Доклады Академии Наук СССР
1951. Том LXXXI, № 5

ФИЗИКА

Хр. Я. ХРИСТОВ

О ПРОХОЖДЕНИИ ЛУЧЕЙ РЕНТГЕНА ЧЕРЕЗ ПЛОСКО-ПАРАЛЛЕЛЬНУЮ ПЛАСТИНКУ КРИСТАЛЛА

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 9 VII 1951)

В предыдущей работе [1] мы показали, что вопрос о прохождении плоской монохроматической волны произвольной длины, падающей нормально на плоско-параллельную пластинку, вырезанную из кристалла ромбической системы, имеющего по одному диполю в клетке, при предположении, что падающая волна линейно поляризована в направлении одной из осей кристалла, сводится к решению бесконечной системы уравнений

$$KZ_l = \sum_\mu (X_{\mu l} + Y_{\mu,\, l+1}),$$

$$\mathbf{X}_{\mu l} - s_\mu \mathbf{X}_{\mu,\, l+1} = \mathbf{u}_\mu^+ Z_l, \tag{1}$$

$$\mathbf{Y}_{\mu,\, l+1} - s_\mu \mathbf{Y}_{\mu,\, l} = \mathbf{u}_\mu^- Z_l,$$

$$\mathbf{X}_{00} = (a_{00}, 0, 0), \quad \mathbf{X}_{\nu 0} = 0, \quad \mathbf{Y}_{\mu N} = 0, \tag{2}$$

в которой $\mathbf{X}_{\mu l}$, $\mathbf{Y}_{\mu l}$ и Z_l — неизвестные величины, а K, s_μ, $\mathbf{u}_\mu^\pm$ и a_{00} — известные константы. Также было показано, что решение этой бесконечной системы сводится к решению следующей конечной системы:

$$S_l Z_0 + S_{l-1} Z_1 + \cdots + S_1 Z_{l-1} + K Z_l + S_1 Z_{l+1} + S_2 Z_{l+2} + \cdots$$
$$\cdots + S_{N-l-1} Z_{N-1} = s_0^{-l} a_{00}. \tag{3}$$

Если число N большое, то решение такой системы все-таки будет трудным. Вот почему, используя результаты и обозначения из [1], мы здесь дадим приближенный метод нахождения распределения электромагнитного поля в предположении, что величина K большая по абсолютному значению, — случай, который имеет место, например, при лучах Рентгена.

Во-первых, мы покажем, что если с двух сторон кристаллической пластинки падают подходящие монохроматические (но не плоские) электромагнитные волны, то в ней могут образоваться поля, при которых колебания диполей образуют плоские монохроматические волны, распространяющиеся с подходящими скоростями в направлении оси z, т. е. покажем, что уравнения (1) (но не уравнения (1) и (2)) допускают решения вида

$$\mathbf{X}_{\mu l} = \mathbf{X}_\mu q^l, \quad \mathbf{Y}_{\mu l} = \mathbf{Y}_\mu q^l, \quad Z_l = Z q^l \tag{4}$$

при произвольном выборе Z и подходящих значениях $\mathbf{X}_\mu$, $\mathbf{Y}_\mu$ и Z.

Действительно, подставляя (4) в (1), получаем

$$\mathbf{X}_{\mu l} = \frac{\mathbf{u}_\mu^+}{1 - s_\mu q} Z q^l, \quad \mathbf{Y}_{\mu l} = \frac{\mathbf{u}_\mu^- q^{-1}}{1 - s_\mu q} Z q^l, \quad Z_l = Z q^l, \tag{5}$$

где q удовлетворяет уравнению

$$K = \sum_{\mu} u_{\mu} \left(\frac{1}{1 - s_{\mu} q} + \frac{1}{1 - s_{\mu} q^{-1}} \right). \tag{6}$$

Все значения, которые может принять индекс $\mu = (m, n)$, могут быть разделены на группы таким образом, чтобы каждой такой группе соответствовало одно и то же значение s_{μ}. Для каждой такой группы значений μ обозначим через $\varphi = (m, n)$ то значение, для которого m имеет наименьшее неотрицательное значение, а при наличии нескольких таких значений μ—то из них, для которого n удовлетворяет тому же условию. Пусть $n_{\varphi} u_{\varphi}$ — сумма всех чисел u_{μ}, соответствующих данному φ. Тогда уравнение (6) может быть написано в виде

$$K = \sum_{\varphi} n_{\varphi} u_{\varphi} \left(\frac{1}{1 - s_{\varphi} q} + \frac{1}{1 - s_{\varphi} q^{-1}} \right), \tag{7}$$

при этом уже числа s_{φ} все различны между собой. Пусть $\rho = (m, n)$ является составным индексом, принимающим те же значения, как и φ. Легко видеть, что, по крайней мере для достаточно больших значений $|K|$, уравнение (7) имеет бесконечно много корней q_{ρ} и q_{ρ}^{-1}, которые с увеличением $|K|$ стремятся, соответственно, к s_{ρ}^{-1} и s_{ρ}, что эти корни простые и что других корней нет. Для того чтобы вычислить корни q_{ρ} и q_{ρ}^{-1}, положим

$$s_{\rho} q_{\rho} = \delta_{\rho} = e^{-\frac{i\omega}{V_{\rho}} c}. \tag{8}$$

При больших значениях $|K|$ величины δ_{ρ} будут близки к 1, а отношения $v : V_{\rho}$ будут близки к 0, так что в первом приближении можем пренебречь в правой части (7) всеми членами, за исключением члена, знаменатель которого равен $1 - s_{\rho} q_{\rho}$. Получим

$$V_{\rho} = \frac{i\omega c}{n_{\rho} u_{\rho}} K, \quad s_{\rho} q_{\rho} = e^{-\frac{n_{\rho} u_{\rho}}{K}}. \tag{9}$$

Лучшее приближение можем получить, если напишем s_{ρ}^{-1} вместо q во всех членах уравнения (7), за исключением члена, соответствующего $\varphi = \rho$, или, общее, за исключением n значений φ, для которых величины $s_{\varphi} q_{\rho}$ наиболее близки к 1. Таким образом для величин $q + q^{-1}$ получается уравнение первой, соответственно n-й степени. Дальнейшее увеличение точности возможно с помощью итераций.

Легко видеть, что каждому корню q_{ρ} или q_{ρ}^{-1} уравнения (7) соответствует дипольная волна, распространяющаяся вдоль оси z со скоростью v_{ρ} или $-v_{\rho}$, определенной из $q_{\rho} = e^{-\frac{i\omega}{v_{\rho}} c}$. Скорости $\pm v_{\rho}$ в общем комплексные, так что амплитуды соответствующих волн зависят экспоненциально от z. Нетрудно вычислить волны, падающие на пластинку, которые создают эти поля. Они имеют сложный характер и не легко могут быть осуществлены.

Будем искать приближенное решение (3), полагая

$$Z_l = \sum_{\rho} {}^{s} (c_{\rho} q_{\rho}^{l} + d_{\rho} q_{\rho}^{-l}), \tag{10}$$

где $s > 1$ и s тем больше, чем большей точности мы хотим достичь; s при знаке суммы обозначает, что она распространяется только на такие значения ρ, для которых $|s_\rho| \leqslant s$. Если в (3) вместо S_l и Z_l подставим их значения из (22) [1] и (10), имея при этом в виду, что q_ρ и q_ρ^{-1} удовлетворяют (7), то найдем

$$\sum_\varphi n_\varphi u_\varphi s_\varphi^{-l-1} \sum_\rho^s \left(\frac{c_\rho q_\rho^{-1}}{1-s_\varphi^{-1}q_\rho^{-1}} + \frac{d_\rho q_\rho}{1-s_\varphi^{-1}q_\rho}\right) +$$
$$+ \sum_\varphi n_\varphi u_\varphi s_\varphi^{-N+l} \sum_\rho^s \left(\frac{c_\rho q_\rho^N}{1-s_\varphi^{-1}q_\rho} + \frac{d_\rho q_\rho^{-N}}{1-s_\varphi^{-1}q_\rho^{-1}}\right) + s_0^{-l-1} s_0 a_{00} = 0.$$

В целях приближения мы отбросим в этом уравнении члены, для которых $|S_\varphi| > S$. Допущенная при этом ошибка будет малой ввиду того, что все эти члены содержат множителями величины s_φ в отрицательных степенях, а их знаменатели не стремятся к нулю с возрастанием $|K|$. Таким образом, полученные уравнения удовлетворяются при любом l, если приравнять к нулю коэффициенты при s_φ^{-l-1} и s_φ^{-N+l}. Получим

$$\sum_\rho^s \left(\frac{c_\rho}{1-s_0 q_\rho} + \frac{d_\rho}{1-s_0 q_\rho^{-1}}\right) = \frac{a_{00}}{n_0 u_0}, \qquad \sum_\rho^s \left(\frac{c_\rho}{1-s_\psi q_\rho} + \frac{d_\rho}{1-s_\psi q_\rho^{-1}}\right) = 0, \tag{11}$$

$$\sum_\rho^s \left(\frac{c_\rho q_\rho^{N-1}}{1-s_\varphi q_\rho^{-1}} + \frac{d_\rho q_\rho^{-N+1}}{1-s_\varphi q_\rho}\right) = 0; \tag{12}$$

здесь индекс ψ принимает те же значения, как и индекс φ, за исключением значения 0. Число этих уравнений равно числу неизвестных c_ρ и d_ρ и не зависит от числа N, а только от выбора числа s, определяющего точность решения. Теперь уже нетрудно, идя обратным путем и основываясь на формуле (10) и на формулах (19), (20), (21), (14), (5), (6) и (1) из [1], найти искомое распределение электромагнитного поля и моментов диполей.

Если N не слишком велико, так что

$$|q_\rho^N| \gg \frac{n_\varphi u_\varphi}{K}, \tag{13}$$

для дальнейшего упрощения мы можем сохранить в уравнениях (11) и (12) только те члены, коэффициенты которых имеют вид $1:(1-s_\varphi q_\varphi)$. Таким образом, независимо от выбора s, получаем

$$c_0 = \frac{a_{00}}{K}, \quad c_\psi = 0, \quad d_\varphi = 0. \tag{14}$$

С помощью этих значений c_φ и d_φ также можно обратным путем найти приближенное решение поставленной задачи.

В частности, если в (21) [1] при $l=0$ и в (19) [1] и (20) [1] при $l=N$ заменим величины Z_l их значениями из (10), а c_ρ и d_ρ — из (14), получаем, что отраженных волн нет и что конечные амплитуды имеют только те волны, прошедшие через кристалл, для которых $s_\mu = s_0$:

$$\mathbf{b}_{\mu 0} = 0, \quad \mathbf{a}_{\nu N} = 0 \ \text{при} \ s_\nu \neq s_0,$$
$$\mathbf{a}_{0N} = a_{00}\frac{\mathbf{u}_0}{u_0}\left(1 - \frac{1}{n_0}\left(1 - e^{-\frac{n_0 u_0}{K}N}\right)\right), \tag{15}$$
$$\mathbf{a}_{\nu N} = -a_{00}\frac{\mathbf{u}_\nu}{u_0}\frac{1}{n_0}\left(1 - e^{\frac{-n_0 u_0}{K}N}\right) \ \text{при} \ s_\nu = s_0.$$

Чтобы найти значения ν, для которых $s_\nu = s_0$, нужно решить уравнение

$$e^{\gamma_\nu c} = e^{i\frac{\omega}{v}c}$$

или

$$\gamma_\nu c = i\frac{\omega}{v}c - i2\pi p,$$

или, наконец,

$$\frac{2p}{\lambda c} = \frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} + \frac{p^2}{c^2}, \qquad (16)$$

где p — целое число.

Для проверки правильности упрощающих предположений мы докажем на основании полученных формул, что энергетический поток перед и за кристаллом один и тот же, т. е. что принцип сохранения энергии выполнен. Для этого, обозначая через $\overline{q}_0$ и $\overline{K}$ мнимые величины, сопряженные q_0 и K, имея в виду (9), надо доказать, что

$$\left(1 - \frac{1}{n_0}(1 - q_0^N)\right)\left(1 - \frac{1}{n_0}(1 - \overline{q}_0^N)\right) +$$

$$+ \sum_\nu \gamma_\nu \frac{v}{i\omega} \frac{\mathfrak{u}_\nu^2}{u_0^2} \frac{1}{n_0^2}(1 - q_0^N)(1 - \overline{q}_0^N) = 1, \qquad (17)$$

где суммирование произведено только для тех значений ν, для которых $s_\nu = s_0$. При помощи формул, установленных в [1], находим тождества

$$\gamma_\mu \frac{v}{i\omega} \frac{\mathfrak{u}_\mu^2}{u_0^2} = \frac{u_\mu}{u_0} \text{ при } |s_\mu| = 1; \quad K - \overline{K} = 2u_0 m_0, \text{ где } m_0 = \frac{1}{u_0}\sum_\varphi{}^1 u_\varphi, \qquad (18)$$

первое из которых можно установить непосредственно, а второе легко доказать, имея в виду, что, вычисляя поле при $N = 1$ по точным формулам, установленным в [1], энергетические потоки перед и за кристаллом должны быть равными. Ввиду (18) уравнение (17) можно написать в виде

$$-\frac{1}{n_0}(1 - q_0^N) - \frac{1}{n_0}(1 - \overline{q}_0^N) + \sum_\mu \frac{u_\mu}{u_0} \frac{1}{n_0^2}(1 - q_0^N)(1 - \overline{q}_0^N) = 0,$$

или

$$\frac{1}{n_0}(q_0^N q_0^{-N} - 1) = 0,$$

или

$$\frac{1}{n_0}\left(e^{2m_0 n_0 \frac{u_0^2}{K\overline{K}} N} - 1\right) = 0.$$

Это равенство в самом деле выполнено, так как из (13) при $\rho = \varphi = 0$ получаем $N \ll |K : n_0 u_0| \ln |K : n_0 u_0|$.

Уравнение (16) совпадает с условием Лауэ о диффракции лучей Рентгена, однако формулы (15), дающие амплитуды диффракционных лучей, при предположении строгой параллельности и монохроматичности падающей волны, не являются тождественными с соответствующими формулами Эвальда [2].

Изложенный здесь метод исследования прохождения лучей Рентгена через плоско-параллельную пластинку кристалла, обобщенный для случая косо падающей волны и для кристалла с произвольной структурой клетки, можно рассматривать как метод структурного анализа кристаллов.

Софийский университет
София, Болгария

Поступило
30 VI 1951

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Хр. Я. Христов, ДАН, 81, № 4 (1951). [2] P. P. Ewald, Ann. d. Phys., 54, 519 (1917).