

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ
ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

НОВЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ РЕНТГЕНОВСКИХ
ЛУЧЕЙ И ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ, ДИФРАГИРОВАННЫХ
В МОНОКРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ*

© 2011 г. А. М. Егиазарян, К. М. Геворкян, А. К. Атанесян

*Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван
E-mail: Konstantin@iapp.sci.am*

Поступила в редакцию 14.12.2009 г.

Предложен новый метод вычисления интенсивностей рентгеновских лучей и тепловых нейтронов, дифрагированных в монокристаллах с дефектами, путем сопоставления динамической теории брэгговской дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в совершенных монокристаллах и теории их малоуглового рассеяния.

Исследование явлений динамической дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в монокристаллах является актуальной задачей современной физики твердого тела. В общих чертах эти явления описываются одинаковыми уравнениями. Однако интегрирование этих уравнений (уравнения Такаги для рентгеновских лучей) в случае несовершенных монокристаллов или монокристаллов с дефектами — непростая задача. Оно предполагает преодоление громоздких математических вычислений, что ограничивает эффективность исследований особенно с точки зрения предсказания новых явлений. Для преодоления этого неудобства мы предлагаем новый метод вычисления интенсивностей рентгеновских лучей и тепловых нейтронов, многократно рассеянных в монокристаллах с некоторыми дефектами.

Допустим пучок рентгеновских лучей под углом Брэгга падает на монокристалл с дефектом (рис. 1). Амплитуду дифрагированной волны будем рассматривать как результат двухэтапной дифракции.

На первом этапе пучок рентгеновских лучей динамически рассеивается на совершенном монокристалле (брэгговская дифракция). На втором этапе дифрагированные на первом этапе волны претерпевают малоугловое рассеяние на дефекте. На первом этапе происходит динамическая брэгговская дифракция рентгеновского пучка на совершенном монокристалле, для которого известны амплитуды дифрагированных волн [1]. На

втором этапе дифрагированные на первом этапе волны претерпевают фраунгоферовскую или френелевскую дифракцию на дефекте в зависимости от размеров дефекта и параметров геометрии регистрации интенсивности дифрагированного излучения.

Пусть монохроматический пучок рентгеновских лучей $\psi_0^i(\mathbf{r})$ под углом Брэгга падает на не поглощающий монокристалл со статическим дефектом (рис. 1).

Согласно выдвинутой идеи, амплитуды волн $\psi_0(\mathbf{r})$ и $\psi_h(\mathbf{r})$ в первом приближении [2] можно представить в виде

$$\psi_{0,h}(\mathbf{r}) = \psi_{0,h}^0(\mathbf{r}) \mp \frac{\nu}{4\pi} \int \psi_{0,h}^0(\mathbf{r}') \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1)$$

где $\psi_{0,h}(\mathbf{r})$ — амплитуды динамически дифрагированных на совершенном кристалле волн, ν — параметр, характеризующий силу взаимодействия волны $\psi_{0,h}^0$ с дефектом, $U(\mathbf{r}')$ — локальное смещение атомов от их положения в совершенном кристалле, \mathbf{r} — радиус-вектор наблюдаемой точки. Интегрирование проводится по объему распределения дефекта. Знаки плюс и минус следуют из закона сохранения энергии, так как наблюдаемое усиление волны $\psi_h(\mathbf{r})$, рассеянной на дефекте, происходит за счет ослабления волны $\psi_0(\mathbf{r})$.

Выражение (1) представляет решение объемной задачи. Из анализа этого решения можно предсказать, в частности, явление переброски рентгеновских лучей из направления прохождения в направлении отражения [3], явление фоку-

* Материал докладывался на Международной конференции «Рассеяние электронов, позитронов, нейтронов и рентгеновских лучей под внешними воздействиями» Ереван-Мери 2009.

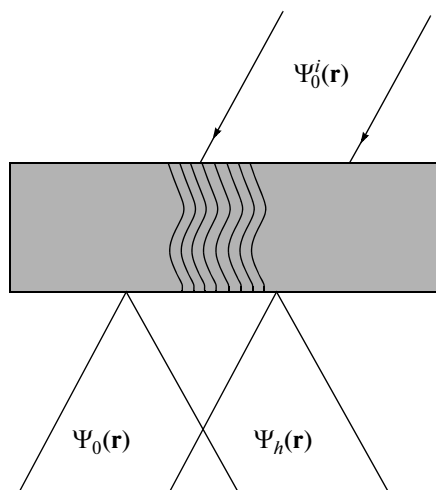


Рис. 1. Схема падения лентообразного пучка на кристалл.

сировки пучка, дифрагированного на дефекте в кристалле. В некоторых случаях можно рассмотреть обратную задачу — определение функции локального смещения $U(\mathbf{r})$ атомов от их положения в совершенном монокристалле и т.д.

Рассмотрим явление модуляции рентгеновских лучей, многократно рассеянных на совершенном монокристалле кварца, где присутствует стоячая акустическая волна [4, 5]. Согласно схеме эксперимента (рис. 2), лентообразный монохроматический пучок рентгеновских лучей падает на монокристалл кварца под точным углом Брэгга, когда по толщине кристалла присутствует стоячая акустическая волна.

В условиях проделанного эксперимента можно принять, что $U = U_0 \cos(2\pi k_{ak}z)$, где k_{ak} — волновое число акустической волны.

Выражение (1) приводим к виду

$$\Psi_{0,h}(x,y) = \Psi_{0,h}^0(x,y) \mp \frac{\nu U_0}{4\pi} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \Psi_{0,h}^0(0,z) \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \cos(2\pi k_{ak}z) dz, \quad (2)$$

где $\Psi_{0,h}^0$ — плосковолновое решение для совершенного монокристалла, d — толщина кристалла. Имея в виду численные значения параметров геометрии эксперимента и падающего излучения, интеграл в выражении (2) можно привести к интегралу Френеля, реальная часть которого с точностью до постоянного множителя имеет вид

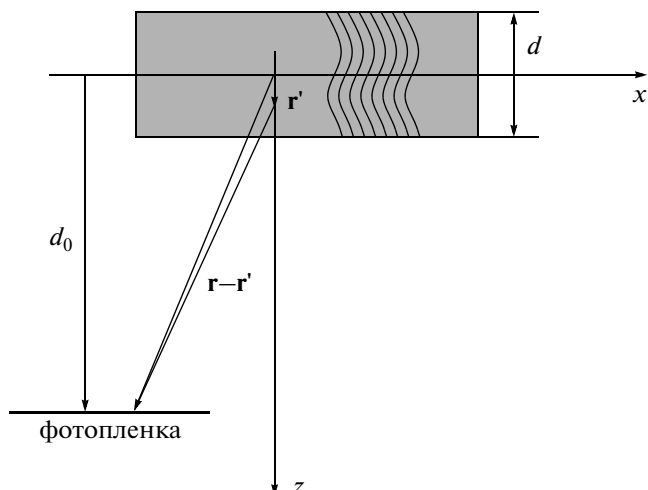


Рис. 2. Схема дифракции пучка на кристалле при наличии стоячей акустической волны.

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \cos \left[-kz \sin \theta_B \frac{\Delta x}{2d_0} + k \frac{z^2 \cos \theta_B}{4d_0} \right] \cos(2\pi k_{ak}z) dz, \quad (3)$$

где θ_B — точный угол Брэгга, Δx — расстояние рассматриваемой точки на фотоэмульсионной пленке от его центра, k — волновое число рентгеновской волны внутри кристалла.

Из численного интегрирования (3) следует, что в геометрических сечениях как для проходящего, так и для отраженного пучков имеют место определенные осцилляции амплитуд, которые точно характеризуют экспериментальные результаты [3, 4].

В заключение отметим, что выражение (1) представляет общее выражение для амплитуд нейтронных и рентгеновских пучков, многократно рассеянных на монокристаллах, содержащие дефекты различного вида. Из анализа этого выражения можно предсказать и количественно оценить различные известные и новые динамические явления при дифракции этих пучков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Свергун Д.И., Фейгин Л.А. // Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. С. 11.
2. Мкртчян А.Р., Навасардян М.А., Мирзоян В.К. // Письма в ЖТФ. 1982. Т. 8. С. 677.
3. Мирзоян В.К., Егиазарян А.А., Багдасарян Э.Г., Мирзоян П.В. // Изв. НАН Армении. Физика. 2007. Т. 42. С. 355.
4. Мирзоян В.К., Егиазарян А.А., Агабекян В.Н., Мирзоян П.В. // Изв. НАН Армении. Физика. 2008. Т. 43. С. 104.