1948 г. Ноябрь Т. XXXVI, вып. 3

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МИКРОЧАСТИЦА И ЕЁ ДИФФРАКЦИОННОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ

Д. И. Блохинцев

Структуру микрочастиц, молекул, атомов и атомных ядер изучают с помощью рассеяния этими частицами различных волн: электромагнитных, электронных, нейтронных и др.

Распределение интенсивностей рассеянных волн, наблюдаемое на удалённом экране, образует диффракционное изображение частицы.

При этом именно упругое рассеяние, происходящее без обмена энергией между волнами и рассеивающей частицей, есть то, при котором получается «снимок» с объекта в неизменном исходном состоянии.

Такой снимок, вообще говоря, может быть получен только с большого коллектива независимых частиц, так как одна и та же частица при повторении рассеяний будет менять своё состояние.

Распределение интенсивностей рассеянных волн на экране непосредственно определяется дифференциальным поперечником $Q(\theta)\,d\Omega$ для упругого рассеяния на угол θ в телесный угол $d\Omega$. Этот поперечник выражается через амплитуду A рассеянной волны $u = A\frac{e^{ikr}}{r}$ (r — расстояние от частицы до экрана, k — волновое число рассеиваемых волн) известным соотношением: $Q(\theta) = |A|^2$ *).

Если структура рассеивающей частицы и силы, действующие между ней и частицами, принадлежащими диффрагирующей волне, известны, то, пользуясь квантовой механикой, можно вычислить амплитуду рассеянной волны A, а вместе с тем найти Q и, стало быть, распределение интенсивностей на экране рассеянных волн $I \cong Q$.

Нас, однако, будет интересовать другой вопрос: что можно сказать о структуре объекта, зная эффективный поперечник или, что то же, распределение интенсивностей I на экране?

Определённости ради рассмотрим случай слабого рассеяния, когда все соотношения особенно просты.

---

*) См., например, Д. Блохинцев, Введение в квантовую механику, § 74—75, или Мотт и Мэсси, Теория атомных столкновений, гл. VII.

В этом случае уравнение для рассеянной волны u гласит («борновское приближение»):

$$\nabla^2 u + k^2 u = -4\pi D(\mathbf{x})\,\psi_0(\mathbf{x}), \qquad (1)$$

где функция $D(\mathbf{x})$ пропорциональна разности (n^2-1), n — показатель преломления среды во вне и внутри рассеивающей частицы, а $\psi_0(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{x}}$ есть первичная, падающая волна, которую мы считаем плоской, распространяющейся в направлении $\mathbf{k}_0$.

Из этого уравнения следует*), что при $r\to\infty$ амплитуда рассеянной волны A есть функция вектора $\mathbf{q} = \mathbf{k}-\mathbf{k}_0$, где $\mathbf{k}$ есть волновой вектор первичной частицы, рассеянной в угол θ (для упругого рассеяния $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = k$) и равна:

$$A(\mathbf{q}) = \int D(\mathbf{x})\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}}\, dx\ {}^{**}). \qquad (2)$$

Функция $D(\mathbf{x})$, определяющая распределение показателя преломления внутри рассеивающей частицы, и будет рассматриваться нами как величина, определяющая её структуру. Таким образом, условно можно сказать, что $D(\mathbf{x})$ представляет предмет, а $A(\mathbf{q})$ его диффракционные изображения на экране. Из (2), пользуясь теоремой Фурье, находим:

$$D(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int A(\mathbf{q})\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}}\, dq. \qquad (3)$$

Если бы из опыта можно было определить $A(\mathbf{q})$, то формула (3) давала бы однозначный ответ на вопрос о структуре предмета.

На самом деле при обращении интеграла возникают два ограничения, относящиеся к эмпирическому знанию амплитуды рассеянных волн $A(\mathbf{q})$.

Первое из них связано с тем, что энергия частиц, принадлежащих первичной волне, ограничена. Если импульс этих частиц равен p $\left(\text{длина волны } \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}\right)$, то максимальное значение вектора $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$ ограниченно и равно $\frac{4\pi}{\lambda}$.

В силу того, что амплитуда A известна при этих условиях лишь в области $q = \sqrt{q_x^2+q_y^2+q_z^2} \leqslant \frac{4\pi}{\lambda}$, мы вместо истинной структуры можем вычислить лишь

$$\tilde{D}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{q\leqslant\frac{4\pi}{\lambda}} A(\mathbf{q})\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}}\, dq. \qquad (3')$$

Тонкая структура будет сглажена, так как в разложении (3′) отсут-

*) См. цитированные выше книги.

**) $dx = dx\,dy\,dz$, $dq = dq_x dq_y dq_z$.

ствуют высшие гармоники с $q > \frac{4\pi}{\lambda}$. Поэтому все детали структуры рассеивающей частицы, претерпевающие существенное изменение на протяжении $\Delta x < \frac{\lambda}{2}$, не будут учтены в $\tilde{D}(\mathbf{x})$ $\left(\text{при } \Delta x \ll \frac{\lambda}{2}\right.$ изменение фазы показательной функции в интеграле (3′) будет $\ll 2\pi$).

Обратимся теперь ко второму ограничению. Суть его заключается в том, что из опыта вообще не определяется сама амплитуда $A(\mathbf{q})$, а только дифференциальный поперечник $Q(\mathbf{q})$. Если представить амплитуду рассеянной волны в виде:

$$A(\mathbf{q}) = a(\mathbf{q})\, e^{i\alpha(\mathbf{q})}, \tag{4}$$

где $\alpha(\mathbf{q})$ фаза, $a(\mathbf{q}) = +\sqrt{Q(\mathbf{q})}$, то наблюдаемой величиной является $a(\mathbf{q})$. Напротив, фаза $\alpha(\mathbf{q})$ остаётся совершенно произвольной, поскольку она выпадает из выражения для поперечника.

Посмотрим теперь, какие следствия вытекают из этого обстоятельства.

Из действительности величины $D(\mathbf{x})$ вытекает: $A(\mathbf{q}) = A(-\mathbf{q})$. Нетрудно видеть, что из этого условия следует $a(\mathbf{q}) = a(-\mathbf{q})$, $\alpha(\mathbf{q}) = -\alpha(-\mathbf{q})$. Поэтому интеграл (3) можно представить в виде:

$$D(\mathbf{x}) = D_s(\mathbf{x}) + D_a(\mathbf{x}), \tag{5}$$

где

$$D_s(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int a(\mathbf{q})\cos\alpha(\mathbf{q})\cos(\mathbf{qx})\,dq, \tag{6}$$

$$D_a(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int a(\mathbf{q})\sin\alpha(\mathbf{q})\sin(\mathbf{qx})\,dq. \tag{6′}$$

$D_s(\mathbf{x})$ представляет собою симметричную относительно преобразования инверсии (замена $\mathbf{x}$ на $-\mathbf{x}$) часть структуры, а $D_a(\mathbf{x})$ — антисимметричную.

Из (6′) видно, что $D_a(\mathbf{x}) = 0$ только в том случае, когда $\alpha(\mathbf{q}) = 0$, т. е. если амплитуда рассеянной волны $A(\mathbf{q})$ действительна. Полагая $\alpha(\mathbf{q}) = 0$, мы получаем единственное и вполне определённое значение $D_s(\mathbf{x})$, соответствующее найденному из опыта эффективному сечению $Q(\mathbf{q})$. Поэтому мы можем высказать следующее положение: данной диффракционной картине соответствует единственный симметричный относительно группы инверсии предмет и бесчисленное множество несимметричных.

Приведём теперь пример, иллюстрирующий это положение. Пусть мы имеем частицу со структурой:

$$D_a(\mathbf{x}) = \frac{\varepsilon}{\pi^{3/2}\Delta^3}\left[e^{-\frac{(x-l)^2+\rho^2}{\Delta^2}} - e^{-\frac{(x+l)^2+\rho^2}{\Delta^2}}\right]. \tag{7}$$

Здесь $\rho^2 = y^2 + z^2$; $x = \pm l$, $\rho = 0$ определяет положение максимальных отступлений $D_a(\mathbf{x})$ от нуля (при малых Δ), $\frac{\varepsilon}{\pi^{3/2}\Delta^3}$ даёт величину этих отступлений. На рис. 1 изображён график $D_a(\mathbf{x})$ в плоскости $\rho=0$. $D_a(\mathbf{x})$, как видно, представляет несимметричный диполеобразный объект. Вычисляя $A(\mathbf{q})$ для этого случая, для чего подставляем (7) в (2), без труда находим:

$$A(\mathbf{q})=2i\varepsilon e^{-\frac{q^2\Delta^2}{4}}\sin(q_x l), \tag{8}$$

т. е.

$$a(\mathbf{q})=2\varepsilon e^{-\frac{q^2\Delta^2}{4}}|\sin(q_x l)|, \qquad \alpha(\mathbf{q})=(-1)^m\frac{\pi}{2},$$

когда $m\pi<q_x l<(m+1)\pi$. Фаза $\alpha(\mathbf{q})$ изменяется, следовательно, скачкообразно, в пределах от $-\frac{\pi}{2}$ до $+\frac{\pi}{2}$.

На рис. 2 изображена интенсивность рассеяния $I(\theta)$ в функции угла рассеяния θ, для структуры (7) (первичный пучок при этом предположен параллельным оси диполя ox). Та же самая картина рассеяния, и притом для любой ориентации первичного пучка и объекта, будет получаться для симметричного объекта с $A(\mathbf{q})=+\sqrt{Q(\mathbf{q})}$ (т. е. при $\alpha(\mathbf{q})=0$).

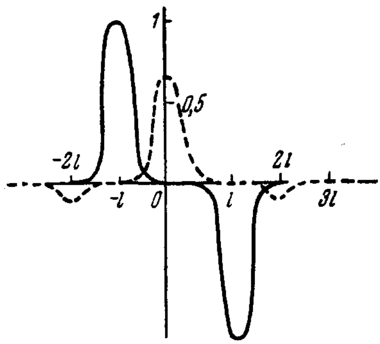

Рис. 1.

Структура этого симметричного объекта, дающего ту же диффракционную картину, что и истинный, несимметричный объект, определяется формулой:

$$D_s(\mathbf{x})=\frac{2\varepsilon}{(2\pi)^3}\int e^{-\frac{q^2\Delta^2}{4}}|\sin(q_x l)|\times e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}\,dq. \tag{7'}$$

Для вычисления этого интеграла положим

$$|\sin(q_x l)|=\sin(q_x l)\frac{2}{\pi}\sum_{s=0}\frac{1}{2s+1}\sin[(2s+1)q_x l] \tag{9}$$

и, произведя интегрирование, найдём:

$$D_s(\mathbf{x})=\frac{\varepsilon}{\pi^{5/2}\Delta^3}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{e^{-\frac{\rho^2}{\Delta^2}}}{(2s+1)}\left\{e^{-\frac{(x-2ls)^2}{\Delta^2}}+e^{-\frac{(x+2ls)^2}{\Delta^2}}-\right.$$

$$\left.-e^{-\frac{(x-2sl-2l)^2}{\Delta^2}}-e^{-\frac{(x+2sl+2l)^2}{\Delta^2}}\right\}. \tag{10}$$

Распределение $D_s(\mathbf{x})$ для этой структуры показано на рис. 1 пунктирной кривой.

Приведём другой пример. Пусть отступления от симметрии невелики, так что фаза $\alpha(\mathbf{q})$ мала в существенной области значений q. Разложим эту фазу в ряд по степеням $q_1 = q_x$, $q_2 = q_y$, $q_3 = q_z$:

$$\alpha = \sum_{i,k,l} \alpha^{ikl} q_i q_k q_l + \cdots \tag{11}$$

При этом мы начинаем разложение с третьего члена, так как первый может быть уничтожен выбором начала координат, а чётные

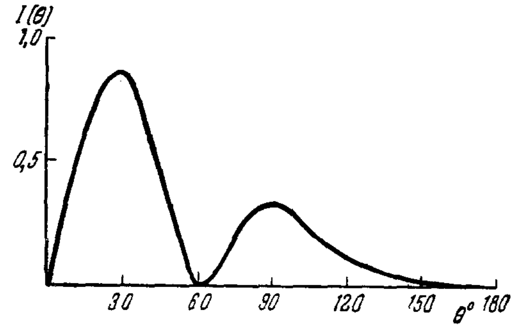

Рис. 2.

степени в α вообще отсутствуют. Полагая $A(\mathbf{q}) = \sqrt{Q(\mathbf{q})}\,\{1 + i\alpha(\mathbf{q}) + \cdots\}$, найдём (по формуле (2))

$$D(\mathbf{x}) = D_s(\mathbf{x}) - \sum_{i,k,l,} \alpha^{ikl} \frac{\partial^3 D_s(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_k \partial x_l}. \tag{12}$$

Все эти структуры, при малых α^{ikl}, будут давать одну и ту же диффракционную картину.

Таким образом мы видим, что, не прибегая к теоретическим представлениям о структуре объекта, невозможно по наблюдению только его диффракционного изображения сделать однозначные заключения об его структуре.

Это обстоятельство может оказаться также существенным при изучении строения малых частиц ультрамикроскопическими методами.