

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»):

$$\nabla^2 u + k^2 u = -4\pi D(\mathbf{x}) \phi_0(\mathbf{x}), \quad (1)$$

где функция $D(\mathbf{x})$ пропорциональна разности $(n^2 - 1)$, n — показатель преломления среды во вне и внутри рассеивающей частицы, а $\phi_0(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}}$ есть первичная, падающая волна, которую мы считаем плоской, распространяющейся в направлении $\mathbf{k}_0$.

Из этого уравнения следует*, что при $r \rightarrow \infty$ 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:

$$A(\mathbf{q}) = \int D(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}^{**}. \quad (2)$$

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:

$$D(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{q}. \quad (3)$$

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 (длина волны $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$), то максимальное значение вектора $\mathbf{q} = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ ограничено и равно $\frac{4\pi}{\lambda}$.

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

$$\tilde{D}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{q \leq \frac{4\pi}{\lambda}} A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{q}. \quad (3')$$

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

*) См. цитированные выше книги.

**) $d\mathbf{x} = dx dy dz$, $d\mathbf{q} = dq_x dq_y dq_z$.

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 $\tilde{D}(\mathbf{x})$ (при $\Delta x \ll \frac{\lambda}{2}$ 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:

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

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:

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

где

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

$$D_a(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int a(\mathbf{q}) \sin \alpha(\mathbf{q}) \sin(\mathbf{q}\mathbf{x}) d\mathbf{q}. \quad (6')$$

$D_s(\mathbf{x})$ 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:

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

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), $\frac{\epsilon}{\pi^{3/2} \Delta^3}$ даёт вели-

чину этих отступлений. На рис. 1 изображён график $D_a(\mathbf{x})$ в плоскости $\rho=0$. $D_a(\mathbf{x})$, как видно, представляет несимметричный дипольобразный объект. Вычисляя $A(\mathbf{q})$ для этого случая, для чего подставляем (7) в (2), без труда находим:

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

т. е.

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

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 $\alpha(\mathbf{q}) = 0$).

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

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

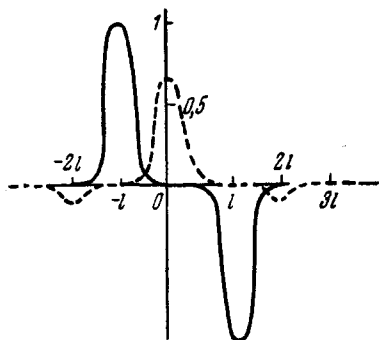


Рис. 1.

Для вычисления этого интеграла положим

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

и, произведя интегрирование, найдём:

$$D_s(\mathbf{x}) = \frac{\varepsilon}{\pi^{5/2} \Delta^3} \sum_{s=0}^{\infty} e^{-\frac{\rho^2}{\Delta^2}} \left\{ e^{-\frac{(x-2ls)^2}{\Delta^2}} + e^{-\frac{(x+2ls)^2}{\Delta^2}} - \right. \\ \left. - e^{-\frac{(x-2sl-2l)^2}{\Delta^2}} - e^{-\frac{(x+2sl+2l)^2}{\Delta^2}} \right\}. \quad (10)$$

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 $q_1 = q_x$, $q_2 = q_y$, $q_3 = q_z$:

$$\alpha = \sum_{i, k, l} \alpha^{ikl} q_i q_k q_l + \dots \quad (11)$$

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

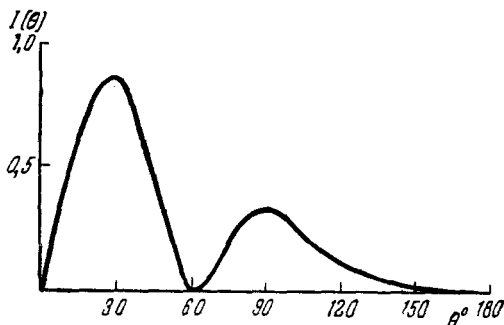


Рис. 2.

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

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

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.