

НОРМАЛЬНЕ ПАДІННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ
НА ТРИВИМІРНУ ГРАТКУ АТОМІВ

Вступ

У роботі [1] використано квантовомеханічний підхід до розгляду явища дифракції світла на двовимірній ґратці атомів. Грунтуючись на загальних фундаментальних уявленнях про вільний рух електронів у двовимірній потенціальній ямі та пружній взаємодії фотонів з електронами речовини, з якого виготовлена ґратка, отримали рівняння, що визначає положення максимумів дифракції. В даній роботі, базуючись на тих же визначальних положеннях, розглянемо дифракцію рентгенівських фотонів на тривимірній ґратці атомів, що утворюють кристал.

Постановка задачі

Будемо вважати, що на межу розподілу вакуум-кристал, яка збігається з площиною XOY , з боку негативних значень осі Z , на тривимірну ґратку атомів нормально падає монохроматичний пучок рентгенівських фотонів (рис.1). Кристал являє собою тривимірну ґратку атомів з коміркою, що утворює паралелепіпед із сталими ґратки a_1, a_2, a_3 , відповідно в напрямках осей X, Y, Z . (на рис. 1 наведено лише один, перший шар атомів).

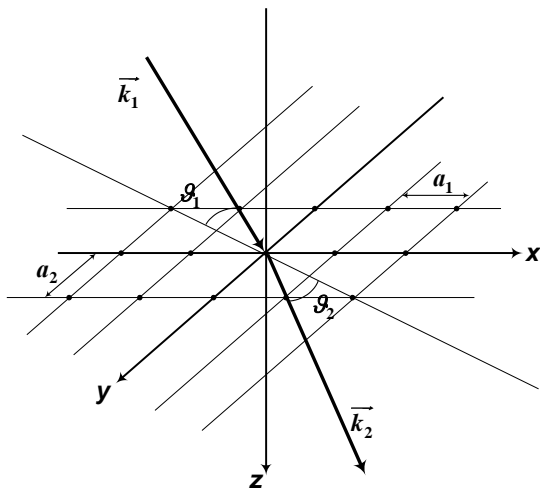


Рис. 1

Будемо також вважати, що розсіяння фотонів відбувається внаслідок їх пружної взаємодії з електронами, які рухаються в періодичному полі ґратки.

При описанні квантових станів електронів будемо базуватися на одновимірній моделі Кроніґа і Пенні [2]. Згідно з зазначеною моделлю, одновимірному ланцюжку атомів співставляється періодична послідовність прямокутних потенціальних бар'єрів висотою V_0 та шириною b , розташованих з періодом a (рис. 2).

Тоді ширина потенціальної ями дорівнює $a - b$. Виберемо початок координат з правого боку одного з бар'єрів. Розв'язуючи задачу про рух електрона в періодичному полі одновимірного ланцюжка атомів, Кроніґ і Пенні отримали трансцендентне рівняння

$$ch\beta b \cos \alpha (a - b) + \left[(\beta^2 - \alpha^2) / 2\alpha\beta \right] sh\beta \sin \alpha (a - b) = \cos ka, \quad (1)$$

де $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$; $\beta^2 = \frac{(V_0 - E)}{\hbar^2}$; E – енергія електрона; m – маса електрона; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$; h – стала

Планка.

Величини α, β – це сталі розповсюдження хвилі де-Бройля відповідно в ямі та в бар'єрі, k – стала розповсюдження електрона в періодичній системі бар'єрів і ям.

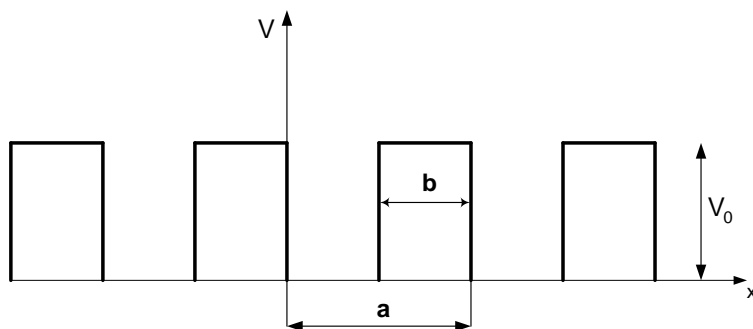


Рис. 2

Оскільки k – величина дійсна, то й $\cos ka$ теж дійсна величина, а тому рівняння (1) має розв'язок, коли його ліва частина не перевищує за модулем одиницю, тобто, позначивши її через $F(\alpha a)$, можна записати $-1 \leq F \leq 1$.

Розв'язок рівняння (1) можна отримати графічно, побудувавши графіки функції $F(\alpha a)$ та $\cos kc$. Коренями рівняння (1) будуть точки перетину цих двох функцій. На рис. 3 наведено для порівняння графіки для двох випадків, які відрізняються тільки висотою бар'єрів V_0 , всі інші параметри мають однакові значення.

$F(\alpha a)$,

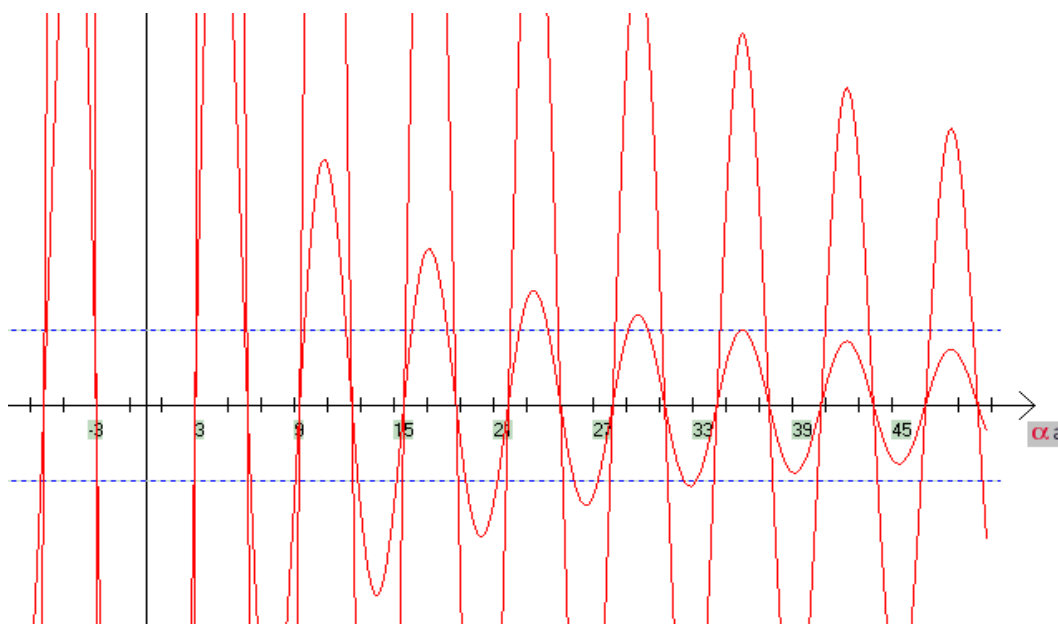


Рис. 3

З порівняння цих двох графіків видно, що у випадку досить вузьких і досить високих бар'єрів смуги, які визначають дозволені значення енергії, – дозволені зони звужуються. Зазначимо, що більшій висоті потенціального бар'єра відповідає крива на наведеному графіку з вищими піками. На рис. 3 графік функції F перетинає смугу значень $\cos kc$ від $+1$ до -1 майже вертикально, і дозволені зони, звужуючись, наближаються до власних значень енергії, які відповідають нескінченно глибокій потенціальній ямі. Таким чином, за ширину

потенціальної ями приймемо значення сталої ґратки відповідно по трьом кристалографічним напрямкам a_1, a_2, a_3 .

Основні співвідношення

Результат пружного зіткнення фотона з електроном будемо описувати, користуючись виразом залежності кута розсіяння фотона, отриманим в [3]:

$$\omega_1(1 - u_1 \cos \vartheta_1) = \omega_2(1 - u_1 \cos \vartheta_2) + \frac{\omega_1 \omega_2}{\varepsilon_1} (1 - \cos \vartheta) \quad (2)$$

де $\omega_1 = h\nu_1$, $\omega_2 = h\nu_2$ – відповідно енергія фотона до і після взаємодії, $\varepsilon_1 = m_1 c^2$ – енергія електрона до розсіяння, $u_1 = \frac{v_1}{c}$ – відношення швидкості електрона до швидкості світла, ϑ_1 і ϑ_2 – кути, утворені імпульсами первинного та розсіяного фотонів з напрямком первинного імпульсу електрона, ϑ – кут між початковим \vec{k}_1 та кінцевим \vec{k}_2 імпульсами фотона рис.(1).

Для релятивістського електрона (коли $v_1 \ll c$) можна знехтувати його кінетичною енергією, вважати, що його повна енергія визначається енергією спокою.

Оскільки зміна довжини хвилі рентгенівського фотона не перевищує 1%, нею можна знехтувати і покласти в виразі (2) $\omega_1 = \omega_2$. Тоді отримаємо:

$$u_1(\cos \vartheta_2 - \cos \vartheta_1) = \frac{\omega}{\varepsilon_1} (1 - \cos \vartheta) \quad (3)$$

Враховуючи в отриманому співвідношенні, що $\vartheta_1 = \frac{\pi}{2}$ та $\vartheta_2 = \frac{\pi}{2} \pm \vartheta$, будемо мати

$$\frac{\sin \vartheta}{1 - \cos \vartheta} = \frac{k_1}{p_1} \quad (4)$$

Розподіл імпульсів у тривимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі визначається виразом [4]

$$p_1 = \pi \sqrt{\left(\frac{m_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{m_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{m_3}{a_3}\right)^2} \quad (5)$$

де m_1, m_2, m_3 - цілі числа, $m_1, m_2, m_3 = 1, 2, 3, \dots$

Підставляючи вираз для імпульсу електрона (5) в рівняння (4), врешті рещт отримаємо

$$\frac{\sin \vartheta}{1 + \cos \vartheta} = \frac{\lambda}{2} \sqrt{\left(\frac{m_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{m_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{m_3}{a_3}\right)^2}. \quad (6)$$

Співвідношення (5) визначає дискретний ряд значень кутів і виділяє в просторі сімейство конусів, вздовж утворюючих яких можуть рухатися розсіяні фотони.

На перетині таких конусів площиною екрана (фотопластинки) отримуємо сімейство еліпсів або гіпербол, в залежності від напрямку цієї площини. В частинному випадку, коли площина пластинки перпендикулярна до осі конуса виникає сімейство концентричних кіл, вздовж яких розташовуються світлі плями-максимума освітленості.

Якщо імпульс первинного електрона буде мати лише одну складову P_x із (6) отримуємо

$$a_1 \frac{\sin \vartheta'}{1 + \cos \vartheta'} = m_1 \frac{\lambda}{2}, \quad (7)$$

коли $P = P_y$:

$$a_2 \frac{\sin \vartheta''}{1 + \cos \vartheta''} = m_2 \frac{\lambda}{2}, \quad (8)$$

коли $P = P_z$

$$a_3 \frac{\sin \vartheta'''}{1 + \cos \vartheta'''} = m_3 \frac{\lambda}{2} \quad (9)$$

У випадку малих значень кутів дифракції ϑ , $\cos \vartheta \approx 1$, будемо мати співвідношення

$$\begin{aligned} a_1 \sin \vartheta' &= m_1 \lambda, \\ a_2 \sin \vartheta'' &= m_2 \lambda, \\ a_3 \sin \vartheta''' &= m_3 \lambda. \end{aligned} \quad (10)$$

Переходячи від кутів падіння до кутів ковзання, тобто покладаючи у виразах (10) $\alpha = \frac{\pi}{2} - \vartheta'$, $\beta = \frac{\pi}{2} - \vartheta''$, $\gamma = \frac{\pi}{2} - \vartheta'''$, де α, β, γ -кути між вектором \vec{k}_2 і відповідно осями X, Y, Z, отримаємо вирази

$$\begin{aligned} a_1 \cos \alpha &= m_1 \lambda, \\ a_2 \cos \beta &= m_2 \lambda, \\ a_3 \cos \gamma &= m_3 \lambda, \end{aligned} \quad (11)$$

що збігаються із умовами максимуму, умовами Лауе [5] (у випадку нормального падіння променів) при яких відбувається підсилення коливань при дифракції світла на тривимірній ґратці атомів.

Висновки

Розглянуто квантовомеханічну модель явища дифракції рентгенівських променів на тривимірній ґратці атомів.

Показано, що причиною відхилення від первинного напрямку руху фотонів є пружне зіткнення фотонів з електронами, що здійснюють рух у тривимірному періодичному полі кристала, а кути, під якими спостерігаються максимуми підсилення світла, визначаються дискретним спектром електронів.

Список літератури. 1. Безуглий, А.В. Світлотехніка та електроенергетика. – 2008. – №3(15). – С.15-20. 2. Kronig, R. de L. Penny, W.G. Prog. Roy. Soc. – 1931. – v.180. – P.499-508. 3. Ахиезер, А.И., Берестецкий, В.Б. Квантовая электродинамика. – М. : Наука, 1969. – С. 437. 4. Ландау, А.Д., Лифшиц, Е.М.; Теоретическая физика. Т. 3. – М., 1963. – С.63. 5. Сивухин, Д.В. Общий курс физики. Т.4. – М. : Наука, 1985. – С. 307.

Харківська національна академія
міського господарства

Надійшла до редколегії 21.02.2012