

Программа REFRА для расчета коэффициента преломления

Основным параметром взаимодействия рентгеновского излучения с веществом является амплитуда рассеяния вперед, то есть без изменения направления лучей. Этот параметр тесно связан с комплексным коэффициентом преломления рентгеновских лучей на границе раздела двух сред $n = 1 - \delta + i\beta$. Последний, с другой стороны определяется диэлектрической функцией вещества с однородной плотностью ε как $n = \varepsilon^{1/2}$. Если записать $\varepsilon = 1 + \chi_0$, $\chi_0 = -2(\delta - i\beta)$.

Программа вычисляет параметры δ и β по химической формуле вещества и его плотности для массива значений энергии фотонов с постоянным шагом. Химическую формулу вещества необходимо задавать в виде перечисления названий различных атомов по таблице Менделеева и в скобках число атомов, если их больше одного, например, TeO(2) или Ca(5)P(3)O(13)H. Плотность задается в граммах на кубический сантиметр.

Программа для каждой энергии вычисляет δ и β , а также комплексную фазу для толщины вещества в 1 мкм. Результат записывается в таблицу из 5 колонок: E , δ , β , P_{re} , P_{im} , которая записывается в файл с названием `refres.txt` в папке программы `s/vkRefra`, и затем содержимое файла показывается в редакторе текстов.

Программа устроена стандартным образом, то есть с использованием одного из шаблонов внешнего вида. У нее есть 5 окон ввода и 6 кнопок. По кнопке [OK] выдается результат, по кнопке [Cancel] программа заканчивает работу. Кнопка [Help] показывает этот текст, кнопка [Notes] открывает текстовый редактор для выполнения записей о вариантах расчета, кнопка [Save Var] позволяет записать данный вариант расчета в базу данных из 25 ячеек (только после выполнения расчета), кнопка [Choose Var] позволяет сразу выставить один из 25 записанных вариантов.

Заметим, что файл `refres.txt` перезаписывается после каждого расчета. При необходимости его запомнить нужно скопировать его с другим именем, либо скопировать текст из окна текстового редактора в другой файл.

Метод расчета описан в статье [1], где обсуждается способ вычисления параметра χ_0 . Есть перевод [2] статьи на английский язык.

Литература

[1] <http://kohnvict.narod.ru/articles/155r.pdf>

[2] <http://kohnvict.narod.ru/articles/155e.pdf>