left(\frac{|\vec{b}_s|}{4} + \sin \theta_0 \right) - \theta_0 \right].$$

В рассмотренном случае с алюминиевым образцом для максимума 200 единичный интервал по шкале 2θ равен $\Delta 2\theta(1) = 24^\circ$, а для максимума 400 36° , откуда $\kappa_{200} = 0,25$, а $\kappa_{400} = 0,39$.

Введение конечного интервала κ приводит не только к замене полного обратного Фурье-преобразования $\hat{\mathcal{F}}^{-1}$ на усеченное $\hat{\mathcal{F}}_{yc}^{-1}$ и замене интеграла Фурье рядом (168), в котором номер коэффициента n' связан с истинным значением n , получаемым при выполнении полного Фурье-преобразования соотношением $n = n'/\kappa$.

Экспериментальная процедура обработки дифракционного профиля, как правило, связана с завышением уровня фона. Если бы экспериментатор ограничивался только усечением профиля, то

он получил бы функцию $I_{yc}^h(\Delta h)$, изображенную на рис. 97 и имеющую ступеньки при $|\Delta h| = \kappa/2$. В действительности экспериментатор всегда проводит «подошву» профиля так, чтобы получить плавный переход «крыльев» кривой к нулю.

В итоге вместо $I_{yc}^h(\Delta h)$ вводится в рассмотрение функция $I_s^h(\Delta h)$, у которой отсчет ординат ведется от новой «подошвы», проведенной на уровне $I_\phi(\kappa)$, а значения интенсивности при $|\Delta h| > \kappa/2$ тождественно равны нулю.

Как видно из рис. 97:

$$I_s^h(\Delta h) = [I^h(\Delta h) - I_\phi(\kappa)] \Pi(\Delta h), \quad (168б)$$

$$\text{где } \Pi(\Delta h) = \begin{cases} 1 & \text{при } |\Delta h| \leq \frac{\kappa}{2} \\ 0 & \text{при } |\Delta h| > \frac{\kappa}{2}. \end{cases}$$

Таким образом, вместо $C_{yc}(n')$, определяемой по формуле (168а), в действительности находится функция

$$C_s(n') = \frac{1}{\kappa} \int_{-\frac{\kappa}{2}}^{\frac{\kappa}{2}} I_s^h(\Delta h) e^{i2\pi n' \frac{\Delta h}{\kappa}} d\Delta h, \quad (168в)$$

где

$$I_s^h(\Delta h) = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} C_s(n') e^{-i2\pi n' \frac{\Delta h}{\kappa}} \quad (168г)$$

Для анализа поведения $C_s(n)$ можно снова перейти к полному Фурье-преобразованию, так как функция $I_s(\Delta h)$ тождественно равна нулю при $|\Delta h| \geq \kappa/2$:

$$\begin{aligned} C_s(n) &= \widehat{\mathcal{F}}^{-1}[I_s^h(\Delta h)] = \widehat{\mathcal{F}}^{-1}[I^h(\Delta h)] \oplus \widehat{\mathcal{F}}^{-1}[\Pi(\Delta h)] - \\ &- I_\phi(\kappa) \widehat{\mathcal{F}}^{-1}[\Pi(\Delta h)] = C(n) \oplus \frac{\sin \pi \kappa n}{\pi n} - I_\phi \frac{\sin \pi \kappa n}{\pi n}. \end{aligned} \quad (169)$$

При известном $I_\phi(\kappa)$ из соотношения (169) можно найти неискаженную функцию $C(n)$. Так как в действительности $I_\phi(\kappa)$ остается неизвестным, соотношение (169) позволяет лишь качественно обсудить, к чему приводит замена истинного профиля $I^h(\Delta h)$ профилем $I_s^h(\Delta h)$.

Замена функции $C(n)$ на функцию

$$C_{yc}(n) = C(n) \oplus \frac{\sin \pi \kappa n}{\pi n}$$

вызывает некоторое расширение $C_{yc}(n)$ по сравнению с функцией $C(n)$ (рис. 98), что, в конечном итоге, приводит к некоторому

уменьшению $\langle \varepsilon^2 \rangle$ и увеличению вычисленных значений $*L$ по сравнению с истинными их значениями.

Помимо расширения $C_{yc}(n)$ по сравнению с $C(n)$, наблюдается искажение поведения функции $C(n)$ в окрестностях начала координат. В то время как значение $\left. \frac{\partial}{\partial n} C(n) \right|_{n=0}$ определяется параметрами тонкой структуры, то

$$\left. \frac{\partial}{\partial n} C_{yc}(n) \right|_{n=0} = 0 \quad (170)$$

всегда независимо от вида функции $C(n)$.

Действительно, так как оператор $\frac{\partial}{\partial n}$ линейный, то в согласии с формулой (14)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n} \left[C(n) \oplus \frac{\sin \pi \kappa n}{\pi n} \right] &= \\ &= C(n) \oplus \frac{\partial}{\partial n} \frac{\sin \pi \kappa n}{\pi n}. \end{aligned}$$

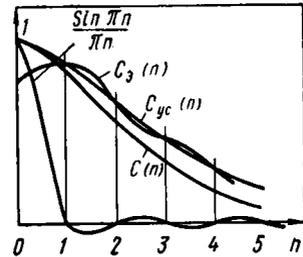


Рис. 98. Влияние конечного интервала и завышения фона на функцию $C(n)$

Из значения производной в нуле от функции $(\pi n)^{-1} \sin \pi \kappa n$:

$$\left. \frac{\partial}{\partial n} \cdot \frac{\sin \pi \kappa n}{\pi n} \right|_{n=0} = 0$$

и следует свойство (170).

Еще большие неприятности, и особенно при малых n , доставляет слагаемое $-I_\Phi (\pi n)^{-1} \sin \pi \kappa n = \Delta C_{yc}(n)$. Наибольшее значение это слагаемое имеет при $n=0$: $\Delta C_{yc}(0) = -I_\Phi(\kappa) \kappa$, что и приводит к загибу функции $C_3(n)$ вблизи начала координат, т. е. появлению недопустимой из физических соображений положительной производной $\frac{\partial}{\partial n} C_3(n) > 0$ (см. рис. 95).

В конечном итоге, функция $C_3(n)$ будет колебаться около функции $C_{yc}(n)$ (см. рис. 98), причем при $\kappa=1$ значения $C_3(n)$ и $C_{yc}(n)$ будут совпадать, если n — целое число; при $\kappa=1/2$ совпадение будет при n четном и т. д. Обычно колебания $C_3(n)$ около $C_{yc}(n)$ практически незаметны, в то время как эффект загиба при $n \rightarrow 0$ проявляется очень сильно.

Описанный здесь анализ соотношения (168б) был проведен Г. Джилли и А. Бори [25].

Для количественной оценки влияния замены функции $I^h(\Delta h)$ на функцию $I_s^h(\Delta h)$ авторы задались функцией распределения для величины доменов $\varphi(N)$, функцией распределения для деформаций $\varphi[\varepsilon(n)]$ в предположении $\frac{\partial \varepsilon}{\partial n} = 0$ и синтезировали дифракционные максимумы для двух порядков дифракции, задавши инструментальную кривую $I^g(\Delta h)$ в виде функции Коши. Оказалось, что при разумных по величине усечениях дифракционных профилей получаются значения размеров L , близкие к истин-

ным, причем величина усечения мало влияет на определяемый экспериментально размер L .

На рис. 96 показаны зависимости

$$\langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} = f(n), \quad (171)$$

полученные при различных усечениях. В данном случае при синтезе дифракционных профилей было взято значение $\langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} = 3,0 \cdot 10^{-3}$; как видно, это значение получается при $L > 150 \text{ \AA}$, а при $L < 150 \text{ \AA}$ характер зависимости (171) целиком определяется тем, как были обрезаны функции $I^\varepsilon(\Delta h)$ и $I^h(\Delta h)$, причем ясно прослеживается следующая тенденция: если сильнее обрезается первый порядок дифракции, то в области малых n $\frac{\partial \langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2}}{\partial n} < 0$, а при более сильном обрезании второго порядка $\frac{\partial \langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2}}{\partial n} > 0$.

Эти расчеты показывают, с какой осторожностью надо относиться к экспериментально получаемым зависимостям $\langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} = f(n)$, на основании которых часто делаются далеко идущие выводы о распределении дислокаций в кристалле.

Выражение (168б) может быть использовано также для анализа возможностей метода определения параметров тонкой структуры, основанного на использовании соотношения (164), когда вместо «хорошей» функции $C_{yc}(n)$ применяется «испорченная» функция $C_3(n)$. При сравнении этих двух функций необходимо нормировать их так, чтобы $C_{yc}(0) = C_3(0) = 1$.

Снабжая нормированную функцию индексом «н», получим из соотношения (169)

$$C_3^n(n) = \frac{C_3(n)}{C_3(0)} = \frac{C_{yc}(n) + \Delta C_{yc}(n)}{1 - S}, \quad (172)$$

где через S обозначена площадь $S = I_\Phi(x)x$, «отрезанная» от дифракционного профиля завышенным уровнем фона и функцией $\Pi(\Delta h)$.

Как мы уже отмечали, отсутствие заметных «волн» на функции $C_3(n)$ показывает, что $\Delta C_{yc}(n) \approx 0$ при $n \neq 0$, поэтому, учитывая, что $S \ll 1$, из формулы (172) получим

$$\ln C_3^n(n) = \ln C_{yc}(n) + S; \quad n \neq 0. \quad (172a)$$

Таким образом, вместо соотношения (164) при практической реализации метода определения параметров тонкой структуры по одной дифракционной линии надо писать, заменяя $C_3^n(n)$ на $A_3(n_3)$:

$$\ln A_3(n_3) = -2\pi^2 h_3^2 \langle \varepsilon^2 \rangle n_3^2 - \langle N_3^{-1} \rangle n_3 + S; \quad (172б)$$

теперь для определения $\langle \varepsilon^2 \rangle$ и $\langle N_3^{-1} \rangle$ нужно иметь, по крайней мере, три значения функции $A_3(n_3)$.

Выражение (1726) получено Б. Я. Пинесом и А. Ф. Сиренко [26]. Разумеется, при работе в режиме ф-сканирования монокристалла можно аналогичным способом получить средние размеры $\langle N_2^{-1} \rangle$ и разориентировку $\langle (\Delta\rho)^2 \rangle$.

По-видимому, использование соотношений типа (1726) является единственной сколько-нибудь приемлемой возможностью получения сведений о параметрах тонкой структуры из одного дифракционного максимума.

Рассмотрим, наконец, как влияет наличие K_α -дублета на определение коэффициентов Фурье дифракционного максимума.

Если определять $C_3(n)$, равные

$$C_3(n) = A_3(n) - iB_3(n),$$

взяв в качестве начала координат точку O' , отвечающую «видимому» максимуму профиля $I_3(\Delta h)$, то коэффициенты $B_3(n)$ при большой асимметрии профиля будут соизмеримы с $A_3(n)$. Значительно уменьшаются $B_3(n)$, если взять в качестве начала координат центр тяжести профиля (точка $\langle \Delta h \rangle$) на рис. 99.

В ряде случаев выгоднее сразу находить коэффициенты

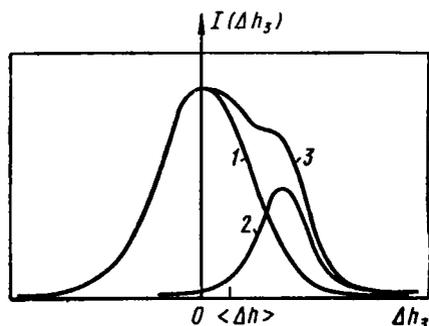


Рис. 99. Искажение дифракционного профиля из-за влияния K_α -дублета:

1 — компонента K_{α_1} ; 2 — компонента K_{α_2} ; 3 — суммарный профиль

Фурье для профиля, соответствующего только компоненте длины волны λK_{α_1} , принимая во внимание, что профиль $I_2(\Delta h_3)$, отвечающий компоненте λK_{α_2} , отличается только масштабом по оси ординат от профиля $I_1(\Delta h)$, отвечающего компоненте $\lambda K_{\alpha_1} = \lambda_1$.

Наиболее простой способ решения этой задачи указан Гангули [27].

При наличии близко расположенных компонент K_α -дублета, находящихся на расстоянии Δ по шкале Δh_3 :

$$\Delta = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} h_3^0,$$

где $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$.

Расстояние между компонентами по шкале $\Delta 2\theta$ равно

$$\delta = \Delta \frac{|\vec{b}_3|}{\cos \theta_0} = 2 \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \operatorname{tg} \theta_0.$$

«Видимый» профиль $I_3(\Delta h_3) = I_1 + I_2$ может быть записан как

$$I_3(\Delta h_3) = I_1(\Delta h_3) + r I_1(\Delta h_3 - \Delta), \quad (173)$$

где r — отношение интенсивности максимума, отвечающего компоненте λ_2 , к интенсивности максимума, отвечающего λ_1 .

Отыскивая $C_3(n_3)$ как $C_{yc}(n_3)$, т. е. применяя выражение (167а) и учитывая сдвиг Δ , получим из соотношения (173)

$$C_3(n_3) = \widehat{\mathcal{F}}_{yc}^{-1} [I_3^h(\Delta h_3)] = \widehat{\mathcal{F}}_{yc}^{-1} [I_3^1(\Delta h_3)] + r \widehat{\mathcal{F}}_{yc}^{-1} [I_1^h(\Delta h_3)] e^{i2\pi n_3 \frac{\Delta}{x}} = C_{31}^h(n_3) \left(1 + r e^{i2\pi n_3 \frac{\Delta}{x}} \right). \quad (173a)$$

Положив

$$\left. \begin{aligned} C_{31}^h(n_3) &= A_{31}^h(n_3) - iB_{31}^h(n_3); \\ p(n_3) &= 1 + r \cos 2\pi n_3 \frac{\Delta}{x}; \\ q(n_3) &= r \sin 2\pi n_3 \frac{\Delta}{x}, \end{aligned} \right\} \quad (173b)$$

получим из формул (173а) и (173б), опуская аргумент n_3 :

$$\begin{aligned} A_3^h &= A_{31}^h p + B_{31}^h q; \\ B_3^h &= -A_{31}^h q + B_{31}^h p, \end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned} A_{31}^h &= \frac{A_3^h p - B_3^h q}{p^2 + q^2}; \\ B_{31}^h &= \frac{B_3^h p + A_3^h q}{p^2 + q^2}. \end{aligned}$$

Как видно, отыскание коэффициентов Фурье, отвечающих только одному из компонент K_α -дублета, требует лишь знания величины r вдобавок к экспериментально найденным $C_3^h(n)$.

Вся рассмотренная в этом параграфе методика анализа формы дифракционного профиля годится при работе в параллельном пучке при $\vec{i}^0 = \text{const}$; незначительная расходимость первичного пучка полностью учитывается инструментальной функцией $I_3^h(\Delta h)$.

При работе в расходящемся пучке функция $I(\Delta\eta)$, наблюдаемая на пленке (рис. 100), получается в результате отображения функции

$$I_2'(h_2) = I^\omega(h_2) \oplus I^{*L_3}(h_2)$$

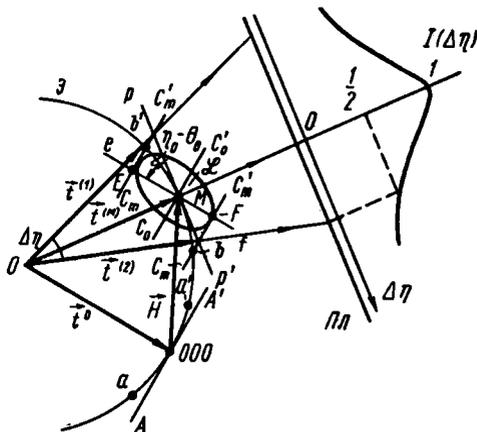


Рис. 100. Образование профиля $I(\Delta\eta)$ в способе расходящегося пучка

и функции

$$I'_3(\Delta h_3) = I^e(\Delta h_3) \oplus I^{*L_3}(\Delta h_3)$$

на ось \vec{b}_3'' (см. п. 8, гл. III), причем, как уже было выяснено, после отображения полученные функции надо свертывать:

$$I(\Delta\eta) = I^\omega(\Delta\eta) \oplus I^{*L_2}(\Delta\eta) \oplus I^e(\Delta\eta) \oplus I^{*L_3}(\Delta\eta). \quad (174)$$

Зададим функции $C^\omega(n_2)$, $C^{*L_2}(n_2)$, $C^e(n_3)$ и C^{*L_3} в виде

$$\left. \begin{aligned} C^\omega(n_2) &= e^{-2\pi^2 \langle h_2^2 \rangle n_2^2}; \\ C^{*L_2}(n_2) &= e^{-\langle {}^*N_2^{-1} \rangle |n_2|}; \\ C^e(n_3) &= e^{-2\pi^2 \langle \Delta h_3^2 \rangle n_3^2}; \\ C^{*L_3}(n_3) &= e^{-\langle {}^*N_3^{-1} \rangle |n_3|} \end{aligned} \right\} \quad (174a)$$

Если в Фурье-пространстве связь между координатами Δh_3 , h_2 и $\Delta\eta$ задана в виде $\Delta h_3 = \kappa_3 \Delta\eta$; $h_2 = \kappa_2 \Delta\eta$, где κ_2 и κ_3 определены соотношением (121a), то в пространстве объекта соотношения между соответствующими координатами будут иметь вид

$$\begin{aligned} n_3 &= l_3''/\kappa_3; \\ n_2 &= n_3''/\kappa_2. \end{aligned}$$

В итоге из соотношений (174) и (174a) получим

$$C(n_3'') = \hat{\mathcal{D}}^{-1} [I(\Delta\eta)] = e^{-2\pi^2 \langle h_2^2 \rangle \frac{n_3''^2}{\kappa_2^2}} e^{-\langle {}^*N_2^{-1} \rangle \frac{n_3''}{\kappa_2}} e^{-2\pi^2 \langle \Delta h_3^2 \rangle \frac{n_3''^2}{\kappa_3^2}} e^{-\langle {}^*N_3^{-1} \rangle \frac{n_3''}{\kappa_3}}$$

откуда в предположении $\langle {}^*L_2^{-1} \rangle = \langle {}^*L_3^{-1} \rangle \approx \langle {}^*L^{-1} \rangle$

$$\begin{aligned} -\ln C^{(j)}(n_3'') &= 2\pi^2 (\langle \varepsilon^2(n) \rangle \text{tg}^2 \theta_0^{(j)} + \langle \omega_{32}^2(n) \rangle) \times \\ &\times n_3''^2 + \frac{\lambda}{4 \langle {}^*L \rangle} \cdot \frac{\sin \theta_0^{(j)} + \cos \theta_0^{(j)}}{\sin \theta_0^{(j)} \cos \theta_0^{(j)}} n_3''. \end{aligned}$$

Как видно, для отыскания трех неизвестных параметров тонкой структуры необходимо иметь, по крайней мере, 3 порядка дифракции ($j = 1, 2, 3$ либо 2, 4, 6 и т. д.).

При практическом проведении Фурье-анализа непосредственно по функции $I(\Delta\eta)$ необходимо, как и ранее, учитывать соотношение между n_3'' и реальным номером $n_{3\zeta}''$ коэффициента Фурье, полученным на ограниченном промежутке ζ :

$$n_3'' = \frac{n_{3\zeta}''}{\zeta}.$$

При работе в режиме $\theta - 2\theta$ -сканирования в параллельном пучке можно проводить Фурье-анализ непосредственно по функции $I(\Delta 2\theta)$ на ограниченном промежутке τ , получая коэффициенты Фурье в зависимости от номера $n_{3\tau}^{\Delta\theta}$.

Для перехода к истинному номеру n_3 необходимо учесть не только интервал τ , но и изменение масштаба k_3 , происходящее при переходе от координаты Δh_3 к координате $\Delta 2\theta$.

Так как при работе в Фурье-пространстве

$$\Delta h_3 = k_3 \Delta 2\theta,$$

$$\text{где } k_3 = \frac{\cos \theta_0}{|\vec{b}_3|},$$

то при переходе к пространству объекта с помощью полного Фурье-преобразования соотношение между n_3 и координатой $n_{3\tau}^{\Delta\theta}$, соответствующей работе по шкале $\Delta 2\theta$, будет иметь вид

$$n_3 = \frac{n_{3\tau}^{\Delta\theta}}{k_3}.$$

В итоге при проведении Фурье-анализа на ограниченном промежутке τ получим

$$n_3 = \frac{n_{3\tau}^{\Delta\theta}}{k_3 \tau}.$$

Очевидно, при проведении Фурье-анализа функции $I(\Delta\varphi)$, полученной методом $\Delta\varphi$ -сканирования на ограниченном промежутке ψ , получим

$$n_2 = \frac{n_{2\psi}^{\Delta\varphi}}{k_2 \psi},$$

$$\text{где } k_2 = \frac{2 \sin \theta_0}{|\vec{b}_2|}.$$

9. Отыскание параметров тонкой структуры непосредственно по дифракционным максимумам, без перехода в пространство объекта

Помимо использования аппарата Фурье-преобразования, основное уравнение (156а), содержащее слева экспериментально определяемую функцию $I'(\Delta\vec{h})$, а справа — свертку неизвестных функций, каждая из которых описывает влияние какого-либо из параметров тонкой структуры, может быть проанализировано при помощи соотношения (158а), не требующего перехода от Фурье-пространства к пространству объекта.

В отличие от способа с использованием соотношения (30), при котором удобно нормировать функции типа I^e , I^ω и т. д. так, чтобы всегда удовлетворялось условие

$$\int_{-\infty}^{\infty} I^e(\Delta h_3) d\Delta h_3 = \int_{-\infty}^{\infty} I^\omega(h_1, h_2) dh_1 dh_2 =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} I^L(h_1, h_2, \Delta h_3) dh_1 dh_2 d\Delta h_3 =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} I^{o.y}(h_1, h_2, \Delta h_3) dh_1 dh_2 d\Delta h_3 = 1,$$

т. е. нормировать функции $C(n)$ или $A(n)$ так, чтобы все коэффициенты

$$C(0) = A(0) = 1,$$

при использовании соотношения (158а) удобно нормировать все функции I^e , I^ω и т. д. таким образом, чтобы

$$I^e(0) = I^\omega(0) = I^L(0) = I^{o.y}(0) = 1.$$

Определив интегральную ширину β дифракционного максимума $I(\Delta \vec{h})$ как

$$\beta = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} I(\Delta \vec{h}) d\Delta \vec{h}}{I(0)},$$

мы можем, используя соотношение (158а), переписать формулу (156а), полагая $I(\Delta \vec{h}) = I^f(\Delta \vec{h})$, в виде

$$\beta^f = \frac{\beta^e \beta^\omega \beta^L \beta^{o.y}}{\int_{-\infty}^{\infty} I^e I^\omega I^L I^{o.y} d\Delta \vec{h}}, \quad (175)$$

причем для сокращения записи в интеграле опущены аргументы функций I^e , I^ω и т. д. Для того чтобы извлечь из соотношения (175) информацию о параметрах тонкой структуры, нужно, во-первых, вычислить интеграл, стоящий в знаменателе выражения (175), и, во-вторых, найти в явном виде связь между интегральными ширинами β^e , β^ω и т. д. и параметрами тонкой структуры.

Проще всего решить первую задачу, аппроксимируя I^e , I^ω и т. д. подходящими аналитическими функциями (почему этот метод и называется методом аппроксимации). Наиболее простой вид соотношения (175) принимает в том случае, когда I^e , I^ω и т. д. — функции Гаусса, либо когда все они — функции Коши,

так как в п. 4 гл. I было установлено, что при свертке любого числа функций Гаусса снова получается функция Гаусса, а при свертке функций Коши — функция Коши.

Работая для определенности в режиме $\theta - 2\theta$ -сканирования и задавая соответствующие функции в виде

$$\left. \begin{aligned} I^e(\Delta h_3) &= \exp -k_1^2(\Delta h_3)^2; \\ I^L(\Delta h_3) &= \exp -k_2^2(\Delta h_3)^2; \\ I^{o.y}(\Delta h_3) &= \exp -k_3^2(\Delta h_3)^2, \end{aligned} \right\} \quad (176)$$

где $k_j^2 = \frac{1}{2 \langle (\Delta h_3)^2 \rangle_j}$,

получим, что

$$\beta^{(j)} = \frac{\sqrt{\pi}}{k_j} = \sqrt{2\pi \langle (\Delta h_3)^2 \rangle_j} \quad (176a)$$

$$\text{и } (\beta_\theta^f)^2 = (\beta_\theta^e)^2 + (\beta_\theta^L)^2 + (\beta_\theta^{o.y})^2$$

При работе в режиме ϕ -сканирования получим

$$(\beta_\phi^f)^2 = (\beta_\phi^e)^2 + (\beta_\phi^L)^2 + (\beta_\phi^{o.y})^2,$$

если соответствующие функции также заданы в виде «колокола» Гаусса.

Задавая функции типа I^e , I^ω и т. д. в виде

$$I^{(j)}(\Delta h_j) = [1 + k_j^2(\Delta h_j)^2]^{-1}, \quad (176б)$$

получим, что

$$\beta^{(j)} = \frac{\pi}{k_j}. \quad (176в)$$

В случае $\theta - 2\theta$ -сканирования

$$\beta_\theta^f = \beta_\theta^e + \beta_\theta^L + \beta_\theta^{o.y}, \quad (176г)$$

а в случае ϕ -сканирования

$$\beta_\phi^f = \beta_\phi^e + \beta_\phi^L + \beta_\phi^{o.y}$$

Описание функций I^e , I^ω и т. д. другими «колоколообразными» функциями не дает таких простых соотношений, как случаи (176) и (176б).

Как отмечалось в п. 5, профили I^L и $I^{o.y}$ достаточно хорошо описываются функциями Коши; в этом случае можно обозначить

$$\beta^L + \beta^{o.y} = \beta^{*L}$$

и рассматривать в соотношении (175) вместо двух величин β^L и $\beta^{o.y}$ только ширину β^{*L} .

Так как при работе рассматриваемым методом сведения о функциях распределения по деформациям получены быть не могут, целесообразно вести вычисления в рамках модели малых

деформаций и справедливости соотношения (1436), что соответствует описанию функций I^e и I^o функциями Гаусса (176).

Учитывая также, что функции $I^L(\Delta h)$ и $I^o.y(\Delta \vec{h})$ не плохо описываются выражениями типа (176а), целесообразно аппроксимировать функцию $I^f(\Delta \vec{h})$ сверткой

$$I^f(\Delta \vec{h}) = \exp -k_1^2 |\Delta \vec{h}|^2 \oplus [1 + k_2^2 |\Delta \vec{h}|^2]^{-1}, \quad (177)$$

т. е. использовать ту же комбинацию аппроксимирующих функций, которая позволяет получить сведения о параметрах тонкой структуры по функциям $C_s(n)$, получаемым из одного порядка дифракции (1726).

Функция типа (177) называется функцией Фойгта; задание этой функции в виде таблиц можно найти в работе [28].

Соотношение (175) в случае функции Фойгта принимает вид

$$\beta^f = \frac{\beta^e \exp \left[- \left(\frac{\beta^{*L}}{\beta^e} \right)^2 \pi^{-1} \right]}{2 \left[\frac{1}{2} - \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\beta^{*L}}{\beta^e} \right) \right]}, \quad (178)$$

$$\text{где } \operatorname{erf} x = (2\pi)^{-1/2} \int_0^x e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

Как показали Хальдер и Вагнер, «параболическое» приближение

$$\frac{\beta^{*L}}{\beta^f} = 1 - \left(\frac{\beta^e}{\beta^f} \right)^2 \quad (178a)$$

очень хорошо заменяет более сложное соотношение (178), полученное в результате аппроксимации (177) типа Гаусс—Коши. Степень этого приближения хорошо видна на рис. 101, где даны зависимости $\beta^{*L}/\beta^f = f(\beta^e/\beta^f)$, соответствующие различным комбинациям аппроксимирующих функций.

Аппроксимация (178a) близка к среднему арифметическому между случаем Коши—Коши, для которого

$$\frac{\beta^{*L}}{\beta^f} = 1 - \frac{\beta^e}{\beta^f},$$

и случаем Гаусс—Гаусс, для которого

$$\left(\frac{\beta^{*L}}{\beta^f} \right)^2 = 1 - \left(\frac{\beta^e}{\beta^f} \right)^2$$

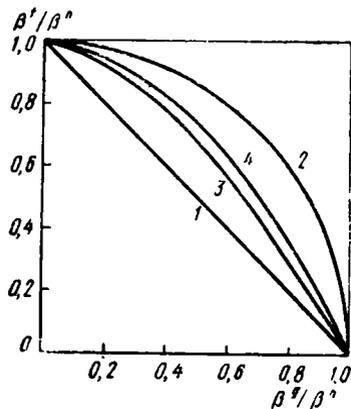


Рис. 101. График для выделения β^f из β^h и β^g либо для выделения β^e и β^L из β^f . Во втором случае по оси абсцисс нужно откладывать β^e/β^f , по оси ординат β^{*L}/β^f .

- 1 — аппроксимация Коши—Коши;
- 2 — аппроксимация Гаусс—Гаусс;
- 3 — аппроксимация Гаусс—Коши;
- 4 — «параболическое» приближение

При работе в режиме ф-сканирования «параболическое» приближение имеет вид

$$\frac{\beta^* L}{\beta^f} = 1 - \left(\frac{\beta^\omega}{\beta^f} \right)^2$$

Не составляет труда найти связь между интегральной шириной дифракционного максимума и соответствующим параметром тонкой структуры.

При аппроксимации функциями Гаусса (176) выражение для интегральной ширины имеет вид (176а). Наибольшую ценность эта аппроксимация представляет при описании искажений, связанных с действием полей $\hat{\varepsilon}$ и $\hat{\omega}$.

При $\theta - 2\theta$ -сканировании получим, учитывая соотношения (144):

$$\beta^e(\Delta h_3) = \sqrt{2\pi} \langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} h_3^0 \quad (179)$$

Аналогично, при работе в режиме ф-сканирования с учетом выражения (148б) получим

$$\beta^\omega(h_2) = \sqrt{2\pi} \frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_1|} \langle \omega_{32}^2 \rangle^{1/2} h_3^0 \quad (179a)$$

В обоих случаях интегральная ширина оказывается пропорциональной номеру узла на дифракционном векторе. Обычно вычисление интегральной ширины делается непосредственно по дифракционному максимуму, записанному в зависимости от угла $\Delta 2\theta$ или $\Delta\varphi$; очевидно, при этом нужно учесть изменение масштаба, имеющее место при переходе от шкалы Δh_3 к шкале $\Delta 2\theta$ и от шкалы h_2 к шкале $\Delta\varphi$.

Учитывая соотношения (166) и (166б), получим

$$\beta^e(\Delta 2\theta) = \beta^e(\Delta h_3) \frac{|\vec{b}_3|}{\cos \theta_0};$$

$$\beta^\omega(\Delta\varphi) = \beta^e(h_2) \frac{|\vec{b}_2|}{2 \sin \theta_0}.$$

Заменяя в соотношениях (179) и (179а) h_3^0 на $\frac{2 \sin \theta_0}{|\vec{b}_3|}$, можно записать, что

$$\beta^e(\Delta 2\theta) = 2 \sqrt{2\pi} \langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} \operatorname{tg} \theta_0; \quad (180)$$

$$\beta^\omega(\Delta\varphi) = \sqrt{2\pi} \langle \omega_{32}^2 \rangle^{1/2} \quad (180a)$$

Строго говоря, для дифракционных максимумов большой ширины переход от шкалы Δh_3 к шкале $\Delta 2\theta$ должен был бы осуществляться при помощи более точного соотношения (166а), однако

обычно и для широких максимумов пользуются масштабным множителем $|\vec{b}_3| \sec \theta_0$.

Часто вместо выражения (180) применяется соотношение

$$\beta^e(\Delta 2\theta) = 4 \frac{\Delta d}{d} \operatorname{tg} \theta_0, \quad (181)$$

которое можно получить без всяких «фокусов», попросту дифференцируя соотношение $\lambda = 2d \sin \theta$

$$\text{и полагая } \langle \epsilon^2 \rangle^{1/2} = \frac{\Delta d}{d} \quad (181a)$$

$$\text{и } \beta^e(\Delta 2\theta) = 2 \Delta 2\theta. \quad (182)$$

Соотношение (181a), как уже было показано в п. 4, справедливо только при $\frac{\partial \epsilon(n)}{\partial n} = 0$, когда функция распределения для деформации является Гауссовой. В то же время соотношение (182) имеет смысл только для функции распределения вида

$$\varphi(\epsilon) = \varphi(\Delta 2\theta) = \Pi(\Delta 2\theta) = \begin{cases} 1 & \text{при } |\Delta 2\theta| \leq \frac{\beta^e}{2} \\ 0 & \text{при } |\Delta 2\theta| > \frac{\beta^e}{2}. \end{cases}$$

Хотя соотношение (181) и не имеет физического смысла, численный коэффициент в соотношении (181) всего на 25% отличается от коэффициента в точном выражении (180), так как $\sqrt{2\pi}/2 = 1,25$.

При аппроксимации функциями Коши (176б) интегральная ширина записывается в виде соотношения (176в). Наибольшую ценность эта аппроксимация приобретает при описании влияния размеров доменов и ошибок укладки. Учитывая выражения (176в) и (153а), получим при $\theta = 2\theta$ -сканировании

$$\beta^{*L}(\Delta h_3) = \frac{1}{2 \langle {}^*N_3 \rangle}, \quad (183)$$

где $\langle {}^*N_3^{-1} \rangle \approx \langle {}^*N_3 \rangle^{-1}$.

В отличие от интегральных ширин $\beta^e(\Delta h_3)$ и $\beta^\omega(h_2)$, ширина $\beta^{*L}(\Delta h_3)$ не зависит от координат дифракционного вектора; этот вывод справедлив только в случае отсутствия в структуре ошибок укладки либо тогда, когда рассматриваются максимумы, у которых параметр $\langle {}^*N^{-1} \rangle$ имеет одно и то же значение.

При работе в режиме φ -сканирования

$$\beta^{*L}(h_2) = \frac{1}{2 \langle {}^*N_2 \rangle} \quad (183a)$$

Для перехода к шкалам $\Delta 2\theta$ и $\Delta\varphi$ нужно использовать те же, что и ранее, масштабные множители:

$$\beta^{*L}(\Delta 2\theta) = \beta^{*L}(\Delta h_3) \frac{|\vec{b}_3|}{\cos \theta_0};$$

$$\beta^{*L}(\Delta\varphi) = \beta^{*L}(h_2) \frac{|\vec{b}_2|}{2 \sin \theta_0}.$$

Учитывая соотношения (183) и (183а) и обозначая

$$\langle *L_3 \rangle = \langle *N_3 \rangle |\vec{a}_3| \text{ и } \langle *L_2 \rangle = \langle *N_2 \rangle |\vec{a}_2|,$$

получим окончательно

$$\beta^{*L}(\Delta 2\theta) = \frac{\lambda}{2 \langle *L_3 \rangle \cos \theta_0} \quad (184)$$

$$\text{и } \beta^{*L}(\Delta\varphi) = \frac{\lambda}{4 \langle *L_2 \rangle \sin \theta_0}. \quad (184а)$$

Обычно связь между интегральной шириной, определяемой по шкале $\Delta 2\theta$, и размером области когерентного рассеяния D , определяемой из ширины, записывается в виде

$$\beta^D(\Delta 2\theta) = \frac{\lambda}{D \cos \theta_0}, \quad (184б)$$

так что величина D оказывается связанной со средним «эффективным» размером домена $\langle *L \rangle$ соотношением

$$D = \hat{\mathcal{Z}} \langle *L_3 \rangle,$$

которое необходимо принимать во внимание, если сравнивать друг с другом размеры о. к. р., получаемые методом аппроксимации, когда D находится из выражения (184 б), и методом анализа в пространстве объекта, когда отыскивается $\langle *L_3 \rangle$. Обычно выражения (181) и (184б) применяются при θ — 2θ -сканировании во всех случаях независимо от того, какими функциями аппроксимируются дифракционные максимумы, в чистом виде описывающие влияние тензорного поля $\hat{\epsilon}$ и размеров о. к. р. что, строго говоря, является неправильным.

В частности, при аппроксимации $I^e(\Delta h_3)$ функцией Коши величина $\langle \epsilon^2 \rangle^{1/2}$ определена быть не может. Вместо нее удобно ввести ширину функции распределения на половине высоты $2\epsilon \frac{1}{2}$.

Легко проверить, что в выражении $(1 + k^2 \epsilon^2)^{-1}$ постоянная k равна

$$k^2 = \left(\frac{\epsilon_1}{2} \right)^{-2},$$

так что интегральная ширина функции $I^e(\Delta 2\theta)$ оказывается равной

$$\beta^e(\Delta 2\theta) = 2\pi \varepsilon_1 \frac{\text{tg } \theta_0}{2}. \quad (184\text{в})$$

Так как наиболее физически оправданной является аппроксимация Гаусс—Коши, хорошо описываемая «параболическим» приближением (178 а), то соотношения (180) и (84) должны применяться только вместе с этим приближением.

Учитывая, однако, что при использовании рассматриваемого метода приходится оставаться в рамках простой модели $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial n} = 0$ и принимать, что функция распределения по размерам о. к. р. имеет также простой вид

$$\varphi(N) = \delta(N - \langle N \rangle),$$

а также учитывая невысокую точность эксперимента, можно принять, что применение выражений (180) и (184) или даже (181) и (184б) для всех комбинаций аппроксимирующих функций является практически вполне допустимым.

Перепиывая соотношение (178 а) в виде

$$(\beta^e)^2 + \beta^f \beta^{*L} = (\beta^f)^2$$

и используя выражения (180) и (184), получим

$$8\pi \text{tg}^2 \theta_0 \langle \varepsilon^2 \rangle + \frac{1}{2} \lambda \beta_\theta^f \sec \theta_0 \langle {}^*L_3 \rangle^{-1} = (\beta_\theta^f)^2; \quad (185)$$

аналогично, при φ -сканировании

$$2\pi \langle \omega_{32}^2 \rangle + \frac{1}{4} \lambda \beta_\varphi^f \text{cosec } \theta_0 \langle {}^*L_2 \rangle^{-1} = (\beta_\varphi^f)^2$$

Как видно, для отыскания двух неизвестных $\langle \varepsilon^2 \rangle$ и $\langle {}^*L_3 \rangle^{-1}$ в первом случае и $\langle \omega_{32}^2 \rangle$ и $\langle {}^*L_2 \rangle^{-1}$ во втором, необходимо каждый раз иметь по два уравнения. В оптимальном случае необходимо снова использовать два порядка дифракции со всеми предосторожностями, связанными с возможным влиянием ошибок укладки.

Обозначая коэффициенты при неизвестных в системе (185) как

$$c_{11} = 8\pi \text{tg}^2 \theta_0 (1);$$

$$c_{12} = \frac{1}{2} \lambda \beta_\theta^f (1) \sec \theta_0 (1);$$

$$c_{21} = 8\pi \text{tg}^2 \theta_0 (2);$$

$$c_{22} = \frac{1}{2} \lambda \beta_\theta^f (2) \sec \theta_0 (2),$$

где индексы 1 и 2 θ_0 относятся к первому и второму порядкам дифракции, получим

$$\langle \varepsilon^2 \rangle = \frac{\begin{vmatrix} -(\beta_0^f(1))^2 & c_{12} \\ -(\beta_0^f(2))^2 & c_{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix}} \quad (185a)$$

$$\langle {}^*L_3 \rangle^{-1} = \frac{\begin{vmatrix} c_{11} - (\beta_0^f(1))^2 & \\ c_{21} - (\beta_0^f(2))^2 & \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix}}$$

Аналогично находятся $\langle \omega_{32}^2 \rangle$ и $\langle {}^*L_2 \rangle^{-1}$

Для того чтобы обойти трудности, связанные с тем, что имеется очень мало векторов \vec{h} , на которых можно использовать два порядка дифракции, принимают, что величина

$$\langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} E = \langle \sigma \rangle,$$

где E — модуль упругости для направления в объекте, параллельного вектору \vec{h} , остается инвариантной при переходе от одного вектора \vec{h} к другому.

В этом случае соотношение (185) может быть переписано в виде

$$8\pi \operatorname{tg}^2 \theta_0 E^{-2} \langle \sigma^2 \rangle + \frac{1}{2} \lambda \beta_0^f \operatorname{sec} \theta_0 \langle {}^*L_3 \rangle^{-1} = (\beta_0^f)^2,$$

и решение системы уравнений можно снова искать в форме (185a), где коэффициенты c_{11} и c_{21} равны

$$c_{11} = 8\pi \operatorname{tg}^2 \theta_0(1) E^{-2}(1);$$

$$c_{21} = 8\pi \operatorname{tg}^2 \theta_0(2) E^{-2}(2),$$

причем индексы 1 и 2 теперь уже относятся к двум максимумам, не расположенным на одном векторе \vec{h} .

При таком подходе, кроме условия инвариантности $\langle \sigma \rangle$, принимается, что инвариантной остается и величина $\langle {}^*L_3 \rangle^{-1}$.

Недавно В. И. Иверонова и Н. Н. Осипенко [29] показали, что аналогичный прием может быть применен и при работе с коэффициентами Фурье $C_n(n)$.

Наиболее деликатной операцией, и особенно тогда, когда ширина «инструментальной» кривой β^g не сильно отличается от ширины экспериментально наблюдаемого дифракционного максимума

β^h , является операция выделения «физической» ширины β^f . Так как и в этом случае справедливо очевидное соотношение

$$\beta^h = \frac{\beta^g \beta^f}{\int_{-\infty}^{\infty} I^f(\Delta \vec{h}) I^g(\Delta \vec{h}) d\Delta \vec{h}},$$

то все, что было сказано о процедуре выделения β^e , β^ω и β^L из «физической» ширины β^f , целиком относится и к рассматриваемой процедуре.

Конечно, наиболее точным способом является отыскание по функциям $I^h(\Delta \vec{h})$ и $I^g(\Delta \vec{h})$ коэффициентов Фурье $C_3^h(n)$ и $C_3^g(n)$, вычисление коэффициентов

$$C_3^f(n) = \frac{C_3^h(n)}{C_3^g(n)}$$

и нахождение интегральной ширины из очевидного соотношения

$$\beta^f = \frac{C_3^f(0)}{\sum_{n=-\infty}^{\infty} C_3^f(n)} = \frac{1}{\sum_{n=-\infty}^{\infty} C_3^f(n)}$$

Однако, как правило, этот путь сторонниками метода аппроксимации игнорируется, так как он вступает в противоречие с основной идеей метода — не пользоваться коэффициентами Фурье.

Практически при отыскании величины β^f по найденным экспериментально β^h и β^g дело сводится к употреблению одной из рассмотренных комбинаций аппроксимируемых функций, причем для работы может быть использован рис. 101, на котором по оси абсцисс в этом случае надо откладывать величину β^g/β^h , а по оси ординат — β^f/β^h .

«Параболическое» приближение (кривая 4) в этом случае выглядит как

$$\frac{\beta^f}{\beta^h} = 1 - \left(\frac{\beta^g}{\beta^h} \right)^2 \quad (186)$$

и рядом авторов рекомендуется как наиболее подходящее для отыскания «физической» ширины β^f .

Можно рассмотреть возможные схемы комбинаций аппроксимирующих функций на этапе выделения β^f из β^h (I этап) и на втором этапе — выделения β^e (β^ω) и β^L из β^f , обозначая: Γ — функция Гаусса, K — функция Коши, Φ — функция Фойгта, K^2 — функция $(1 + k^2 x^2)^{-2}$:

$$\begin{array}{ll} \Gamma^f \oplus \Gamma^g = \Gamma^h(\Gamma) & \text{I} \quad K^f \oplus K^g = I_3^h(K) \\ \text{a} \quad \downarrow & \text{б} \quad \downarrow \\ \Gamma^f = \Gamma^e \oplus \Gamma^L & \text{II} \quad K^f = K^e \oplus K^L \end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
\Gamma^f \oplus K^g = I_3^h (\Phi) & \text{I } K^f \oplus \Gamma^g = I_3^h (\Phi) \\
\text{в } \downarrow & \Gamma \downarrow \\
\Gamma^f = \Gamma^e \oplus \Gamma^L & \text{II } K^f = K^e \oplus K^L \\
\\
K^f \oplus K^{2g} = I_3^h & \text{I } K^{2f} \oplus K^g = I_3^h \\
\text{д } \downarrow & \text{е ?} \\
K^f = K^e \oplus K^L & \text{II } I^f = K^{2e} \oplus K^L \\
\\
K^{2f} \oplus K^{2g} = I_3^h & \text{I } \Gamma^f \oplus K^g = I_3^h (\Phi) \\
\text{ж } ? & \text{з ?} \\
I^f = K^{2e} \oplus K^{2L} & \text{II } I^f (\Phi) = \Gamma^e \oplus K^L \\
\\
\Phi^f \oplus K^g = I_3^h (\Phi) & \text{I} \\
\text{и } \downarrow & \\
\Phi^f = \Gamma^e \oplus K^L & \text{II}
\end{array}$$

Логическая связь между комбинациями, применяемыми на первом и втором этапах, соблюдается в вариантах «а»—«д», однако во всех этих случаях комбинации функций, применяемых на втором этапе, не являются оптимальными. Так как для функции Гаусса $\partial/\partial n C(n)|_{n=0} = 0$, то эта функция не может применяться для описания профиля $I^L(\Delta h)$, и вариант «в» не имеет права на существование. Более удачные комбинации показаны в вариантах «е»—«з», однако при этом функция I^f , применяемая на втором этапе, не совпадает с выделенной на первом этапе. Наиболее приемлемым вариантом оказывается последний «и», у которого на втором этапе фигурирует наиболее удачная, из физических соображений, комбинация $\Gamma^e \oplus K^L$, а на первом этапе применяется функция K^g , обычно хорошо описывающая инструментальный дифракционный максимум.

Так как свертка функции Фойгта с функцией Коши (или Гаусса) снова дает функцию Фойгта, для выделения β^f на первом этапе и разделения β^e и β^L на втором этапе может применяться параболическое приближение в форме (186) и (178а).

Используя соотношение (168б), можно оценить ошибки, возникающие при замене истинной функции $I(\Delta h)$ экспериментально наблюдаемой функцией $I_3(\Delta h)$ (см. рис. 97).

Как видно, систематическая ошибка $\Delta\beta_{\pm}^h$, возникающая при замене функции $I(\Delta h)$ на функцию $I_3(\Delta h)$, равна

$$\Delta\beta = \beta - \beta_3 = \frac{S + S_1}{I^h(0)} \approx \frac{S + S_1}{I_3(0)},$$

где $S + S_1$ — площадь, отсеченная от истинной кривой.

Для того чтобы понять, как сказывается ошибка $\Delta\beta$ на результате определения параметров тонкой структуры, достаточно рассмотреть всю процедуру в рамках приближения Коши—Коши на обоих этапах разделения.

На первом этапе получим

$$\Delta\beta^f = (\Delta\beta^h - \Delta\beta^g) > 0,$$

так как для более узкой g -кривой ошибка $\Delta\beta^g$ должна быть меньше, чем для более размытой h -кривой.

Используя на втором этапе соотношения (176г), (184а) и (184в), получим

$$\beta^f \cos \theta_0 = \lambda \langle 2^* L_3 \rangle^{-1} + 2\pi \varepsilon_{\frac{1}{2}} \sin \theta_0. \quad (187)$$

В координатах $\beta^f \cos \theta_0 = f(\sin \theta_0)$ соотношение (187) изображается прямой, проведенной через 2 точки, полученные на двух порядках дифракции.

Как правило, экспериментальные точки лежат ниже, чем это было бы в отсутствие ошибок. Соотношение между экспериментально определяемыми величинами $\langle *L_{3g} \rangle$, $\frac{\varepsilon_1}{2}$ и их истинными значениями $\langle *L_3 \rangle$ и $\varepsilon_{\frac{1}{2}}$ зависит от соотношения величин $\Delta\beta^f(1) \times \cos \theta_0(1)$ и $\Delta\beta^f(2) \cos \theta_0(2)$.

Обычно при наличии в структуре не очень малых $\varepsilon_{\frac{1}{2}}$ и не очень больших $\langle *L_3 \rangle$ ошибки, связанные с отсечением части дифракционного профиля и с неточным подбором аппроксимирующих функций, сильнее сказываются на размерах областей когерентного рассеяния, чем на величине деформаций, в противоположность методу, использующему коэффициенты Фурье, при котором ошибки, связанные с отсечением части профиля, сказываются в основном лишь на виде функции $\langle \varepsilon^2(n_3) \rangle = f(n_3)$ в области малых значений n_3 .

Второй способ, позволяющий определять параметры тонкой структуры без перехода в пространство объекта непосредственно по дифракционным максимумам, основан на соотношении (47а). Обозначая нормированный второй центральный момент m_2 через W и называя эту величину вариансом, получим из соотношения (47а)

$$W_{\infty}^h = W_{\infty}^f + W_{\infty}^g, \quad (187а)$$

где $W_{\infty}^f = W_{\infty}^e + W_{\infty}^{*L}$ для θ — 2θ -сканирования и $W_{\infty}^f = W_{\infty}^e + W_{\infty}^{*L}$ для φ -сканирования.

Принимая, что $I^e(\Delta h_3)$ описывается функцией Гаусса в форме (176), получим

$$W_{\infty}^e(\Delta h_3) = \langle (\Delta h_3)^2 \rangle$$

или, используя соотношение (144):

$$W_{\infty}^e(\Delta h_3) = \langle \varepsilon^2 \rangle h_3^2.$$

Аналогично, для W_{∞}^{ω} получим

$$W_{\infty}^{\omega}(h_2) = \langle h_2^2 \rangle = \left(\frac{|\vec{a}_2|}{|\vec{a}_3|} \right) \langle \omega_{32}^2 \rangle h_3^2$$

Если работать не по шкале Δh_3 , а по шкале $\Delta 2\theta$, то надо снова использовать известный нам масштабный множитель $|\vec{b}_3| \sec \theta_0$, взятый в квадрате, так как при вычислении W^e используется абсцисса, возведенная в квадрат:

$$W_{\infty}^e(\Delta 2\theta) = W_{\infty}^e(\Delta h_3) \left(\frac{|\vec{b}_3|}{\cos \theta_0} \right)^2 = 4 \langle \varepsilon^2 \rangle \operatorname{tg}^2 \theta_0. \quad (188)$$

Аналогично:

$$W_{\infty}^{\omega}(\Delta \varphi) = W_{\infty}^{\omega}(h_2) \left(\frac{|\vec{b}_2|}{2 \sin \theta_0} \right)^2 = \langle \omega_{32}^2 \rangle.$$

Если аппроксимировать профиль $I^{*L}(\Delta h_3)$ функцией Коши (176б), то вариант $W^{*L}(\Delta h_3)$ может быть вычислен только в конечных пределах на отрезке $(-\sigma, \sigma)$:

$$W_{\sigma}^{*L}(\Delta h_3) = \frac{k}{\pi} \int_{-\sigma_1}^{\sigma_2} \frac{(\Delta h_3)^2 d\Delta h_3}{1 + k^2 (\Delta h_3)^2}. \quad (188a)$$

Согласно выражению (153а), $k \approx 2\pi \langle *N_3 \rangle$, где $\langle *N^{-1} \rangle \approx \langle *N_3 \rangle$.

Можно оценить величину $k^2(\Delta h_3)^2$, задавшись разумной величиной $\langle *N_3 \rangle$. Наиболее неблагоприятная оценка имеет место для малых $\langle *N_3 \rangle$. Взяв $\langle *N_3 \rangle = 5 \cdot 10$, что соответствует $\langle *L \rangle$ порядка 100 Å, получим для $\Delta h_3 = 10^{-2}$ оценку

$$k^2 (\Delta h_3)^2 = 4\pi^2 \langle *N_3 \rangle^2 (\Delta h_3)^2 \approx 10.$$

При $\Delta h_3 > 10^{-2}$ и $\langle *N_3 \rangle > 5 \cdot 10$

$$k^2 (\Delta h_3)^2 \gg 1,$$

поэтому уже на незначительном расстоянии от начала координат вместо функции Коши $[1 + k^2(\Delta h_3)^2]^{-1}$ при вычислении варианта может быть взята функция $[k^2(\Delta h_3)^2]^{-1}$, т. е. вместо соотношения (188а) можно записать

$$W_{\sigma}^{*L}(\Delta h_3) = \frac{1}{\pi k} \int_{-\sigma_1}^{\sigma_2} d\Delta h_3 = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2\pi^2} \langle *N_3^{-1} \rangle.$$

Для перехода к шкале $\Delta 2\theta$ надо учесть, что в соотношении (188а) от масштаба по оси абсцисс зависит и σ . Обозначая пределы,

в которых происходит вычисление варiances через τ_1 и τ_2 и принимая во внимание соотношение

$$\tau = \sigma \frac{|\vec{b}_3|}{\cos \theta_0},$$

получим

$$W_{\tau}^{*L}(\Delta 2\theta) = \frac{\lambda \langle {}^*L_3^{-1} \rangle}{2\pi^2 \cos \theta_0} (\tau_1 + \tau_2). \quad (188б)$$

Если не задаваться конкретным видом функций $I^e(\Delta h_3)$, $I^L(\Delta h_3)$ и т. д., можно отыскивать варiances, используя коэффициенты $C(n)$:

$$W(\Delta h) = \int (\Delta h)^2 \widehat{\mathcal{F}}[C(n)] d\Delta h.$$

При практической реализации этой возможности приходится ограничиваться условиями малых $ne(n)$, $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial n} = 0$ и рассматривать поведение функции $C(n)$ и ее производных вблизи начала координат. В этом случае для варiances W_{∞}^e и W_{τ}^{*L} при разумных предположениях о поведении функции $C(n)$ и ее производных вблизи начала координат [30] снова получаются выражения (188) и (188б), которые мы получили более простым способом, сразу задавшись для описания профилей $I^e(\Delta h_3)$ и $I^{*L}(\Delta h_3)$ функциями Гаусса и Коши.

Принимая ошибку, возникающую от замены варiances W_{∞}^{*L} , вычисленного в бесконечных пределах, варiancesм W_{τ}^{*L} , пренебрежимо малой, мы можем снова воспользоваться соотношением (47а) и (156а) и записать, что

$$W_{\infty}^f = W_{\infty}^e + W_{\tau}^{*L}, \quad (188в)$$

откуда, используя соотношения (188) и (188б), получим, переходя к шкале $\Delta 2\theta$:

$$W_{\infty}^f = 4 \langle \varepsilon^2 \rangle \operatorname{tg}^2 \theta_0 + \frac{\lambda}{2\pi^2} \langle {}^*L_3^{-1} \rangle \sec \theta_0 (\tau_1 + \tau_2). \quad (189)$$

Из этого соотношения параметры тонкой структуры $\langle \varepsilon^2 \rangle$ и $\langle {}^*L_2^{-1} \rangle$ легко могут быть определены по двум порядкам дифракции, аналогично (185а), причем

$$c_{11} = 4 \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(1)};$$

$$c_{12} = \frac{\lambda}{2\pi^2} \sec \theta_0^{(1)} (\tau_1 + \tau_2)_1;$$

$$c_{21} = 4 \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(2)};$$

$$c_{22} = \frac{\lambda}{2\pi^2} \sec \theta_0^{(2)} (\tau_1 + \tau_2)_2.$$

При желании можно воспользоваться максимумами, принадлежащими различным векторам \vec{h} , принимая инвариантность величин $\langle *L^{-1} \rangle$ и $\langle e^2 \rangle^{1/2} E$; в этом случае

$$c_{11} = 4E^{-2} (1) \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(1)}$$

$$\text{и } c_{21} = 4E^{-2} (2) \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(2)},$$

где индексы 1 и 2 относятся к первому и второму максимумам.

Соотношение (189) позволяет определить $\langle e^2 \rangle$ и $\langle *L^{-1} \rangle$ по одной дифракционной кривой с помощью построения зависимости $W^I = f(\tau_1 + \tau_2)$ (рис. 102).

Как видно, при достаточно больших τ_1 и τ_2 , т. е. там, где справедлива замена функции Коши функцией $[k^2(\Delta h_3)^2]^{-1}$, коварианс W^I_τ должен линейно зависеть от $\tau_1 + \tau_2$, что позволяет по углу наклона прямолинейной части найти $\langle *L^{-1} \rangle$, а по отрезку, отсекаемому на оси ординат, — $\langle e^2 \rangle$.

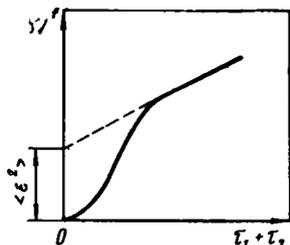


Рис. 102. Определение $\langle e^2 \rangle$ и $\langle *L^{-1} \rangle$ без перехода в пространство объекта способом коварианса

Само собой разумеется, что рассмотренные процедуры могут быть использованы и при работе в режиме ф-сканирования. Для оценки возможностей метода коварианса нужно в первую очередь иметь в виду, что экспериментатор в действительности имеет дело не с функциями $I^h(\Delta \vec{h})$ и $I^g(\Delta \vec{h})$, а с функциями $I^h_3(\Delta \vec{h})$ и $I^g_3(\Delta \vec{h})$ типа (1686).

Используя выражение (1686), получим

$$W_3 = \int_{-\infty}^{\infty} (\Delta h)^2 [I(\Delta h) - I_\Phi] \Pi(\Delta h) d\Delta h = \\ \int_{-\frac{x}{2}}^{\frac{x}{2}} (\Delta h)^2 I(\Delta h) d\Delta h - I_\Phi \int_{-\frac{x}{2}}^{\frac{x}{2}} (\Delta h)^2 d\Delta h;$$

прибавляя и вычитая из правой части интеграл $2 \int_{\frac{x}{2}}^{\infty} (\Delta h)^2 I(\Delta h) d\Delta h$, получим

$$W_3 = W_\infty - W_\Phi - W_{x\infty},$$

где W_∞ — коварианс функции $I(\Delta h)$, определенный на отрезке $(-\infty, \infty)$;

W_Φ — коварианс, отвечающий функции $I_\Phi \Pi(\Delta h)$;

$W_{x\infty}$ — коварианс, соответствующий отброшенным «хвостам» функции $I(\Delta h)$.

$$\text{Так как } W_{\phi} = \frac{1}{12} I_{\phi} x^3,$$

то незначительное изменение пределов обрыва $\pm \frac{\kappa}{2}$ вызывает значительное изменение W_{ϕ} и W_3 .

Эта чрезвычайно сильная зависимость W_3 от пределов обрыва говорит не в пользу метода варiances при сравнении его с методом, использующим интегральную ширину.

При использовании метода одного дифракционного максимума по схеме, изображенной на рис. 102, обычно оказывается, что прямолинейный участок, который необходим для определения параметров тонкой структуры, сколь-нибудь однозначно локализовать не удается.

Хотя первоначально считалось, что преимуществом метода варiances перед методом, использующим интегральную ширину, является независимость получаемых результатов от формы дифракционной линии (так как основное соотношение (187а) годится для любых финитных функций), на самом деле, используя для W^e и W^{*L} соотношения (188) и (188б), мы тем самым снова не выходим за пределы возможности, даваемых аппроксимацией Гаусса—Коши.

Как показал С. А. Иванов, при работе с расходящимся пучком $\vec{i}^0 = \text{var}$ процедура анализа интегральной ширины дифракционного максимума значительно усложняется.

Рассмотрим подробнее, как формируется дифракционный профиль $I(\Delta\eta)$ в способе расходящегося пучка (см. рис. 100). Вариация $\vec{i}^0 = \text{var}$ в плоскости рисунка приводит к тому, что центры всех Фурье-образов двигаются по дуге aa' , и поэтому при соответствующем движении области существования функции интенсивности \mathcal{L} все ее точки будут последовательно заметаться частью окружности Эвальда bb' . Интенсивность $I(\Delta\eta)$, наблюдаемая под некоторым углом η , будет обязана прохождению через точку, лежащую на сфере Эвальда, всех точек области \mathcal{L} , лежащих на соответствующей прямой типа cc' , параллельной касательной AA' , которой мы заменили дугу aa' . Из рис. 100 видно, что максимум интенсивности $I(0)$ получится при пересечении сферы Эвальда всеми точками области \mathcal{L} , лежащими на отрицательной и положительной сторонах оси \vec{b}'_2 .

Как видно, по отношению к формированию профиля линии способ расходящегося пучка является своеобразным гибридом θ — 2θ сканирования и ϕ -сканирования, однако наибольший видимый угловой размер максимума будет обусловлен не размером \mathcal{L} -области вдоль \vec{h} -вектора, как при θ — 2θ -сканировании, и не наибольшим размером этой области поперек \vec{h} -вектора, как при ϕ -сканировании, а наибольшим размером \mathcal{L} -области по направлению, образующему угол η с \vec{h} -вектором, т. е. расстоянию между двумя касательными к \mathcal{L} -области c_n, c'_m , образующими с \vec{h} -вектором угол θ_0 .

Как и обычно, имеет смысл отдельно рассмотреть влияние на ширину линии размеров \mathcal{L} -области вдоль и поперек \vec{h} -вектора.

Из рис. 103 видно, что размеру AB вдоль \vec{h} -вектора будет соответствовать угловая ширина, измеряемая по шкале $\Delta\eta$, равная $\Delta\eta = \beta_K^{\parallel} = \frac{AB \cos \eta_0}{\cos |\theta_0 - \eta_0|}$, а размеру CD поперек \vec{h} -вектора — ширина $\beta_K^{\perp} = \frac{CD \cos \theta_0}{\cos |\theta_0 - \eta_0|}$.

Для сравнения можно вспомнить, что при θ -сканировании ширина, измеренная по шкале $\Delta 2\theta$, была бы равна

$$\beta_{\theta} = \frac{AB}{\cos \theta_0},$$

а ширина, измеряемая в режиме φ -сканирования по шкале $\Delta\varphi$, была бы равна

$$\beta_{\varphi} = \frac{CD}{2 \sin \theta_0}.$$

Как видно, β_K^{\parallel} и β_{θ} неограниченно возрастают при $\theta_0 \rightarrow 90^\circ$, а β_K^{\perp} и β_{φ} неограниченно возрастают при $\theta_0 \rightarrow 0^\circ$, если AB и CD остаются конечными. В том случае, когда область существования функции интенсивности \mathcal{L} имеет в плоскости рисунка форму эллипса (рис. 100), угловая ширина будет определяться расстоянием EF между двумя касательными $C_m C'_m$, проведенными параллельно AA' к \mathcal{L} -области.

Из рассмотрения рис. 103 видно, что в этом случае

$$\beta_K = \frac{EF}{\cos (\theta_0 - \eta_0)} \quad (190)$$

Из рис. 103 легко также усмотреть, что при работе в области малых углов θ_0 прямая EF почти перпендикулярна вектору \vec{h} , а при работе в области больших θ_0 эта прямая почти параллельна \vec{h} . Иначе говоря, при $\theta_0 \rightarrow 90^\circ$ мы в основном исследуем эффекты, связанные с действием тензора $\hat{\epsilon}$ и размера $*L_3$, а при $\theta_0 \rightarrow 0^\circ$ — эффекты, связанные с действием тензора $\hat{\omega}$ и размера $*L_2$.

Записывая рассмотренную в (120) функцию $I'(h_2, \Delta h_3)$ в виде

$$\begin{aligned} I'(h_2, \Delta h_3) &= I_2(h_2) I_3(\Delta h_3) = \\ &= [I^{\omega}(h_2) \oplus I^{*L_2}(h_2)] [I^{\epsilon}(\Delta h_3) \oplus I^{*L_3}(\Delta h_3)], \end{aligned}$$

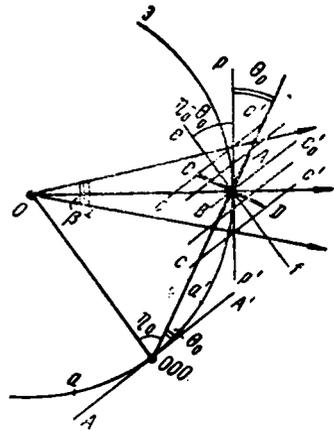


Рис. 103. К расчету интегральной ширины профиля в способе расходящегося пучка:

AB и CD размеры области \mathcal{L} вдоль и поперек дифракционного вектора \vec{h}

получим после отображения функции $I'(h_2 \Delta h_3)$ на ось \vec{b}_3

$$I'(h_2, \Delta h_3) = I(\Delta\eta) = I^\omega(\Delta\eta) \oplus I^{*L_2}(\Delta\eta) \oplus I^e(\Delta\eta) \oplus I^{*L_3}(\Delta\eta).$$

Записывая интегральную ширину, получим

$$\beta^f = \frac{\int I(\Delta\eta) d\Delta\eta}{I(0)} = \frac{\beta^\omega \beta^{*L_2} \beta^e \beta^{*L_3}}{\int I^\omega(\Delta\eta) I^{*L_2}(\Delta\eta) I^e(\Delta\eta) I^{*L_3}(\Delta\eta) d\Delta\eta}. \quad (191)$$

Описывая, как и ранее, $I^\omega(h_2)$, $I^e(\Delta h_3)$ функциями Гаусса (176), а $I^{*L_2}(h_2)$ и $I^{*L_3}(\Delta h_3)$ — функциями Коши (176б), получим из (178а) и (191)

$$(\beta^f)^2 = \beta^f (\beta^{*L_2} + \beta^{*L_3}) + (\beta^e)^2 + (\beta^\omega)^2 \quad (191a)$$

Для перехода от интегральных ширин, найденных в терминах переменных h_2 и Δh_3 :

$$\beta^\omega(h_2) = \sqrt{2\pi} \langle h_2^2 \rangle^{1/2}; \quad \beta^e(\Delta h_3) = \sqrt{2\pi} \langle \Delta h_3^2 \rangle^{1/2};$$

$$\beta^{*L_2}(h_2) = \frac{1}{2 \langle *N_2 \rangle}; \quad \beta^{*L_3}(\Delta h_3) = \frac{1}{2 \langle *N_3 \rangle},$$

к ширинам β , найденным по шкале $\Delta\eta$, необходимо воспользоваться масштабными множителями κ_2 и κ_3 из (121а):

$$\beta^\omega = \beta^\omega(h_2) \kappa_2 = \sqrt{2\pi} \langle \Delta\rho^2 \rangle^{1/2};$$

$$\beta^e = \beta^e(\Delta h_3) \kappa_3 = \sqrt{2\pi} \langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2} \operatorname{tg} \theta_0;$$

$$\beta^{*L_2} = \beta^{*L_2}(h_2) \kappa_2 = \frac{\lambda}{4 \langle *L_2 \rangle \sin \theta_0};$$

$$\beta^{*L_3} = \beta^{*L_3}(\Delta h_3) \kappa_3 = \frac{\lambda}{4 \langle *L_3 \rangle \cos \theta_0}.$$

В итоге в уравнение войдут четыре неизвестных параметра: $\langle \Delta\rho^2 \rangle^{1/2}$, $\langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2}$, $\langle *L_2 \rangle$, $\langle *L_3 \rangle$, что требует использования, по крайней мере, четырех порядков дифракции.

В предположении $\langle *L_2 \rangle = \langle *L_3 \rangle = \langle *L \rangle$ получим из соотношения (191а)

$$(\beta^f)^2 = \beta^f \frac{\lambda}{4 \langle *L \rangle} \frac{\sin \theta_0^{(j)} + \cos \theta_0^{(j)}}{\sin \theta_0^{(j)} \cos \theta_0^{(j)}} + 2\pi \langle \varepsilon^2 \rangle \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(j)} + 2\pi \langle \Delta\rho^2 \rangle.$$

Как видно, три неизвестных параметра тонкой структуры могут быть отысканы по трем порядкам дифракции, которым соответствуют углы $\theta_0^{(1)}$, $\theta_0^{(2)}$ и $\theta_0^{(3)}$ и ширины максимумов β_1^f , β_2^f , β_3^f .

В рамках той же аппроксимации не представляет труда использовать метод варьанса. Учитывая, что при переходе от варьансов,

найденных по шкалам h_2 и Δh_3 , к вариансам, найденным по шкале $\Delta\eta$, необходимо применять масштабные множители κ_2^2 и κ_3^2 , сразу получим

$$W_\infty^\varepsilon = \langle \varepsilon^2 \rangle \operatorname{tg}^2 \theta_0; \quad W_\infty^\omega = \langle \Delta \rho^2 \rangle;$$

$$W_\xi^{*L} = \frac{\lambda (\xi_1 + \xi_2)}{4\pi^2 \sin \theta_0} \langle {}^*L^{-1} \rangle; \quad W_\xi^{*L} = \frac{\lambda (\xi_1 + \xi_2)}{4\pi^2 \cos \theta_0} \langle {}^*L_3^{-1} \rangle,$$

где через ξ_1 и ξ_2 обозначены пределы интегрирования по шкале $\Delta\eta$ при вычислении вариантов W_ξ^{*L} .

Положив $\langle {}^*L_2^{-1} \rangle = \langle {}^*L_3^{-1} \rangle \approx \langle L^{-1} \rangle$, получим

$$W_j^f = \langle \varepsilon^2 \rangle \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(j)} + \langle \Delta \rho^2 \rangle + \frac{\lambda (\xi_1 + \xi_2)}{4\pi^2 \langle {}^*L \rangle} \cdot \frac{\sin \theta_0^{(j)} + \cos \theta_0^{(j)}}{\sin \theta_0^{(j)} \cos \theta_0^{(j)}}. \quad (1916)$$

Кроме обычного способа, использующего три порядка дифракции, для решения системы (1916) можно воспользоваться способом экстраполяции прямолинейного участка функции $W^f = f(\xi_1 + \xi_2)$ на $\xi = 0$, что позволит отыскать $\langle {}^*L \rangle$ и $\langle \varepsilon^2 \rangle \operatorname{tg}^2 \theta_0^{(j)} + \langle \Delta \rho^2 \rangle$; как видно, такая процедура требует всего двух порядков дифракции.

10. Деформационные искажения с функцией распределения в виде дельта-функции

В п. 4 мы рассматривали деформационные искажения, описываемые функцией распределения $\varphi(\varepsilon)$ в виде «колоколообразной» кривой с максимумом в точке $\varepsilon = 0$. Под действием такой функции распределения дифракционный максимум расширяется, однако его вершина остается на прежнем месте.

Рассмотрим функцию распределения вида

$$\varphi(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon^{(j)}). \quad (192)$$

Наличие такой функции распределения означает, что в объекте по направлению $\vec{n}^{(j)}$ действует деформация $\varepsilon(\vec{n}^{(j)}) = \varepsilon^{(j)}$, причем в пределах объема, участвующего в создании дифракционной картины, она является однородной, так что $\partial\varepsilon/\partial r = 0$.

Вычисляя функцию $C^\varepsilon(n_3)$, получим из формулы (141)

$$C^\varepsilon(n_3) = \left\langle e^{-i2\pi h_3^0 \varepsilon(n_3)n_3} \right\rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i2\pi h_3^0 \varepsilon(n_3)n_3} \delta(\varepsilon - \varepsilon^{(j)}) d\varepsilon = e^{-i2\pi h_3^0 \varepsilon^{(j)} n_3},$$

после чего нетрудно найти функцию интенсивности

$$I^\varepsilon(\Delta h_3) = \hat{\mathcal{F}} [C^\varepsilon(n_3)] = \hat{\mathcal{F}} [e^{-i2\pi h_3^0 \varepsilon^{(j)} n_3}] = \delta(\Delta h_3 + \varepsilon^{(j)} h_3^0).$$

Если функцию интенсивности, соответствующую состоянию $\hat{\epsilon} = 0$, обозначить как $I^0(\Delta\vec{h})$, то состоянию $\hat{\epsilon} \neq 0$ будет соответствовать множество дифракционных максимумов $\{I^\epsilon(\Delta\vec{h})\}$, причем, в соответствии с выражением (95):

$$\begin{aligned} I^\epsilon(\Delta\vec{h}) &= I^0(\Delta\vec{h}) \oplus \delta(\Delta h_3 + \epsilon^{(j)} h_3^0) = \\ &= I^0(h_1, h_2, \Delta h_3 + \epsilon^{(j)} h_3^0). \end{aligned}$$

Таким образом, при наличии в объекте тензора $\hat{\epsilon}$ с функцией распределения типа (192) дифракционные максимумы не изменяют своей формы, но смещаются только вдоль координаты h_3 на величину

$$\Delta h_3^{(j)} = -\epsilon^{(j)} h_3^0 \quad (192a)$$

Это обстоятельство чрезвычайно облегчает отыскание компонент тензора $\hat{\epsilon}$, так как при этом оказывается достаточным рассмотреть только смещение дифракционных максимумов вдоль дифракционных векторов, не обращая внимание на возможное изменение формы максимумов, вызванное влиянием других причин.

В итоге процедура отыскания компонент тензора $\hat{\epsilon}$ оказывается значительно более простой, чем различные процедуры нахождения прочих параметров тонкой структуры, рассмотренные в п. 7: необходимо определить множество смещений $\{\Delta h_3^{(j)}\}$ для $j = 1, 2, \dots, 6$, после чего из соотношения (192a) отыскиваются все $\epsilon^{(j)}$. При этом, очевидно:

$$\vec{n}^{(j)} = \frac{\vec{H}^{(j)}}{|\vec{H}^{(j)}|},$$

так что направления, по которым находятся деформации $\{\epsilon^{(j)}\}$, определяют непосредственно из дифракционной картины.

Шесть неизвестных компонент тензора $\hat{\epsilon}$ легко отыскиваются из системы уравнений

$$n_i^{(j)} n_k^{(j)} \epsilon_{ik} = \epsilon^{(j)}, \quad (193)$$

$$i, k = 1, 2, 3; j = 1, 2, \dots, 6,$$

где ϵ_{ik} — шесть неизвестных компонент тензора $\hat{\epsilon}$;
 $\epsilon^{(j)}$ — экспериментально найденные деформации;

$n_i^{(j)}, n_k^{(j)}$ — компоненты вектора $\vec{n}^{(j)}$, задающего направление, по которому измеряется деформация.

При практической работе обычно используют не шкалу Δh_3 , а шкалу $\Delta 2\theta$; для перехода в шкале $\Delta 2\theta$ надо, как и обычно, до-

множить левую и правую части соотношения (192а) на масштабный множитель $|\vec{b}_3| \sec \theta_0$, после чего получим

$$\Delta 2\theta^{(j)} = 2 \Delta \theta^{(j)} = -2\varepsilon^{(j)} \operatorname{tg} \theta_0, \quad (192б)$$

где $\Delta \theta^{(j)} = \theta^{(j)} - \theta_0$;

θ_0 — значение угла дифракции для состояния $\hat{\varepsilon} = 0$.

Легко видеть, что выгодно измерять $\varepsilon^{(j)}$ на больших углах дифракции θ_0 , потому что ошибка в определении $\varepsilon^{(j)}$ равна

$$\delta \varepsilon = \operatorname{ctg} \theta_0 \delta \Delta \theta = 2 \operatorname{ctg} \theta_0 \delta \theta.$$

Так как ошибка в определении угла дифракции $\delta \theta$ обычно лишь незначительно растет с ростом угла θ_0 , то ошибка $\delta \varepsilon$ оказывается весьма малой при работе в области углов $\theta_0 \approx 80^\circ$

Используя (192б), удобно переписать систему уравнений (193) в виде

$$\begin{aligned} -(\theta^{(j)} - \theta_0) \operatorname{ctg} \theta &= n_i^{(j)} n_k^{(j)} \varepsilon_{ik} = (n_1^{(j)})^2 \varepsilon_{11} + (n_2^{(j)})^2 \varepsilon_{22} + \\ &+ (n_3^{(j)})^2 \varepsilon_{33} + 2n_2^{(j)} n_3^{(j)} \varepsilon_{23} + 2n_1^{(j)} n_3^{(j)} \varepsilon_{13} + 2n_1^{(j)} n_2^{(j)} \varepsilon_{12} \end{aligned} \quad (193а)$$

$$j = 1, 2, \quad 6.$$

Так как обычно упругие деформации $\varepsilon^{(j)}$ невелики, то нужно добиваться наибольшей точности при измерении углов $\theta^{(j)}$ и θ_0 для того, чтобы надежно найти малую разность $\theta^{(j)} - \theta_0$; вместе с тем при вычислении котангенса можно вместо θ_0 брать любое из значений $\theta^{(j)}$, вследствие чего в соотношении (193а) индекс «ноль» в аргументе котангенса опущен.

Для того чтобы отыскать шесть неизвестных ε_{ik} из системы (193а), необходимо измерить θ_0 и шесть значений $\theta^{(j)}$, выбирая $\vec{n}^{(j)}$ так, чтобы никакие три вектора $\vec{n}^{(j)}$ не лежали в одной плоскости, и никакие три вектора (например, $\vec{n}^{(1)}, \vec{n}^{(2)}, \vec{n}^{(3)}$) не образовывали множества, от которого можно было бы перейти к множеству $\{\vec{n}^{(4)}, \vec{n}^{(5)}, \vec{n}^{(6)}\}$ при помощи двух поворотов.

При анализе системы (193а) может появиться идея избавиться от определения θ_0 , приписав к системе (193а) седьмое уравнение

$$-(\theta^{(7)} - \theta_0) \operatorname{ctg} \theta = n_i^{(7)} n_k^{(7)} \varepsilon_{ik}$$

и вычтя это уравнение из каждого из уравнений системы, написанного для $j = 1, 2, \quad 6$, получить систему, состоящую из уравнений вида

$$-(\theta^{(j)} - \theta^{(7)}) \operatorname{ctg} \theta = (n_i^{(j)} n_k^{(j)} - n_i^{(7)} n_k^{(7)}) \varepsilon_{ik}, \quad (193б)$$

в которых отсутствует θ_0 .

Легко проверить, что определитель

$$\det \|n_i^{(j)} n_k^{(j)} - n_i^{(7)} n_k^{(7)}\|,$$

составленный из элементов матрицы (6×6) , тождественно обращается в нуль, так как сумма первых трех его столбцов дает столбец, составленный из нулей:

$$(n_1^{(j)})^2 + (n_2^{(j)})^2 + (n_3^{(j)})^2 - [(n_1^{(7)})^2 + (n_2^{(7)})^2 + (n_3^{(7)})^2] = 1 - 1 = 0,$$

при любом $j = 1, 2, \dots, 6$.

Таким образом, решить систему (193а) без знания θ_0 не удастся.

Дальше мы увидим, что, переходя при помощи закона Гука от деформаций к напряжениям, в некоторых случаях удастся обойтись без знания θ_0 , используя граничные условия, при которых некоторые из компонент тензора напряжений обращаются в нуль.

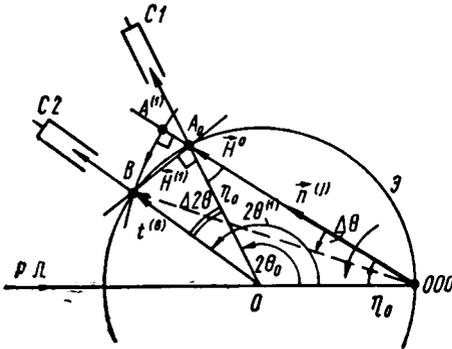


Рис. 104. Поиск брегговского максимума в монокристалле с искажениями первого рода, описываемыми дельта-функцией

В отличие от случаев, разбиравшихся ранее, когда пространственная решетка «в среднем» не изменяла своих размеров, действие функции распределения типа (192) приводит к изменению размеров и формы элементарной ячейки, и поэтому при работе с монокристалльным образцом для отыскания угла $\theta^{(j)}$ необходимо изменять ориентировку кристалла, работая в режиме $\theta - 2\theta$ -сканирования (рис. 104).

Если в неискаженном состоянии измерялся угол дифракции θ_0 , что соответствовало пересечению узла A_0 со сферой Эвальда, то при наличии деформации $\epsilon^{(1)} < 0$ узел A_0 смещается в положение $A^{(1)}$, причем

$$\Delta \vec{H}^{(1)} = \vec{A}_0 \vec{A}^{(1)} = -\epsilon^{(1)} \vec{H}^0$$

Как видно, для получения дифракционного максимума при $\epsilon^{(1)} < 0$ необходимо повернуть кристалл против часовой стрелки вокруг оси, проходящей через точку O перпендикулярно плоскости рисунка, на угол $\Delta\theta$; при этом Фурье-образ повернется на угол $\Delta\theta$, узел $A^{(1)}$ перейдет в положение B , и счетчик, повернутый в положение \vec{i}^B , зафиксирует дифракционный максимум. Из-за малости $\Delta 2\theta$ угол $\angle OA_0B$ можно считать прямым, поэтому $\angle BA_0A^{(1)} = \theta_0$; так как $\angle BA^{(1)}A_0 = 90^\circ$, то сразу получаем

$$\Delta 2\theta = A_0B = \frac{A^{(1)}A_0}{\cos \theta_0} = -2\epsilon^{(1)} \operatorname{tg} \theta_0,$$

т. е. формулу (192б).

Если при работе с монокристаллом для получения дифракционного максимума, по которому измеряется угол $\theta^{(j)}$, нужно каж-

дый раз заново ориентировать кристалл так, чтобы соответствующий \vec{H} -вектор удовлетворял условию дифракции, то при работе с поликристаллическим образцом процедура существенно упрощается, так как для деформированного образца область существования Фурье-образа представляет собой трехосный эллипсоид с главными осями \vec{H}_1 , \vec{H}_2 и \vec{H}_3 , длины которых равны

$$|\vec{H}_i| = |\vec{H}_0 + \Delta\vec{H}_i| = (1 - \epsilon_i) |\vec{H}_0|,$$

где $\{\epsilon_i\} = \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ — главные деформации тензора $\hat{\epsilon}$.

Как видно из рис. 105, пересечение указанного эллипсоида со сферой Эвальда будет иметь место при любой ориентировке об-

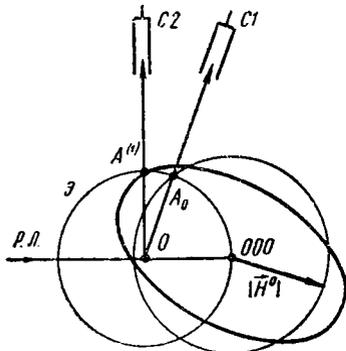


Рис. 105. Поиск брегговского максимума в поликристаллическом образце с искажениями, описываемыми дельта-функцией

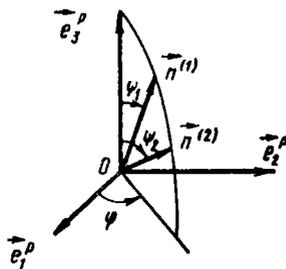


Рис. 106. Сферические координаты (ψ, φ) :

$\{\vec{e}_i^p\}$ — главные оси тензора деформаций

разца, а не только при некоторых, специально выбранных ориентировках, как это наблюдается у монокристалла, когда со сферой Эвальда пересекаются лишь некоторые узлы, принадлежащие множеству $\{\vec{H}^{(j)}\}$.

При работе с поликристаллическим образцом целесообразно записать соотношение (193) несколько иначе, введя главные оси тензора деформаций $\{\vec{e}_i^p\}$, в которых тензор будет иметь вид

$$\hat{\epsilon} = \begin{vmatrix} \epsilon_{11}^p & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22}^p & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33}^p \end{vmatrix}.$$

Обозначая в дальнейшем $\epsilon_{11}^p = \epsilon_1$, $\epsilon_{22}^p = \epsilon_2$, $\epsilon_{33}^p = \epsilon_3$ и введя сферические координаты (ψ, φ) (рис. 106), при помощи которых вектор \vec{n} запишется как $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3) = (\sin \psi \cos \varphi, \sin \psi \times \sin \varphi, \cos \psi)$, мы можем переписать выражение (193) в виде

$$\epsilon(\vec{n}) = \epsilon_{\psi, \varphi} = n_1^2 \epsilon_1 + n_2^2 \epsilon_2 + n_3^2 \epsilon_3 = \epsilon_3 + (\epsilon_{\psi} - \epsilon_3) \sin^2 \psi, \quad (194)$$

где через ε_φ обозначена деформация, измеряемая по направлению $(90^\circ, \varphi)$, лежащему в плоскости векторов \vec{e}_1^0, \vec{e}_2^0 , и равная

$$\varepsilon_\varphi = \varepsilon_1 \cos^2 \varphi + \varepsilon_2 \sin^2 \varphi. \quad (194a)$$

Как видно из соотношения (194), при работе в неизменном азимуте φ деформация $\varepsilon_{\psi, \varphi}$ оказывается пропорциональной $\sin^2 \psi$. Конечно, соотношение (194) справедливо и для монокристалльных образцов, однако в этом случае от него мало пользы, так как измерить деформацию $\varepsilon_{\psi, \varphi}$ при $\varphi = \text{const}$ и нескольких значениях ψ удастся лишь для некоторых, специально подобранных ориентировок кристалла.

В том случае, когда нас интересуют не только деформации, но и напряжения, необходимо перейти от тензора деформаций к тензору напряжений $\hat{\tau}$ при помощи закона Гука:

$$\hat{\tau} = \hat{c}\hat{\varepsilon}. \quad (194б)$$

Здесь через \hat{c} обозначен тензор четвертого ранга, описывающий упругие свойства кристалла.

Закон Гука может быть записан в виде

$$\hat{\varepsilon} = \hat{s}\hat{\tau}, \quad (194в)$$

где \hat{s} — тензор четвертого ранга, обратный \hat{c} :

$$\hat{s} = \hat{c}^{-1}.$$

Вычисление компонент тензора $\hat{\tau}$ проводится при помощи соотношения

$$\tau_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}.$$

Обычно компоненты тензоров \hat{c} и \hat{s} задаются в осях физического базиса $\{\vec{e}_i^0\}$, ориентированных стандартным образом относительно направлений $\langle 100 \rangle$ кристалла [31], и для того, чтобы работать в системе осей $\{\vec{e}_i^m\}$, согласованных с внешней формой кристалла, необходимо преобразовать компоненты c_{ijkl} и s_{ijkl} к новой системе осей $\{\vec{e}_i^m\}$.

Существенное упрощение всех вычислений может быть достигнуто в том случае, если перейти от 3-пространства к 6-пространству, в котором ранг всех тензоров понизится вдвое. Тензоры $\hat{\tau}$ и $\hat{\varepsilon}$ превратятся в векторы, имеющие по 6 компонент:

$$\vec{T} = (T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6); \quad \vec{E} = (E_1, E_2, E_3, E_4, E_5, E_6),$$

а тензоры четвертого ранга \hat{c} и \hat{s} , имеющие каждый по 81 компоненте, превратятся в тензоры второго ранга, имеющие каждый по 36 компонент [32].

Если индексы компонент в 3-пространстве обозначить i, j, k, l , а индексы в 6-пространстве m, n , то должно соблюдаться следующее правило перехода:

$$\left. \begin{array}{l} \text{3-пространство} \\ i, j, k, l \quad 11 \ 22 \ 33 \ 23,32 \ 13,31 \ 12,21 \\ \text{6-пространство} \\ m, n \quad 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \end{array} \right\} \quad (195)$$

Соотношение между компонентами соответствующих тензоров имеет вид

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= T_m, \text{ любые } m; \\ \varepsilon_{ij} &= E_m, \text{ для } m = 1, 2, 3; \\ 2\varepsilon_{ij} &= E_m, \text{ для } m = 4, 5, 6; \\ \alpha_{jkl} &= C_{mn}, \text{ любые } m \text{ и } n; \\ s_{ijkl} &= S_{mn}, m, n = 1, 2, 3; \\ 2s_{ijkl} &= S_{mn}, m \text{ или } n = 4, 5, 6; \\ 4s_{ijkl} &= S_{mn}, m \text{ и } n = 4, 5, 6. \end{aligned}$$

В новых обозначениях закон Гука примет вид $T_m = C_{mn}E_n$ и $E_m = S_{mn}T_n$.

Для того чтобы не вводить слишком много новых индексов, мы в дальнейшем будем употреблять и в 6-пространстве индексы i, j, k, l , каждый раз указывая, какие значения пробегает эти индексы, так что закон Гука может быть записан в форме

$$\left. \begin{array}{l} T_i = C_{ik}E_k; \\ E_i = S_{ik}T_k. \end{array} \right\} \quad (196)$$

$i, k = 1, 2, \dots, 6.$

Обозначая $(n_1^{(i)})^2 = N_{j1}$; $(n_2^{(i)})^2 = N_{j2}$; $n_2^{(j)}n_3^{(j)} = N_{j4}$ и т. д., в соответствии со схемой (195), перепишем соотношение (193) в виде

$$\varepsilon(\vec{n}^{(i)}) = \varepsilon^{(i)} = E_j^* = N_{jk}E_k. \quad (197)$$

Проще всего отыскивать компоненты матрицы N в физических осях $\{e_i^0\}$; в этом случае координаты n_i будут равны

$$n_i = \cos(\vec{n}, \vec{e}_i^0),$$

что в случае кристалла кубической сингонии дает

$$n_i = \frac{h_i^0}{\sqrt{(h_1^0)^2 + (h_2^0)^2 + (h_3^0)^2}}. \quad (197a)$$

Работая в кристаллографическом базисе, получим из формул (196) и (197) простое соотношение между измеренными деформациями $\{E_i^*\}$ и компонентами тензора напряжений \hat{T} в форме

$$E_i^* = N_{ij}E_j = N_{ij}S_{jk}T_k$$

$$i, j, k = 1, 2, \quad 6. \quad (1976)$$

В ряде случаев удобнее задавать компоненты тензора \hat{T} в макроскопическом базисе $\{\vec{e}_i^m\}$, векторы которого согласованы с внешней формой кристалла. Так, например, при деформировании плоского образца в виде пластинки \vec{e}_1^m целесообразно направить вдоль длинной оси пластинки, а \vec{e}_3^m — перпендикулярно широкой грани пластинки.

Если известна матрица перехода α от $\{\vec{e}_i^0\}$ к $\{\vec{e}_i^m\}$, то компоненты тензора \hat{T} в базисе $\{\vec{e}_i^m\}$, равные T_i^m , могут быть найдены по компонентам T_j при помощи соотношения

$$T_i^{(m)} = A_{ij}T_j, \quad (198)$$

где матрица A составлена из компонент матрицы α [32]:

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^2 & \alpha_{12}^2 & \alpha_{13}^2 & 2\alpha_{12}\alpha_{13} & 2\alpha_{13}\alpha_{11} & 2\alpha_{11}\alpha_{12} \\ \alpha_{21}^2 & \alpha_{22}^2 & \alpha_{23}^2 & 2\alpha_{22}\alpha_{23} & 2\alpha_{23}\alpha_{21} & 2\alpha_{21}\alpha_{22} \\ \alpha_{31}^2 & \alpha_{32}^2 & \alpha_{33}^2 & 2\alpha_{32}\alpha_{33} & 2\alpha_{33}\alpha_{31} & 2\alpha_{31}\alpha_{32} \\ \alpha_{21}\alpha_{31} & \alpha_{22}\alpha_{32} & \alpha_{23}\alpha_{33} & \alpha_{22}\alpha_{33} + \alpha_{23}\alpha_{31} + \alpha_{21}\alpha_{32} + \\ & & & + \alpha_{23}\alpha_{32} & + \alpha_{21}\alpha_{33} & + \alpha_{22}\alpha_{31} \\ \alpha_{31}\alpha_{11} & \alpha_{32}\alpha_{12} & \alpha_{33}\alpha_{13} & \alpha_{12}\alpha_{33} + \alpha_{13}\alpha_{31} + \alpha_{11}\alpha_{32} + \\ & & & + \alpha_{13}\alpha_{32} & + \alpha_{11}\alpha_{33} & + \alpha_{12}\alpha_{31} \\ \alpha_{11}\alpha_{21} & \alpha_{12}\alpha_{22} & \alpha_{13}\alpha_{23} & \alpha_{12}\alpha_{23} + \alpha_{13}\alpha_{21} + \alpha_{11}\alpha_{22} + \\ & & & + \alpha_{13}\alpha_{22} & + \alpha_{11}\alpha_{23} & + \alpha_{12}\alpha_{21} \end{pmatrix} \quad (198a)$$

Используя соотношение (198), перепишем выраженные (197a) в виде

$$E_i^* = N_{ij}S_{jk}T_k = N_{ij}S_{jk}A_{ki}^{-1}T_l^{(m)} \quad (199)$$

$$i, j, k, l = 1, 2, \quad 6.$$

Это соотношение позволяет определить все 6 компонент тензора \hat{T} , если известны матрица N размером 6×6 , определяющая ориентировку множества векторов $\{\vec{n}^{(j)}\}$, по которым измеряются деформации $\{E_i^*\}$, и матрица A^{-1} , обратная A , также имеющая размер 6×6 . При определении компонент матрицы A^{-1} нет нужды поль-

зоваться обычными приемами обращения матриц, так как матрица A^{-1} может быть построена по рецепту (198а), если вместо α_{ij} брать α_{ij}^{-1} . По-прежнему, если все $T_l^{(m)} \neq 0$, то решение системы (199) не может быть получено без знания θ_0 .

Действительно, если добавить к шести уравнениям (199) седьмое, положив $i = 1, 2, \dots, 7$, и вычтуть это седьмое уравнение из первых шести, то получим систему

$$\Delta E_i^* = \Delta N_{ij} S_{ik} A_{kl}^{-1} T_l^{(m)}, \quad (199a)$$

$$i, j, k, l = 1, 2, \dots, 6,$$

где $\Delta N_{ij} = N_{ij} - N_{ji}$.

Так как определитель системы (199а) равен

$$\det(\Delta N S A^{-1}) = \det \Delta N \det S \det A^{-1}, \quad (199б)$$

а определитель разностной матрицы ΔN , как мы уже видели ранее, равен нулю, то и определитель (199б) оказывается равным нулю.

Если задать граничные условия, при которых некоторые из $T_l^{(m)} = 0$, то в отдельных случаях удастся решить систему (199а) относительно $\{T_l^{(m)}\} \neq 0$, т. е. определить компоненты тензора напряжений без знания θ_0 .

Конкретный вид граничных условий, при которых удастся это сделать, зависит от особенностей матрицы S для кристаллов рассматриваемой сингонии.

У кристаллов кубической сингонии решить разностную систему (199а) удастся только при задании граничных условий в виде

$$T_3^{(m)} = T_4^{(m)} = T_5^{(m)} = 0, \quad (200)$$

где принято, что \vec{e}_3^n перпендикулярна поверхности образца.

Так как условие $T_4^{(m)} = T_5^{(m)} = 0$ определяет главную ось тензора \hat{T} , то условие (200) сводится к требованию, чтобы одна из главных осей тензора напряжений, т. е. \vec{e}_3^p , совпадала с нормалью к поверхности, т. е. с \vec{e}_3^n , и одновременно с этим соответствующее нормальное напряжение было равно нулю.

Обычно измерение деформаций $\{E_i^*\}$ может проводиться только в месте, свободном от внешних приложенных нагрузок, и поэтому условие (200) кажется совершенно обязательным. В действительности это не так, если вблизи поверхности существует большой градиент напряжений (деформаций) по глубине и толщина слоя, участвующего в создании дифракционной картины, достаточно велика.

В этом случае может наблюдаться как отклонение главной оси \vec{e}_3^p от \vec{e}_3^n , что приведет к появлению компонент $T_4^{(m)} \neq 0$ и $T_5^{(m)} \neq 0$, так и появление компоненты

$$T_3^{(m)} \neq 0.$$

Экспериментально определяемые в этом случае деформации $\{E_i^*\}$ будут соответствовать напряжениям, усредненным по толщине слоя, участвующего в создании дифракционной картины.

Рассмотрим в качестве примера случай $\vec{e}_3^p = \vec{e}_3^m$, которому соответствуют граничные условия

$$T_4^{(m)} = T_5^{(m)} = 0, \quad (200a)$$

так что вектор напряжений оказывается равным

$$\vec{T} = (T_1^{(m)}, T_2^{(m)}, T_3^{(m)}, 0, 0, T_6^{(m)}).$$

Принимая для простоты $\{\vec{e}_i^m\} = \{\vec{e}_i^0\}$, что эквивалентно условию

$$A^{-1} = A = \mathbf{1}_6,$$

где $\mathbf{1}_6$ — единичная матрица размером 6×6 , и рассматривая кристалл кубической сингонии, получим из системы (199a)

$$\begin{pmatrix} \Delta E_1 \\ \Delta E_2 \\ \Delta E_3 \\ \Delta E_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta N_{11} & \Delta N_{12} & \Delta N_{13} & \Delta N_{14} & \Delta N_{15} & \Delta N_{16} \\ \Delta N_{21} & \Delta N_{22} & \Delta N_{23} & \Delta N_{24} & \Delta N_{25} & \Delta N_{26} \\ \Delta N_{31} & \Delta N_{32} & \Delta N_{33} & \Delta N_{34} & \Delta N_{35} & \Delta N_{36} \\ \Delta N_{41} & \Delta N_{42} & \Delta N_{43} & \Delta N_{44} & \Delta N_{45} & \Delta N_{46} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1^0 \\ T_2^0 \\ T_3^0 \\ 0 \\ 0 \\ T_6^0 \end{pmatrix} \quad (200b)$$

Здесь $\Delta E_i^* = E_i^* - E_5^* = -(\theta^{(i)} - \theta^{(5)}) \operatorname{ctg} \theta$.

Для i -того уравнения этой системы получим

$$\begin{aligned} \Delta E_i^* &= (\Delta N_{i1} S_{11} + \Delta N_{i2} S_{12} + \Delta N_{i3} S_{12}) T_1^0 + \\ &+ (\Delta N_{i1} S_{12} + \Delta N_{i2} S_{12} + \Delta N_{i3} S_{12}) T_2^0 + \\ &+ (\Delta N_{i1} S_{12} + \Delta N_{i2} S_{12} + \Delta N_{i3} S_{11}) T_3^0 + \Delta N_{i6} S_{44} T_6^0. \end{aligned}$$

Если сложить первые три коэффициента при неизвестных T_1^0 , T_2^0 и T_3^0 , то получим для любого из уравнений

$$(\Delta N_{i1} + \Delta N_{i2} + \Delta N_{i3}) (S_{11} + 2S_{12}) = 0,$$

так как $\Delta N_{i1} + \Delta N_{i2} + \Delta N_{i3} = 0$.

(200b)

В итоге получаем, что определитель системы (200б) размером 4×4 оказывается тождественно равным нулю, и отыскать компоненты тензора \hat{T}^0 без знания θ_0 не удастся.

При граничных условиях (200) удастся решить систему (199а) и для кристаллов кубической сингонии; при этом получим три уравнения, в которых учтено свойство (200в):

$$\Delta E_i^* = \Delta N_{i1} (S_{11} - S_{12}) T_1^0 + \Delta N_{i2} (S_{11} - S_{12}) T_2^0 + \Delta N_{i6} S_{44} T_6^0, \quad (201)$$

где $\Delta E_i^* = E_i^* - E_4^* = -(\theta^{(i)} - \theta^{(4)}) \operatorname{ctg} \theta$. $i = 1, 2, 3$.

Легко проверить, что определитель этой системы, составленный из коэффициентов при неизвестных T_1^0, T_2^0, T_6^0 , не обращается в нуль, и поэтому компоненты T_1^0, T_2^0 и T_6^0 могут быть определены без знания θ_0 .

От уравнений (200б) и (201), записанных для кристаллов кубической сингонии, легко перейти к случаю поликристаллических материалов, положив

$$S_{44} = 2(S_{11} - S_{12});$$

$$S_{11} = \frac{1}{E};$$

$$S_{12} = -\frac{\nu}{E},$$

где E — модуль Юнга;

а ν — коэффициент Пуассона.

Так как для поликристаллических материалов, являющихся изотропными, матрица поворота A всегда равна единичной, то в уравнениях (199а) $T_i^0 = T_i^{(m)}$; кроме того, компоненты вектора \vec{n} удобно определять в сферической системе координат (ψ, φ) , как это показано на рис. 107.

Если отсчитывать азимут φ от главной оси e_1^0 , то в уравнениях (201) останутся только диагональные компоненты тензора \vec{T} , т. е. главные компоненты T_1^0 и T_2^0 . Пользуясь особенностями Фурье-образа поликристаллического образца, можно не заботиться специально о выборе направлений $\vec{n}^{(i)}$, а ограничиться для получения двух деформаций, позволяющих найти ΔE_i^* , двумя направлениями (ψ_2, φ) и (ψ_1, φ) , лежащими в одном азимуте (см. рис. 107), для которых

$$\Delta E_i^* = E_2^* - E_1^* = \varepsilon_{\psi_2, \varphi} - \varepsilon_{\psi_1, \varphi} = -(\theta_{\psi_2, \varphi} - \theta_{\psi_1, \varphi}) \operatorname{ctg} \theta. \quad (202)$$

Для ΔN_{i1} и ΔN_{i2} получим

$$\left. \begin{aligned} \Delta N_{i1} &= (n_1^{(2)})^2 - (n_1^{(1)})^2 = (\sin^2 \psi_2 - \sin^2 \psi_1) \cos^2 \varphi; \\ \Delta N_{i2} &= (n_2^{(2)})^2 - (n_2^{(1)})^2 = (\sin^2 \psi_2 - \sin^2 \psi_1) \sin^2 \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (202a)$$

Обозначая в уравнениях (201) $T_1^0 = T_1^p = \sigma_1$; $T_2^0 = T_2^p = \sigma_2$ и используя соотношения (202) и (202a), получим

$$-(\theta_{\psi_2, \varphi} - \theta_{\psi_1, \varphi}) \operatorname{ctg} \theta = \frac{1 + \nu}{E} \sigma_{\varphi} (\sin^2 \psi_2 - \sin^2 \psi_1),$$

где через σ_{φ} обозначено

$$\sigma_{\varphi} = \cos^2 \varphi \sigma_1 + \sin^2 \varphi \sigma_2. \quad (202б)$$

Как видно, σ_{φ} есть не что иное, как нормальное напряжение, действующее на площадку, перпендикулярную направлению ($90^\circ, \varphi$) (см. рис. 106).

Зависимость угла $\theta_{(\psi, \varphi)}$ от $\sin^2 \psi$ при $\sigma_{\varphi} = \text{const}$ изображается прямой линией:

$$\theta_{\psi, \varphi} = \theta_{0, \varphi} - \frac{1 + \nu}{E} \operatorname{tg} \theta \sigma_{\varphi} \sin^2 \psi, \quad (203)$$

тангенс угла наклона которой к оси абсцисс позволяет найти напряжение

$$\sigma_{\varphi} = -\frac{E}{1 + \nu} \operatorname{ctg} \theta \frac{\Delta \theta}{\Delta \sin^2 \psi} = -\frac{E}{1 + \nu} \operatorname{ctg} \theta \operatorname{tg} \alpha.$$

Выражение (203), особенно удобное при работе с поликристаллическими материалами, может быть получено непосредственно из соотношения (194), если использовать закон Гука для изотропной среды:

$$\varepsilon_i = \frac{1}{E} [\sigma_i - \nu(\sigma_j + \sigma_k)], \quad (204)$$

где $i, j, k = 1, 2, 3$ циклически;
 σ_i — главные напряжения.

При граничных условиях (200¹) из соотношений (194), (194а), (202б), (204) сразу получим

$$\varepsilon_{\psi, \varphi} = \varepsilon_3 + \frac{1 + \nu}{E} (\sigma_{\varphi} - \sigma_3) \sin^2 \psi. \quad (204а)$$

Так как

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{\psi, \varphi} &= -(\theta_{\psi, \varphi} - \theta_0) \operatorname{ctg} \theta \\ \text{и } \varepsilon_3 &= -(\theta_{0, \varphi} - \theta_0) \operatorname{ctg} \theta, \end{aligned} \right\} \quad (204б)$$

то соотношение (204а) принимает вид

$$\theta_{\psi, \varphi} = \theta_{0, \varphi} - \frac{1 + \nu}{E} \operatorname{tg} \theta (\sigma_{\varphi} - \sigma_3) \sin^2 \psi. \quad (204в)$$

Как видно, при $\sigma_3 = 0$ соотношение (204в) переходит в уравнение (203). При $\sigma_{\varphi} - \sigma_3 = \text{const}$ из соотношения (204в) можно получить выражение

$$\sigma_{\varphi} - \sigma_3 = -\frac{E}{1 + \nu} \operatorname{ctg} \theta \frac{\Delta \theta_{\psi, \varphi}}{\Delta \sin^2 \psi}, \quad (205)$$

позволяющее определить $\sigma_{\varphi} - \sigma_3$ по наклону прямой (204в).

Работая в азимутах $\varphi - 45^\circ$ и $\varphi + 45^\circ$, можно получить выражение для определения σ_3 , пользуясь тем, что при граничных условиях (200а)

$$\sigma_{\varphi-45^\circ} + \sigma_{\varphi+45^\circ} = \sigma_1 + \sigma_2 = \frac{\sigma_3}{\nu} - \frac{E}{\nu} \varepsilon_3. \quad (205а)$$

Записывая выражение (205) для азимутов $\varphi - 45^\circ$ и $\varphi + 45^\circ$ и учитывая соотношения (204б) и (205а), получим

$$\sigma_3 = -\frac{E}{1-2\nu} \operatorname{ctg} \theta \left[\theta_{0,\varphi} - \theta_0 + \frac{\nu}{1+\nu} \left(\frac{\Delta\theta_{\varphi, \varphi-45^\circ}}{\Delta \sin^2 \psi} + \frac{\Delta\theta_{\varphi, \varphi+45^\circ}}{\Delta \sin^2 \psi} \right) \right]. \quad (206)$$

Аналогично, из соотношения (204в) можно получить

$$\theta_{\varphi, \varphi-45^\circ} + \theta_{\varphi, \varphi+45^\circ} - \left(2 - \frac{1+\nu}{\nu} \sin^2 \psi \right) \theta_{0,\varphi} - \frac{1+\nu}{\nu} \theta_0 \sin^2 \psi = -\frac{1-2\nu}{E} \frac{1+\nu}{\nu} \operatorname{tg} \theta \sigma_3 \sin^2 \psi. \quad (206а)$$

В полном соответствии с ранее полученными результатами, формулы для определения σ_φ и σ_3 при граничных условиях (200а) содержат θ_0 , т. е. значение угла дифракции для неискаженного материала.

Используя экспериментально определенные σ_φ , $\sigma_{\varphi-45^\circ}$, $\sigma_{\varphi+45^\circ}$, можно получить из соотношения (2026) выражения для отыскания главных напряжений σ_1 , σ_2 и угла φ , определяющего положение главной оси \vec{e}_1^0 :

$$\sigma_1 = \sigma_\varphi + \frac{1}{2} (\sigma_{\varphi-45^\circ} - \sigma_{\varphi+45^\circ}) \operatorname{tg} \varphi;$$

$$\sigma_2 = \sigma_\varphi - \frac{1}{2} (\sigma_{\varphi-45^\circ} - \sigma_{\varphi+45^\circ}) \operatorname{ctg} \varphi;$$

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{\sigma_{\varphi-45^\circ} - \sigma_{\varphi+45^\circ}}{2\sigma_\varphi - \sigma_{\varphi-45^\circ} - \sigma_{\varphi+45^\circ}}.$$

Рассмотрим теперь подробнее случай граничных условий (200а) применительно к поликристаллическому объекту, подвергнутому упрочняющей поверхностной обработке (поверхностная закалка, обкатка роликом, обдувка дробью и т. д.) [33]. В этом случае вблизи поверхности изделия возникает распределение напряжений σ_φ с большим градиентом (рис. 107). Одновременно с этим может наблюдаться возрастание нормального напряжения от нуля на самой поверхности до значительной величины на небольших расстояниях от поверхности.

Так как

$$\frac{\partial \sigma_i}{\partial z} \neq 0,$$

в уравнения (204а) и (204б), связывающие измеряемые деформации или углы дифракции с напряжениями, необходимо подставлять некоторые средние величины напряжений, причем усреднение должно проводиться с учетом поглощения падающего и дифрагированного пучков на пути $s_1 + s_2$ (рис. 108).

Если ввести функцию распределения вида [34]

$$\varphi(z) = \mu^* e^{-\mu^* z},$$

где μ^* — эффективный коэффициент ослабления, определяемый из условия

$$\mu^* z = \mu_0 (s_1 + s_2),$$

Рис. 107. Распределение напряжений σ_φ и σ_3 вблизи поверхности образца:

s_1 и s_2 — пути, проходимые первичным и дифрагированным на объеме dV рентгеновскими лучами

а μ_0 — табличный коэффициент ослабления, то все средние величины легко отыскиваются как

$$\langle \sigma_i \rangle = \int_0^\infty \sigma_i(z) \varphi(z) dz. \quad (207)$$

Из рис. 108 видно, что

$$\mu^* = \mu_0 \frac{\cos(\psi - \eta) + \cos(\psi + \eta)}{\cos(\psi - \eta) \cos(\psi + \eta)} = \frac{2\mu_0}{\cos \psi^*},$$

что при малых η дает

$$\mu^* \approx \frac{2\mu_0}{\cos \psi}.$$

Представляя $\sigma_i(z)$ в виде

$$\begin{aligned} \sigma_3 &= k_{31}z + k_{32}z^2 + k_{33}z^3 + \\ \sigma_\varphi &= \sigma_{\varphi 0} + k_{\varphi 1}z + k_{\varphi 2}z^2 + k_{\varphi 3}z^3 + \end{aligned}$$

получим, используя соотношение (207):

$$\begin{aligned} \langle \sigma_3 \rangle &= \frac{\cos \psi^*}{2\mu_0} k_{31} + \frac{\cos^2 \psi^*}{2\mu_0^2} k_{32} + \frac{3}{4} \cdot \frac{\cos^3 \psi^*}{\mu_0^3} k_{33} + \\ \langle \sigma_\varphi \rangle &= \sigma_{\varphi 0} + \frac{\cos \psi^*}{2\mu_0} k_{\varphi 1} + \frac{\cos^2 \psi^*}{2\mu_0^2} k_{\varphi 2} + \frac{3}{4} \frac{\cos^3 \psi^*}{\mu_0^3} k_{\varphi 3} + \dots \end{aligned}$$

Теперь уравнения (206а) и (204в) должны быть записаны в виде

$$\Delta\theta^* = -\frac{1-2\nu}{E} \cdot \frac{1+\nu}{\nu} \operatorname{tg} \theta \langle \sigma_3 \rangle \sin^2 \psi \quad (208)$$

и

$$\theta_{\psi, \varphi} - \theta_{0, \varphi} = -\frac{1+\nu}{E} \operatorname{tg} \theta (\sigma_{\varphi} - \sigma_3) \sin^2 \psi, \quad (208a)$$

где через $\Delta\theta^*$ обозначена величина, определяемая из эксперимента:

$$\Delta\theta^* = \theta_{\psi, \varphi-45^\circ} + \theta_{\psi, \varphi+45^\circ} - \left(2 - \frac{1+\nu}{\nu} \sin^2 \psi\right) \theta_{0, \varphi} - \frac{1+\nu}{\nu} \theta_0 \sin^2 \psi.$$

Выбирая достаточно большое число значений угла ψ в соотношениях (208) и (208а), мы можем определить неизвестные k_{3i} и $k_{\varphi i}$. Как видно, этот способ позволяет исследовать распределение напряжений в тонком поверхностном слое, толщина которого по порядку величины равна μ_0^{-1} .

Существенной особенностью соотношений (208) и (208а) является то, что зависимости $\Delta\theta^*$ и $\theta_{\psi, \varphi}$ от $\sin^2 \psi$ уже не изображаются прямыми линиями.

Криволинейный характер этих зависимостей указывает на то, что в пределах эффективной глубины проникновения рентгеновских лучей в образец наблюдается заметное изменение действующих напряжений, и расчет этих напряжений должен проводиться по формулам (208) и (208а).

В том случае, когда ось \vec{e}_3^m уже не является главной, т. е. когда $\langle T_4^m \rangle \neq 0$ и $\langle T_5^m \rangle \neq 0$, расчеты еще более усложняются.

Как указали М. Я. Фукс и Л. И. Гладких [35], простым приемом, позволяющим заметить отклонение третьей главной оси \vec{e}_3^p от \vec{e}_3^m , является определение зависимости

$$\varepsilon_{\psi, \varphi} = f(\sin^2 \psi)$$

при азимутах φ и $\varphi + 180^\circ$

Очевидно, при несовпадении осей \vec{e}_3^p и \vec{e}_3^m

$$\varepsilon_{\psi, \varphi} \neq \varepsilon_{\psi, \varphi+180^\circ}.$$

Авторы работы [35] рассматривали только случай плоского напряженного состояния, полагая справедливыми граничные условия (200).

В самом общем случае, когда можно предполагать отличными от нуля все компоненты тензора \hat{T} , необходимо использовать систему уравнений

$$E_i^* = N_{ij} S_{jl} \langle T_l^m \rangle,$$

записывая элементы матрицы N в сферических координатах (ψ, φ) и выражая $T_i^{(m)}$ в виде

$$T_i^{(m)} = T_{i0} + k_{i1}z + k_{i2}z^2 +$$

Аналогичный прием может быть применен и при работе с монокристаллами, однако в этом случае возникают значительные трудности из-за того, что множество направлений $\{\vec{n}^{(j)}\}$, по которым может измеряться деформация, содержит не слишком много членов.

При работе с поликристаллическими материалами в случае граничных условий (200) и наличия градиента напряжений выражение для определения напряжения $\sigma_\varphi(z)$ примет вид

$$\theta_{\psi, \varphi} - \theta_{0, \varphi} = -\frac{1+\nu}{E} \operatorname{tg} \theta \langle \sigma_\varphi \rangle \sin^2 \psi.$$

Как видно, в этом случае для анализа напряженного состояния вблизи поверхности знания угла дифракции в ненапряженном состоянии не требуется.

При переходе от тензора деформаций $\hat{\epsilon}$ к тензору напряжений $\hat{\tau}$ фундаментальное значение приобретает проблема правильного выбора упругих постоянных.

При работе с монокристалльными образцами «рентгеновские» тензоры упругих постоянных \hat{c} и \hat{s} в точности равны обычным тензорам \hat{c} и \hat{s} , определенным на монокристалльных образцах нерентгеновскими методами. Если в образце дислокационная структура развита слабо, вызываемые внешними нагрузками деформации будут однородными как в микро-, так и в макрообъемах, то для определения ϵ (\vec{n}^i) не обязательно пользоваться множеством максимумов, у которых индексы дифракции принадлежат одной форме $\{h_1^0 h_2^0 h_3^0\}$ [36]; в этом случае «рентгеновские» деформации $\hat{\epsilon}^r$ совпадают с «нерентгеновскими» деформациями $\hat{\epsilon}$, измеряемыми при помощи обычных тензометров.

Если работать с поликристаллическим образцом, отдельные кристаллиты которого достаточно велики для того, чтобы именно в них была определена деформация $\hat{\epsilon}$, то использование постоянных \hat{c} дает возможность отыскать истинные напряжения $\hat{\tau}$, действующие на рассматриваемый кристаллит; по-видимому, это локальное напряжение, усредненное лишь в пределах освещаемого объема данного кристаллита, будет отличаться от макроскопического напряжения $\hat{\tau}^{(m)}$, действующего на все множество кристаллитов образца.

При переходе к поликристаллическому материалу, размеры отдельных кристаллитов которого настолько малы, что в пределах

освещаемого объема в создании дифракционной картины принимает участие достаточно большое их число, измеряемая деформация $\hat{\epsilon}^r$ является усредненной на множестве кристаллитов, у которых вектор $\vec{n}^{(i)}$ образует угол η с первичным пучком рентгеновских лучей, причем значение угла дифракции $\theta^{(i)}$ будет инвариантным по отношению к повороту любого из кристаллитов этого множества на произвольный угол вокруг вектора $\vec{n}^{(i)}$

При переходе от измеренных деформаций $\hat{\epsilon}^r$ к напряжениям $\hat{\tau}$ приходится пользоваться соотношением $\hat{\epsilon}^r = \langle \hat{s} \hat{\tau} \rangle$, в котором для вычисления $\langle \hat{s} \hat{\tau} \rangle$ необходимо знать соответствующую функцию распределения или, в конечном итоге, задаваться некоторой моделью распределения деформаций и напряжений в образце.

Среди большого числа предложенных моделей [37] наиболее простыми являются модель Рейсса [38], в которой принимается равенство локальных напряжений $\hat{\tau}$, действующих на отдельные кристаллиты, и модель Фойгта [39], в которой принимается равенство локальных деформаций $\hat{\epsilon}$.

В модели Рейсса

$$\hat{\epsilon}^r = \langle \hat{s} \rangle_R \tau = \hat{s}^R \tau^{(m)},$$

где $\tau^{(m)}$ — макроскопическое напряжение, действующее на образец.

В модели Фойгта удобнее пользоваться законом Гука, записанным в форме (1946), которая дает

$$\hat{\tau} = \langle \hat{c} \hat{\epsilon} \rangle = \langle \hat{c} \rangle_V \hat{\epsilon} = \hat{c}^V \hat{\epsilon}^r$$

Здесь $\hat{\epsilon}^r$ — тензор деформаций, компоненты которого определяются экспериментально. В пересчете на упругие постоянные E и ν получим

$$E^R = [S_{11} - (2S_{11} - 2S_{12} - S_{44}) \Gamma]^{-1};$$

$$\nu^R = - \frac{S_{12} + \frac{1}{2} (2S_{11} - 2S_{12} - S_{44}) \Gamma}{S_{11} - (2S_{11} - 2S_{12} - S_{44}) \Gamma}; \quad (209)$$

$$E^V = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})}{2C_{11} + 3C_{12} + C_{44}};$$

$$\nu^V = \frac{C_{11} + 4C_{12} - 2C_{44}}{2(2C_{11} + 3C_{12} + C_{44})}.$$

В соотношении (209)

$$\Gamma = n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2,$$

где $\{n_i\}$ — координаты вектора $\vec{n}^{(j)}$, в направлении которого измерялась деформация $\epsilon(\vec{n}^{(j)})$, записанная в том же базисе $\{\vec{e}_i^0\}$, в котором заданы постоянные s_{ijkl} и c_{ijkl} .

Для кристаллов кубической сингонии $\{n_i\}$ легко отыскать по индексам дифракции [формула (197a)], в других сингониях нужно учитывать различие между кристаллографическим базисом $\{\vec{a}_i\}$, описывающим сингонию, и физическим базисом $\{\vec{e}_i^0\}$, в котором задаются упругие постоянные.

В большинстве случаев $(E, \nu)^V > (E, \nu)^R$, и экспериментально найденные значения E^r и ν^r лежат между $(E, \nu)^V$ и $(E, \nu)^R$. В качестве первого приближения часто принимают, что $(E, \nu)^r$ являются линейной комбинацией $(E, \nu)^V$ и $(E, \nu)^R$:

$$E^r = k^V E^V + k^R E^R;$$

$$\nu^r = k^V \nu^V + k^R \nu^R;$$

$$k^V + k^R = 1.$$

По-видимому, значения k^V и k^R зависят от конкретных особенностей рассматриваемой структуры и могут служить характеристикой распределения деформаций и напряжений между отдельными кристаллитами деформированного образца.

Исследование поликристаллических материалов осложняется их гетерогенностью. Даже в макроскопически однофазном материале всегда присутствуют сильно искаженные области с повышенной плотностью дислокаций, не дающие вклада в брегговские дифракционные максимумы, по которым измеряется деформация, но являющиеся местами концентрации напряжений и деформаций. По-видимому, в этом случае для определения упругих постоянных должна быть использована априорная информация, которая позволит отыскать по измеренным деформациям $\hat{\epsilon}^r$ истинное распределение напряжений по объему образца. Очевидно, в гетерогенных материалах нельзя ожидать совпадения определенных таким образом напряжений с макроскопическими напряжениями, приложенными к образцу.

Не представляет труда распространить процедуру, предусматривающую использование коэффициентов Фурье от функции, описывающей интенсивность максимума (п. 4), на случай одновременного смещения и расширения максимума под действием деформационных искажений [13].

Очевидно, действие функции распределения вида $\delta(\epsilon - \langle \epsilon^0 \rangle)$ приведет к смещению максимума на величину $\langle \Delta h_3^0 \rangle = -\langle \epsilon^0(n) \rangle h_3^0$, а действие колоколообразной функции $\phi(\epsilon)$ приведет к расширению смещенного максимума.

Обозначая коэффициенты Фурье, вычисленные в предположении, что начало координат находится в точке $\Delta h_3 = 0$, через $C'(n)$, получим, учитывая (17):

$$C'(n) = \hat{\mathcal{F}}^{-1} [I(\Delta h_3)] = C(n) e^{i2\pi \langle \Delta h_3^0 \rangle n} = C(n) e^{-i2\pi h_3^0 \langle \varepsilon^0(n) \rangle n},$$

где $C(n) = C^L(n) C^e(n)$ — функции, рассмотренные в (п. 4) и отражающие только влияние расширения дифракционного максимума.

Записывая $C'(n)$ в виде

$$C'(n) = A'(n) - iB'(n) = C(n) \cos 2\pi h_3^0 \langle \varepsilon^0(n) \rangle n - iC(n) \sin 2\pi h_3^0 \langle \varepsilon^0(n) \rangle n. \quad (210)$$

получим $\frac{B'(n)}{A'(n)} = \operatorname{tg} 2\pi h_3^0 \langle \varepsilon^0(n) \rangle n$.

Как видно, смещение центра тяжести максимума $\varphi[\varepsilon(n)]$ равно

$$\langle \varepsilon^0(n) \rangle = \frac{1}{2\pi h_3^0 n} \operatorname{tg}^{-1} \frac{B'(n)}{A'(n)}.$$

В общем случае $C^e(n) = A^e(n) - iB^e(n)$, однако в нашем случае функции $A^e(n)$ и $B^e(n)$ вычисляются в предположении переноса начала координат в центр тяжести максимума, т. е. в точку $\langle \Delta h_3^0 \rangle$.

Очевидно, при этом

$$B^e(n) = \langle \sin 2\pi h_3^0 \varepsilon(n) n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \sin(2\pi h_3^0 \varepsilon(n) n) d\varepsilon \approx \\ \approx 2\pi h_3^0 n \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \varepsilon(n) d\varepsilon = 2\pi h_3^0 n \langle \varepsilon^0(n) \rangle = 0.$$

Так как вместе с этим всегда $C^L(n) = A^L(n)$, то из (210) будем иметь

$$|C'(n)| = \sqrt{A'^2(n) + B'^2(n)} = A^L(n) A^e(n).$$

Таким образом, вычисляя коэффициенты ряда Фурье, описывающего форму и положение максимума:

$$I(\Delta h_3) = \sum_{n'} C'(n') e^{-i2\pi n' \frac{\Delta h_3}{\kappa}}$$

$$\text{где } C'(n') = \frac{1}{\kappa} \int_{-\frac{\kappa}{2}}^{\frac{\kappa}{2}} I(\Delta h_3) e^{i2\pi n' \frac{\Delta h_3}{\kappa}} d\Delta h_3,$$

мы можем отыскать не только размеры о. к. р. $\langle L \rangle$ и дисперсию функций распределения $\langle \varepsilon^2(n) \rangle$, но и смещение центра тяжести функций распределения по деформациям $\langle \varepsilon^0(n) \rangle$.

11. Влияние ошибок укладки в слоистых структурах

Специфическими, часто встречающимися дефектами строения реальных кристаллов являются ошибки в расположении слоев друг относительно друга. В ряде случаев силы связи между атомами плоского слоя значительно превышают силы связи, существующие между слоями. Так, например, в графите, который является типично слоистым кристаллом, атомы в каждом слое связаны между собой сильным ковалентным взаимодействием, в то время как друг с другом слои связаны слабыми силами Ван-дер-Ваальса, что и объясняет легкое скольжение этих слоев относительно друг друга.

Легко понять, что в такой структуре часто будут встречаться нарушения, обусловленные неправильным расположением слоев относительно друг друга.

Кристаллы типа меди, магния, железа не представляют собой слоистых структур, однако и в них существуют плоскости с плотнейшей укладкой атомов.

Ряд процессов (прохождение расщепленной дислокации, двойникование, рост кристалла) также приводит к отклонениям от правильной последовательности укладки рассматриваемых плоскостей, что должно отражаться на дифракционной картине.

Как и во многих других случаях, связанных с влиянием нарушений структуры на дифракционную картину, в настоящее время не существует способа, позволяющего прямо перейти от дифракционных эффектов к нарушениям структуры, и поэтому количественная оценка параметров, характеризующих нарушения, в сильной степени зависит от модели, принятой при расчете дифракционных эффектов.

Ограничимся рассмотрением одного из простейших случаев нарушений правильной укладки слоев в структуре, которая может быть описана как множество плоскостей (слоев), индцируемых как (001) и отстоящих друг от друга на расстоянии $|\vec{a}_3|$.

В рассматриваемом случае структура в пределах каждого из слоев остается неизменной, но слои могут смещаться друг относительно друга в плоскостях (001), так что расстояния между слоями не изменяются, а векторы смещений $\Delta\vec{R}_i$ всегда лежат в плоскостях (001).

Можно легко представить, что получится на дифракционной картине, если корреляция между смещениями соседних плоскостей будет полностью отсутствовать, а сами плоскости будут бесконечно протяженными.

В этом случае область существования Фурье-образа отдельной плоскости будет иметь известный вид (см. рис. 18); для учета сдвига отдельных плоскостей нужно ввести соответствующие фазовые множители. При отсутствии корреляции в смещениях

плоскостей этот учет ничего нового не дает, и в итоге мы от рассматриваемой структуры получим двумерную дифракцию, причем брегговские максимумы будут δ -образными.

Если плоскости (слои) имеют конечные размеры или, что то же, «плохие» области на хороших плоскостях ограничены, то вместо бесконечно тонких стержней, представленных на рис. 51, появятся стержни, сечение которых определяется Фурье-образом функции формы, описывающей область «плохого» материала в плоскости, так что брегговские максимумы будут расширяться.

Если сдвиги плоскостей будут коррелированными, то интенсивность вдоль стержней, в соответствии с общей теорией, развитой в п. 2 гл. IV, будет модулирована.

В простейшем случае, когда в кристалле оказывается смещенной каждая тысячная плоскость, размеры области когерентного рассеяния по перпендикуляру к плоскостям равны $L_3^a = 10^3 |\vec{a}_3|$. Тогда вместо бесконечно длинных стержней (см. рис. 18) появятся стержни длиной $L_3^b = \lambda 10^{-3} |\vec{a}_3|^{-1}$, удаленные друг от друга на расстояние $|\vec{b}_3| = \lambda |\vec{a}_3|^{-1}$. В результате получим множество брегговских максимумов, расположенных так же, как и в случае неискаженного кристалла, с той лишь разницей, что вместо δ -образных пиков получатся расширенные максимумы, форма которых будет определяться функцией с областью существования в виде стержня конечной длины L_3^b и конечного поперечного сечения.

Для оценки эффектов, возникающих на дифракционной картине, можно снова воспользоваться выражением (126а). Если ранее мы не были связаны с какой-либо плоскостью или направлением в кристалле, что позволило каждый раз использовать специально выбранный ромбический базис $\{\vec{a}_i\}$, записывая любой дифракционный вектор в форме $\vec{H} = (0, 0, h_3^3)$ и полагая $\Delta \vec{h} = (h_1, h_2, \Delta h_3)$ для любого из максимумов, то в данном случае такой способ описания непригоден, так как рассматриваются дефектные слои и необходимо согласовать базисные векторы с расположением этих слоев.

Удобно расположить вектор \vec{a}_3 перпендикулярно рассматриваемым слоям, причем назначить $|\vec{a}_3|$ равным расстоянию между соседними слоями, а векторы \vec{a}_1 и \vec{a}_2 расположить параллельно слоям, в которых могут происходить сдвиги. В этом случае базис $\{\vec{a}_i\}$ может быть ромбическим, тетра- и гексагональным или даже моноклинным.

В этом случае как вектор \vec{R}_u , описывающий положения ячейки, так и вектор \vec{h} должны быть записаны в общем виде $\vec{R}_u = R_1(u_1) \vec{a}_1 + R_2(u_2) \vec{a}_2 + R_3(u_3) \vec{a}_3$ и $\vec{h} = h_i b_i$, где $R_i(u_i)$ равно u_i .

Независимо от угла между векторами \vec{a}_1 и \vec{a}_2 , векторы \vec{a}_3 и \vec{b}_3 всегда параллельны друг другу.

Используем для расчета общее соотношение (126а)

$$I(h) = I_3 N \sum_{n=-\infty}^{\infty} C^L(n) C^\Delta(n) e^{-i2\pi \left(\frac{h}{\lambda} \cdot \vec{R}_n\right)}$$

где в соответствии с выражениями (127а) и (138) $C^L(n) = C_1^L(n_1) C_2^L(n_2) C_3^L(n_3)$ и $C^\Delta(n) = |F|^2 < e^{-i2\pi \left(\frac{h}{\lambda} \cdot \Delta\vec{R}_{(n)}\right)}$

Как видно, в том случае, когда плоскости смещаются без изменения расстояния между ними, $\Delta\vec{R}_u = \Delta R_1(u_3) \vec{a}_1 + \Delta R_2(u_3) \vec{a}_2$ для любой из плоскостей и $\Delta\vec{R}_{(n)} = \Delta\vec{R}_{u'} - \Delta\vec{R}_u = \Delta R_1(n_3) \vec{a}_1 + \Delta R_2(n_3) \vec{a}_2$, причем как вектор смещения $\Delta\vec{R}_u$, так и вектор $\Delta\vec{R}_{(n)}$, равный разности векторов смещений для двух слоев, в конечном итоге, определяются соответственно координатами u_3 и n_3 , т. е. номером слоя u_3 или числом слоев n_3 , разделяющих две рассматриваемые ячейки:

$$C^\Delta(n) = C^\Delta(n_3) = C^{o.y}(n_3) |F|^2, \quad (211)$$

где через $C^{o.y}(n_3)$ обозначена величина

$$C^{o.y}(n_3) = \left\langle e^{-i2\pi \left(\frac{h}{\lambda} \cdot \Delta\vec{R}_{(n)}\right)} \right\rangle, \quad (211a)$$

а вектор $\Delta\vec{R}_{(n)}$ связан только с ошибками укладки.

Таким образом, с учетом выражений (126а) и (211) распределение интенсивности должно быть записано в виде

$$I(\vec{h}) = I_3 N |F|^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_1^L(n_1) C_2^L(n_2) C_3^L(n_3) C^{o.y}(n_3) e^{-i2\pi \left(\frac{h}{\lambda} \cdot \vec{R}_n\right)}, \quad (211b)$$

а распределение интенсивности в отдельном максимуме — как

$$\begin{aligned} I(\Delta\vec{h}) &= I_3 N |F|^2 \hat{\mathfrak{F}} [C_1^L(n_1) C_2^L(n_2) C_3^L(n_3) C^{o.y}(n_3)] = \\ &= I_3 N |F|^2 \hat{\mathfrak{F}} [C_1^L(n_1)] \hat{\mathfrak{F}} [C_2^L(n_2)] \hat{\mathfrak{F}} [C_3^L(n_3)] \oplus \hat{\mathfrak{F}} [C^{o.y}(n_3)]. \end{aligned} \quad (212)$$

Как и обычно:

$$\hat{\mathfrak{F}} [C_j(n_j)] = I(\Delta h_j),$$

так что функция интенсивности, описывающая влияние ошибок упаковки, зависит только от координаты Δh_3 :

$$I^{o.y}(\Delta h_3) = \hat{\mathfrak{F}} [C^{o.y}(n_3)]. \quad (213)$$

Так как выражение (211a) записано не в специально выбранном ромбическом базисе $\{\vec{a}_i\}$, в котором $\{\vec{a}_3\}$ всегда направлено по \vec{h} -вектору, а в базисе $\{\vec{a}_i\}$, в котором \vec{a}_3 направлено перпендикулярно рассматриваемым слоям, то по отношению к вектору \vec{h} область существования функции (213), изображаемая отрезком $\mathcal{L}^{0 \cdot y}$, будет ориентирована по-разному в зависимости от угла между \vec{b}_3 и \vec{h} , оставаясь во всех случаях ориентированной перпендикулярно рассматриваемым слоям.

Независимо от конкретного вида функции $C^{0 \cdot y}(n_3)$ в том случае, когда смещения $\Delta \vec{R}_u$ лежат только в рассматриваемых плоскостях, размер области существования функции $I^{0 \cdot y}(\Delta h_3)$ будет зависеть от того, какой вектор \vec{H} мы используем.

Для $\vec{H}^{(2)}$, параллельного слоям, $\mathcal{L}_2^{0 \cdot y}$ будет наибольшим для $\vec{H}^{(3)}$, направленного перпендикулярно слоям, $C_2^{0 \cdot y}(n_3)$ равно, в соответствии с (211a), единице, так что

$$I_3^{0 \cdot y}(\Delta h_3) = \delta(\Delta h_3)$$

и

$$\mathcal{L}_3^{0 \cdot y} = 0.$$

Для произвольно направленного вектора \vec{H} область существования $\mathcal{L}^{0 \cdot y}$ образует с \vec{H} -вектором угол

$$\psi = \cos^{-1} \frac{(\vec{H}, \vec{b}_3)}{|\vec{H}| |\vec{b}_3|}.$$

Если рассматривать бесконечно большой кристалл, т. е. предположить все $C_j^L(n_j) = 1$, то при работе в режиме $\theta \div 2\theta$ сканирования на любом дифракционном векторе $I(\Delta \vec{h}) = \delta(\Delta \vec{h})$, так что наличие ошибок не скажется на дифракционной картине. При работе в режиме ϕ -сканирования на векторе $\vec{H}^{(2)}$ получим расширенный дифракционный пик, протяженность которого определяется областью $\mathcal{L}_2^{0 \cdot y}$, если только неподвижный счетчик будет ориентирован на угол $2\theta_0^{(2)}$; незначительное отклонение вектора \vec{t} от $2\theta_0^{(2)}$ приведет к исчезновению пика.

При работе в режиме ϕ -сканирования неподвижный счетчик может быть ориентирован по любому из векторов \vec{t} , лежащих в интервале $\vec{t}^{(1)} \div \vec{t}^{(2)}$, и каждый раз, когда область $\mathcal{L}^{0 \cdot y}$ пересечет сферу Эвальда, возникнет δ -образный дифракционный максимум.

При наличии в структуре разориентировок функцию $I^{0 \cdot y}(\Delta h_3)$ нужно свернуть с функцией распределения по разориентировкам

или, что то же, ввести в (213) коэффициент $C^{\circ} (n)$. Если теперь расчеты вести в терминах специального ромбического базиса $\{\vec{r}a_i\}$, то функцию $I^{\circ \cdot y} (\Delta h_3)$ нужно записать как $I^{\circ \cdot y} ({}^r h_2 \Delta^r h_3)$, а функцию распределения — по разориентировкам как $\varphi ({}^r h_2)$.

В предельном случае при переходе к поликристаллическому (или порошковому) образцу $\varphi ({}^r h_2) = \mathbf{1} ({}^r h_2)$ и в итоге после свертки останется только функция, зависящая от координаты $\Delta^r h_3$, измеряемой вдоль \vec{h} -вектора:

$$I^{\circ \cdot y} ({}^r h_2 \Delta^r h_3) \oplus \mathbf{1} ({}^r h_2) = I_3^{\circ \cdot y} (\Delta^r h_3),$$

которая может быть исследована обычным методом 2θ-сканирования, применяемым при работе с порошковыми образцами.

Как видно, в этом случае работа на сферах с радиусами $|\vec{H}^{(2)}|$ и $|\vec{H}^{(3)}|$ не позволит выявить наличие дефектов укладки.

Легко получить соотношение между координатой Δh_3 , измеряемой вдоль перпендикуляра, к слоям, т. е. по направлению [001] в Фурье-пространстве, описываемом при помощи базиса $\{\vec{b}_i\}$, и координатой $\Delta^r h_3$, измеряемой вдоль \vec{h} -вектора, т. е. по направлению [001], соответствующему базису $\{\vec{r}b_i\}$.

Так как $\Delta |\vec{h}| = \Delta^r h_3 |{}^r \vec{b}_3| = \Delta h_3 |\vec{b}_3| \cos \psi$,
то

$$\Delta^r h_3 = \frac{|\vec{b}_3|}{|{}^r \vec{b}_3|} \cos \psi \Delta h_3.$$

Для отыскания функции $C^{\circ \cdot y} (n_3)$ в явном виде необходимо задать конкретную модель искажений. Рассмотрим в качестве примера одну из простейших моделей, описывающих влияние ошибок упаковки в двухслойной структуре типа ...АВАВАВ..., т. е. в г. п. у-структуре. В этом случае возможно появление деформационных ошибок типа ...АВАВСАСАС... и ошибок роста вида ...АВАВСВСВС...

Для того чтобы воспользоваться выражением (213), дающим распределение интенсивности, зависящее только от ошибок упаковки, необходимо найти в явном виде значение $C^{\circ \cdot y} (n_3)$, равное по определению

$$C^{\circ \cdot y} (n_3) = \langle F_u F_{n+u}^* \rangle / |F|^2.$$

В рассматриваемой структуре векторы \vec{a}_1 и $|\vec{a}_2| = |\vec{a}_1|$ — обычные векторы гексагонального базиса, а вектор \vec{a}_3 равен половине обычного гексагонального вектора. Таким образом:

$$|\vec{a}_3| = \frac{1,63}{2} |\vec{a}_1|.$$

Если выражение A в структуре принять за исходное, то в слое B , смещенном по отношению к A на $\Delta R_u = \frac{1}{3} \vec{a}_1 + \frac{2}{3} \vec{a}_2$, структурная амплитуда должна рассчитываться как

$$F_B = F_A e^{-i2\pi \left[\frac{\vec{H}}{\lambda} \cdot \left(\frac{\vec{a}_1}{3} + \frac{2}{3} \vec{a}_2 \right) \right]},$$

а в слое, смещенном в положение C , — как

$$F_C = F_A e^{-i2\pi \left[\frac{\vec{H}}{\lambda} \cdot \left(\frac{2}{3} \vec{a}_1 + \frac{\vec{a}_2}{3} \right) \right]}$$

Введем вероятность $P(n_3)$ того, что два слоя, разделенные промежутком, насчитывающим n_3 этажей, находятся в одинаковых позициях (A , B или C). В этом случае вероятность того, что эти два слоя находятся в разных позициях, будет равна $1 - P(n_3)$.

Если в простейшем случае не сделать различия между парами различных типов, то комбинации $A \div A$, $A \div B$ и $A \div C$, в которых между слоями пары расположено n_3 этажей, будут осуществляться с вероятностями $P(n_3)$, $\frac{1}{2}(1 - P(n_3))$, $\frac{1}{2}(1 - P(n_3))$.

Для определения $C^{o.y}(n_3)$ мы должны рассмотреть три варианта расположения слоев начиная по очереди со слоя A , слоя B и слоя C и приписать каждому варианту вес, равный $\frac{1}{3}$.

Если первый слой A , то

$$\langle F_u \cdot F_{n+u}^* \rangle^A = F_A \left[P(n_3) F_A^* + \frac{1}{2}(1 - P(n_3)) F_B^* + \frac{1}{2}(1 - P(n_3)) F_C^* \right];$$

для первого слоя B получим

$$\langle F_u \cdot F_{n+u}^* \rangle^B = F_B \left[P(n_3) F_B^* + \frac{1}{2}(1 - P(n_3)) F_A^* + \frac{1}{2}(1 - P(n_3)) F_C^* \right]$$

и если первый слой C , то

$$\langle F_u \cdot F_{n+u}^* \rangle^C = F_C \left[P(n_3) F_C^* + \frac{1}{2}(1 - P(n_3)) F_A^* + \frac{1}{2}(1 - P(n_3)) F_B^* \right].$$

В итоге получим

$$\langle F_u' F_{n+u}'^* \rangle = \frac{1}{3} \langle F_u' F_{n+u}'^* \rangle^A + \frac{1}{3} \langle F_u' F_{n+u}'^* \rangle^B + \\ + \frac{1}{3} \langle F_u' F_{n+u}'^* \rangle^C$$

Так как в рассматриваемой модели ячейка содержит только один атом с рассеивающей способностью f , то во всех выражениях $F_A = f$ и $|F|^2 = f^2$.

Расчеты можно сократить, замечая, что

$$e^{-i2\pi \frac{h_1^0 + 2h_2^0}{3}} = e^{-i2\pi \frac{h_1^0 + 2h_2^0 - 3h_2^0}{3}} = e^{-i2\pi \frac{h_1^0 - h_2^0}{3}}$$

так что

$$F_B = fe^{-i2\pi \frac{h_1^0 - h_2^0}{3}} \quad \text{и} \quad F_C = fe^{i2\pi \frac{h_1^0 - h_2^0}{3}} = F_B^*;$$

кроме того, $F_A F_A^* = F_B F_B^* = F_C F_C^* = f^2$.

Окончательно получим

$$C^{o.y}(n_3) = P(n_3) + [1 - P(n_3)] \cos 2\pi \frac{h_1^0 - h_2^0}{3}. \quad (214)$$

Для упрощения анализа можно поступить так же, как и при рассмотрении влияния нарушений идеальной структуры в п. 2 гл. IV, введя среднюю вероятность $\langle P(n_3) \rangle$ и флуктуацию вероятности $\Delta P(n_3)$:

$$P(n_3) = \langle P(n_3) \rangle + \Delta P(n_3). \quad (215)$$

При усреднении по достаточно большому объему $\langle P(n_3) \rangle = \frac{1}{3}$. В этих же условиях при полном беспорядке $P(n_3) = \langle P(n_3) \rangle$ и, кроме того, $P(0) = 1$ и $P(1) = 0$; последнее условие означает, что из рассмотрения исключается сегрегация или случай одинакового расположения соседних слоев.

Воспользовавшись выражением (215), можно выделить в $C^{o.y}(n_3)$ постоянное слагаемое, не зависящее от n_3 :

$$C^{o.y}(n_3) = C_1 \mathbf{1}(n_3) + C_2 \Delta P(n_3), \quad (216)$$

где

$$C_1 = \langle P \rangle + (1 - \langle P \rangle) \cos 2\pi \frac{h_1^0 - h_2^0}{3}$$

и

$$C_2 = 2 \sin^2 \pi \frac{h_1^0 - h_2^0}{3}.$$

Используя (216), легко записать распределение интенсивности в дифракционном максимуме, обусловленное только ошибками укладки:

$$I_0^{\circ \cdot y}(\Delta h_3) = \hat{\mathfrak{F}} [C_0^{\circ \cdot y}(n_3)] = I_1^B(\Delta h_3) + I_2^{\circ \cdot y}(\Delta h_3) = \\ = C_1 \delta(\Delta h_3) + C_2 \hat{\mathfrak{F}}[\Delta P(n_3)] \quad (217)$$

Как видно, структура этого выражения в точности повторяет структуру выражения (129), описывающего влияние искажений первого рода: первый член соответствует обычному брегговскому максимуму (в нашем случае при $C^L(n) = \mathbf{1}(n)$ он превратился в δ -функцию), а второй передает влияние отклонений структуры от «среднего» состояния, характеризуемого вероятностью $\langle P(n_3) \rangle$.

Конкретный вид второго слагаемого в выражении (247) зависит от вида функции $\Delta P(n_3)$, однако из формулы (217) ясно видно, что при полном беспорядке, когда $P(n_3) = \langle P(n_3) \rangle$, $\Delta P(n_3)$ отлично от нуля только при $n_3 = 0$, т. е. является δ -функцией. В этом случае слагаемое

$$I_2^{\circ \cdot y}(\Delta h_3) = C_2 \hat{\mathfrak{F}}[\delta(n_3)] = C_2 \mathbf{1}(\Delta h_3).$$

и область существования функции $I_2^{\circ \cdot y}(\Delta h_3)$ является прямой, перпендикулярной рассматриваемым слоям, в полном соответствии с качественным рассмотрением, проведенным в начале этого параграфа.

Из выражения (217) также видно, что независимо от значения $\Delta P(n_3)$ член $I_2^{\circ \cdot y}(\Delta h_3)$ обращается в нуль при

$$h_1^q - h_2^q = 3\kappa, \quad (218)$$

где κ — целое число, так как при этом $C_2 = 0$, $C_1 = 1$.

Таким образом, влияние ошибок будет сказываться только на максимумах с координатами h_1^q и h_2^q , удовлетворяющими соотношению

$$h_1^q - h_2^q = 3\kappa \pm 1, \quad (219)$$

причем в этом случае $C_2 = 3/2$ и $C_1 = 0$, так что брегговский δ -максимум I_1^B исчезает.

В итоге точкам Фурье-пространства, координаты которых удовлетворяют соотношению (218), будет соответствовать только брегговский пик I_1^B , на котором не сказываются ошибки укладки, а точкам с координатами, удовлетворяющими условию (219), или, что то же, условию $h_1^q - h_2^q = 3\kappa \mp 2$, только максимумы типа $I_2^{\circ \cdot y}(\Delta h_3) = \frac{3}{2} \hat{\mathfrak{F}}[\Delta P(n_3)]$, вид которых будет определяться ошибками укладки слоев.

Как видно, собственно структура кристалла будет сказываться на величине коэффициентов C_1 и C_2 ; модель, принятая при описании нарушений структуры, будет влиять на функцию $\Delta P(n_3)$,

однако структура выражения (217) останется неизменной для очень широкого класса различных моделей.

В частности, если, помимо сдвига слоев параллельно друг другу, ввести еще малые смещения слоев в направлении нормали к слою, то при условии сохранения «в среднем» исходного расстояния между слоями влияние таких ошибок укладки по-прежнему будет описываться выражением типа (217).

В качестве примера расчетов, которые приходится проводить при рассмотрении моделей структур с ошибками, рассмотрим г. п. у.-структуру, в которой появление ошибки, т. е. позиции С, следующей за парой АВ, характеризуется вероятностью α .

В этом случае мы рассматриваем только первых и вторых соседей атома А, так что ошибки разных типов не рассматриваются.

Если в слое, от которого начинается отсчет n_3 при определении $P(n_3)$, содержится атом А, то величину $P(n_3)$ можно сравнить с величинами $P(n_3 - 1)$ и $P(n_3 - 2)$, которые характеризуют позиции двух предшествующих рассматриваемому слоев (табл. 3).

Таблица 3
ХАРАКТЕРИСТИКА ВАРИАНТОВ
РАСПОЛОЖЕНИЯ СЛОЕВ

Варианты расположения слоев	Номер слоя			
	0	n_3-2	n_3-1	n_3
<i>a</i>	A	A	B	A
<i>б</i>	A	B	C	A
<i>б</i>	A	C	B	A

Если имеет место вариант «а», т. е. ошибки нет, то вклад в $P(n_3)$ будет равен $(1 - \alpha) \times P(n_3 - 2)$, так как вероятность нахождения в позиции $n_3 - 2$ атома А равна $P(n_3 - 2)$, помноженному на вероятность отсутствия ошибки, т. е. на $(1 - \alpha)$.

В варианте «б», когда имеет место ошибка, вклад будет равен $\alpha [1 - P(n_3 - 2) - P(n_3 - 1)]$,

так как ни в позиции $n_3 - 2$, ни в позиции $n_3 - 1$ нет атома А. Сумма вкладов «а» и «б» даст вероятность $P(n_3)$:

$$P(n_3) = (1 - \alpha) P(n_3 - 2) + \alpha [1 - P(n_3 - 2) - P(n_3 - 1)].$$

Используя выражение (215) и принимая $\langle P \rangle = \frac{1}{3}$, получим $(2\alpha - 1) \Delta P(n_3 - 2) + \alpha \Delta P(n_3 - 1) + \Delta P(n_3) = 0$. (220)

Решение этого уравнения следует искать в виде $\Delta P(n_3) = x^{|n_3|}$, что дает при подстановке в выражение (220)

$$x^2 + \alpha x - (1 - 2\alpha) = 0. \quad (221a)$$

Отсюда, считая $\alpha \ll 1$, получим

$$x_1 = 1 - \frac{3}{2} \alpha; \quad x_2 = -1 + \frac{\alpha}{2}.$$

Общее решение уравнения (220) будет линейной комбинацией двух частных решений, соответствующих (221):

$$\Delta P(n_3) = A_1 \left(1 - \frac{3}{2} \alpha\right)^{|n_3|} + A_2 \left(-1 + \frac{\alpha}{2}\right)^{|n_3|},$$

причем A_1 и A_2 легко находятся из начальных условий $\Delta P(0) = \frac{2}{3}$ и $\Delta P(1) = -\frac{1}{3}$. В итоге

$$\Delta P(n_3) = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{3}{2}\right)^{|n_3|} + \frac{1}{2} (-1)^{|n_3|} \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)^{|n_3|} \quad (222)$$

Теперь не представляет труда перейти к рассмотрению распределения интенсивности, вызванного нарушениями правильной укладки слоев.

До сих пор во всех расчетах мы использовали координаты $\{n_i\}$ и $\{h_i\}$, отнесенные к «полугексагональной» ячейке, в которой вектор \vec{a}_3 равен расстоянию между соседними слоями, т. е. половине «обычного» гексагонального вектора $\vec{a}_3 = \frac{\vec{c}}{2}$.

Для того чтобы перейти к обычному вектору \vec{a}_3 и обычной координате \vec{h}_3 , снабдим третьи координаты, отнесенные к «половинной» ячейке, значком (*). Очевидно, соотношение между h_3^* и h_3 запишется в виде $h_3 = 2h_3^*$.

Принимая во внимание, что

$$(-1)^{|n_3^*|} = e^{i\pi n_3^*},$$

$$(1 - \gamma)^{|n_3^*|} = e^{|n_3^*| \ln(1-\gamma)} = e^{-\frac{2\pi}{k} |n_3^*|}$$

где $k = -\frac{2\pi}{\ln(1-\gamma)}$, выражение (222) запишем в виде

$$\Delta P(n_3) = \frac{1}{6} e^{-\frac{2\pi}{k_1} |n_3^*|} + \frac{1}{2} e^{i\pi n_3^*} e^{-\frac{2\pi}{k_2} |n_3^*|},$$

где

$$k_1 = -\frac{2\pi}{\ln\left(1 - \frac{3}{2}\alpha\right)}; \quad k_2 = -\frac{2\pi}{\ln\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)}.$$

Интересуясь только той частью дифракционной картины, которая связана с нарушениями правильной укладки слоев, мы можем записать в соответствии с выражениями с (211б) и (216), опуская множители $I_3 N |F|^2$ и учитывая, что коэффициент C_2 по-прежнему равен $3/2$:

$$\begin{aligned} I_2^{\circ, \gamma}(h_3) &= C_2 \sum \Delta P(n_3) e^{-i2\pi h_3^* n_3^*} = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{n_3^*=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\pi}{k_1} |n_3^*|} e^{-i2\pi h_3^* n_3^*} + \\ &+ \frac{3}{4} \sum_{n_3^*=-\infty}^{\infty} e^{i\pi n_3^*} e^{-\frac{2\pi}{k_2} |n_3^*|} e^{-i2\pi h_3^* n_3^*}. \end{aligned} \quad (223)$$

Первая сумма описывает множество максимумов, положение которых соответствует целочисленным значениям координаты h_3^* или четным значениям координаты h_3 , т. е. пикам, у которых $h_3 = h_3^0$ — четное число.

Распределение интенсивности около узлов с четным h_3^0 получим как

$$\widehat{\mathcal{F}} \left[e^{-\frac{2\pi}{k_1} |n_3^*|} \right] = \frac{k_1}{\pi} \frac{1}{1 + k_1^2 (\Delta h_3^*)^2},$$

или, переходя к координате Δh_3 , как

$$\frac{k_1}{\pi} \frac{1}{1 + k_1^2 \left(\frac{\Delta h_3}{2} \right)^2}. \quad (224)$$

Найдем распределение интенсивности вблизи максимумов, отвечающих второй сумме из выражения (223):

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}} \left[e^{i\pi n_3^*} e^{-\frac{2\pi}{k_2} |n_3^*|} \right] &= \widehat{\mathcal{F}} \left[e^{i2\pi \frac{1}{2} n_3^*} \right] \oplus \widehat{\mathcal{F}} \left[e^{-\frac{2\pi}{k_2} |n_3^*|} \right] = \\ &= \delta \left(\Delta h_3^* - \frac{1}{2} \right) \oplus \frac{k_2}{\pi} \frac{1}{1 + k_2^2 (\Delta h_3^*)^2} \end{aligned} \quad (224a)$$

Выражение $\delta \left(\Delta h_3^* - \frac{1}{2} \right)$ показывает, что δ -функция расположена по шкале h_3^* посередине между узлами h_3^* ; по шкале h_3 δ -функции появятся только при нечетных значениях координаты h_3^0 .

Таким образом, при нечетном h_3^0 появляются пики вида

$$\frac{3}{4} \frac{k_2}{\pi} \frac{1}{1 + k_2^2 \left(\frac{\Delta h_3}{2} \right)^2}. \quad (224b)$$

Интегральная ширина пиков, отвечающих выражениям типа (224) и (224b), равная $\frac{\pi}{k}$, оказывается при малых γ пропорциональной γ : $\pi/k = -[\ln(1 - \gamma)/2] \approx \gamma/2$.

Таким образом, в терминах переменной h_3^* «четные» пики будут иметь ширину $3/4\alpha$, а «нечетные» — $\alpha/4$.

Легко также видеть, что при $\alpha = 0$ пики типа (224), (224b) и (218) будут давать множество δ -функций, т. е. брегговских максимумов, с весовыми множителями соответственно 1, 3 и 4, как это и полагается идеальной г. п. у.-структуре.

Расчеты дифракционных эффектов в простейших структурах содержатся в работах [20, 21]; более сложные модели разобраны в [22, 23].

В общем случае, когда в структуре существуют ошибки различных типов, имеет место не только симметричное размытие максимумов, описываемое выражениями (224) и (224b), но также их смещение по координате h_3 и асимметричное расширение.

Не останавливаясь на этих расчетах, заметим только, что при малых концентрациях ошибок представление функции, описывающей влияние ошибок, в виде $\exp - \frac{2\pi}{k} |n_3|$ оказывается вполне удовлетворительным. Можно принять, не учитывая предэкспоненциального множителя, что для максимумов, на которые влияют ошибки укладки:

$$C^{\circ \cdot y}(n_3) = e^{-\frac{2\pi}{k} |n_3|} \quad (225)$$

Приняв $2/\pi = \langle \circ \cdot y N^{-1} \rangle$, можно записать выражение (225) в удобном для дальнейшего использования виде

$$C^{\circ \cdot y}(n_3) = e^{-\circ \cdot y \langle N^{-1} \rangle |n_3|},$$

где $\circ \cdot y N$ — некоторая безразмерная величина, по смыслу равная числу ячеек.

В дальнейшем снова перейдем от базисных векторов, «привязанных» к плоскостям, которые укладываются с ошибками, к ромбическому базису, согласованному с рассматриваемым дифракционным вектором \vec{h} , так что $r\vec{b} = \vec{b}_3$ всегда направлено вдоль \vec{h} .

В этом случае область существования функции $I^{\circ \cdot y}(\Delta\vec{h})$ по-прежнему будет описываться отрезком, но функции $I^{\circ \cdot y}(\Delta\vec{h})$ и $C^{\circ \cdot y}(n)$ будут зависеть от всех трех координат:

$$I^{\circ \cdot y}(\Delta\vec{h}) = I^{\circ \cdot y}(h_1, h_2, \Delta h_3)$$

и

$$C^{\circ \cdot y}(n) = C^{\circ \cdot y}(n_1, n_2, n_3),$$

причем на области существования $I^{\circ \cdot y}(\Delta\vec{h})$

$$m_1 h_1 + m_2 h_2 + m_3 \Delta h_3 = 0,$$

где $\{m_i\}$ — постоянные.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шварц Л. Математические методы для физических наук. Пер. с франц. М., «Мир», 1965. 412 с. с ил.
2. Гудмен Дж. Введение в Фурье-оптику. Пер. с англ. М., «Мир», 1970. 364 с. с ил.
3. Папулис А. Теория систем и преобразований в оптике. Пер. с англ. М., «Мир», 1971. 495 с. с ил.
4. Зоммерфельд А. Оптика. Пер. с нем. М., ИЛ, 1953. 486 с. с ил.
5. Марешаль А., Франсон М. Структура оптического изображения. Пер. с франц. М., «Мир», 1964. 286 с. с ил.
6. Белов Н. В. Предисловие к книге Г. Липсона и Г. Стипла «Интерпретация порошковых рентгенограмм». Пер. с англ. М., «Мир», 1972. 384 с. с ил.
7. Вуергер М. Crystal structure analysis. London, Willey, 1960, p. 634.
8. Азаров Л., Бургер М. Метод порошка в рентгенографии. Пер. с англ. М., ИЛ, 1961. 363 с. с ил.
9. Бургер М. Рентгеновская кристаллография. Пер. с англ. М., ИЛ, 1948. 484 с. с ил.
10. Миркин Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. М., Физматгиз, 1961. 863 с. с ил.
11. Tixier R., Wache C. — «J. Appl. Cryst.», 1970, v 3, № 4, p. 466—485.
12. Васильев Д. М., Иванов С. А. — «Заводская лаборатория», 1971, т. 37, № 9, с. 1099—1103.
13. Schmidt G. K. — «Z. angew. Phys.», 1961, Bd 13, № 2, s. 90—95.
14. Kossel W., Voges H. — «Ann. d. Physik», 1935, v. 23, № 8, p. 677—698.
15. Schneider J., Weik H. — «Acta Cryst.», 1966, v. A222, № 1 p. 21—24.
16. Schneider J., Weik H. — «Z. angew. Physik», 1968, v. 24, № 2, p. 75—78.
17. Newman B., Schreier A. — «J. Appl. Cryst.», 1970, v. 3, № 4, p. 280—281.
18. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. Пер. с англ. М., Мир, 1972. 384 с. с ил.
19. Порай-Кошиц М. А. Практический курс рентгеноструктурного анализа. М., Изд-во МГУ, 1960. 632 с. с ил.
20. Вильсон А. Оптика рентгеновских лучей. Пер. с англ. М., ИЛ, 1951. 143 с. с ил.
21. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. М., ГИТТЛ, 1952. 588 с. с ил.
22. Уоррен Б. Рентгенографическое изучение деформированных металлов. Пер. с англ. М., Металлургиздат, 1963. 372 с. с ил. (Сер. «Успехи физики металлов»).
23. Иверонова В. И., Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М., Изд-во МГУ, 1972. 246 с. с ил.
24. Васильев Д. М., Иванов С. А., Тараканов Б. М. — «Заводская лаборатория», 1974, т. 40, № 6, с. 685—689.
25. Gilli G., Voega P. — «J. Appl. Cryst.», 1970, v. 3, № 3, p. 205—211.
26. Пинес Б. Я., Сиренко А. Ф. — «Кристаллография», 1962, т. 7, № 1, с. 20—25.
27. Gangulee A. — «J. Appl. Cryst.», 1970, v. 3, № 4, p. 272—277.
28. Фадеева В. Н., Терентьев И. М. Таблицы значений интеграла вероятностей от комплексного аргумента. М., Гостехиздат, 1954. 362 с. с ил.
29. Иверонова В. И., Осипенко Н. И. — «Заводская лаборатория», 1965, т. 31, № 11, с. 1349—1352.
30. Langford J., Wilson A. — In: Crystallographie and crystal Perfection, Lond. Willey, 1963, p. 360.
31. Най Дж. Физические свойства кристаллов. Пер. с англ. М., «Мир», 1967. 385 с. с ил.

32. Васильев Д. М. Физическая кристаллография. М., «Металлургия», 1972. 279 с. с ил.
33. Васильев Д. М., Трофимов В. В. — «Труды ЛПИ», 1975, № 341, Л., изд. ЛПИ, с. 78—84.
34. Тошняво Ширайва, Ешиясу Секамото, «Дзайре» «J. Soc. Mater. Sci. Jap.» 1967, v. 16, № 8, p. 943—949.
35. Фукс М. Я., Гладких Л. И. — «Заводская лаборатория», 1965, т. 31, № 8, с. 978—983.
36. Большаков П. П., Васильев Д. М., Титовец Ю. Ф. — «Труды ЛПИ», 1975, № 341, Л., изд. ЛПИ, с. 76—78.
37. Крёпер Е. — «Z. für Physik», 1958, Bd 151, № 3, s. 504—518.
38. Reuss A. — «Z. angew. Met. u Mech.», 1929, Bd 9, № 1, s. 49—58.
39. Voigt W. Lehrb. der Kristalphysik Leipzig, 1928, s. 738.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	4
Г Л А В А I	
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ	8
1. Ряды Фурье и интеграл Фурье	8
2. Дельта-функция Дирака	9
3. Свертка функций	10
4. Преобразование Фурье	12
5. Свойства оптического сигнала	22
6. Дифракция Френеля и Фраунгофера	28
7. Дифракция Фраунгофера на отверстиях и на дифракционной решетке	31
Г Л А В А II	
ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ НА ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ	43
1. Рассеяние электромагнитной волны на свободном электроне	43
2. Дифракция на решеточной структуре	45
3. Геометрия дифракционной картины для объекта с одно-, двух- и трехмерными решетками	49
4. Представление дифракции на трехмерном объекте с решеткой как отражения от узловых плоскостей	54
5. Влияние типа ячейки Браве, винтовых осей и плоскостей скольжения отражения на дифракционную картину	60
6. Влияние расположения атомов в ячейке на дифракционную картину	68
7. Способы анализа распределения интенсивности в брегговских дифракционных максимумах	74
8. Интегральная отражательная способность кристалла	82
Г Л А В А III	
МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ И РЕГИСТРАЦИИ ДИФРАКЦИОННОЙ КАРТИНЫ	87
1. Некоторые соображения о различных возможностях получения дифракционной картины	87
2. Особенности изображения решеточных Фурье-образов идеального монокристалла и поликристаллического (порошкового) объекта	89
3. Метод вращения	99
4. Методы рентгенонометров	107
5. Метод Лауэ	110
6. Метод расходящегося пучка	120
7. Метод порошка	132
8. Определение удельной отражательной способности в различных методах получения дифракционной картины	138
Г Л А В А IV	
ДИФРАКЦИЯ НА РЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ	148
1. Искажения структуры первого и второго рода	148
2. Дифракция на кристалле с искажениями первого рода	150
3. Влияние тепловых колебаний на дифракцию	155
4. Влияние деформационных искажений и поворотов, вызванных разориентировками, на брегговские максимумы	160

5. Сведения о размерах областей когерентного рассеяния и о функции распределения по размерам, получаемые из коэффициентов $C_{(n)}^L$	171
6. Совместное действие различных искажений структуры на дифракционную картину	175
7. Отыскание параметров тонкой структуры кристалла по функциям $C(n)$, заданным в объекте	178
8. Влияние практической процедуры анализа дифракционного профиля на значение параметров тонкой структуры при работе в пространстве объекта	185
9. Отыскание параметров тонкой структуры непосредственно по дифракционным максимумам, без перехода в пространство объекта	195
10. Деформационные искажения с функцией распределения в виде дельта-функции	213
11. Влияние ошибок укладки в слоистых структурах	232
Список литературы	244

**Дмитрий Михайлович
ВАСИЛЬЕВ**

**Дифракционные
методы
исследования
структур**

Редактор издательства А. А. САЛЬНИКОВ
Художественный редактор Г. А. ЖЕГИН
Технический редактор В. А. ЛЫКОВА
Корректоры: В. Б. ЛЕВИН, Т. А. РЮМИНА
Переплет художника В. З. КАЗАКЕВИЧА

Сдано в набор 23/VII 1976 г. Подписано в печать 10/II 1977 г.
Т-01595 Формат бумаги 60×90¹/₁₆ Бумага типографская № 2
Печ. л. 15,5 Уч.-изд. л. 16,24
Тираж 3100 экз. Заказ 1167 Изд. № 2742 Цена 2 р. 59 к.

Издательство «Металлургия», 119034, Москва, Г-34,
2-й Обыденский пер. д 14

Ленинградская типография № 6 Союзполиграфпрома
при Государственном комитете Совета Министров СССР
по делам издательств, полиграфии и книжной торговли
193144, Ленинград, С-144, ул. Моисеенко, 10