В. П. Яшников, Об одной задаче дифракции, *Функц. анализ и его прил.*, 1978, том 12, выпуск 4, 95–96

Функциональный анализ и его приложения,
т. 12, вып. 4, 1978, 95—96

УДК 535.42

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ ДИФРАКЦИИ

В. П. Яшников

Предметом настоящей работы является математическая постановка и изучение задачи восстановления плотности распределения ориентаций кристаллитов в поликристалле по заданной функции интенсивности дифракционных отражений. Дадим краткое описание постановки этой задачи в рамках рентгеноструктурного анализа поликристаллических веществ [1]—[3].

Полная информация о данных дифракционного эксперимента содержится в функции интенсивности дифракции $I(\xi)$, которая для идеального кристалла имеет вид

$$I(\xi) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \sum_{n_3=0}^{\infty} a_{n_1,n_2,n_3} \delta(\xi - n_1e_1 - n_2e_2 - n_3e_3), \tag{1}$$

где ξ означает вектор рассеяния, a_{n_1,n_2,n_3} — интенсивности дифракционных отражении (n_1, n_2, n_3), e_1, e_2, e_3 — базисные векторы решетки, сопряженной к решетке кристалла. В структурном анализе поликристаллических веществ принято считать, что рассеяние на кристаллах различных ориентаций $g_1, \ldots, g_N$, составляющих образец, происходит независимо; вклад в результирующую дифракционную картину от кристаллов ориентации g_i пропорционален объемной доле $p(g_i)$, занимаемой этими кристаллами в образце. Тогда интенсивность дифракции от поликристалла выражается так:

$$\hat{I}(\xi) = \sum_{i=1}^{N} I_{g_i}(\xi) \cdot p(g_i), \tag{2}$$

где $I_{g_i}(\xi)$ — интенсивность дифракции от кристалла единичного объема, имеющего ориентацию g_i. При повороте кристалла с ориентацией g посредством вращения τ интенсивность дифракции преобразуется согласно формуле

$$I_{\tau g}(\xi) = I_g(\tau^{-1}\xi), \tag{3}$$

поэтому (2) приобретает вид

$$\hat{I}(\xi) = \sum_{i=1}^{N} I(g_i^{-1}\xi) \cdot p(g_i), \tag{4}$$

где $I(\xi)$ означает интенсивность дифракции от кристалла единичного объема, базисные векторы которого направлены по осям фиксированной системы координат. Основным в структурном анализе поликристаллов является вопрос о том, какую информацию о весовой функции $p(g)$ можно получить из (4), если известны интенсивности дифракционных отражений $I(\xi)$ и $\hat{I}(\xi)$.

Рассмотренная ситуация приводит к следующей математической задаче. Пусть $\mathbf{R}^3$ — вещественное евклидово пространство, $\mathbf{Z}$ — множество целых чисел и Γ — решетка, порожденная линейно независимыми векторами e_1, e_2, e_3:

$$\Gamma = \{\gamma \in \mathbf{R}^3:\ \gamma = n_1e_1 + n_2e_2 + n_3e_3;\ n_1, n_2, n_3 \in \mathbf{Z}\}. \tag{5}$$

Пусть, далее, $\{a_\gamma\}_{\gamma\in\Gamma}$ — последовательность комплексных чисел, удовлетворяющих условию $a_\gamma \neq 0$, $\gamma \in \Gamma$, и $V(x) = V(x_1, x_2, x_3)$ — обобщенная функция, определяемая равенством

$$V(x) = \sum_{\gamma\in\Gamma} a_\gamma \cdot \delta(x - \gamma). \tag{6}$$

Пусть $SO(3)$ группа вращения $\mathbf{R}^3$ и $C(SO(3))$ — совокупность непрерывных комплексных функций на этой группе. Для произвольной $p(g) \in C(SO(3))$ образуем среднее

$$\hat{V}(x) = \int_{SO(3)} V(g^{-1}x)\, p(g)\, dg, \tag{7}$$

где dg — инвариантный элемент объема на $SO(3)$, и поставим вопрос о том, каковы необходимые и достаточные условия на функции $V(x)$ и $p(g)$, при выполнении которых $p(g)$ однозначно восстанавливается по известным $V(x)$ и $\hat{V}(x)$.

Цель данной работы сформулировать такие условия, предварительно описав структуру обобщенной функции $\hat{V}(x)$ и установив связь между свойством гладкости $\hat{V}(x)$ и аналогичными свойствами весовой функции $p(g)$.

Переходя к формулировке полученных результатов, обозначим через $C(\Omega)$ совокупность непрерывных комплексных функций на сфере $\Omega = \{x \in \mathbf{R}^3:\ |x| = 1\}$. Пусть $\{d_i\}_{i=1, 2, \ldots}$ — последовательность длин векторов решетки Γ.

Лемма. *Для произвольной функции* $p(g) \in C(SO(3))$ *обобщенная функция* $\hat{V}(x)$, *определяемая* (7), *допускает представление вида*

$$\hat{V}(x) = q_0 \cdot \delta(x) + \sum_{i=1}^{\infty} q_i \left(\frac{x}{|x|}\right) \cdot \delta(|x| - d_i), \tag{8}$$

в котором $q_0 = a_0 \int\limits_{SO(3)} p(g)\,dg$, $q_i(\omega) \in \mathbf{C}(\Omega)$, *для любого* $i = 1, 2, \ldots$ *Если* $p(g) \in C^\infty(SO(3))$, *то* $q_i(\omega) \in C^\infty(\Omega)$ *для любого* $i = 1, 2, \ldots$ *Если числа* $\{a_\gamma\}_{\gamma\in\Gamma}$ *удовлетворяют условию* $a_\gamma > 0$ *для любого* $\gamma \in \Gamma$ *и, кроме того,* $p \geqslant 0$ *на* $SO(3)$, *то* $q_i \geqslant 0$ *на* Ω *для любого* $i = 1, 2, \ldots$

Введем в рассмотрение семейство линейных операторов $\{\mathscr{D}_i\}_{i=1,2,\ldots}$, действующих из пространства $C^\infty(SO(3))$ в пространство $C^\infty(\Omega)$, полагая по определению $\mathscr{D}_i p = q_i$ для произвольной функции $p \in C^\infty(SO(3))$, где q_i берется из (8). Определим для произвольного числа $0 \leqslant s < \infty$ пространства $\mathscr{H}_s(SO(3))$ и $\mathscr{H}_s(\Omega)$ согласно [4].

Теорема. *Для любого* $i = 1, 2, \ldots$ *линейный оператор* $\mathscr{D}_i$ *единственным образом продолжается до непрерывного оператора, действующего из* $\mathscr{H}_s(SO(3))$ *в* $\mathscr{H}_s(\Omega)$. *Если числа* $\{a_\gamma\}_{\gamma\in\Gamma}$ *удовлетворяют условию* $a_\gamma > 0$, $\gamma \in \Gamma$, *то каждый оператор* $\mathscr{D}_i$ *преобразует конус неотрицательных функций* $\mathscr{H}_s^+(SO(3))$ *в аналогичный конус* $\mathscr{H}_s^+(\Omega)$ *функций на сфере.*

Положим $\Omega_i(\Gamma) = \{\gamma \in \Gamma \colon |\gamma| = d_i\}$ и на сфере Ω рассмотрим систему дискретных мер $\{\Delta_i\}_{i=1,2,\ldots}$ следующего вида: $\Delta_i = \sum\limits_{\gamma\in\Omega_i(\Gamma)} a_\gamma \cdot \delta\left(\omega - \frac{\gamma}{|\gamma|}\right)$.

Пусть $O(3)$ — группа ортогональных преобразований $\mathbf{R}^3$, и пусть $O(V)$ (соответственно $SO(V)$) подгруппа $O(3)$ (соответственно $SO(3)$), составленная из преобразований, сохраняющих обобщенную функцию $V(x)$. Через $H^l(\Omega)$, $l = 0, 1, \ldots$, обозначим пространство однородных сферических функций степени l (см. [5]) и среди этих пространств выберем такие $H^{l_\nu}(\Omega)$, в которых имеются ненулевые сферические функции, инвариантные относительно группы $O(V)$. Символом $H_V^{l_\nu}(\Omega)$ обозначим подпространство $H^{l_\nu}(\Omega)$, порожденное такими функциями; вещественная размерность $H_V^{l_\nu}(\Omega)$ пусть будет M_ν.

Пусть $O(V)$ (соответственно $SO(V)$) — подгруппа $O(3)$ (соответственно $SO(3)$) преобразований, сохраняющих $V(x)$; $H_V^{l_\nu}(\Omega)$ — пространство $O(V)$-инвариантных однородных сферических функций степени l_ν (см. [5]), $T_V^{l_\nu}(SO(3))$ — пространство $SO(V)$-левоинвариантных обобщенных сферических функций степени l_ν (см. [5]); $\mathscr{H}_{s,V}(SO(3))$ — пространство $SO(V)$-левоинвариантных функций класса $\mathscr{H}_s(SO(3))$; $p_m^\perp(g)$ — проекция произвольной функции $p(g) \in \mathscr{H}_{s,V}(SO(3))$ на подпространство $\mathscr{C}_V^{l_m}(SO(3)) = \sum\limits_{\nu=1}^{m} T_V^{l_\nu}(SO(3))$.

Теорема. *Для того чтобы функция* $p(g) \in \mathscr{H}_{s,V}(SO(3))$ *однозначно определялась по известным обобщенным функциям* $V(x)$ *и* $\hat{V}(x)$, *необходимо и достаточно выполнение условия: для любого пространства* $H_V^{l_\nu}(\Omega)$ *в системе функционалов* $\{\Delta_i\}_{i=1,2,\ldots}$ *существует конечная подсистема* $\{\Delta_{i_1}, \ldots, \Delta_{i_{M_\nu}}\}$, *тотальная в* $H_V^{l_\nu}(\Omega)$. *Функция* $p_m^\perp(g)$ *однозначно определяется по заданным* $V(x)$ *и* $\hat{V}(x)$, *если предыдущее условие выполняется для любого* $\nu \leqslant m$.

Институт физики твердого тела АН СССР

Поступило в редакцию 26 апреля 1977 г.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Гинье А., Рентгенография кристаллов, М., ИЛ, 1961. 2. Roe R. J., J. Appl. Phys. **36**, № 6 (1965), 2024—2031. 3. Bunge H. J., Z. Metallkunde **56** (1965), 872—874. 4. Хёрмандер Л., Линейные дифференциальные операторы с частными производными, М., ИЛ, 1965. 5. Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро З. Я., Представления группы вращений и группы Лоренца, М., Физматгиз, 1958.