

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ РСФСР ПО ДЕЛАМ НАУКИ И ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ

САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра физики твердого тела

ПРАКТИКУМ ПО СПЕЦИАЛЬНЫМ МЕТОДАМ

РЕНТГЕНСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

Лабораторная работа № 5

Самара 1991

Составители: канд. физ.-мат. наук, доцент А.Б. Покоев,  
аспирант Д.И. Степанов

Отв. редактор: докт. техн. наук, профессор А.А. Жирнов



Самарский госуниверситет, 1991

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 5

### ГАРМОНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ФОРМЫ ЛИНИЙ РЕНТГЕНОГРАММЫ

Цель работы - ознакомление с элементарной теорией свертки функций и освоение методики расчета с помощью ЭВМ кривой распределения интенсивности, обусловленной физическими факторами, по заданным распределениям интенсивности экспериментальной и инструментальной линий.

#### 1. Свертка функций

В решении различных задач теории дифракции находит широкое применение операция свертывания функций. Сверткой называется результат распределения одной функции  $f_1(x)$  по закону, задаваемому другой функцией  $f_2(x)$ . Другое формальное определение свертки:

Заданы две функции  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$ . Образует третью функцию

$$f(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) f_2(x-x') dx, \quad (I)$$

называемую сверткой функций  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$ ; удобно обозначать операцию свертки  $\frown$  или  $\oplus$  и записывать интеграл (I) в виде

$$f(x) = f_1(x) \frown f_2(x) \quad \text{или} \quad f(x) = f_1(x) \oplus f_2(x).$$

Проще всего понять операцию свертки рассмотрев сначала некоторые свойства  $\delta$ -функции.

Интеграл от произведения какой-либо функции с  $\delta$ -функцией "вырезает" значение этой функции при  $x=0$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(x). \quad (2)$$

Если  $\delta$ -функция задана не в точке  $x=0$ , а в точке  $x=x'$ , то такой интеграл "вырезает" значение функции  $f(x)$  при  $x=x'$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x-x') dx = f(x'). \quad (3)$$

Если в этом интеграле рассматривать  $x'$  как переменную величину, то он осуществляет "перевод"  $f(x)$  в пространство аргумента  $x'$ . Образует теперь аналогичный интеграл с суммой двух  $\delta$ -функций, заданных с некоторыми весами (например, с весами 1 и 2) в точках  $x'$  и  $x''$

$$f_2(x) = \delta(x-x') + 2\delta(x-x''), \quad (4)$$

так что  $x'' = x' + a$ , как это показано на рис. I, а. Согласно (3), мы получим

$$Q(x) = f(x') + 2f(x'+a) \quad (5)$$

(рис. I, б). Из рис. I, б видно, что функция  $f(x)$  распределена по закону, задаваемому функцией (4): она сдвинута в точки, в которых существует  $f_2(x)$ , и помножена на ее значения (вес) 1 и 2 в этих точках. Следует обратить внимание на тот факт, что при этом функция  $f_2(x)$  в пространстве  $x'$ , в котором получается результат, инвертирована относительно пространства  $x$ , в котором она сначала была задана вместе с функцией  $f(x)$ . Это видно и в исходной записи (3), в которой  $x'$  в аргументе  $\delta$ -функции имеет отрицательный знак.

Обобщая (3) на случай произвольной функции  $f_2(x)$ , можно обозначить интеграл

$$Q(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) f_2(x-x') dx \quad (6)$$

(Q-свертка), дающий "распределение" одной функции по закону, задаваемому второй функцией, инвертированной относительно пространства свертки. Легко понять, что интеграл

$$P(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) f_2(x'-x) dx = f_1(x) \widehat{f_2}(x) \quad (7)$$

(P-свертка) дает распределение одной функции по закону, задаваемому второй, но уже без инвертирования в пространстве свертки, в котором получен результат (рис. I, в). Если одна из функций сама обладает центром инерсии, то инвертирование несущественно, и оба выражения тождественны:  $P=Q$ . Заметим, что при определении свертки по (7), интеграл (6) (т.е. Q-свертка) равен

$$f_1(x) \widehat{f_2}(x).$$

Для лучшего уяснения того, что получается при свертке двух функций, необходимо изучить рис. 2, 3. Если обе функции  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$  не имеют острых пиков, то их общие черты проступают в свертке менее ясно, чем в случае функций, состоящих из пиков (см. например, рис. 3). При вычислении свертки (6, 7) приходится, как говорят, "сканировать" функцию  $f_1(x)$  с помощью функции  $f_2(x)$  (или наоборот).

Свойства свертки

1) Если  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$  финитные, т.е. имеют ограниченные области, то и свертка  $P, Q$  будет финитной функцией, причем область существования  $P, Q$  будет равна сумме областей существования функций.

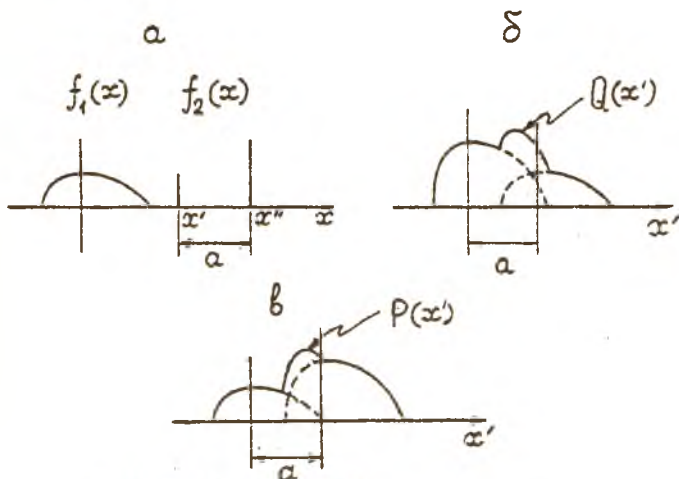


Рис.1. Функции  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$  (а),  $\delta$ -Q-свертка,  $\rho$ -свертка

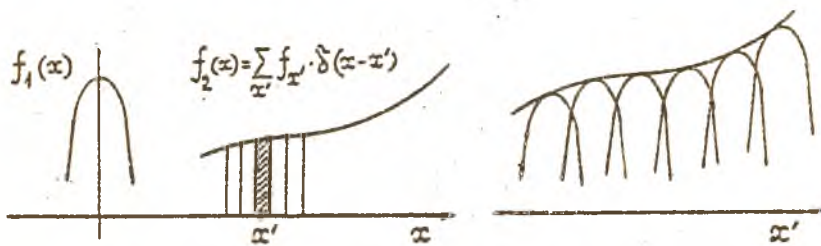


Рис.2. Схема образования свертки функций  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$ : представим  $f_2(x)$  в виде суммы "взвешенных"  $\delta$ -функций  $f_2(x) = \sum_{x'} f_{x'} \cdot \delta(x-x')$ , где  $f_{x'}$  - вес  $\delta$ -функции  $\delta(x-x')$  (сравнить с (4)); на рисунке каждая  $\delta(x-x')$  изображена в виде заштрихованной узкой полоски; при образовании свертки функция  $f_1(x)$  "сканируется" по функции  $f_2(x)$ , или, другими словами, функция  $f_1(x)$  преобразуется по закону, задаваемому функцией  $f_2(x)$



Рис. 3.  $P$  - свертка двух функций

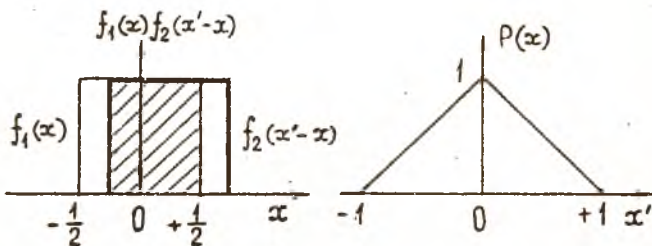


Рис. 4. Самосвертка двух функций  $f_1(x)$  и  $f_2(x)$  при  $f_1(x) = f_2(x) = \Pi(x) = 1$  на отрезке  $(-1/2, +1/2)$ . Заштрихованная область равна  $P(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) f_2(x'-x) dx$ ; значение интеграла  $P(x)$  отложено в виде ординаты функции  $P(x)$

2) Операция свертки подчиняется коммутативному, дистрибутивному и ассоциативному закону и в этом смысле ведет себя как обычное умножение.

3) Полезным оказывается очевидное свойство

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x') dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) f_2(x'-x) dx dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) dx \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f_2(x) dx, \quad (e)$$

так как при интегрировании в бесконечных пределах по переменной  $x'$  начало отсчета несущественно, и функция  $f_2(x'-x)$  может быть заменена на  $f_2(x)$ .

4) Для любого линейного оператора  $\hat{L}$  справедливо

$$\hat{L}[\widehat{f_1(x) f_2(x)}] = \{\widehat{L[f_1(x)]}\} f_2(x) = f_1(x) \{\widehat{L[f_2(x)]}\}. \quad (9)$$

Это свойство следует из того, что свертка является результатом сканирования функции  $f_1(x)$  функцией  $f_2(x)$  (или наоборот).

## 2. Использование свертки функций

Операция свертывания находит много применений. Например, структуру цепной молекулы можно описать как результат распределения некоторой группы атомов по узлам одномерной линейной цепочки, т.е. как результат Р-свертки соответствующих функций.

Операция свертки особенно интересна в связи со свойствами интеграла Фурье от свертки функций: трансформанта Фурье свертки функций равна произведению трансформант функций, образующих свертку (см. формулы (1п) и (4п) приложения). Существует и "взаимная" теорема: интеграл Фурье от произведения двух функций есть свертка интегралов Фурье каждой из них.

В рентгеноструктурном анализе широко используется функция Паттерсона, которая представляет собой самосвертку электронной плотности (самосвертка - это свертка функции с самой собой, см. рис.4):

$$Q(x') = \int \rho(\bar{r}) \cdot \rho(\bar{r} - \bar{r}') d\tau_{\bar{r}}, \quad (10)$$

где  $\rho(\bar{r})$  - функция электронной плотности в кристалле.

Настоящая работа иллюстрирует практическое использование понятия свертки для выделения распределения кривой интенсивности, обусловленного физическими факторами, из экспериментального распределения.

## 3. Построение кривой распределения интенсивности, обусловленного физическими факторами

При размерах кристаллитов 100-1500 Å используют метод измерения уширения интерференционных линий. Ширина и форма этих линий определяются следующими факторами:

- 1) размером кристаллитов или их разбиением на малые разориентированные относительно друг друга блоки;
- 2) микроскажениями кристаллитов;
- 3) наличием в кристаллитах дефектов (деф. упаковки, дислокаций и т. д.).

Уширение линий, связанное с указанными выше факторами, называется физическим уширением. Ширина интерференционной линии  $\beta$ , обусловленная физическими факторами, может быть представлена тремя составляющими:  $\beta_n, \beta_d, \beta_{др}$ , соответствующих перечисленным выше причинам.

Ширина линии зависит также от геометрических условий рентгено съемки -- сходимости и расходимости периферического пучка, а также от собственной ширины спектральной линии характеристического излучения. Уширение, обусловленное геометрическими факторами, называется геометрическим, или инструментальным уширением. Обычно ширина линии рентгенограммы обусловлена совместным влиянием физических и инструментальных факторов. Влияние этих факторов неаддитивно, так как каждый элемент физической кривой независимо испытывает инструментальное уширение.

Для выяснения распределения интенсивности, зависящего от физических факторов  $f(x)$ , из экспериментального распределения интенсивности  $h(x)$  следует исключить распределение интенсивности, обусловленное геометрическими факторами  $g(x)$ .

Инструментальное (геометрическое) уширение и связанное с ним распределение  $g(x)$  может быть получено исследованием эталона, роль физических факторов в котором сведена к минимуму.

На рис.5 схематически показано распределение интенсивности, обусловленное физическими факторами  $f(x)$ . Ордината  $y_0$  соответствует пику кривых. Разделим кривую физического уширения на элементы с основанием  $dy$  и высотой  $f(y)$ . На каждый элемент действует функция геометрического уширения  $g(y)$ , что приводит его к размытию в кривую, подобную  $g(x)$ ; площадь этого элемента по-прежнему равна  $f(y)dy$ . Экспериментальная кривая  $h(x)$ , полученная от исследуемого образца, представляет собой наложение множества таких размытых элементов:

$$h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y)g(x-y)dy. \quad (II)$$

Нетрудно видеть, что (II) представляет собой свертку функций  $f(x)$  и  $g(x)$ .

Для нахождения  $f(x)$  следует разложить в ряды Фурье кривые  $h(x)$  и  $g(x)$ , заменив интеграл суммой членов этого ряда. Пределы суммирования  $\pm a/2$  определяются расстоянием от точки  $x = 0$  до точки, где кривые  $h(x)$  и  $g(x)$  сливаются с фоном. (Примечание: при анализе двух или нескольких отражений выбор интервала разложения для разных линий НКЛ целесообразно согласовывать с масштабом обратной решетки

ки. Если интервал разложения для размытой линии образца  $H_1 K_1 L_1$  выбран  $\alpha = \Delta(2\theta)_{H_1 K_1 L_1}$ , то для линии  $H_2 K_2 L_2$  следует взять

$$\Delta(2\theta)_{H_2 K_2 L_2} = \Delta(2\theta)_{H_1 K_1 L_1} \cos \theta_{H_1 K_1 L_1} / \cos \theta_{H_2 K_2 L_2}.$$

В результате разложения каждой функции (подробные выкладки даны в Приложении) получим:

$$h(x) = \frac{H_0}{2} + H_1^A \cos x + H_2^A \cos 2x + \dots + H_n \cos nx + H_1^M \sin x + \dots + H_n^M \sin nx; \quad (12a)$$

$$g(x) = \frac{G_0}{2} + G_1^A \cos x + G_2^A \cos 2x + \dots + G_n \cos nx + G_1^M \sin x + \dots + G_n^M \sin nx; \quad (12б)$$

$$f(x) = \frac{F_0}{2} + F_1^A \cos x + F_2^A \cos 2x + \dots + F_n^A \cos nx + F_1^M \sin x + \dots + F_n^M \sin nx. \quad (12в)$$

Коэффициенты кривой истинного уширения  $f(x)$  связаны с коэффициентами кривых  $h(x)$  и  $g(x)$  зависимостями (см. Приложение):

$$F_i^A = \frac{1}{\alpha} \frac{H_i^A G_i^A + H_i^M G_i^M}{(G_i^A)^2 + (G_i^M)^2}; \quad F_i^M = \frac{1}{\alpha} \frac{H_i^M G_i^A - H_i^A G_i^M}{(G_i^A)^2 + (G_i^M)^2}; \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (13)$$

Индексы "д" и "м" в (12) и (13) при коэффициентах разложения Фурье относятся соответственно к действительной и мнимой частям. В случае четных функций (симметричных относительно оси ординат), когда  $f(x) = f(-x)$  мнимые члены исчезают. Тогда формула (13) упрощается:

$$F_i^A = \frac{1}{\alpha} \frac{H_i^A}{G_i^A} \quad (14)$$

Коэффициенты  $H$  и  $G$  определяются следующим образом:

$$H_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} h(x) dx \quad H_0 = \frac{1}{\alpha} \int_{-\frac{\alpha}{2}}^{+\frac{\alpha}{2}} h(x) dx = \frac{1}{\alpha} \sum_{x} h(x) \Delta x; \quad (15a)$$

$$H_i = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} h(x) \cos ix dx = \frac{2}{\alpha} \sum_{x} h(x) \cos ix \Delta x; \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (15б)$$

Соответственно

$$G_0 = \frac{1}{\alpha} \sum_{x} g(x) \Delta x; \quad (16a)$$

$$G_i = \frac{2}{\alpha} \sum_{x} g(x) \cos ix \Delta x; \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (16б)$$

Зная  $H_i$  и  $G_i$ , по формулам (13) вычисляются коэффициенты  $F_i$ , по которым далее восстанавливается кривая физического уширения  $f(x)$  по формуле (12a) (рис.5).

В данной работе используется метод машинных расчетов. Нужно подготовить данные для ввода в ЭВМ, и машина реализует описанные выше вычисления по программе "MOSKAL".

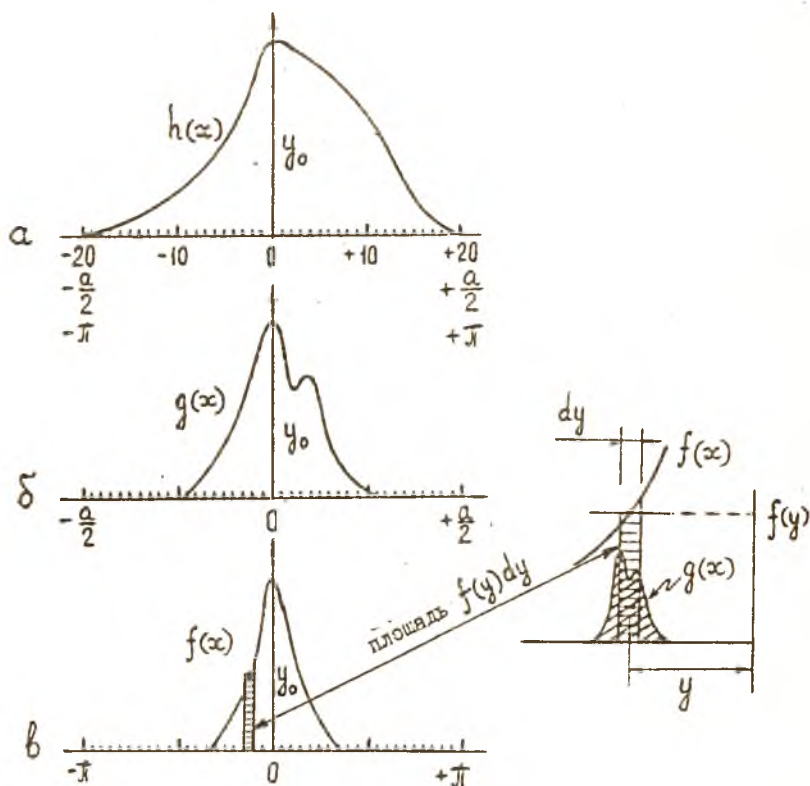


Рис.5. Распределение интенсивности, обусловленное физическими факторами  $f(x)$  (б), под действием инструментальных факторов  $g(x)$  (delta) сменяется суммарным распределением  $h(x)$  (а). Каждый элемент кривой  $f(x)$  высотой  $f(y)$  и шириной  $dy$  размывается в "кривую", подобную  $g(x)$  (причем площадь элемента и площадь кривой  $g(x)$  остаются равными ( $\tau$ ))

#### 4. Описание программы "MOSKAU"

Программа предназначена для нахождения кривой физического уширения формы рентгеновской линии исследуемого образца по известным кривым распределения интенсивности инструментальной (эталон) и экспериментальной линий. После того, как получены экспериментальная  $H(x)$  и инструментальная  $G(x)$  кривые, выбирается интервал, за пределами которого можно считать эти функции равными нулю. Интервал разбивается на  $Q$  частей, где  $Q = 20$  - четное число (в случае необходимости увеличения точности расчетов интервал следует разбить на большее количество частей).

В каждой точке измеряется значение функции (масштаб на миллиметровой бумаге можно выбрать произвольным).

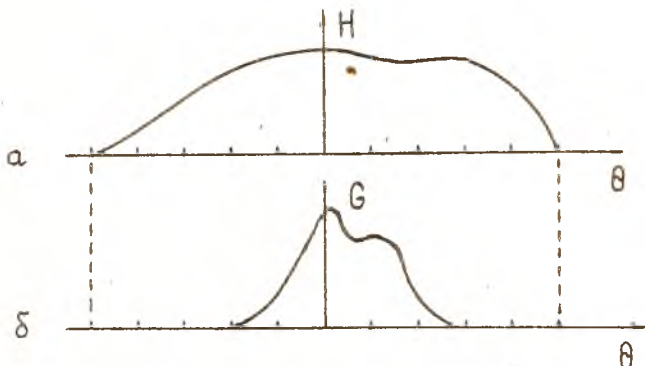


Рис.6. Экспериментальная ( $\alpha$ ) и инструментальная ( $\delta$ ) кривые распределения интенсивности рентгеновских лучей

Для функций  $H(x)$  и  $G(x)$  создаются массивы  $H(I)$  и  $G(I)$  соответственно из  $Q + 1$  чисел.

Основные блоки программы

Блок 1: Программа начинается с выполнения подпрограммы  $FIG(N,Z,TR)$ , где  $N$  - размерность используемого массива,  $Z$  - имя исходного массива,  $TR$  - имя полученного массива, которая осуществляет поиск максимального элемента и деление на него всех остальных. Таким образом, массивы  $H(I)$  и  $G(I)$  приводятся к нормализованному виду.

Блок 2: В операторе  $REAL$  описаны следующие массивы:

$G(Q+1)$  - массив кривой эталона (инструментальная кривая);

$H(Q+1)$  - массив значений интенсивности исследуемого образца (экспе-

риментальная кривая), испытавшего воздействие физических факторов;  
 $HN(Q+1)$  и  $GN(Q+1)$  - соответственно нормированные указанные массивы;  
 массивы  $HD(Q+1)$  и  $HM(Q+1)$  - коэффициенты разложения функции  $HN$ ;  
 массивы  $FD(Q+1)$  и  $FM(Q+1)$  - коэффициенты разложения функции  $GN$ ;  
 $FD(Q+1)$  и  $FM(Q+1)$  - массивы коэффициентов разложения истинного уширения;  
 $DX$  - длина отрезков, на которые разбивается интервал (в радианах);  
 массив  $AУ(Q+1,3)$  - массив значений трех функций  $F, HN, GN$ ;  
 $AX(Q+1,3)$  - массив значений абсцисс, по которым мы строим кривые  $F, HN, GN$ .

Эти массивы необходимы для того, чтобы машина могла построить кривые  $F, HN, GN$ .

Блок 3: Производится вычисление коэффициентов разложения  $HD, HM, GD, GM, FD$  и  $FM$  ряда Фурье функций  $HN, GN$  и  $F$ .

Блок 4: Вычисляются значения функции  $F$  и ее нормированные значения  $FN$ .

Блок 5: Вычисляется интегральная ширина  $W$  кривой  $F$ .

Блок 6: Строятся массивы  $AУ$  и  $AX$  и с помощью стандартной подпрограммы находятся  $HN, GN$  и  $FN$ .

#### 5. Порядок выполнения работы

- 1) Ознакомиться с теоретической частью работы по описанию и законспектировать основные ее положения в тетради.
- 2) Получить записи экспериментальных кривых у преподавателя.
- 3) Ознакомиться с программой "MOSKAU" по описанию.
- 4) Выбрать интервал существования функций  $H$  и  $G$  и определить число точек разбиения  $Q$  интервала.
- 5) Измерить интенсивности кривых в точках разбиения.
- 6) Перенести полученные данные на перфокарты, сформировать рабочую колоду перфокарт, сдать ее на счет.
- 7) Получить распечатку результатов счета и провести их анализ.

#### 6. Контрольные вопросы и задания

1. Что такое свертка функций? Вскрыть смысл определений свертки,  $P$ -свертки,  $Q$ -свертки; дать геометрическую интерпретацию образования свертки.
2. Обосновать или доказать свойства свертки, приведенные в описании.
3. Построить свертку функции  $f_1(x) = Ae^{-\alpha x}$  и  $f_2(x) = \begin{cases} B, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & x < 1, x \geq 1 \end{cases}$ , если  $A=2$ ,

$B=1, \alpha = 2$ .

4. Привести примеры использования свертки.
5. Что такое самосвертка функций? Построить самосвертку функции  $f_1 = Ae^{-\alpha x^2}$  при заданных выше параметрах /см. п.3/.
6. Рассмотреть свертку "финитной" функции  $f_1(x)$  не равной нулю только на конечном отрезке  $[x_1, x_2]$  (рис.6) с "гребенкой Дирака", собранной из большого количества  $\delta$ -функций, отстоящих друг от друга на расстоянии  $a$ , которую можно представить уравнением  $\mathbb{W}(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na)$ . Ответ иллюстрировать рисунком.
7. Чему равна самосвертка  $\delta$ -функции; записать самосвертку "гребенки Дирака".

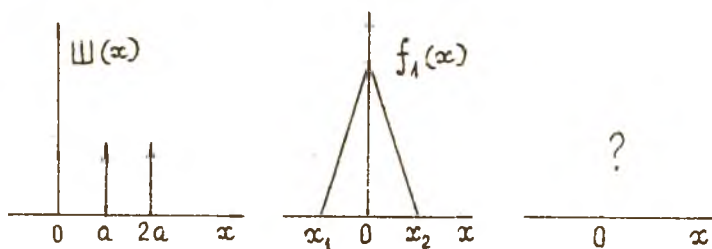


Рис.6. Свертка функции  $f_1(x)$  с "гребенкой Дирака"

8. Определить истинную форму кривой распределения интенсивности линий (III), (222), (200) и (400) деформированного никеля.
9. Построить кривую физического уширения линии (III) электролитической меди.

ПРИЛОЖЕНИЕ

I. Вывод формул (I3) описания

Запишем функции  $f(x)$ ,  $g(x)$  и  $h(x)$  через интегралы Фурье:

$$\begin{aligned} f(x) &= (2\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} F(t) \exp(-2\pi i x t) dt; \\ g(x) &= (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) \exp(-2\pi i x t) dt; \\ h(x) &= (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} H(t) \exp(-2\pi i x t) dt. \end{aligned} \quad (Iп)$$

В уравнениях (Iп) коэффициенты  $F(t)$ ,  $G(t)$  и  $H(t)$  представляют собой трансформанты Фурье и могут быть выражены уравнениями (обратное преобразование Фурье)

$$\begin{aligned} F(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(2\pi i x t) dx; \quad G(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \exp(2\pi i x t) dx; \\ H(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(x) \exp(2\pi i x t) dx. \end{aligned} \quad (2п)$$

Выразим в уравнении (II) описания функцию  $g(x-y)$  через трансформанту  $G(t)$ :

$$h(x) = (2\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) \exp[-2\pi i(x-y)t] dt dy. \quad (3п)$$

Изменим порядок интегрирования:

$$\begin{aligned} h(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) \exp(-2\pi i x t) (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) \exp(2\pi i y t) dy dt = \\ &= (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) F(t) \exp(-2\pi i x t) dt. \end{aligned}$$

Учитывая выражение (Iп) для  $h(x)$ , получаем

$$H(t) = G(t) F(t). \quad (4п)$$

Тогда можно представить  $f(x)$  в виде

$$f(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} H(t)/G(t) \exp(-2\pi i x t) dt. \quad (5п)$$

Выберем интервал  $a$ , на концах которого функции  $h(x)$  и  $g(x)$

равны нулю. Разобьем этот интервал от  $-a/2$  до  $+a/2$  на ряд равных отрезков  $\Delta x$ , так что  $a = \sum \Delta x = n \Delta x$ , где  $n$  может приниматься равным 20, 40, 60 или 120.

Тогда определяемая функция  $f(x)$  может быть представлена рядом Фурье:

$$f(x) = (2\pi)^{-1/2} \sum_t \bar{a}^t H(t) G(t)^{-1} \exp(-2\pi i t x/a), \quad (6n)$$

где  $t$  - индекс суммирования:  $t = 0, 1, 2, \dots, k$ .

На практике множители  $(2\pi)^{-1/2}$  и  $\bar{a}^t$  могут быть отброшены, т.к. они влияют только на высоту (ординаты) кривой, а не на ее форму.

Трансформанты Фурье  $H(t)$  и  $G(t)$  в свою очередь могут быть представлены в виде соответствующих рядов Фурье:

$$H(t) = \sum_x h(x) \exp(2\pi i t x/a), \quad (7n)$$

$$G(t) = \sum_x g(x) \exp(2\pi i t x/a). \quad (8n)$$

Используя формулу Эйлера, запишем выражение (7n) в другом виде:

$$H(t) = \sum_x h(x) \cos(2\pi t x/a) + i \sum_x h(x) \sin(2\pi t x/a) = H_A + i H_M, \quad (9n)$$

где  $H_A$  и  $H_M$  - коэффициенты, относящиеся к действительной и к мнимой частям соответственно.

Аналогично

$$G(t) = G_A + i G_M. \quad (10n)$$

Из уравнений (4n), (9n) и (10n) получаем

$$F(t) = H(t)/G(t) = (H_A + i H_M)/(G_A + i G_M) = \\ = [H_A G_A + H_M G_M + i(H_M G_A - H_A G_M)] / (G_A^2 + G_M^2).$$

Так как  $F(t) = F_A(t) + i F_M(t)$ , то

$$F_A(t) = (H_A G_A + H_M G_M) / (G_A^2 + G_M^2); \quad (11n)$$

$$F_M(t) = (H_M G_A - H_A G_M) / (G_A^2 + G_M^2). \quad (12n)$$

Уравнения (11n) и (12n) позволяют вычислить  $F_A(t)$  и  $F_M(t)$  по коэффициентам  $G(t)$  и  $H(t)$ , определенным по экспериментальным данным.

Искомую функцию дифракционного уширения можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \sum_{\pm} F(t) \exp(-2\pi i t x/a) = \sum_{\pm} (F_A + i F_M) [\cos(2\pi t x/a) - \\
 &- i \sin(2\pi t x/a)] = \sum_{\pm} F_A \cos(2\pi t x/a) + \sum_{\pm} F_M \sin(2\pi t x/a) - \\
 &- i \sum_{\pm} F_A \sin(2\pi t x/a) + i \sum_{\pm} F_M \cos(2\pi t x/a) .
 \end{aligned}$$

Коэффициент  $F(-t)$  представляет собой величину, комплексно-сопряженную с  $F(t)$  по уравнению (2п). Поэтому  $F_A(-t) = F_A(t)$  - четная функция и  $F_M(-t) = -F_M(t)$  - нечетная функция.

Так как суммирование производится по положительным и отрицательным значениям  $t$ , то  $\sum_{\pm} F_A \sin(2\pi t x/a) = 0$ ,  $\sum_{\pm} F_M \cos(2\pi t x/a) = 0$

и поэтому  $f(x) = \sum_{\pm} F_A \cos(2\pi t x/a) + \sum_{\pm} F_M \sin(2\pi t x/a)$ .

Выбор интервала разложения  $a$  произволен, но важно, чтобы на концах и за его пределами функции  $h(x)$  и  $g(x)$  обращались в нуль; интервал  $a$  должен быть одинаков при разложении обеих функций.

## 2. Программа "MOSKAU"

```

C      БЛОК 1
C      НОРМИРОВАНИЕ ФУНКЦИИ
SUBROUTINE FIG(N,Z,TR)
REAL Z(N),TR(N)
S=Z(1)
DO 2 I=1,N
  IF(Z(I)-S) 2,3,3
3 S=Z(I)
2 CONTINUE
DO 4 J=1,N
  TR(J)=(Z(J)/S)*100.
4 CONTINUE
RETURN
END
C      БЛОК 2
C      ВВОД ДАННЫХ
REAL H(21),G(21),HN(21),GN(21),
+HD(21),GD(21),HM(21),GM(21),
+FD(21),FM(21),F(21),FN(21),
+AY(21,3),AX(21,3),ARG(21)
READ 1,H,G
1 FORMAT(2X,7F6.2)
PRINT 1,H,G
PI=3.14159

Q=20.
DX=2*PI/Q
CALL FIG(21,H,HN)
CALL FIG(21,G,GN)
PRINT 1,HN,GN
C      БЛОК 3
C      ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ
C      РАЗЛОЖЕНИЯ РЯДА ФУРЬЕ
DO 6 I=1,21
  L=I-11
  B=0.0
  C=0.0
  T=0.0
  R=0.0
  DO 7 K=1,21
    X=(K-11)*DX
    B=B+HN(K)*COS(X*L)*DX/PI
    C=C+GN(K)*COS(X*L)*DX/PI
    T=T+HN(K)*SIN(X*L)*DX/PI
    R=R+GN(K)*SIN(X*L)*DX/PI
  7 CONTINUE
  IF(I-11) 18,19,18
19 HD(I)=B/2
   GD(I)=C/2

```

```

      FD(I)=HD(I)/GD(I)/2/PI
      FM(I)=0.0
      GO TO 6
18  HD(I)=B
      GD(I)=C
      HM(I)=T
      GM(I)=R
      FD(I)=(HD(I)*GD(I)+HM(I)*GM(I))/
      *(GD(I)**2+GM(I)**2)/PI
      FM(I)=(HM(I)*GD(I)-HD(I)*GM(I))/
      *(GD(I)**2+GM(I)**2)/PI
      6 CONTINUE
      PRINT 13
13  FORMAT(5X,7S(=" "))
      PRINT 17,(HD(I),HM(I),GD(I),GM(I),I,I=1,21)
17  FORMAT(4(5X,E14.7),2X,"I=",I2)
      PRINT 13
      PRINT 14,(FD(I),FM(I),I,I=1,21)
14  FORMAT(2(7X,E14.7),3X,"I=",I2)
с   БЛОК 4
с   РАСЧЕТ КРИВОЙ ФИЗИЧЕСКОГО УШИРЕНИЯ
      DO 20 J=1,21
      X=(J-1)*DX
      S=0.0
      DO 8 L=1,21
      I=L-11
      S=S+FD(L)*COS(X*L)+
      *FM(L)*SIN(X*L)
      8 CONTINUE
      F(J)=S
20  CONTINUE
      CALL FIG(21,F,FN)
      PRINT 9,(J,FN(J),J=1,21)
      9  FORMAT(///17X,"ФИЗИЧЕСКОЕ УШИРЕНИЕ"//
      *21(22X,"F(",I2,")=",G15.8/))
с   БЛОК 5
с   РАСЧЕТ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ШИРИНЫ ЛИНИИ
      SUM=0.0
      DO 15 I=12,21
15  SUM=SUM+FD(I)
      W=PI/(1.+SUM/FD(11))
      PRINT 16,W
16  FORMAT(17X,"ИНТЕГРАЛЬНАЯ ШИРИНА"
      *///23X,"W=",G15.8)
с   БЛОК 6
с   ПОСТРОЕНИЕ ГРАФИКОВ
      DO 5 I=1,21
      5  ARG(I)=(I-11)*DX

```

```
DO 10 I=1.21
  AY(I,1)=FN(I)
  AY(I,2)=HN(I)
  AY(I,3)=GN(I)
  DO 10 J=1.21
10 AX(I,J)=ARG(I)
  CALL PRIN(1,N1,M1,AY,AX,21,3,0,C,
  *C1,C2,1,6)
  STOP
  END
```

#### Литература

1. С.С.Горелик, Л.Н.Расторгуев, Ю.А.Скаков. Рентгенографический и электронографический анализ. М.: Металлургия, 1970.
2. А.А.Русаков. Рентгенография металлов. М.: Атомиздат, 1977.
3. Я.С.Уманский. Рентгенография металлов. М.: Металлургия, 1967.
4. Б.Я.Пинес. Лекции по структурному анализу. Уарьков: ХГУ, 1967.
5. Д.М.Васильев. Дифракционные методы исследования структур. М.: Металлургия, 1977.
6. Б.К.Вайнштейн. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. М.: Изд-во АН СССР, 1963.

---

Подписано в печать 22.05.91г. Формат 60x84/16.

Бумага оберточная белая. Печать оперативная. Объем 1,25 печ.л.

Тираж 100 экз. Бесплатно. Заказ №10

Самарский госуниверситет. 443011, г. Самара, ул. акад. Павлова, 1

Отпечатано на РТИ МП "Оптика"