

- [6] K. Behringer. Zs. Phys. B, 246, 333, 1971.
 [7] W. L. Wiese, D. E. Kelleher, D. R. Paquette. Phys. Rev., A, 6, 1132, 1972.
 [8] J. D. Hey. Central Structure of Stark-Broadened Balmer Lines and $H\beta$. Techn. Rept., № 74—089, Univ. of Maryland, 1974.
 [9] C. F. Hooper, Jr. Phys. Rev., 165, 215, 1968.
 [10] M. Baranger, B. Mozeg. Phys. Rev., 115, 521, 1959.
 [11] В. Ф. Турчин, В. П. Козлов, М. С. Малкевич. Усп. физ. наук, 102, 3, 1970.
 [12] А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. «Наука», М., 1974.
 [13] В. Ф. Турчин, В. З. Нозик. Изв. АН СССР, сер. физ. атм. и океана, 5, 29, 1969.
 [14] Г. А. Ковальская, В. Г. Севастьяненко. Газодинамика и физическая кинетика. Новосибирск, 1974.

Поступило в Редакцию 22 января 1976 г.
 В окончательной редакции 13 января 1977 г.

УДК 535.39 : 539.26

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ, ОПИСЫВАЮЩИЕ ПОЛНОЕ ВНЕШНЕЕ ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Л. А. Смирнов

Полное внешнее отражение рентгеновских лучей, как показал Паррат [1], может быть использовано для изучения строения поверхностей твердых тел. С этой целью допускают существование на поверхности тела слоя (или нескольких слоев) с плотностью, отличной от плотности самого тела. Толщина этого слоя и его плотность подбираются так, чтобы обеспечить наилучшее согласие с экспериментом расчетной картины отражения, полученной с помощью формул Френеля. Метод расчета не позволяет учитывать возможную «размытость» границ раздела сред. Она может возникнуть как вследствие взаимной диффузии материалов пленки и подложки, так и вследствие шероховатости поверхности, которую можно трактовать, на наш взгляд, как наличие слоя с меняющейся по глубине плотностью. Цель настоящей работы — получить уравнения, позволяющие рассчитывать отражение от таких слоев.

Составим, прежде всего, модель отражающего объекта. Пусть на поверхность тела падает волна под малым углом скольжения φ . Разобьем тело на слои, параллельные поверхности. Их толщину Δz выберем такой, чтобы разность фаз волн, отраженных соседними слоями, была много меньше 2π . В этом случае мы можем спроектировать атомы слоя на плоскость, ограничивающую слой сверху, и приписать этой плоскости всю рассеивающую способность слоя. Поверхностная плотность спроектированных атомов равна $\rho_a \Delta z$, где ρ_a есть число атомов в единице объема.

Согласно [2, 3], первичная волна проходит эту плоскость с коэффициентом прохождения $1 - iq_0$. При этом возникает также зеркально отраженная волна с коэффициентом отражения — iq . Величины q_0 и q пропорциональны $\rho_a \Delta z$ и атомным амплитудам рассеяния для соответствующих направлений, которые в силу малости φ мы можем считать одинаковыми и равными Z . Мы не разбиваем электрический вектор на две составляющие, как это обычно делается, так как при малых углах отражения коэффициенты отражения этих составляющих одинаковы. Полагаем также $\sin \varphi = \varphi$. При этих условиях

$$-q_0 = -q = \frac{\rho_a Z \lambda e^2}{\varphi m c^2}. \quad (1)$$

Учитывая, что для легких элементов единичный декремент показателя преломления равен

$$\delta = \frac{\rho_a Z e^2 \lambda^2}{2\pi m c^2}, \quad (2)$$

мы можем переписать (1) в виде

$$-q_0 = -q = \frac{2\pi\delta}{\lambda\varphi} \Delta z = a \Delta z. \quad (3)$$

Отраженная волна, выходя из тела, также испытывает отражение от каждой плоскости и вносит вклад в первичную волну. Возникает самосогласованная система многократно отраженных волн.

Как известно, согласно теории, развитой Дарвином [2, 3], такая же система волн возникает при брегговском отражении рентгеновской волны от идеального кристалла. Разница состоит лишь в том, что угол φ (обозначаемый в этом случае θ) велик. Поэтому велика разность фаз волн, рассеянных соседними плоскостями. В первом приближении она равна $2\pi m$, где m — порядок отражения. Эту разность удобно представить в виде

$$2z = 2\pi m + 2v, \quad (4)$$

где $2z$ — разность фаз, а $2v$ — ее превышение над целым числом полупериодов. Несмотря на то что теория Дарвина описывает отражение от кристалла, мы предлагаем применить ее для описания полного внешнего отражения от аморфного объекта, используя построенную выше модель. Для этого мы должны в (4) принять равным нулю, так как расстояние между соседними плоскостями намеренно выбрано таким, чтобы $2z$ было величиной малой, много меньшей 2π .

Следовательно,

$$a = v = \frac{2\pi\varphi}{\lambda} \Delta z = \gamma \Delta z. \quad (5)$$

Обозначив входящую волну символом T , а выходящую — S и считая их функциями от z , мы можем написать, согласно [2, 3],

$$S(z) = ia(z) \Delta z T(z) + [1 + ia(z) \Delta z] e^{-i\gamma \Delta z} S(z + \Delta z),$$

$$T(z + \Delta z) = [1 + ia(z) \Delta z] e^{-i\gamma \Delta z} T(z) + ia(z) \Delta z e^{-2i\gamma \Delta z} S(z + \Delta z). \quad (6)$$

Разложив в ряд все функции от z и отбросив все члены высшего порядка малости, получим после несложного преобразования

$$T(z) = \frac{i}{a(z)} \frac{d}{dz} S(z) - \left[1 - \frac{\gamma}{a(z)}\right] S(z), \quad (7)$$

$$S(z) = -\frac{i}{a(z)} \frac{d}{dz} T(z) - \left[1 - \frac{\gamma}{a(z)}\right] T(z). \quad (8)$$

Введем новые функции

$$F(z) = T(z) + S(z), \quad (9)$$

$$G(z) = T(z) - S(z). \quad (10)$$

Складывая и вычитая (7) и (8), получим

$$[2a(z) - \gamma] F(z) = -i \frac{d}{dz} G(z), \quad (11)$$

$$\gamma G(z) = i \frac{d}{dz} F(z). \quad (12)$$

Переслав (11) и (12) с учетом (3) и (5), получим искомые дифференциальные уравнения

$$\frac{2\pi}{\lambda\varphi} [2\delta - \varphi^2] F(z) = -i \frac{d}{dz} G(z), \quad (13)$$

$$\frac{2\pi\varphi}{\lambda} G(z) = i \frac{d}{dz} F(z). \quad (14)$$

Решение этих уравнений в частном случае, когда $\delta = \text{const}$ имеет вид

$$F(z) = F_0 \exp\left[-\frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{2\delta - \varphi^2} z\right], \quad (15)$$

$$G(z) = -\frac{i}{\varphi} \sqrt{2\delta - \varphi^2} F_0 \exp\left[-\frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{2\delta - \varphi^2} z\right]. \quad (16)$$

Коэффициент отражения равен, по определению,

$$R = \left| \frac{S(0)}{T(0)} \right|^2 = \left| \frac{F(0) - G(0)}{F(0) + G(0)} \right|^2 = \left[\frac{\varphi - \sqrt{\varphi^2 - 2\delta}}{\varphi + \sqrt{\varphi^2 - 2\delta}} \right]^2. \quad (17)$$

Найденный нами коэффициент отражения совпадает с выражением, полученным обычным способом с помощью формул Френеля [4]. Точно так же формула (15), описывающая ослабление суммарной волны с глубиной, совпадает с формулой Эйхенвальда, приведенной в приближении малых углов. Таким образом, правильность полученных

нами уравнений подтверждается тем, что их решение в частном случае приводит к уже известным формулам.

При выводе этих уравнений мы не учитывали поглощение, так как, согласно Принсу [5], для этого достаточно в формулах, полученных без учета поглощения, заменить δ на $\delta - i\beta$, где $\beta = \lambda\mu/4\pi$ (μ — линейный коэффициент поглощения).

Формулы (13) и (14) позволяют, таким образом, описать отражение рентгеновских лучей от «размытой» границы раздела двух сред. «Размытость» границы может являться следствием шероховатости поверхности или диффузии одной среды в другую.

Отметим также, что полное внешнее отражение рентгеновских лучей формально можно считать брегговским отражением нулевого порядка, так как для описания обоих явлений можно использовать один и тот же математический аппарат, если при описании полного внешнего отражения положить порядок равным нулю.

Литература

- [1] L. G. Parratt. Phys. Rev., 95, 359, 1954.
- [2] C. G. Darwin. Phys. Mag., 27, 315, 675, 1914.
- [3] Р. Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М., 1950.
- [4] М. А. Блохин. Физика рентгеновских лучей. М., 1957.
- [5] J. A. Prins. Zs. Phys., 63, 477, 1930.

Поступило в редакцию 2 июля 1976 г.

УДК 535.34-31

УЛЬТРАФИОЛЕТОВЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ГАЛОГЕНИДОВ МЕТИЛЗАМЕЩЕННЫХ АММОНИЯ

А. П. Мамедов, Л. Я. Панова и Л. А. Шабалинская

В настоящем сообщении впервые приводятся результаты исследования УФ спектров поглощения некоторых галогенидов метилзамещенных аммония, являющихся аналогами хорошо изученных простых неорганических ионных кристаллов — щелочно-галогенидных (ЩГК) [1] и аммонийногалогенидных (АГК) [2].

Галогениды метилзамещенных аммония (ГМА) представляют собой органические ионные кристаллы, в которых комплексный катион $[(CH_3)_nNH_{4-n}]^+$, включающий в себя органические фрагменты, играет роль иона щелочного металла. Однако являясь, с одной стороны, аналогами простейших неорганических кристаллов, ГМА обладают рядом своеобразных черт: обратным соотношением по сравнению с большинством ЩГК и АГК, радиусов катиона и аниона, т. е. $r_c/r_a > 1$, гораздо большей поляризуемостью катионов, а также более низкой симметрией кристаллической решетки [3-5].

С целью выявления аналогий и своеобразий в спектральных характеристиках ГМА по сравнению с ЩГК и АГК нами была предпринята попытка измерить УФ спектры поглощения указанного класса соединений. Спектры были измерены с помощью спектрофотометров СФ-8 и «Specord UVVIS» в оптическом вакуумном металлическом криостате при температурах от $T=293$ до 80 К в спектральном диапазоне 6.7–1.55 эВ. Для области 6.7–6.2 эВ применялась продувка сухим азотом оптической камеры спектрофотометра «Specord UV VIS».

Готовые образцы ГМА марки «ч» либо синтезированные нами были многократно (3–4 раза) перекристаллизованы из соответствующих растворителей. В зависимости от физико-химических свойств ГМА — плавления, растворимости, сублимации и гигроскопичности — получение тонких пленок, пригодных для измерения спектров поглощения, велось тремя способами: расплавлением с последующей медленной кристаллизацией между двумя кварцевыми пластинками (хлориды, бромиды и иодиды метиламмония и диметиламмония); постепенным испарением растворителя из раствора ГМА, нанесенного на поверхность кварцевой пластинки (хлорид и бромид тетраметиламмония); напылением слоя в вакууме (вакуумный эвапоратор Jec-4s к электронному микроскопу Jem-7a) при 10^{-5} тор (йодид тетраметиламмония).

На рисунке представлены УФ спектры поглощения хлоридов, бромидов и иодидов метил-, диметил- и тетраметиламмония. Сравнение приведенных спектров с известными из литературы [1, 2] спектрами ЩГК и АГК показывает, что полосы поглощения ГМА находятся в том же спектральном интервале, что и экситонные полосы для ЩГК и АГК. При понижении температуры образцов до 80 К полосы поглощения смещаются на 0.15–0.3 эВ в коротковолновую область и становятся более четкими. Такое значительное смещение полос характерно для экситонных полос поглощения и согласуется