

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ
РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ
КРИСТАЛЛОВ**

Суворов Э.В.

СОДЕРЖАНИЕ

	Предисловие	4
Глава 1.	Введение в физику дифракции	7
1.1.	Введение	7
1.2.	Основные положения кинематического приближения теории рассеяния	11
1.2.1.	Интерференционная функция Лауэ	11
1.2.2.	Обратная решетка. Геометрическая интерпретация условий дифракции	14
1.2.3.	Структурная амплитуда	16
1.3.	Рассеяние в неупорядоченных системах	18
1.3.1.	Рассеяние на случайных скоплениях атомов	18
1.3.2.	Атомный фактор рассеяния	20
1.3.3.	Влияние температуры	26
1.3.4.	Рассеяние на молекулах разреженного газа. Уравнение Дебая	29
1.3.5.	Радиальная функция межатомных расстояний	31
1.3.6.	Рассеяние системами с непрерывным распределением межатомных расстояний	33
1.4.	Основные положения динамического приближения теории рассеяния	36
1.4.1.	Волновое поле в идеальном кристалле	36
1.4.2.	Двухволновое приближение в совершенном кристалле	40
1.4.3.	Важнейшие следствия динамической теории рассеяния	44
1.4.4.	Волновое поле в кристалле с искажениями. Моделирование на ЭВМ дифракционного изображения дефектов	46
1.5.	Литература	50
Глава 2.	Интегральные методы исследования дефектов в кристаллах	53
2.1.	Введение	53
2.2.	Некоторые результаты динамической теории рассеяния рентгеновских лучей для кристаллов со случайно распределенными дефектами	55
2.2.1.	Диффузное рассеяние на кристаллах с дефектами	52
2.2.2.	Интегральные характеристики динамического рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами	57
2.3.	Экспериментальные методы исследования дифракционных характеристик структурного совершенства кристаллов	62
2.4.	Примеры использования интегральных методов для изучения структурных дефектов в кристаллах	68
2.5.	Литература	70
Глава 3.	Рентгеновская дифракционная микроскопия	75
3.1.	Введение	75
3.2.	Методы рентгеновской топографии	75
3.2.1.	Основные характеристики методов	76
3.2.2.	Классификация типов контраста	78
3.2.3.	Примеры применения топографических методов	81
3.3.	Рентгеновский дифракционный контраст дефектов	86
3.3.1.	Природа дифракционного изображения дислокаций	87
3.3.2.	Дифракционный контраст, формируемый в дальнем поле дислокаций	88
3.3.3.	Механизмы формирования изображения ближнего поля дислокаций	93
3.4.	Литература	100
Глава 4.	Электронная микроскопия высокого разрешения	105
4.1.	Введение	105
4.2.	Основные характеристики оптических систем	107
4.2.1.	Основы оптической микроскопии	107

4.2.2.	Типы контраста (амплитудный и фазовый контраст)	111
4.3.	Формирование изображения в оптической системе	114
4.3.1.	Микроскоп как дифракционный прибор. Подход Аббе	114
4.3.2.	Передаточная функция оптической системы	116
4.4.	Анализ aberrаций в электронном микроскопе	118
4.4.1.	"Тонкий" фазовый объект в электронной микроскопии	118
4.4.2.	Анализ передаточной функции электронного микроскопа	119
4.4.3.	Метод оптического дифрактометра для экспериментального исследования передаточной функции	122
4.4.4.	Методы численного моделирования изображения высокого разрешения на ЭВМ	123
4.5.	Примеры использования методов электронной микроскопии высокого разрешения	127
4.6.	Литература	138
Глава 5.	Основы растровой электронной микроскопии (РЭМ)	143
5.1.	Введение	143
5.2.	Устройство и принцип работы РЭМ	145
5.2.1.	Формирование электронного зонда	146
5.2.2.	Детекторы сигналов в РЭМ	148
5.3.	Взаимодействие электронного пучка с веществом	151
5.3.1.	Основные механизмы потерь энергии электронов в веществе (упругие и неупругие потери)	151
5.3.2.	Основные источники сигналов, используемых для формирования изображения в РЭМ	153
5.3.3.	Область взаимодействия электронов зонда с веществом мишени	159
5.4.	Формирование контраста в РЭМ	163
5.4.1.	Основные механизмы формирования изображения в РЭМ	163
5.4.2.	Методы обработки видеосигнала в РЭМ	165
5.5.	Рентгеновский микроанализ	168
5.5.1.	Методы регистрации рентгеновского спектра	168
5.5.2.	Основные поправки, вводимые в количественном анализе	172
5.6.	Примеры применения РЭМ	175
5.7.	Литература	182
6.	Заключение	185

ПРЕДИСЛОВИЕ

Интенсивное развитие физики твердого тела, физики металлов, современного материаловедения в значительной степени связано с прогрессом в области совершенствования существующих и разработки новых методов исследования реальной структуры кристаллов и их свойств. В последние 15-20 лет появились принципиально новые материалы, такие как квазикристаллы, фуллерены, магнитные кристаллы с особыми свойствами, высокотемпературные сверхпроводящие керамики и монокристаллы, сегнетоэлектрики, сегнетоэластики, материалы с памятью формы, жидкие кристаллы, нанокристаллические материалы, аморфные сплавы и пр., нашедшие применение в целом ряде направлений новой техники. Изучение их структуры и свойств требует, как правило, привлечения комплекса самых современных физических методов исследования, взаимно дополняющих друг друга.

Под влиянием бурно развивающейся теории рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов и электронов появилась целая гамма прямых методов исследования дефектов кристаллической решетки, обладающих чрезвычайно высокой чувствительностью к локальным деформациям и предельной разрешающей способностью на атомном уровне [1]. Это в первую очередь целое семейство методов рентгеновской дифракционной топографии, высокоразрешающая электронная микроскопия, разнообразные методы растровой электронной микроскопии. Появление методов, позволяющих непосредственно наблюдать тонкую структуру дефектов кристаллической решетки с атомным разрешением, определять их количественные характеристики, внесло неоценимый вклад в понимание определяющей роли дефектов в формировании физических свойств кристаллов [2]. Особое место в этом перечне занимает рентгеновский микроанализ, позволивший проводить количественный анализ атомного состава материала с предельно малым объемом вещества, составляющих нескольких сотен кубических ангстрем [3,4].

Аналогичные процессы происходили и в электронной микроскопии. Развитие дифракционной теории изображения и особенно прогресс в области производства новых поколений электронных микроскопов позволил в последние 10 лет довести разрешение лучших инструментов до величины около 1.2Å и выйти на прямое разрешение атомной решетки. Экспериментальные исследования, в которых используются результаты непосредственного наблюдения структуры дефектов (дислокаций, межзеренных границ, двойников и пр.) на атомном уровне, перестали быть экзотикой [5-8].

В последние 15-20 лет особое распространение в физическом материаловедении получили методы, связанные с идеологией растровых электронных микроскопов. Эти приборы позволили исследовать не только топографию дефектов поверхности, но и распределение атомного состава с достаточно высокой чувствительностью и точностью. Так пространственное

разрешение РЭМ составляет $20-100\text{Å}$, а чувствительность к атомному составу может достигать 1-2% для широкого спектра составов и концентраций [9].

По перечисленным выше методам существует весьма обширная литература - это в первую очередь публикации оригинальных исследований в научной периодике, по каждому из названных выше методов имеется значительное число обзоров и монографий, однако начинающий исследователь, пожелавший применять эти методы в практической работе, обычно сталкивается с определенной трудностью - среди имеющейся литературы практически отсутствуют книги, способные в сравнительно небольшом объеме познакомить читателя с физическими основами этих методов, дать в руки исследователя некоторые основные принципы, лежащие в основе практически всех названных выше методов исследования.

Предлагаемая вниманию читателя работа, по мнению автора, может восполнить этот пробел и поможет экспериментаторам быстрее овладеть новыми методами. Большое внимание в книге отведено введению в физику дифракции, так как именно это явление лежит в основе большинства известных методов исследования дефектов кристаллической структуры. В данной работе рассматриваются лишь некоторые наиболее известные в настоящее время методы - такие как метод интегральных характеристик, рентгеновские топографические методы, электронная микроскопия высокого разрешения, растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. Такое ограничение связано с одной стороны рамками книги, а с другой безусловно пристрастием автора.

Книга содержит пять глав и имеет следующую структуру. В первой главе приведены наиболее важные по мнению автора сведения по физике дифракции. Во второй главе рассмотрен метод интегральных характеристик, позволяющий по весьма простым дифракционным параметрам определять степень совершенства кристаллов. В третьей главе описаны основные методы рентгеновской дифракционной топографии, позволяющие исследовать топографию дефектов в объеме кристаллов без его разрушения. Четвертая глава посвящена описанию основ высокоразрешающей электронной микроскопии. И наконец пятая глава содержит материал по основам растровой электронной микроскопии и рентгеновского микроанализа. Основное внимание в книге уделяется физическим принципам, на которых основан каждый из описываемых методов. В конце каждой главы приводится раздел, в котором рассмотрены некоторые выигрышные примеры использования данной методики для исследования реальной структуры кристаллов.

Автор надеется, что предлагаемая книга окажется полезным пособием для специалистов физиков-экспериментаторов, использующих в своей работе разнообразные методы исследования дефектов в кристаллах. Она может быть также полезна в качестве учебного пособия для стажеров-исследователей, аспирантов и инженеров, предполагающих использовать в своей работе новые методы исследования реальной структуры кристаллов.

Литература

1. Diffraction and Imaging Techniques in Material Science,
Editors by S. Amelincks, R. Gevers, J. V. Landuyt
North-Holland Publishing Company, 1984

2.I.Watt

The principles and practice of electron microscopy,
Cambridge University Press, 1985

3.I.Rozgai

Trace Element Analysis in the SEM,
Electron Microscopy and Analysis, 26,31-33,1993

4.A.V.Hetherington, D.K.Skinner

Coordinated Analysis for Materials Problems,
Electron Microscopy and Analysis, 23,19-21,1993

5.H.Hashimoto

Development of high resolution electron microscopy in atomic level and its future, J.Electron
Microsc.,28,s1-8,1979

6.R.G.Garcia

Atomic and Nanometre Scale Structures Generated by the STM,
Microscopy and Analysis,22,21-23,1993

7.J.M.Cowley

High Resolution Imaging and Diffraction Studies of Crystal Surfaces,
Surface Sci.,114,587-595,1982

8.A.Tonemura

Electron Holography,
Phys.Rev.Lett.,56,792-794,1986

9.Electron beam testing technology,

Editing by J.T.L.Thong,
Plenum Press, 1993

ГЛАВА 1

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ДИФРАКЦИИ

1.1. ВВЕДЕНИЕ

Большинство известных в настоящее время экспериментальных методов исследования структуры материалов основано на их взаимодействии с излучениями разной природы и последующим анализом картин рассеяния [1-5]. Условием для получения необходимых сведений о структуре вещества является достаточная величина разрешающей способности метода, которая, как известно, определяется длиной волны применяемого излучения. Поскольку межатомные расстояния в кристаллической решетке составляют величины порядка 1Å , становится ясно, что необходимые длины волн должны быть меньше этой величины.

Как показывает практика, наиболее подходящими излучениями для целей исследования структуры вещества являются рентгеновское излучение, электроны и нейтроны.

Рентгеновское излучение с длиной волны $\sim 0.1-10\text{Å}$ достаточно легко генерируется и регистрируется обычными способами (фотометод, нульмерные, одномерные или двухмерные детекторы), имеет слабое поглощение. Рассеяние рентгеновских квантов происходит на электронах вещества. При этом следует отметить, что их взаимодействие с электронным газом очень слабое.

Пучки электронов, ускоренные до энергии E , имеют длину волны

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{12,5}{\sqrt{U}}, \quad (1.1)$$

где U - ускоряющее напряжение в *вольтах*. Таким образом ускоряющим напряжениям в несколько сотен эв соответствует длина волны де-Бройля порядка 1Å . Электроны с такими энергиями сильно поглощаются веществом, поэтому для экспериментов приходится использовать либо очень тонкие $\sim 0.1\text{мкм}$ образцы, либо изучать тонкие приповерхностные слои. Рассеяние электронов происходит на электрических потенциалах, распределенных в пространстве между атомами, и энергия взаимодействия их существенно выше, чем для рентгеновских квантов. Для получения большей проникающей способности применяют ускоряющие напряжения $\sim 1\text{мэв}$ и выше, что серьезно усложняет экспериментальную технику. Для тяжелых частиц, таких как нейтроны, соответствующие длины волн получаются при значительно меньших энергиях. Так нейтроны с длиной волны $\sim 1\text{Å}$ имеют энергию $\sim 0.08\text{эв}$, что соответствует температуре нейтронов около 600К .

Взаимодействие нейтронов с атомами вещества существенно отличается по своей природе от взаимодействия с фотонами или заряженными частицами. Поэтому при облучении нейтронами дополнительно выявляются особенности атомного строения (положения легких атомов в решетке, магнитная структура

и др.). Следует отметить, что поглощение нейтронов в веществе очень мало, и это позволяет изучать массивные образцы.

Рассеянное веществом излучение необходимо тем или иным способом проанализировать и извлечь из параметров рассеяния структурные характеристики. В принципе возможно два пути: во-первых, можно сфокусировать, если это возможно, рассеянное излучение, получить "оптическое" изображение объекта и изучать по нему структуру; во-вторых, получить дифракционную картину и, применяя Фурье-анализ, извлечь всю возможную информацию о структуре исследуемого кристалла (симметрия дифракционной картины позволяет определить симметрию кристалла - его точечную и пространственную группу симметрии; измерения интенсивностей рефлексов дает возможность в конечном счете получить распределение электронной плотности; и, наконец, тонкая структура дифракционных пятен содержит информацию о реальной структуре кристалла, то есть о дефектах кристаллической решетки, их типе и количестве). Следует отметить, что и первый и второй пути не всегда могут дать однозначную информацию о структуре и связано это в первую очередь с тем, что двухмерное микроскопическое изображение или двухмерная дифракционная картина не позволяют восстановить без потерь все характеристики трехмерного объекта.

Рассмотрим взаимодействие плоской когерентной волны с атомами кристаллической решетки. Атомы решетки, а точнее электроны в атомах, попадая в поле действия падающей волны сами становятся источниками вторичных волн. Суммарное рассеянное излучение является результатом интерференции всех вторичных волн и существенным образом зависит от природы взаимодействия первичной волны с атомами объекта, а также от их расположения в пространстве. Методы описания процессов дифракции и многие дифракционные характеристики зависят от соотношения энергии рассеянного излучения и энергии падающего пучка. Если взаимодействие падающих квантов с веществом слабое, то энергия дифрагированного излучения мала по сравнению с энергией падающего излучения, в этом случае волновое поле после дифракции является, по существу, суперпозицией исходной и рассеянных волн. В квантовой механике такой случай получил название приближения однократного рассеяния или борновского приближения, а в теории дифракции - кинематического рассеяния. Большинство структурных задач достаточно хорошо описывается кинематическим приближением, так как объекты, с которыми приходится иметь дело, достаточно несовершенны и процессами многократного рассеяния можно пренебречь, однако в некоторых случаях (совершенный и достаточно протяженный кристалл, случай рассеяния электронов и др.) вероятность того, что вторичные волны продифрагируют на соседних атомах еще один и более раз становится заметной. В этом случае интенсивность дифрагированной волны становится соизмерима с волной падающей, и кинематическое приближение перестает работать - возникает необходимость учитывать эффекты многократного рассеяния.

Сказанное выше можно проиллюстрировать на следующих схемах. Падающая волна, проходя через кристалл, возбуждает атомы, лежащие на различной глубине, и вызывает появление дифрагированных волн, которые, в силу недостаточного совершенства кристалла (условие Брэгга для более глубоких слоев выполняется для этих волн недостаточно хорошо), проходят оставшуюся часть кристалла без взаимодействия (см.рис.1.1а). В случае высоко совершенного кристалла вторичные волны будут дифрагировать снова, так как соседняя область кристалла также ориентирована под правильным углом для брегговского отражения.

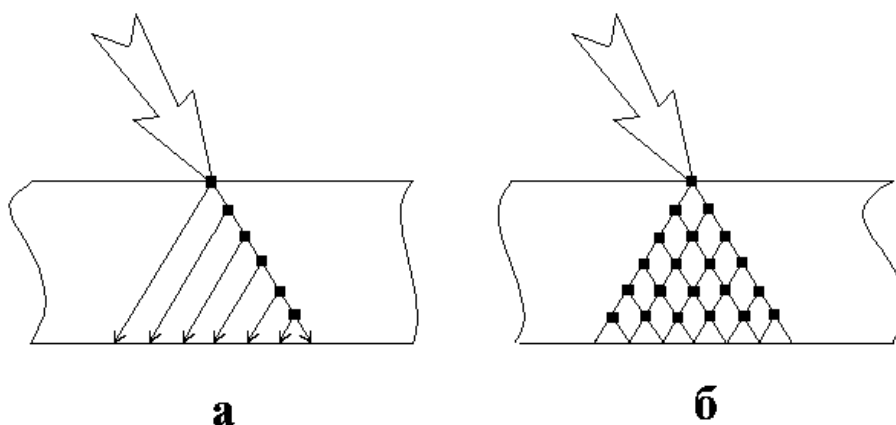


Рис.1.1 Схема, иллюстрирующая процесс формирования однократного -а), и многократного рассеяния -б).

В результате в кристалле за счет интерференции вторичных многократно дифрагированных волн формируется самосогласованное волновое поле (см.рис.1.1б). Структура и свойства этого поля коренным образом отличаются от дифрагированной волны в кинематическом случае. Для рентгеновских лучей коэффициент преломления отличается от единицы на величину порядка 10^{-6} . Поэтому на первый взгляд кажется, что учет многократного рассеяния будет столь же мал. Однако это не так. На совершенных кристаллах наблюдаются многочисленные тонкие но весьма заметные динамические эффекты такие, как "маятниковый" эффект, эффект "аномального прохождения", эффект "углового усиления" и др. Эти эффекты лежат в основе разнообразных методов исследования структурных характеристик кристаллов.

Для рассеяния электронов их взаимодействие с веществом значительно сильнее и поэтому при расчетах картин рассеяния электронов, электронно-микроскопических изображений и в целом ряде других случаев необходимо пользоваться динамическим приближением теории рассеяния.

1.2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КИНЕМАТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

1.2.1. ИНТЕРФЕРЕНЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ЛАУЭ

Когерентное рассеяние электромагнитных волн на электронах и других зарядах вещества с точки зрения классической электродинамики может быть описано как двойной процесс: под действием переменного электромагнитного поля падающей волны электроны приходят в колебательное движение; последнее в свою очередь вызывает вторичные электромагнитные волны, распространяющиеся во всех направлениях вокруг колеблющегося заряда. Можно строго доказать, что амплитуда волны, рассеянная одним электроном и наблюдаемая на расстоянии R , определяется выражением

$$E^e = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \cdot \frac{E_0}{R} \quad (1.2)$$

здесь и далее e - заряд электрона; m - масса электрона; c - скорость света в вакууме; E_0 - тангенциальная составляющая напряженности поля первичной волны.

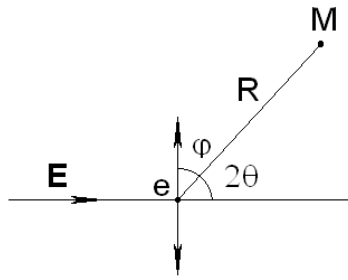
Распределение электронной плотности в атоме имеет сложный характер и описывается законами квантовой механики. Поэтому при переходе от отдельного электрона к атому необходимо учитывать зависимость рассеяния от угла. Строгое решение этой задачи достаточно сложно. На практике обычно пользуются таблицами

$f(\sin\theta/\lambda)$ функции атомного рассеяния. Эта величина показывает во сколько раз амплитуда, рассеянная атомом в данном направлении и при данной длине волны, больше, чем амплитуда рассеяния электроном в том же направлении, и носит название атомной амплитуды.

Рассмотрим рассеяние рентгеновских лучей на пространственной решетке, состоящей из отдельных атомов. Для упрощения задачи будем считать, что падающая волна в кристалле распространяется со скоростью света в вакууме, т.е. показатель преломления мы полагаем равным единице [1-11]. Это означает, что можно пренебречь взаимодействием между рассеянной и падающей волнами. Амплитуды волн, рассеянных всеми эквивалентными атомами в заданном направлении, считаем одинаковыми, т.е. пренебрегаем эффектами поглощения и многократного рассеяния. Наконец, рассматривается только дифракция Фраунгофера: на кристалл падает плоская волна, а точка наблюдения практически бесконечно удалена от кристалла. Каждый узел решетки, попадая в поле падающей волны, становится источником вторичной сферической волны. Задача таким образом сводится к поиску результирующей волны в любой точке пространства, находящейся на расстоянии, много большем размеров кристалла [1-9].

Рассеяние рентгеновских лучей свободными электронами.

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot \exp(i\omega t) \quad m \cdot \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = e\mathbf{E} \quad m\ddot{\mathbf{x}} = e\mathbf{E} \quad \ddot{\mathbf{x}} = e\mathbf{E} / m \quad (1.27)$$



$$|\mathbf{E}^e| = |\mathbf{H}^e| = \ddot{\mathbf{x}} \cdot \frac{e}{c^2 R} \cdot \sin \varphi \quad (1.28)$$

$$I(\varphi) = |\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^*| = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \frac{\sin^2 \varphi}{R^2} \quad (1.29)$$

I_0 - интенсивность первичного пучка; R - расстояние до точки наблюдения; e^2 / mc^2 - классический радиус электрона; $(e^2 / mc^2)^2$ - сечение рассеяния электрона

(множитель Томпсона). В первом случае $\varphi = 90^\circ$ $I_{\perp} = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{R^2}$,

$$I_{\perp} = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \text{ во втором - учитывая, что } \varphi = \frac{\pi}{2} - 2\theta,$$

$$I_{\parallel} = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \frac{\cos^2 2\theta}{R^2}. \text{ Записывая среднее значение интенсивности получаем}$$

$$I = \frac{I_{\parallel} + I_{\perp}}{2} = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{R^2} \cdot \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

$$I_e = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \right) \quad (1.30)$$

Множитель $\frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$ получил название поляризационного множителя.

Полное рассеяние излучения на одном электроне составляет

$$P = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \int_s \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \cdot ds = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \cdot \frac{8\pi}{3} \quad (1.31)$$

Численное значение сечения рассеяния электрона составляет $\left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \approx 10^{-24} \text{ см}^2$.

Следовательно, один электрон рассеивает ничтожную долю падающего излучения. Однако, как показывает следующий пример, число электронов, принимающих участие в рассеянии, достаточно велико. Если принять, что радиус атома составляет $\approx 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ нм}$, объем одного атома будет равен

$$V_a = \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4 \cdot 3,14 \cdot 1,5^3 \cdot (10^{-8})^3}{3} = 14,13 \cdot 10^{-24} \text{ нм}^3, \text{ облучаемый объем около}$$

$$\approx 10^{-3} \text{ нм}^3, \text{ число атомов в таком объеме будет } n = \frac{V_{\text{exp}}}{V_a} = \frac{10^{-3}}{14,13 \cdot 10^{-24}} \approx 7 \cdot 10^{19}, \text{ а}$$

число электронов в Z раз больше. Тогда доля рассеянной энергии в таком примере составит $\approx 4 \cdot 10^{-5} \cdot Z$, т.е. $10^{-5} \div 10^{-3}$ от полной энергии падающего

пучка. Ясно, что не все излучение рассеивается по упругому механизму. Некоторая его часть рассеивается за счет неупругих процессов с изменением длины волны излучения, поэтому эта доля не будет принимать участия в интерференции и пока рассматриваться не будет. Для протонов $m_p = 1840 \cdot m_e$, поэтому доля рассеянной энергии будет существенно меньше.

$$E^e = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \cdot \frac{E_0}{R} \quad E^a = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \cdot \frac{E_0}{R} \cdot f(\theta) \quad \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \approx 10^{-12}$$

Рассмотрим рассеяние излучения на правильной решетке. Пусть на кристалл с элементарной ячейкой, определяемой трансляционными векторами $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ и содержащей N^3 одинаковых атомов (кристалл имеет форму параллелепипеда с ребрами, параллельными векторам $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, и содержат по N атомов вдоль каждого ребра), падает плоская волна с волновым вектором \mathbf{k} ($|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$) в направлении, определяемом единичным вектором \mathbf{s}_0

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i(\omega t - \varphi)} \quad (1.3)$$

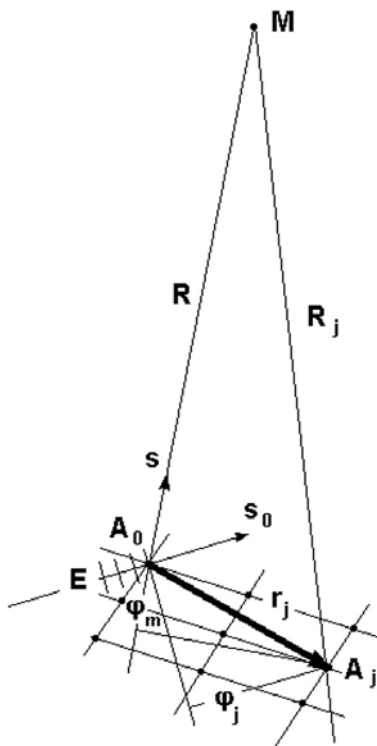


Рис.1.2.Схема, иллюстрирующая процесс рассеяния на кристаллической решетке. A_0, A_j - узлы решетки; \mathbf{s}_0, \mathbf{s} - единичные вектора, определяющие направление падающей волны; R, R_j - расстояния от точки наблюдения M до соответствующих узлов; \mathbf{r}_j - вектор решетки, соединяющий нулевой узел решетки с узлом j .

Выберем начало координат в одном из узлов решетки, например A_0 . Легко показать, что плоская волна, распространяющаяся в кристалле, в узле A_j , находящемся на расстоянии $|\mathbf{r}_j|$ от начала координат, будет иметь фазу $\varphi_j = k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)$ и, следовательно, возмущение, создаваемое этой волной в точке A_j , можно записать в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)]}, \quad (1.4)$$

здесь и далее $k = |\mathbf{k}|$. Вектор \mathbf{r}_j можно выразить через параметры элементарной ячейки

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p, \quad (1.5)$$

где m, n, p - целые числа. Если точка наблюдения M (см.рис.1.2) находится на достаточно большом расстоянии R от начала координат, так что $R \gg r_j$ (R много больше размеров кристалла), в направлении, определяемом единичным вектором \mathbf{s} , вторичная сферическая волна, излучаемая атомом, находящимся в узле A_j будет в точке M иметь дополнительную фазу $\varphi_M = kR_j$ и следовательно амплитуда волны в точке M может быть записана как

$$\mathbf{E}_j = \frac{\mathbf{E}_0}{|\mathbf{R}_j|} \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j) - kR_j]} \quad (1.6)$$

Здесь R_j - расстояние от точки наблюдения до узла A_j . Полагая в знаменателе амплитуды $|\mathbf{R}_j| \approx |\mathbf{R}|$, следует в то же время более точно учесть фазовый член kR_j в экспоненте. С точностью до величин второго порядка малости, можно записать $\mathbf{R}_j = \mathbf{R} - (\mathbf{s}, \mathbf{r}_j)$. Учитывая сказанное, выражение для вторичной сферической волны, примет вид

$$\mathbf{E}_j = \frac{\mathbf{E}_0}{R_j} \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j) - (kR_j) + k(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j)]} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t - kR)} \cdot e^{ik(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)} \quad (1.7)$$

Чтобы вычислить результирующую волну возмущения в точке M , образующуюся в результате рассеяния первичной плоской волны всеми атомами кристалла, необходимо просуммировать выражение для \mathbf{E}_j по всем узлам кристаллической решетки, т.е.

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t - kR)} \cdot \sum_j e^{ik(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)} \quad (1.8)$$

Подставляя значение вектора $\mathbf{r}_j = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p$ и обозначая временной множитель $\mathbf{E}(t) = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t - kR)}$, стоящий в начале формулы, получим

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(t) \cdot \sum_{m=0}^N \sum_{n=0}^N \sum_{p=0}^N e^{ik[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), (\mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p)]} = \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \quad (1.9)$$

$$\text{где } \mathbf{L}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = \prod_{a,b,c} \sum_{m=0}^N e^{ikm[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}]} \quad (1.10)$$

Функция $\mathbf{L}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)$ впервые была введена в теорию рассеяния М.Лауэ.

Выражения, стоящие под знаком суммы в выражении(1.10), представляют собой геометрические прогрессии, первый член которых равен 1, а знаменатель имеет вид $q = e^{-ik[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}]}$. Введем следующие обозначения

$$\begin{aligned} \Psi_a &= \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] \\ \Psi_b &= \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] \\ \Psi_c &= \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] \end{aligned} \quad (1.11)$$

Тогда для первой суммы можно записать

$$\sum_{m=0}^N e^{ikm[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}]} = \frac{1 - \exp(2iN\Psi_a)}{1 - \exp(2i\Psi_a)} \quad (1.12)$$

и аналогично для других сомножителей. Суммарную интенсивность рассеянного излучения в точке M легко получить, умножив выражение для амплитуды (1.9) на комплексно сопряженное, и затем используя формулы Эйлера, после несложные тригонометрические преобразования получим окончательное выражение для интенсивности (см. приложения 1)

$$I = \left(\frac{E}{R}\right)^2 \cdot \prod_{a,b,c}^3 \frac{\sin^2(N\Psi_a)}{\sin^2(\Psi_a)} = \left(\frac{E}{R}\right)^2 \cdot L^2(\Psi_a, \Psi_b, \Psi_c) \quad (1.13)$$

Выражение стоящее под знаком произведения носит название интерференционной функции Лауэ. Анализ этой функции показывает, что она имеет максимумы в точках $\Psi_a = \pi h, \Psi_b = \pi k, \Psi_c = \pi l$, где h, k, l - целые числа. Эти максимумы носят название главных максимумов и имеют значения

$$I_{max} = \left(\frac{E}{R}\right)^2 \cdot (N^3)^2. \quad \text{Наряду с главными максимумами, в точках}$$

$\Psi_1 = h \pm \frac{3}{2N}, h \pm \frac{5}{2N}$, и т.д. располагаются побочные максимумы, имеющие существенно меньшую амплитуду. Полуширина главных максимумов тем меньше, чем больше число атомов N в кристалле. На рис.1.3 приведен вид функции Лауэ, вычисленный для нескольких значений N . Запишем еще раз координаты главных максимумов

$$\begin{cases} \Psi_1 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] = \pi h \\ \Psi_2 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] = \pi k \\ \Psi_3 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] = \pi l \end{cases} \quad (1.14)$$

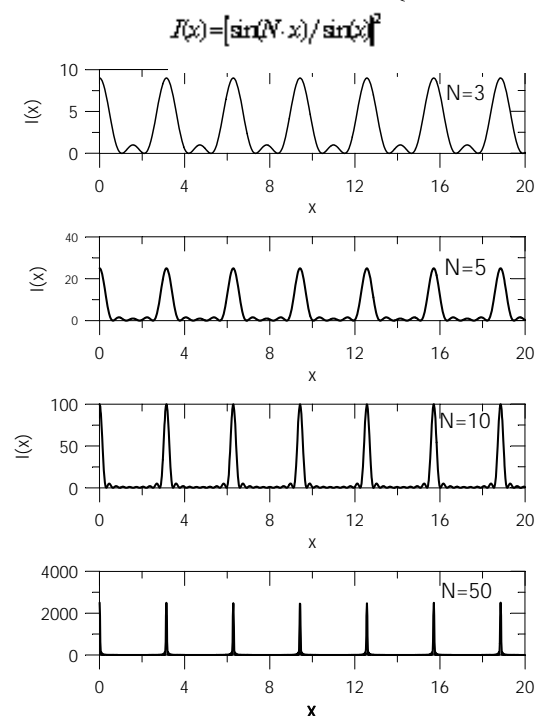


Рис.1.3. Вид интерференционной функции Лауэ, вычисленный для $N=5; 10; 15; 20; 30; 50$.

Совершенно понятно, что это - условия дифракции на трехмерной решетке, которые носят название уравнений Лауэ. График одномерной интерференционной функции Лауэ (один из сомножителей в тройном произведении (1.13.) представлен на рис 1.3.

Из анализа функции понятно, что с увеличением числа рассеивающих центров растут амплитуды главных дифракционных пиков и уменьшается их ширина, т.е. добротность резонансной системы растет. С другой стороны

амплитуды побочных максимумов уменьшается, а их число растет. Таким образом для кристаллической решетки в единице объема которой имеется $N_A = 6,0247 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ атомов ширина пиков будет очень маленькая, а амплитуда будет равна $I_{max} = \left(\frac{E}{R}\right)^2 \cdot (N^3)^2$.

1.2.2. ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ

В дифракционных задачах физики твердого тела, оптики, структурного анализа, электронной микроскопии и др. чрезвычайно полезным является введение понятия обратной решетки и обратного пространства, сопряженных с прямой решеткой и прямым пространством. Если прямая решетка определяется векторами элементарной ячейки $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, и любой узел решетки может быть задан при помощи вектора трансляции $\mathbf{T} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$, то вектора элементарной ячейки обратной решетки определяются соотношениями

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{V}[\mathbf{bc}], \mathbf{b}^* = \frac{1}{V}[\mathbf{ca}], \mathbf{c}^* = \frac{1}{V}[\mathbf{ab}], \quad (1.15)$$

где V - объем элементарной ячейки $V = (\mathbf{a}[\mathbf{bc}]) = (\mathbf{b}[\mathbf{cd}]) = (\mathbf{c}[\mathbf{ab}])$, причем

$$\begin{aligned} (\mathbf{aa}^*) &= (\mathbf{bb}^*) = (\mathbf{cc}^*) = 1, \\ (\mathbf{ab}^*) &= (\mathbf{ac}^*) = (\mathbf{ba}^*) = (\mathbf{bc}^*) = (\mathbf{ca}^*) = (\mathbf{cb}^*) = 0, \end{aligned} \quad (1.16)$$

а любой узел этой решетки задается вектором $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$, называемым вектором обратной решетки. Из определения следуют два важных свойства обратной решетки: во-первых вектор обратной решетки \mathbf{H} перпендикулярен плоскостям прямой решетки с индексами hkl ; во-вторых абсолютная величина вектора \mathbf{H} равна обратной величине межплоскостного расстояния d для плоскостей с индексами hkl . Учитывая сказанное выше, условия дифракции (1.14) можно записать в очень простой и компактной форме (Более подробную информацию по свойствам обратной решетки можно прочитать в приложении 2)

$$\frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} = \mathbf{H}_{hkl}, \text{ или } \mathbf{K} - \mathbf{K}_0 = \mathbf{H}_{hkl}, \quad (1.17)$$

представляющей закон Вульфа-Брегга, т.е.

$$2 \cdot \sin\theta = \mathbf{H}_{hkl} \cdot \lambda, \text{ или } 2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin\theta = \lambda \quad (1.18)$$

Введенное выше определение обратной решетки (1.15-1.16) позволяет использовать очень наглядное геометрическое представление условий дифракции, предложенное Эвальдом [4-9]. От нулевого узла обратной решетки O в направлении, обратном \mathbf{S} , отложим отрезок, равный $1/\lambda$, и из полученной точки P опишем сферу радиусом $R=1/\lambda$ (см.рис.1.4). Если какой-либо узел обратной решетки, например Q с координатами h,k,l , попадает на эту сферу, называемую сферой отражения (сферой распространения или сферой Эвальда), то, как видно из рисунка 1.4, для треугольника POQ удовлетворяется векторное уравнение

$$\frac{\mathbf{s}}{\lambda} = \mathbf{H}_{hkl} + \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda}, \text{ или } \mathbf{K} = \mathbf{H}_{hkl} + \mathbf{K}_0 \quad (1.19)$$

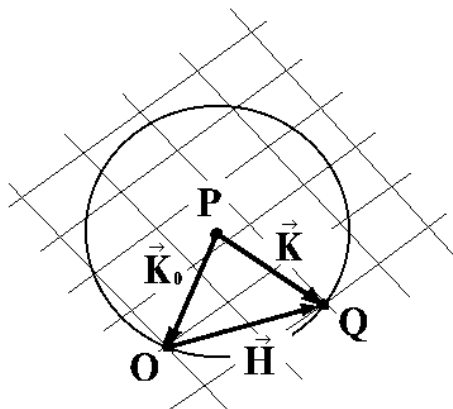


Рис.1.4.Схема геометрии Лауэ. Сфера отражения в обратном пространстве.

Отрезок OQ здесь не что иное, как вектор обратной решетки \vec{H} . Таким образом при повороте обратной решетки вокруг нулевого узла на сферу отражения попадают те или иные узлы обратной решетки, при этом выполняется условие дифракции Лауэ, и в направлении этих узлов возникают дифрагированные пучки. Из геометрического построения Лауэ следует, что в дифракции могут участвовать только те узлы обратной решетки, которые попадают внутрь сферы радиуса $2/\lambda$, проведенной вокруг нулевого узла и называемой сферой ограничения.

1.2.3. СТРУКТУРНАЯ АМПЛИТУДА

Проведенные выше рассуждения сделаны для случая примитивной кристаллической решетки, т.е. когда все рассеивающие центры одинаковы, причем рассеивающая способность узлов для простоты полагалась равной единице, поэтому для реального случая, когда в узлах располагаются атомы, полученное выражение для интенсивности необходимо умножить на атомный фактор рассеяния. В случае если решетка более сложная и имеет базис, состоящий из атомов разных сортов, приведенные выше рассуждения остаются справедливыми, следует только атомный фактор заменить на структурную амплитуду $F(hkl)$.

В рассмотренном выше случае рассеяния плоской монохроматической волны примитивной решеткой интерференционная картина состоит из ряда максимумов, интенсивность которых не зависит от индексов отражающей плоскости и пропорциональна числу рассеивающих центров. Расположение максимумов определяется только трансляционной группой симметрии, т.е. вектором $\mathbf{r}_j = a\mathbf{m} + b\mathbf{n} + c\mathbf{p}$.

В решетке с базисом внутри каждой элементарной ячейки находятся дополнительные атомы, положения которых определяются векторами $\mathbf{r}_m = a\mathbf{u}_m + b\mathbf{v}_m + c\mathbf{w}_m$, где m меняется от 1 до M ; u, v, w - правильные дроби, определяющие координаты атомов базиса, причем при $j=1$ $r_m=0$, что соответствует атомам примитивной решетки. Положение каждого атома в сложной решетке тогда можно записать в виде $\mathbf{r}_{mj} = \mathbf{r}_m + \mathbf{r}_j$. Рассеивающая способность атомов каждого сорта задается атомной функцией рассеяния $f_m(\sin \theta/\lambda)$.

Таким образом любую сложную решетку можно представить, как состоящую из M одинаковых примитивных решеток, вставленных одна в

другую и смещенных относительно исходной решетки на вектора \mathbf{r}_m . Каждая из этих решеток с точностью до постоянного множителя при рассеянии волны образует одну и ту же интерференционную функцию, и значит число и положение дифракционных максимумов будет одно и то же. Это означает, что в сложной решетке число максимумов не может быть больше, чем в примитивной. Наоборот, в ряде случаев число интерференционных максимумов в сложной решетке может уменьшаться, так как волны, рассеиваемые отдельными примитивными решетками в направлении главных максимумов, вообще говоря, не совпадают по фазе и поэтому могут частично или полностью ослаблять друг друга. Следовательно для определения суммарной амплитуды волны, рассеянной сложной решеткой, необходимо просуммировать амплитуды элементарных волн, рассеянных всеми атомами. Задачу можно упростить, если сначала суммирование провести по атомам, образующим отдельные примитивные решетки, а затем просуммировать все волны, рассеиваемые всеми примитивными решетками [4,7-9].

Суммирование по примитивным решеткам всякий раз приводит к одному и тому же результату: к одинаковой интерференционной функции, положение главных максимумов которой определяется уравнением $(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = \lambda \cdot \mathbf{H}_{hkl}$. Второе суммирование показывает, что в направлении главных максимумов распространяется M волн, разность хода которых определяется выражением $(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_m)$. Тогда второе суммирование даст

$$F(hkl) = \sum_{m=1}^M f_m \cdot e^{ik(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_m)} = \sum_{m=1}^M f_m \cdot e^{2\pi i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_m)} = \sum_{m=1}^M f_m \cdot e^{2\pi i(u_m h + v_m k + w_m l)} \quad (1.20)$$

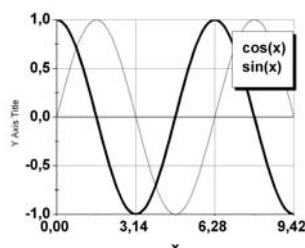
В случае примитивной решетки ($j=1, r_m=0$) $F=L$. Написанное выражение носит название структурной амплитуды решетки. Интенсивность максимумов сложной решетки пропорциональна $|F^2(hkl)|$ и называется структурным фактором решетки.

Таким образом в общем случае результирующая интенсивность, рассеянная сложной решеткой, будет иметь вид

$$I = \left(\frac{E_0}{R}\right)^2 \cdot L^2(\mathbf{H}) \cdot F^2(\mathbf{H}, \mathbf{r}_m), \quad (1.21)$$

причем следует подчеркнуть, что положения интерференционных максимумов определяются интерференционной функцией Лауэ - $L(\mathbf{H})$, а их амплитуда - структурным множителем - $F(\mathbf{H}, \mathbf{r}_m)$. Следовательно структурная амплитуда является своеобразным амплитудным фильтром, который накладываясь на интерференционную функцию Лауэ приводит к уменьшению или полному исчезновению интенсивности отдельных линий дифракционного спектра.

Рассмотрим несколько простых примеров.



Пусть например мы имеем решетку центрированную по одному ребру. Тогда её базис может быть

записан как $\left(000, \frac{1}{2}00\right)$. Структурная амплитуда в

этом случае будет выглядеть как

$$F = f_1 + f_2 \exp(i\pi h) = f(1 + \exp i\pi h) = f(1 + \cos \pi h)$$

допустим, что все атомы одинаковые т.е. $f_1 = f_2$.

Следовательно закон погасаний рефлексов для этой решетки будет

$$F = \begin{cases} 0, & \text{если } h \cdot \text{нечетно} \\ 2f, & \text{если } h \cdot \text{четно} \end{cases}$$

Рассмотрим другой пример. Пусть мы имеем решетку центрированную по одной грани. Тогда её базис будет записан в виде $\left(000, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$. Структурная

амплитуда для этой решетки примет вид

$$F = F = f_1 + f_2 \exp\left(2i\pi \frac{h+k}{2}\right) = f[1 + \exp i\pi(h+k)] = f[1 + \cos \pi(h+k)] \text{ и}$$

следовательно закон погасаний примет вид

$$F = \begin{cases} 0, & \text{если } h+k = 2m+1, \cos \pi(h+k) = -1 \\ 2f, & \text{если } h+k = 2m, \cos \pi(h+k) = 1 \end{cases}$$

Рассмотрим пример гранецентрированной решетки. Её базис имеет вид

$\left(000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$. Структурная амплитуда ГЦК-решетки будет

$$F = f[1 + \cos \pi(h+k) + \cos \pi(k+l) + \cos \pi(l+h)]. \text{ Следовательно закон}$$

погасаний для ГЦК-решетки будет записан как

$$F = \begin{cases} 4f, & \text{если } hkl \cdot \dots \cdot 2n+1 \cdot \text{или} \cdot 2n \\ 0, & \text{если } hkl \cdot \text{смешанной} \cdot \text{четности} \end{cases}$$

Наконец рассмотрим пример объемцентрированной кубической решетки. Уё

базис имеет вид $\left(000, \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\right)$, а структурная амплитуда будет записана как

$$F = f[1 + \exp \pi i(h+k+l)] = f[1 + \cos \pi(h+k+l)]. \text{ Тогда закон погасаний для}$$

$$\text{ОЦК-решетки имеет вид } F = \begin{cases} 0, & \text{если } h+k+l = 2n+1 \\ 2f, & \text{если } h+k+l = 2n \end{cases}$$

Рассмотренные примеры показывают, что в спектре не могут появиться новые максимумы, некоторые рефлексы могут погаснуть вообще, для други может измениться амплитуда. Это основной вывод из анализа функции структурного фактора.

1.3. РАССЕЙАНИЕ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

1.3.1. РАССЕЙАНИЕ НА СЛУЧАЙНОМ СКОПЛЕНИИ РАССЕИВАЮЩИХ ЦЕНТРОВ

Выше были рассмотрены основные закономерности явлений дифракции (рентгеновских лучей, или других видов излучения) для случая регулярного расположения атомов в кристаллической решетке (положения атомов в решетке задаются трансляционным вектором $\mathbf{r}_j = \mathbf{a}h + \mathbf{b}k + \mathbf{c}l$), благодаря чему эти явления выражены особенно отчетливо в виде интерференционной функции Лауэ и закона Брегга. Естественно, что такая идеальная кристаллическая решетка, это крайний случай степени порядка. В реальном кристалле ситуация гораздо сложнее. Рассеивающие узлы (все или их часть) могут быть смещены из своего правильного положения в решетке и тогда в направлениях интерференционных максимумов нарушится точное сложение амплитуд волн и их интенсивность для такой искаженной решетки ослабнет. Однако суммарная рассеянная энергия не должна уменьшаться, и поэтому в каких-то других направлениях, не отвечающих условиям дифракции, интенсивность рассеяния может увеличиваться. Таким образом в результате нарушения правильного расположения рассеивающих центров происходит перераспределение интенсивности между дифракционными пиками и остальной частью обратного пространства. Иными словами, в случае рассеяния на реальном кристалле будет существовать заметное распределение диффузного рассеяния, в котором сосредоточена информация о нарушениях правильного расположения атомов в кристаллической решетке.

Наряду с кристаллическим состоянием в природе широко распространены газообразное, жидкое и аморфное состояния. Поэтому естественно возникает вопрос, возможно ли использовать рассеяние излучений для получения информации о строении неупорядоченных или слабо упорядоченных систем [1-13].

Для начала рассмотрим другой крайний случай, когда атомы или другие рассеивающие частицы располагаются в пространстве произвольно, а координаты их могут быть описаны лишь на языке функций распределения вероятностей (имеются в виду случайные скопления рассеивающих частиц). Пусть рассеивающий объем состоит из N атомов, положения которых заданы векторами $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N$. Пусть также $f_1, f_2, \dots, f_j, \dots, f_N$ множители рассеяния, соответствующие различным сортам N атомов, \mathbf{s}_0, \mathbf{s} единичные вектора, определяющие направления падающего и дифрагированного пучков. Тогда, как и в случае идеальных кристаллов, можно записать суммарную амплитуду рассеянного излучения в точке наблюдения M (см.рис.1.2) в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot \sum_{j=1}^N f_j \cdot e^{ik(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)} \quad (1.22)$$

Полученное выражение можно переписать, воспользовавшись понятием обратного пространства и заменив $\mathbf{k}(s - s_0) = \mathbf{H}$, где \mathbf{H} -вектор обратного пространства, тогда рассеянная амплитуда примет вид

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot \sum_{j=1}^N f_j \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j)} \quad (1.23)$$

Суммирование производится по всем атомам рассеивающего объема. Чтобы получить выражение для интенсивности, необходимо умножить рассеянную амплитуду на комплексно сопряженную. Для того, чтобы учесть все члены суммы, следует умножать слагаемые с отличными индексами, т.е.

$$\begin{aligned} I(\mathbf{H}) &= \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^* = \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j)} \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{j'})} = E_0^2 \cdot \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})} = \\ &= E_0^2 \cdot \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

здесь $\mathbf{r}_{jj'} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}$. В некоторых случаях может быть полезным другое выражение для интенсивности, которое может быть получено, если выделить в отдельный член все слагаемые с одинаковыми индексами, т.е.

$$I(\mathbf{H}) = E_0^2 \cdot \left[\sum_{j=j'} f_j^2 + \sum_{j \neq j'} \sum f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})} \right] \quad (1.25)$$

Таким образом чтобы вычислить рассеянную интенсивность, необходимо знать координаты всех рассеивающих частиц в любой момент времени. Эта информация для таких сложных систем как газы, жидкости или аморфные материалы получена быть не может, так как рассеивающие атомы в этих системах находятся в непрерывном движении. Поэтому имеется единственная возможность, используя функции распределения атомов в пространстве определить лишь среднюю величину интенсивности. Усреднять придется фазовый множитель, стоящий под знаком суммы. Если известно распределение вероятности $W(\mathbf{r}_{jj'})$ значений вектора $\mathbf{r}_{jj'}$, среднее значение величины экспоненты в (1.25) будет определяться выражением

$$\overline{e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})}} = \int_{\mathcal{V}} e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})} \cdot W(\mathbf{r}_{jj'}) d\mathbf{r}_{jj'} \quad (1.26)$$

Интегрирование необходимо проводить по всему объему, где размещаются рассеивающие частицы.

1.3.2. АТОМНЫЙ ФАКТОР РАССЕЯНИЯ

Рассеяние рентгеновских лучей на электронах в атомах. Атомный фактор рассеяния или амплитуда атомного рассеяния это - функция, зависящая от угла рассеяния и определяемая отношением суммарной амплитуды,

рассеянной всеми электронами одного атома, к амплитуде волны, рассеянной одним электроном, т.е.

$$|\mathbf{E}| = |\mathbf{E}^e| \cdot f(\theta) \quad (1.32)$$

Так как размеры атома соизмеримы с длиной волны рентгеновского излучения, между волнами, рассеянными на отдельных электронах атома, возникает разность фаз, которую необходимо учитывать при подсчете суммарной амплитуды. Электроны в атомах связаны и имеют собственные частоты колебаний. Поэтому для упрощения будем предполагать, что частота падающей волны существенно больше частот собственных колебаний, другими словами, энергия связи электронов в атоме мала. Из квантовой механики известно, что электроны в атомах движутся по определенным орбитам, и, следовательно, излучать вторичные волны будут движущиеся электроны. Для упрощения расчетов будем считать, что период обращения электронов по своим орбитам существенно больше периода колебаний падающей волны, и эффектом Доплера в данном случае можно пренебречь.

Рассмотрим рассеяние на электронах одного атома. Выберем начало полярной системы координат в центре атома, как показано на рис.1.5, и будем считать, что электроны распределены непрерывно с плотностью $\rho(\mathbf{r})$ внутри сферы, ограничивающей атом.

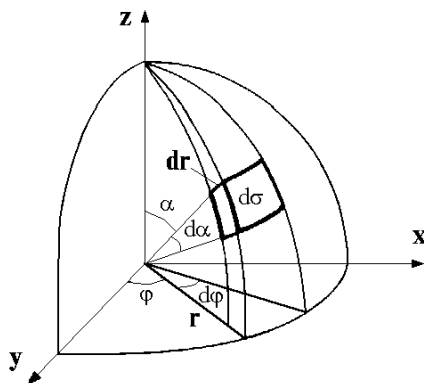


Рис.1.5.Схема полярной системы координат для расчета амплитуды волны, рассеянной электронами атома.

Пусть единичные векторы \mathbf{s}_0 и \mathbf{s} определяют направления падающей и рассеянной волн. Тогда разность фаз для волн, рассеянных на электронах, расположенных в точках \mathbf{r} и в начале координат, будет $\Delta\varphi = k(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r})$. Выделим элемент объема $dv = r d\varphi \cdot r \sin\alpha \cdot d\alpha \cdot dr$ на расстоянии r от начала координат. Амплитуда волны, рассеянная этим элементом объема, будет определяться соотношением

$$d\mathbf{E} = \mathbf{E}^e \cdot \rho(\mathbf{r}) dv \cdot e^{ik(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r})} = \mathbf{E}^e \cdot \rho(\mathbf{r}) dv \cdot e^{ik(\mathbf{S}, \mathbf{r})} \quad (1.33)$$

Обозначим через 2θ угол рассеяния, тогда модуль разности векторов в выражении для фазы можно записать в виде

$$k|\mathbf{s} - \mathbf{s}_0| = 2k \cdot \sin\theta = 4\pi \cdot \frac{\sin\theta}{\lambda} = \mathbf{S}, \text{ а дополнительная разность фаз примет вид}$$

$\Delta\varphi = k \cdot 2\sin\theta \cdot r\cos\alpha = S \cdot r \cdot \cos\alpha$. Суммарная рассеянная амплитуда может быть получена в результате интегрирования амплитуды, рассеянной элементарным объемом по всему объему атома, т.е.

$$|\mathbf{E}| = |\mathbf{E}^e| \cdot \int_V \rho(\mathbf{r}) \cdot e^{iSr\cos\alpha} dv = |\mathbf{E}^e| \cdot \int_\varphi d\varphi \int_r \rho(r)^2 dr \int_\alpha e^{iSr\cos\alpha} \sin\alpha \cdot d\alpha \quad (1.34)$$

Интегрируя полученное выражение по α и φ , получим

$$|\mathbf{E}| = |\mathbf{E}^e| \cdot \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) \cdot \frac{\sin(Sr)}{Sr} \cdot dr \quad (1.35)$$

Величина написанного интеграла носит название атомного фактора рассеяния [1-9]. При $S=0$ множитель под интегралом становится равен единице, $\frac{\sin(Sr)}{Sr} = 1$, а атомный фактор рассеяния при этом будет равен числу

электронов Z в атоме. С ростом $S = 4\pi \cdot \frac{\sin\theta}{\lambda}$ функция $f(\sin\theta/\lambda)$ монотонно убывает, как показано на рис.1.6.

Можно показать, что наибольший вклад в амплитуду рассеяния вносят электроны глубоких уровней электронной оболочки атома. Анализ показывает, что с ростом расстояния электронов от ядра их роль в рассеянии сильно убывает. Валентные электроны дают заметный вклад в амплитуду рассеяния только при очень малых углах рассеяния. Интенсивность, рассеянная атомом, имеющем точечный размер вообще не должна зависеть от угла рассеяния и будет равна числу электронов в атоме. Если атом имеет конечные размеры, а электроны распределены в его объеме по определенному закону, рассеянная интенсивность будет убывать с ростом величины $\sin\theta/\lambda$, причем, чем больше диаметр атома, тем круче будет спадать интенсивность.

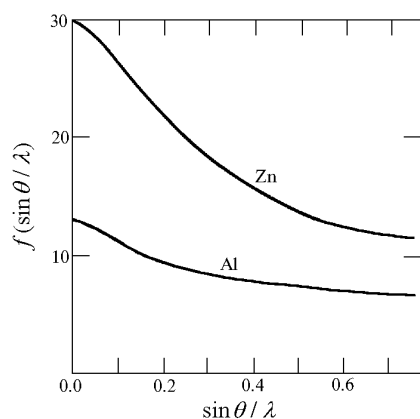


Рис.1.6. Вид зависимости атомной функции рассеяния от $\sin\theta/\lambda$ для нейтральных атомов Zn и Al. ($Z_{Zn}=30$; $Z_{Al}=13$).

Оценки, сделанные выше, выполнены при условии, что электроны в атоме практически свободны и уравнение движения электрона можно записать в виде $m\ddot{r} = eE$. Реальная ситуация сложнее - электроны в атомах движутся по своим орбитам и имеют собственные частоты колебаний и, следовательно необходимо рассматривать задачу движения связанного электрона под

действием внешней периодической возмущающей силы при движении электрона т.е. $m\ddot{\mathbf{r}} + \omega_0^2 \mathbf{r} = e\mathbf{E}$. И это еще не все. Необходимо также учесть затухание при движении электронов. Тогда полное уравнение движения будет иметь вид $m\ddot{\mathbf{r}} + k\dot{\mathbf{r}} + \omega_0^2 \mathbf{r} = e\mathbf{E}$. В этом случае амплитуда волны, рассеянной на связанном электроде, может быть записана в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e \cdot \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2 - ik\omega}, \quad (1.36)$$

здесь \mathbf{E}^e - амплитуда рассеяния для свободного электрона, ω_0 - собственная частота связанного электрона, k - коэффициент затухания, определяемый силой связи электрона в атоме. Если в атоме содержится n связанных электронов, необходимо просуммировать амплитуды рассеяния для всех n электронов.

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e \cdot \sum_n \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{0n}^2 - ik\omega}$$

Из написанного соотношения видно, что, во-первых, амплитуда рассеяния представляется комплексным числом и, следовательно, появляется дополнительное поглощение вблизи собственных резонансных частот, а, во-вторых, - амплитуда сильно зависит от частоты падающей волны, т.е. имеется дисперсия. Корректный учет этих поправок проведен в работах Лоренца.

Если длина волны падающего излучения достаточно далека от края полосы поглощения, атомный фактор попросту равен f_0 . Однако при приближении длины волны падающего излучения к краю полосы поглощения атомный фактор становится комплексной величиной и его следует записать в виде $f = f_0 + \Delta f' + i\Delta f''$, где f_0 является атомной функцией рассеяния, полученной в предположении свободных электронов атома, а $\Delta f'$ и $\Delta f''$ - дисперсионные поправки, первая из которых учитывает дополнительное рассеяние, а вторая - дополнительное поглощение вблизи собственных частот колебаний электронов в атоме. Дисперсионные поправки зависят от длины волны и практически не зависят от $\sin\theta/\lambda$. А так как f_0 уменьшается с ростом угла рассеяния, дисперсионные поправки начинают играть возрастающую роль при больших углах рассеяния.

Функции атомного рассеяния для случая свободных электронов в атоме в зависимости от величины $\sin\theta/\lambda$ и соответствующие дисперсионные поправки в зависимости от длины волны для всех элементов таблицы Менделеева приводятся обычно в виде таблиц [25-27]. Наиболее точные значения этих величин даны в интернациональных таблицах [27].

Амплитуда атомного рассеяния электронов. В дифракционных экспериментах наряду с рентгеновским излучением используются электроны с энергией от десятков до сотен кэВ (электроны с энергией 50кэВ имеют длину волны 0.037Å). Путем несложных выкладок можно показать, что амплитуда атомного рассеяния для электронов связана с амплитудой атомного рассеяния рентгеновских лучей следующим выражением

$$f_e(\sin\theta / \lambda) = \frac{Z - f_x(\sin\theta / \lambda)}{\pi(\sin\theta / \lambda)^2} \quad (1.37)$$

Анализ написанного выражения показывает, что при больших углах рассеяния, где f_x мало, $f_e \rightarrow Z$ и уменьшается обратно пропорционально $(\sin\theta/\lambda)^2$. В электронографии и электронной микроскопии обычно используется величина, кратная амплитуде атомного рассеяния и входящая в первое Борновское приближение теории рассеяния электронов, а именно

$$f_{tb}(\sin\theta/\lambda) = \frac{2\pi me}{h^2} \cdot f_e(\sin\theta/\lambda) \quad (1.38)$$

Именно эта величина приводится обычно в справочниках [37-39]. Амплитуда электронного рассеяния, как видно из приведенных выше формул, на два-три порядка выше амплитуды рассеяния рентгеновских лучей и более слабо зависит от атомного номера Z . На рис.1.7 для примера показаны амплитуды рассеяния рентгеновских лучей и электронов для случая атома водорода.

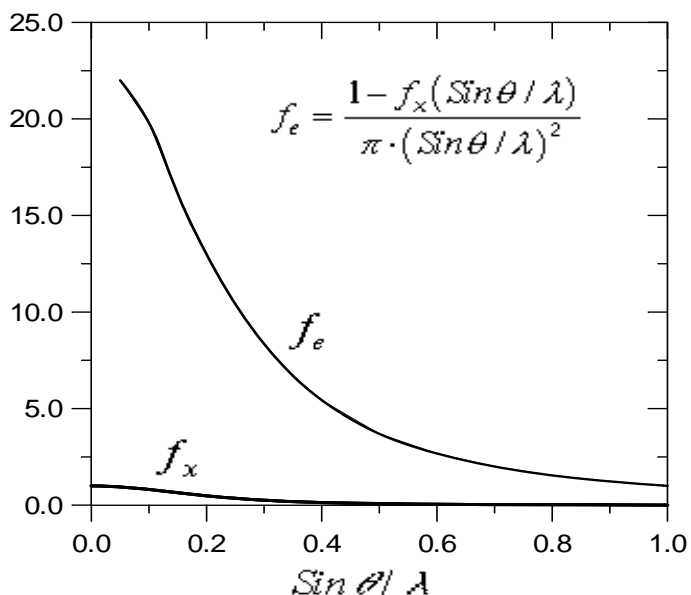


Рис.1.7. Вид функций атомного рассеяния атома водорода для рентгеновских лучей и электронов, рассчитанный в первом Борновском приближении.

Оценки амплитуд атомного рассеяния электронов, сделанные выше, приводят к важным особенностям в применении рассеяния электронов по сравнению с рентгеновскими лучами. С одной стороны, более высокая амплитуда рассеяния электронов (на два-три порядка) заметно повышает светосилу дифракционной картины и наряду с возможностью фокусировки пучка падающих электронов позволяет исследовать весьма мелкие кристаллы в поликристаллических системах. С другой стороны, заметное поглощение электронов с энергией порядка нескольких десятков кэВ открывает выгодную возможность изучения структуры тонких поверхностных слоев толщиной в $10^{-6} \div 10^{-7} \text{ нм}$. Для сравнения в рентгенографии при оптимальных условиях регистрируется слой около $10^{-2} \div 10^{-4} \text{ нм}$.

Более слабая зависимость атомной амплитуды рассеяния электронов по сравнению с рентгеновскими лучами от атомного номера позволяет проводить структурные исследования для легких атомов.

Наличие у электронов спина и магнитного момента открывает дополнительные возможности для изучения магнитной структуры материалов.

Амплитуда атомного рассеяния для нейтронов. Для дифракционных экспериментов обычно используются тепловые нейтроны с энергией ≈ 0.025 эв, что соответствует длине волны около 1.5 \AA . Оставляя в стороне вопросы, связанные с получением и регистрацией нейтронов, остановимся лишь на некоторых особенностях рассеяния нейтронов.

В отличие от рентгеновских лучей и электронов нейтроны практически не взаимодействуют с электронами атома, так как нейтроны не имеют электрического заряда - основное взаимодействие происходит с атомными ядрами. Нейтроны слабо поглощаются веществом (примерно в 10^3 раз меньше, чем рентгеновское излучение). Так как размеры атомных ядер существенно меньше длины волны тепловых нейтронов, амплитуда атомного рассеяния нейтронов не должна зависеть от угла рассеяния. Величина атомной амплитуды рассеяния примерно на один-два порядка меньше по сравнению с рентгеновскими лучами.

В ядерной физике рассеяние нейтронов описывается величиной, называемой "длиной рассеяния" b , связанной с сечением взаимодействия соотношением $\sigma = 4\pi b^2$. В общем случае величина b является комплексной, однако мнимая часть является заметной величиной лишь для нескольких ядер, таких, как изотопы бора и кадмия, которые сильно поглощают тепловые нейтроны. Для целого ряда ядер длина рассеяния b является величиной отрицательной, причем даже для соседних изотопов параметр b может иметь разный знак и существенно отличаться по величине. Достаточно надежные численные значения параметра b приведены в интернациональных таблицах [35].

Нейтроны имеют собственный магнитный момент $\mu_n = 1.9131$ ядерных магнетонов. Поэтому параметр рассеяния b наряду с ядерным рассеянием b_n будет содержать член, описывающий магнитное рассеяние

$$b = b_n + b_m. \quad (1.39)$$

Рассмотренные выше особенности в рассеянии нейтронов веществом показывают, что метод нейтронографии дополняет рентгенографию и электронографию, а в целом ряде случаев оказывается даже более эффективным. Во-первых, дифракция нейтронов является по существу единственным методом определения положения атомов водорода и других легких элементов в кристаллической решетке. Во-вторых, исследование положений атомов в решетке в случае, когда они занимают соседние места в таблице элементов Менделеева (из-за, иногда, существенного различия параметров b). В-третьих, исследование рассеяния поляризованных нейтронных пучков дает информацию о структуре магнитных подрешеток (ферриты, антиферромагнетики). И, наконец, в-четвертых, изучение неупругого рассеяния нейтронов позволяет получать фоннный спектр кристаллов.

1.3.3. ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА АМПЛИТУДУ РАССЕЯНИЯ

Тепловые колебания атомов должны существенно влиять на интенсивность излучения, рассеянного веществом, поскольку колеблющиеся

атомы решетки как бы размазываются в пространстве, приобретая большие пространственные размеры. Если средние смещения атомов из положений равновесия во всех направлениях одинаковы, электронное облако сохраняет сферическую симметрию, а рассеянная амплитуда будет более круто спадать с ростом $\sin\theta/\lambda$, по сравнению с покоящимся атомом.

Предположим для простоты, что каждый атом колеблется независимо от соседних атомов и изотропно (приближение Дебая). Если атом в положении равновесия имеет координату \mathbf{r}_j , а мгновенное значение смещения этого атома \mathbf{u}_j , тогда мгновенное значение рассеянной амплитуды будет определяться соотношением

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i\omega t} \sum_j f_j \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j + \mathbf{u}_j)} \quad (1.40)$$

Для определения мгновенного значения рассеянной интенсивности необходимо полученное значение амплитуды умножить на величину комплексно-сопряженную

$$\begin{aligned} I &= |\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}^*| = \left(\frac{E_0}{R}\right)^2 \cdot \sum_j \sum_{j'} f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j - \mathbf{u}_j)} \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{j'} - \mathbf{u}_{j'})} = \\ &= \left(\frac{E_0}{R}\right)^2 \cdot \sum_j \sum_{j'} f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})} \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'})} \end{aligned} \quad (1.41)$$

Среднее значение рассеянной интенсивности получится путем усреднения по времени мгновенного значения интенсивности. Фактически от времени зависит только множитель, содержащий мгновенные значения смещений атомов из положения равновесия. Первый экспоненциальный множитель соответствует фазовому множителю для идеальной решетки. Следует иметь в виду, что частоты тепловых колебаний атомов в кристаллической решетке существенно меньше частот колебаний падающей волны, и, следовательно, при каждом акте рассеяния атом можно считать неподвижным. С другой стороны, время наблюдения велико по сравнению с периодом колебаний атомов, поэтому усреднение следует проводить по всем возможным значениям \mathbf{u}_j .

Введем обозначение $(\mathbf{H}, \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'}) = p_{jj'}$, тогда для среднего значения множителя, содержащего смещения атомов, получим

$$\overline{e^{-ip}} = 1 - i\overline{p} - \frac{\overline{p^2}}{2!} + \frac{i\overline{p^3}}{3!} + \dots = 1 - \frac{\overline{p^2}}{2} + \frac{\overline{p^4}}{24} - \dots \approx 1 - \frac{\overline{p^2}}{2} \quad (1.42)$$

Среднее значение членов, содержащих нечетные степени p , равно нулю, так как положительные и отрицательные значения разности смещений равновероятны. Ввиду малости величины смещений с хорошим приближением можно записать

$$\overline{e^{-ip_{jj'}}} \approx 1 - \frac{\overline{p_{jj'}^2}}{2} \approx e^{-\frac{1}{2}\overline{p_{jj'}^2}}. \text{ Вспоминая, что}$$

$$p_{jj'} = (\mathbf{H}, \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'}) = k \cdot \sin\theta \cdot |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'}|_{\mathbf{H}} = \frac{4\pi \cdot \sin\theta}{\lambda} \cdot |\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'}|_{\mathbf{H}}, \quad (1.43)$$

и, что квадрат среднего значения смещений можно представить как

$$\overline{(u_{js} - u_{j's})^2} = \overline{u_{js}^2} + \overline{u_{j's}^2} - 2\overline{u_{js}u_{j's}}, \quad (1.44)$$

а также имея в виду предположение, сделанное выше, что колебания различных узлов решетки независимы друг от друга и обладают одной и той же энергией, т.е. $\overline{u_{js}^2} = \overline{u_{j's}^2} = \overline{u_s^2}$; $\overline{u_{js}u_{j's}} = 0$, для среднего значения рассеянной интенсивности можно записать

$$\begin{aligned} \bar{I} &= \left(\frac{E_0}{R} \right)^2 \cdot \sum_j \sum_{j'} f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})} \cdot e^{-\frac{1}{2} p^2_{jj'}} = \\ &= \left(\frac{E_0}{R} \right)^2 \cdot \sum_j \sum_{j'} f_j f_{j'} \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})} \cdot e^{-\frac{1}{2} \left[\frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} \right]^2 \cdot \overline{u_s^2}} \end{aligned} \quad (1.45)$$

Обозначив выражение, стоящее в показателе степени и содержащее среднее значение квадрата смещений, через $M = 8\pi^2 \cdot \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right)^2 \cdot \overline{u_s^2}$, преобразуем сумму, исключив из нее члены с одинаковыми индексами. Число таких членов равно числу атомов N в решетке. Экспоненциальные множители для этих слагаемых равны 1. Поэтому выражение для усредненной интенсивности можно упростить и оно примет вид

$$\bar{I} = \left(\frac{E_0}{R} \right)^2 \cdot \left[N + e^{-2M} \cdot \sum_{j \neq j'} \sum f_j f_{j'} \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})} \right] \quad (1.46)$$

Если обозначить через I' интенсивность, рассеиваемую решеткой с неподвижными атомами, тогда двойная сумма может быть записана как $I' - \left(\frac{E_0}{R} \right)^2 \cdot N$. Таким образом, окончательное выражение для рассеянной интенсивности примет вид

$$\bar{I} = \left(\frac{E_0}{R} \right)^2 \cdot N (1 - e^{-2M}) + I' \cdot e^{-2M} \quad (1.47)$$

Этот результат был получен Дебаем и Валлером еще в 1935 году при очень простых предположениях о природе колебаний решетки. Анализ полученного выражения показывает, что интенсивность всех интерференционных максимумов в результате колебаний атомов в решетке будет уменьшена в e^{-2M} , при этом форма и положения максимумов сохраняются (последнее слагаемое в (1.47)). Этот множитель получил в литературе название температурного фактора или множителя Дебая-Валлера [1,4-10]. Таким образом влияние

тепловых колебаний решетки на дифракционные спектры рассеяния фактически сводиться к уменьшению рассеивающей способности узлов решетки в e^{-2M} раз.

Первый член в рассматриваемой формуле описывает широкий слабый максимум общего рассеяния в области средних углов. Более строгий учет влияния тепловых колебаний решетки дает для интерференционных максимумов такой же результат. Однако, член, описывающий общее рассеяние, существенно меняется - появляются слабые размытые максимумы в области основных интерференционных максимумов (диффузное рассеяние).

Предположения о независимости колебаний узлов решетки, лежащие в основе проведенного рассуждения, на самом деле справедливы лишь в первом приближении. Атомы в решетке связаны между собой силами связи, и колебания каждого узла будут влиять на колебания соседей. Поэтому выражение для $p_{jj'}^2$ будет сложным образом связано со спектром колебаний решетки. Однако для большего числа задач структурного анализа приведенное приближение оказывается достаточным и весьма полезным для понимания основных механизмов влияния тепловых колебаний на спектры рассеяния.

1.3.4. РАССЕЯНИЕ НА МОЛЕКУЛАХ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА. УРАВНЕНИЕ ДЕБАЯ

Рассмотрим газ, содержащий N одинаковых молекул, каждая из которых состоит из n атомов различного сорта. Если давление газа мало, и взаимодействием между молекулами можно пренебречь, то за конечный промежуток времени все ориентации молекул будут встречаться одинаково часто. Такие системы получили название идеально неупорядоченных. Поэтому, чтобы получить полную интенсивность рассеяния в таком газе, необходимо определить среднее значение интенсивности рассеянной одной молекулой и затем умножить его на число молекул N в объеме.

Согласно проведенным выше рассуждениям мгновенная интенсивность, рассеянная одной молекулой, может быть записана в виде

$$I(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N f_j f_{j'} \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})}, \quad (1.48)$$

причем суммирование проводится по всем атомам молекулы. Для получения среднего значения $I(\mathbf{H})$ по всем возможным ориентациям этой молекулы рассмотрим два атома с индексами j и j' . Введем полярные пространственные координаты r, α, φ , как показано на рис.1.5, причем атом j пусть располагается в начале координат. Тогда вероятность того, что атом с индексом j' , или, что тоже самое, конец вектора \mathbf{r} , попадет на элемент поверхности $d\sigma$, будет

$$\frac{d\sigma}{\sigma} = \frac{r_{jj'} \cdot \sin\alpha \cdot d\alpha \cdot r_{jj'} \cdot d\varphi}{4\pi r_{jj'}^2}, \quad (1.49)$$

Среднее значение интенсивности тогда можно записать

$$\overline{I(\mathbf{H})} = \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N f_j f_{j'} \cdot \int_{\alpha}^{2\pi} \int_{\varphi}^{2\pi} e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})} \cdot \frac{\sin \alpha \cdot d\alpha \cdot d\varphi}{4\pi} \quad (1.50)$$

Выполнив интегрирование по α и φ , получим

$$\overline{I(\mathbf{H})} = \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N f_j f_{j'} \cdot \frac{\sin(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})}{(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{jj'})} \quad (1.51)$$

Это выражение получило название уравнения Дебая по имени автора. Оно описывает распределение интенсивности, рассеянной невзаимодействующими молекулами газа. Полученное уравнение было применено Дебаем для мелкокристаллического порошка, каждая частичка которого является маленьким кристаллом [1,4-13]. Ясно, что проведенные выше рассуждения в этом случае так же останутся в силе.

Рассмотрим несколько примеров. Применим полученное выражение для расчета интенсивности рассеяния в газе, состоящем из одно- двух- трех- и четырех атомных молекул. На рис.1.8 показаны соответствующие распределения интенсивности и формулы, по которым построены графики.

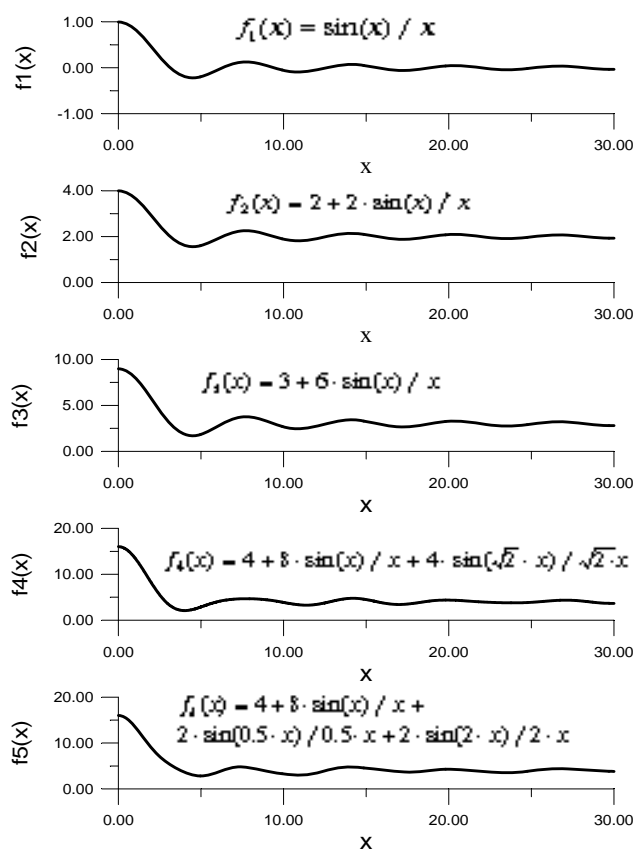


Рис.1.8.Примеры расчета по формуле Дебая усредненной интенсивности рассеяния для случаев разреженных газов. а)- одноатомные молекулы; б)- двухатомные молекулы; в)- трехатомные молекулы (равносторонний треугольник; г)- четырехатомные молекулы (атомы расположены в вершинах квадрата); д)- четырехатомные молекулы (атомы расположены в вершинах ромба)

1.3.5. РАДИАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ

МЕЖАТОМНЫХ РАССТОЯНИЙ

Для количественного описания структуры газов, жидкостей и аморфных систем обычно используется радиальная функция межатомных расстояний. Предположим, что система состоит из N одноатомных молекул j_1, j_2, \dots, j_N и занимает объем V . Выберем в этой системе два элемента объема dV_j и $dV_{j'}$, определяемые векторами \mathbf{r}_j и $\mathbf{r}_{j'}$, как это показано на рис.1.9.

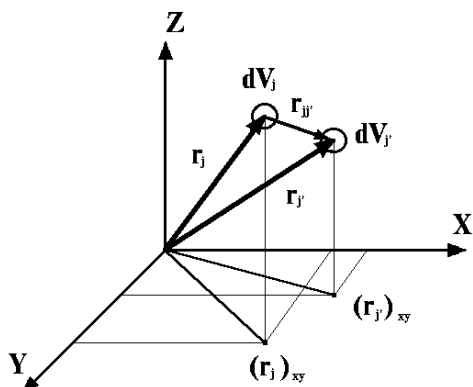


Рис.1.9. Система координат и обозначения, выбранные для описания расположения частиц в пространстве.

Если предположить на первом этапе, что молекулы не взаимодействуют между собой и распределены в объеме V случайно, тогда вероятность события, когда молекула j находится в элементе объема dV_j , а молекула j' в то же самое время находится в элементе объема $dV_{j'}$,

может быть записана в виде $dP(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{j'}) = \frac{dV_j}{V} \cdot \frac{dV_{j'}}{V}$. В реальных системах

частицы взаимодействуют между собой и, следовательно, их взаимное расположение не может быть случайным. В общем случае вероятность того, что частица j находится в точке \mathbf{r}_j зависит от того, какие места в объеме V занимают другие частицы. Эта вероятностная связь между взаимным расположением молекул определяется некоторой корреляционной функцией координат выбранных частиц $W(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{j'}) = W(\mathbf{r}_{j'})$. Тогда выражение для вероятности dP ,

записанное выше, примет вид $dP(\mathbf{r}_{j'}) = W(\mathbf{r}_{j'}) \cdot \frac{dV_j \cdot dV_{j'}}{V^2}$. Если

рассматриваемая среда однородна и изотропна, корреляционная функция зависит только от величины расстояния между частицами, т.е.

$$W(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{j'}) = W(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|) = W(\mathbf{r}) \quad (1.52)$$

В этом случае выражение для вероятности можно несколько конкретизировать, если предположить, что молекула с индексом j находится в начале полярной системы координат. Тогда вероятность обнаружить молекулу j' на расстоянии \mathbf{r} в сферическом слое толщиной $d\mathbf{r}$ будет

$$dP(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r}) \cdot \frac{4\pi r^2 dr}{V} \quad (1.53)$$

Естественно, что вероятность обнаружить частицу с индексом j' в объеме V будет $\int_V dP(\mathbf{r}) = 1$, интегрирование ведется по всему объему V , т.е.

$$\frac{1}{V} \cdot \int_V W(\mathbf{r}) \cdot 4\pi r^2 dr = 1. \quad (1.54)$$

Введем теперь функцию распределения радиальной плотности $\rho(r)$. Предположим, что в сферическом слое толщиной dr находится dN частиц, тогда число частиц в единице объема, т.е. плотность, будет равно $\rho(\mathbf{r}) = \frac{dN}{4\pi r^2 dr}$ или $dN = \rho(\mathbf{r}) \cdot 4\pi r^2 dr$. Если просуммировать эту величину по всему объему V , должно получиться N частиц, т.е. $\int_V dN = \int_r \rho(\mathbf{r}) \cdot 4\pi r^2 dr$. Сопоставление выражений для нормировки корреляционной функции $W(\mathbf{r})$ и радиальной плотности $\rho(\mathbf{r})$ позволяет установить связь между ними $W(\mathbf{r}) = \frac{V}{N} \cdot \rho(\mathbf{r})$. Это означает, что корреляционная функция представляет собой относительную вероятность обнаружить молекулу на расстоянии r от начала координат.

Представляет интерес выяснить, какой вид имеют функции $W(r)$ для простейших случаев. Предположим, что рассматриваемая система состоит из не взаимодействующих частиц, имеющих нулевой объем. Это означает, что функция $W(r) = 1$ для любых значений расстояния r (см. рис.1.10а). Если система состоит из сферических несжимаемых частиц с радиусом r , причем взаимодействие между ними по-прежнему отсутствует, частицы не могут приблизиться к началу координат ближе, чем на расстояние $2r$ и, следовательно, функция $W(r)$, будет, как и в предыдущем случае, равна единице, кроме интервала $0 \div 2r$ (см. рис.1.10б). При условии сжимаемости частиц граница в области $2r$ размоется, как показано на рис.1.10в.

При учете взаимодействия между частицами системы какие-то расстояния от начала координат будут более вероятны, а какие-то менее вероятны, и функция $W(r)$ будет осциллировать вблизи единицы, довольно быстро затухая с увеличением расстояния. Эти флуктуации отражают характер упорядоченности на близких расстояниях от атома, выбранного в качестве начала координат (ближний порядок), который имеется в расположении атомов в веществе. Такое поведение радиальной функции межатомных расстояний $W(r)$ демонстрируется на рис.1.10г. Для кристаллического состояния, когда атомы располагаются в строго определенных позициях кристаллической решетки, функция межатомных расстояний будет иметь явно выраженный дискретный характер (см. рис.1.10д), причем тепловые колебания решетки будут приводить к гауссовому размытию этих пиков.

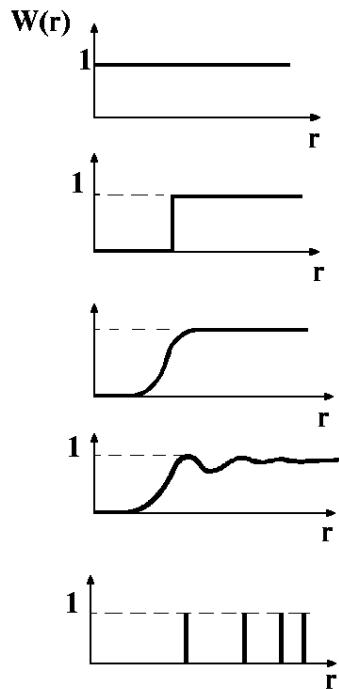


Рис.1.10.Схематический вид радиальной функции $W(r)$ для разреженных газов -а), -б) -в); для жидкостей -г); для кристаллов -д).

1.3.6. РАССЕЙЯНИЕ СИСТЕМОЙ С НЕПРЕРЫВНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МЕЖАТОМНЫХ РАССТОЯНИЙ

Рассмотрим систему из N частиц j_1, j_2, \dots, j_N с радиальной функцией распределения $W(\mathbf{r}_{j\bar{j}})$. Причем для упрощения выкладок будем полагать, что все частицы в этой системе одного сорта. Мгновенное значение рассеянной интенсивности для такой системы, как было показано выше, можно записать

$$I(\mathbf{H}) = f^2 \cdot \left(N + \sum_{j \neq j'} \sum e^{i(\mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_{j\bar{j}'})} \right) \quad (1.55)$$

Усредненное значение интенсивности по всем возможным расстояниям $\mathbf{r}_{j\bar{j}}$ будет определяться выражением

$$\overline{I(\mathbf{H})} = \int \int_{V_j V_{j'}} W(\mathbf{r}_{j\bar{j}}) \cdot I(\mathbf{H}) \cdot \frac{dV_j dV_{j'}}{V^2} \quad (1.56)$$

После подстановки мгновенного значения интенсивности в эту формулу, учета того факта, что в результате усреднения суммирование можно заменить умножением среднего значения на количество слагаемых $N(N-1) \approx N^2$ и замены $W(\mathbf{r}_{j\bar{j}}) = [W(\mathbf{r}_{j\bar{j}}) - 1] + 1$, получим в результате выражение, состоящее из трех слагаемых

$$\overline{I(\mathbf{H})} = f^2 \cdot \left[N + N^2 \int_{V_j} \int_{V_{j'}} e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{j\bar{j}'})} \cdot (W(\mathbf{r}_{j\bar{j}'}) - 1) \cdot \frac{dV_j dV_{j'}}{V^2} + N^2 \cdot \int_{V_j} \int_{V_{j'}} e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{j\bar{j}'})} \cdot \frac{dV_j dV_{j'}}{V^2} \right] \quad (1.57)$$

Обозначим через X_1 значение интеграла во втором слагаемом, а через X_2 значение интеграла в третьем слагаемом, тогда среднее значение рассеянной интенсивности будет

$$\overline{I(\mathbf{H})} = f^2 \cdot (N + N^2 X_1 + N^2 X_2) \quad (1.58)$$

Это уравнение есть не что иное, как более общая форма уравнения Дебая, частный случай которого рассмотрен выше [1-10]. Так как функция радиального распределения $W(\mathbf{r}_{j\bar{j}'})$ сферически симметрична, можно положить, что рассеивающий центр с индексом j располагается в начале координат и в центре сферы радиуса L , так что $V = L^3$, а суммарный объем всех рассеивающих центров R_0 . Тогда первый интеграл X_1 можно упростить, вводя сферические координаты r, α, φ и проводя интегрирование по $dV_{j'}$,

$$X_1 = \int_{V_{j'}} \frac{dV_{j'}}{V} \cdot \int_{V_j} (W(\mathbf{r}) - 1) \cdot \frac{dV_j}{V} = \frac{1}{V} \cdot \int_0^{R_0} 4\pi r^2 (W(\mathbf{r}) - 1) \cdot \frac{\sin(\mathbf{H}, \mathbf{r})}{(\mathbf{H}, \mathbf{r})} dr \quad (1.59)$$

Интегрирование во втором слагаемом при этих же предположениях можно провести по частям, подинтегральное выражение распадается на два независимых множителя

$$X_2 = \int_{V_j} \int_{V_{j'}} e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_{j\bar{j}'})} \cdot \frac{dV_j dV_{j'}}{V^2} = \frac{4\pi L^3}{3V} \left\{ \frac{3[\sin(\mathbf{H}L) - \mathbf{H}L \cos(\mathbf{H}L)]}{(\mathbf{H}L)} \right\}^2 = \frac{4\pi L^3}{3V} \cdot \Phi(\mathbf{H}L) \quad (1.60)$$

$$\text{где } \Phi(\mathbf{H}L) = \left\{ \frac{3[\sin(\mathbf{H}L) - (\mathbf{H}L)\cos(\mathbf{H}L)]}{(\mathbf{H}L)^3} \right\}^2 \quad (1.61)$$

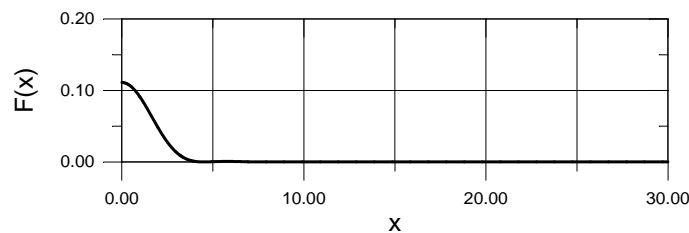


Рис.1.11. Характер зависимости $\Phi(\mathbf{H}L)$, определяющей общий вид третьего слагаемого в формуле усредненной интенсивности в зависимости от угла дифракции.

Первый член суммы в уравнении Дебая для усредненной интенсивности Nf^2 - это так называемый лауэвский фон, т.е. та часть когерентной интенсивности, которую дало бы рассеяние на полностью беспорядочном скоплении частиц. Второй член $N^2 X_1$ содержит радиальную функцию распределения и, следовательно, описывает межмолекулярную дифракцию на этой системе частиц.

Третий член $N^2 X_2$ очень быстро убывает с ростом \mathbf{H} и описывает малоугловое рассеяние, характеризующее форму рассеивающих частиц. На рис.1.11 показан общий характер этой зависимости. Видно, что функция $\Phi(\mathbf{H}\mathbf{L})$ убывает гораздо быстрее, чем множитель $\sin(x)/x$, непосредственно входящий во второе слагаемое формулы Дебая.

1.4. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

1.4.1. ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ В СОВЕРШЕННОМ КРИСТАЛЛЕ

В общем случае, когда взаимодействием падающей и рассеянных волн пренебречь нельзя, то есть когда скорость распространения поля в среде отличается от скорости в вакууме, распространение электромагнитной волны в среде должно в общем случае описываться системой уравнений Максвелла [1,2,4,5,11]

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} & \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi\mathbf{J} \right) & \operatorname{div} \mathbf{H} = 0 \end{cases} \quad (1.62)$$

Константы среды здесь учитываются через вектор поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r},t)$, который связан с вектором электрической индукции $\mathbf{D}(\mathbf{r},t)$ соотношением $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$; c - фазовая скорость поля; диэлектрическая проницаемость ε связана с поляризуемостью среды, коэффициентом преломления и скоростью поля - $\varepsilon = \frac{1}{c^2} = 1 + \chi = n^2$; n - коэффициент преломления; $\chi(\mathbf{r}) = -\frac{R\lambda^2}{\pi} \rho(\mathbf{r})$ - поляризуемость среды, $R = \frac{e^2}{mc^2}$ - радиус электрона, $\rho(\mathbf{r})$ - распределение электронной плотности в веществе.

Для того что бы получить более привычный вид уравнений для волнового поля в среде, уравнения Максвелла необходимо несколько преобразовать. Для этого подставим значение вектора \mathbf{E} , выраженное через вектор электрической индукции, в первое уравнение Максвелла, тогда оно примет вид

$$\operatorname{rot}(\mathbf{D} - 4\pi\mathbf{P}) = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (1.63)$$

Воспользовавшись соответствующими теоремами векторного анализа, можно записать

$$\operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{D}) = \nabla(\operatorname{div} \mathbf{D}) - \Delta \mathbf{D} \quad (1.64)$$

Учитывая отсутствие свободных зарядов в среде т.е. $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ получим

$$\Delta \mathbf{D} - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial(\operatorname{rot} \mathbf{H})}{\partial t} = -4\pi \cdot \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{P}) \quad (1.65)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + 4\pi \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.66)$$

$$\Delta \mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} + 4\pi \cdot \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{P}) = 0 \quad (1.67)$$

Так как ε мало отличается от единицы, можно написать $\chi = \varepsilon - 1 \approx 1 - \frac{1}{\varepsilon}$, тогда из $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ следует, что $4\pi\mathbf{P} \approx \chi\mathbf{D}$ и, следовательно, в окончательном виде уравнение (1.67), описывающее волновое поле в среде с поляризуемостью $\chi(\mathbf{r})$, примет вид неоднородного волнового уравнения

$$\Delta\mathbf{D} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2\mathbf{D}}{\partial t^2} + \text{rot}(\text{rot}\chi\mathbf{D}) = 0 \quad (1.68)$$

Волновое уравнение $\Delta\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0$ является частным случаем только что написанного уравнения (1.68) и описывает свободные колебания электромагнитного поля в среде с поляризуемостью среды $\chi(\mathbf{r})$. Здесь Δ - оператор Лапласа.

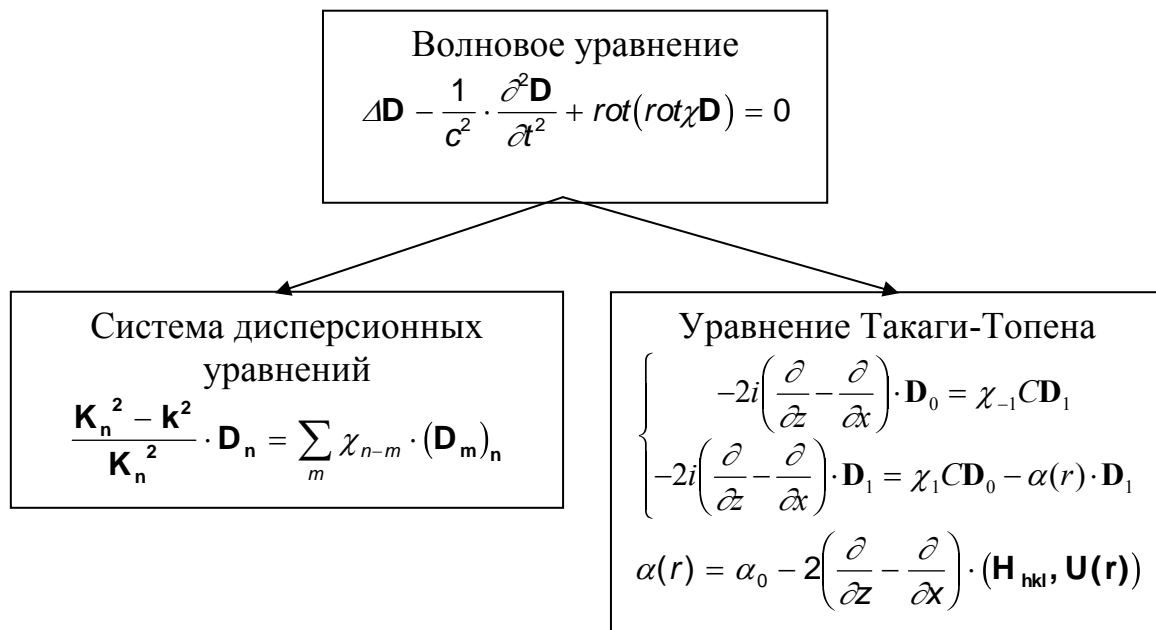
После несложных преобразований и учитывая известные векторные равенства для плоской волны типа $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A} \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{k}, \mathbf{r})]}$

$$\Delta\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = -|\mathbf{K}|^2 \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}, t); \quad \frac{\partial^2\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -\omega^2 \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}, t), \quad (1.69)$$

написанное выше уравнение можно записать в более удобном для дальнейших рассуждений виде

$$\text{rot}(\text{rot}\chi\mathbf{D}) - 2|\mathbf{K}|^2 \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (1.70)$$

Известно два подхода при решении полученного уравнения. Первый - состоит в непосредственном решении уравнения (1.69 или 1.70) и был впервые проведен Эвальдом и Лауэ. Этот путь очень нагляден и позволяет легко понять физическую картину явлений. Второй - сводится к преобразованию уравнения (1.70) в систему дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных. Такой подход был впервые реализован С.Такаги [27,28] и затем Д.Тапенем [32,33]. Система уравнений полученная С.Такаги легко может быть обобщена на случай деформированного кристалла. Вначале мы рассмотрим как эта задача была представлена М.Лауэ.



Волновое уравнение (1.70) имеет бесчисленное множество частных решений $\mathbf{D}_1(\mathbf{r}, t), \mathbf{D}_2(\mathbf{r}, t), \dots, \mathbf{D}_n(\mathbf{r}, t)$, например в виде плоских волн $\mathbf{D}_j(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})}$. Здесь вектор \mathbf{k} перпендикулярен фронту волны, а его величина $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ определяет волновой вектор в вакууме. В случае распространения волны в среде необходимо учесть отличие коэффициента преломления от единицы. Тогда уравнение волны следует записать $\mathbf{D}_j(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot e^{i(\omega t - \mathbf{K}\mathbf{r})}$, где $|\mathbf{K}| = \sqrt{1 + \chi} \cdot \frac{\omega}{c}$, или $|\mathbf{K}| = n \cdot |\mathbf{k}|$. Общее решение представляется суперпозицией частных решений и может быть записано в виде

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_j A_j \mathbf{D}_j(\mathbf{r}, t) \quad (1.71)$$

Амплитуды волн A_j не зависят от времени, но могут меняться в пространстве, т.е. зависеть от координат. Дело в том, что электроны колеблются под действием распространяющейся волны, и испускаемые ими электромагнитные волны интерферируют между собой и с исходной волной. Устанавливается некоторое стационарное поле, характер которого будет определяться функцией распределения электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ в кристаллической решетке. Поэтому, если мы имеем дело с кристаллической решеткой, распределение электронной плотности можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \cdot \sum_{hkl} F(hkl) \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})} \quad (1.72)$$

Подставляя это выражение в соотношение для поляризуемости среды, получаем

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{R\chi^2}{\pi V} \cdot \sum_{hkl} F(hkl) \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})} = \sum_{hkl} \left\{ -\frac{R\chi^2}{\pi V} \cdot F(hkl) \right\} \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})} \quad (1.73)$$

Выражение в фигурных скобках есть не что иное, как Фурье компонента разложения поляризуемости среды по векторам обратной решетки, и, следовательно, предыдущее выражение можно записать в виде

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \chi_{hkl} \cdot e^{-i(\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{r})}, \quad (1.74)$$

где $\chi_{hkl} = -\frac{R\chi^2}{\pi V} \cdot F(hkl)$. Полученное выражение для коэффициентов поляризуемости показывает, что $\chi_{hkl} = \chi_{\mathbf{H}}$ может иметь действительную и мнимую части, т.е. $\chi_{\mathbf{H}} = \chi_{\mathbf{H}r} + i\chi_{\mathbf{H}i}$, что соответствует учету поглощения в среде, причем в общем случае для структур, не имеющих центра симметрии, $\chi_{\mathbf{H}} \neq \chi_{\mathbf{H}^-}$. Численное значение действительной части χ составляет величину порядка 10^{-6} .

Как уже отмечалось выше, решение волнового уравнения можно представить в виде волны, $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}, \mathbf{r})]}$, где амплитуда $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ должна иметь периодичность кристаллической решетки и может быть записана в виде ряда Фурье по векторам обратной решетки

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{-i(\mathbf{H}, \mathbf{r})} \quad (1.75)$$

Индекс суммирования m определяет здесь узел в обратной решетке с индексами hkl . Тогда решение волнового уравнения может быть записано в виде пакета плоских волн, или, блоховской волны, с амплитудой, имеющей периодичность решетки.

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}, \mathbf{r})]} = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_m, \mathbf{r})]} = e^{i\omega t} \cdot \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i(\mathbf{K}_m, \mathbf{r})}, \quad (1.76)$$

где $\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$.

Не сложные, но достаточно громоздкие преобразования, приводят в конечном счете к уравнению связывающему волновые вектора распространяющихся в кристалле волн с их амплитудами (см. приложение 4).

$$\frac{\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_n^2} \cdot \mathbf{D}_n = \sum_m \chi_{n-m} \cdot (\mathbf{D}_m)_n \quad (1.83)$$

Здесь $(\mathbf{D}_m)_n$ - проекция вектора \mathbf{D}_m на направление, перпендикулярное вектору

\mathbf{K}_n , а $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$ - значение волнового вектора в вакууме. Полученные уравнения

(1.83) носят название фундаментальных уравнений динамической теории [1,4,5,11]. Они представляют собой систему линейных уравнений, число которых равно числу волн с индукцией \mathbf{D}_n и связывают между собой значения волновых векторов и амплитуд волн самосогласованного волнового поля в кристаллической решетке, возбужденного внешней падающей волной, или, другими словами, полученная система уравнений связывает значения волновых векторов и энергий соответствующих мод. Поэтому эта система уравнений представляет собой дисперсионные уравнения для самосогласованного поля в кристаллической решетке.

Очень полезна геометрическая интерпретация приведенной выше системы уравнений. Согласно представлений Эвальда дисперсионные уравнения описывают m -листную поверхность в обратном пространстве в окрестности точки Лауэ (точных условий дифракции). Если из любой точки M (см. рис.1.12) этой поверхности провести прямые линии в точки обратного пространства с индексами $0, 1, \dots, m$, полученные отрезки будут волновыми векторами $\mathbf{K}_0, \mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m$ волн самосогласованного волнового поля распространяющегося в кристалле. Таким образом поверхность, описываемая дисперсионными уравнениями, является геометрическим местом точек распространения для m -волновой дифракционной задачи.

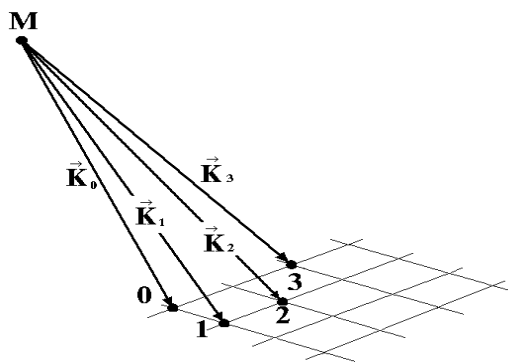


Рис.1.12. Геометрическая интерпретация связи волновых векторов с дисперсионной поверхностью. Точка M принадлежит m -листной поверхности, называемой дисперсионной поверхностью. Узлы $0, 1, 2, 3$ соответствуют узлам обратной решетки с индексами $h_0 k_0 l_0, h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2, h_3 k_3 l_3$, участвующими в дифракции.

1.4.2. ДВУХВОЛНОВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В СОВЕРШЕННОМ КРИСТАЛЛЕ

Система уравнений (1.83) в общем случае должна состоять из бесконечного числа уравнений, однако даже беглый анализ системы показывает, что величины D_m резко уменьшаются с ростом разности $K_n^2 - k^2$. Действительно, правая часть системы не может сильно изменяться при переходе от одного уравнения этой системы к другому, т.е. D_m велико, если $K_n^2 - k^2$ мало. Это означает, что значениями D_m для всех членов с большим $K_n^2 - k^2$ можно пренебречь, ввиду их малости. Тогда число уравнений в системе (1.83) можно ограничить.

Наибольший практический интерес представляет тот случай, когда ориентация кристалла близка к одному из брегговских положений, например, к положению с волновым вектором (вектором отражения) K_l , т.е. когда только два узла обратной решетки с индексами 0 и l (индексы Миллера которых (000) и (hkl) соответственно) лежат вблизи сферы Эвальда. Такой случай показан на рис.1.13 и получил название двухволнового приближения [1,4,5,11].

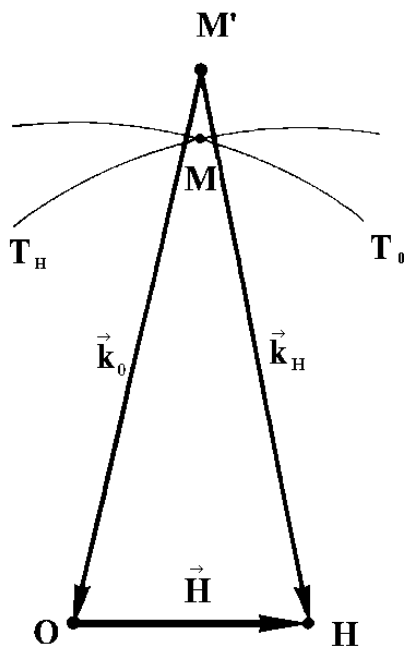


Рис.1.13. Геометрия расположения волновых векторов для случая двух сильных волн. Точка M' соответствует случаю, когда коэффициент преломления равен единице, т.е. рассеяние происходит в вакууме и носит название точки Лоренца. Точка M соответствует центру распространения с учетом преломления, но для чисто кинематического случая, когда взаимодействием волн можно пренебречь. T_H и T_0 - следы от пересечения сфер радиуса k и k , проведенных из узлов решетки O и H . Точка их пересечения называется точкой Лауэ.

В этом случае в решении волнового уравнения остается только два члена

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0 \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_0, \mathbf{r})]} + \mathbf{D}_1 \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_1, \mathbf{r})]} \quad (1.84)$$

Тогда система уравнений (1.83) будет состоять из двух уравнений

$$\begin{cases} \frac{K_0^2 - k^2}{K_0^2} \cdot \mathbf{D}_0 = \chi_0 \mathbf{D}_0 + C \chi_{-1} \mathbf{D}_1 \\ \frac{K_1^2 - k^2}{K_1^2} \cdot \mathbf{D}_1 = \chi_1 \mathbf{D}_0 + C \chi_0 \mathbf{D}_1 \end{cases} \quad (1.85)$$

После несложных преобразований написанная выше система может быть записана в матричной форме

$$\begin{vmatrix} \frac{\mathbf{K}_0^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_0^2} - \chi_0 & -\chi_{-1}C \\ -\chi_1 C & \frac{\mathbf{K}_1^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_1^2} - \chi_0 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{D}_0 \\ \mathbf{D}_1 \end{vmatrix} = 0 \quad (1.86)$$

Эта линейная система уравнений будет иметь нетривиальные решения, если детерминант системы тождественно равен нулю, т.е. когда

$$\left(\frac{\mathbf{K}_0^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_0^2} - \chi_0 \right) \cdot \left(\frac{\mathbf{K}_1^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_1^2} - \chi_0 \right) = C\chi_{-1}\chi_1 \quad (1.87)$$

Здесь поляризационный множитель $C=1$ для компонент волнового поля, поляризованных перпендикулярно к плоскости рассеяния (σ -поляризация), и $C=\cos 2\theta$ для компонент, поляризованных в этой плоскости (π -поляризация), $\theta = \frac{1}{2} \mathbf{K}_0 \wedge \mathbf{K}_1$ - брегговский угол.

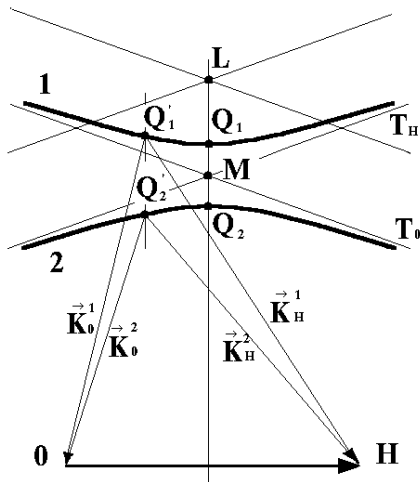


Рис.1.14. Сечение (1,2) дисперсионной поверхности плоскостью рассеяния для двухволнового случая. Кривые 1 и 2 соответствуют двум листам дисперсионной поверхности. Q_1 и Q_2 - связанные точки возбуждения, соответствующие двум типам блоховских волн. T_0 и T_1 - асимптотические поверхности, к которым приближаются ветви дисперсионной поверхности вдали от точного условия брегговского отражения.

Это уравнение описывает двулистную поверхность вращения типа гиперболического цилиндра с осью вращения, совпадающей с вектором обратной решетки \mathbf{H}_1 (называемым вектором дифракции или вектором отражения) и асимптотами T_0, T_1 , и носит название дисперсионного уравнения (см. рис.1.14). Дисперсионные уравнения позволяют в каждом конкретном случае определить амплитуды всех волн участвующих в рассеянии и, следовательно, определить интенсивности всех дифракционных пиков.

Не вдаваясь в детали вывода можно получить выражения связывающие коэффициенты отражения $R(\theta)$ и прохождения $T(\theta)$ с величиной дифракционного угла и таким образом построить профили дифракционных линий, однако в общем случае выражения эти достаточно громоздки. Для симметричного лауэвского случая дифракции рентгеновских лучей на плоскопараллельной пластинке при отсутствии поглощения эти соотношения вид

$$T(y) = \frac{I}{I+y^2} \cdot \left[y^2 + \cos^2(A\sqrt{I+y^2}) \right]$$

$$R(y) = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \cdot \frac{\sin^2(A\sqrt{I+y^2})}{I+y^2}, \quad (1.88)$$

где $A = \frac{\pi t}{\lambda}$, $y = \frac{\sin 2\theta_B}{C|\chi_{rh}|} \cdot \Delta\theta$, $\Lambda = \frac{\lambda \cdot \cos \theta_B}{C|\chi_{rh}|}$. Из этих соотношений легко видеть, что, как проходящая, так и отраженная волны зависят не только от величины угла $\Delta\theta$, но и от толщины кристалла t . На рис.1.15 показаны коэффициенты прохождения $T(A,y)$ и отражения $R(A,y)$ вблизи максимума для случая прозрачной плоскопараллельной кристаллической пластики. Эти зависимости имеют осциллирующий характер и быстро убывают с увеличением отклонения от точного брегговского положения за счет множителя $(I+y^2)^{-1}$.

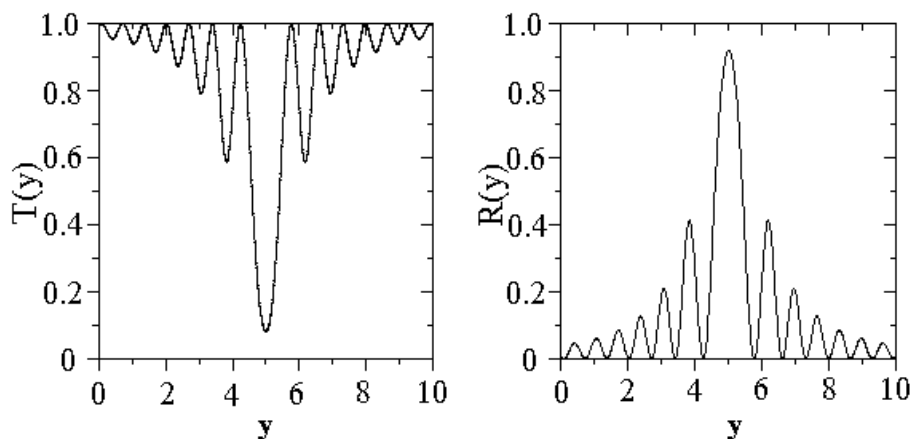


Рис.1.15. Характер изменений коэффициентов прохождения $T(A,y)$ и отражения $R(A,y)$ в окрестности брегговского максимума.

Чтобы проследить изменение коэффициентов $T(A,y)$ и $R(A,y)$ с толщиной кристалла необходимо проинтегрировать выражения (1.88) по параметру y определяемому величиной отклонения от брегговского положения. На рис.1.16 показана зависимость интегрального коэффициента отражения от толщины кристалла. Из рисунка видно, что интенсивность дифрагированного пучка осциллирует с увеличением толщины кристалла. Аналогичным образом ведет себя и проходящая волна. Этот эффект впервые был обнаружен теоретически Эвальдом и получил название маятникового эффекта. Такое поведение интенсивности дифрагированной и отраженной волн связано с взаимной перекачкой энергии между этими волнами и совершенно аналогично перекачки энергии между двумя связанными маятниками. Отсюда становится понятно название эффекта.

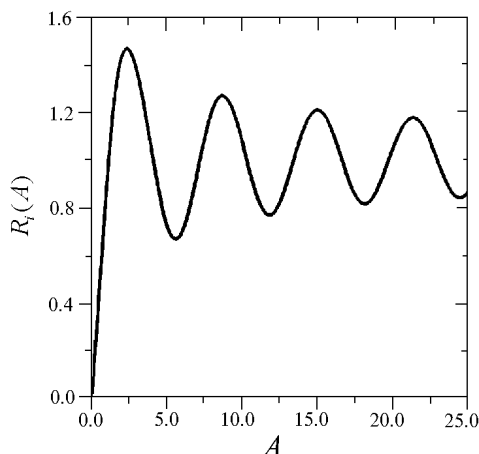


Рис.1.16. Осциллирующий характер зависимости $R_i(A)$ интегрального коэффициента отражения от толщины кристалла.

1.4.3. ВАЖНЕЙШИЕ СЛЕДСТВИЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Поскольку дисперсионная поверхность по существу представляет собой изоэнергетическую поверхность в пространстве обратной решетки, анализ ее формы аналогичен анализу формы Ферми-поверхности вблизи границы зоны Бриллюэна [1,5,11,22,23].

В рассматриваемом двухволновом случае легко показать, что в плоскости рассеяния вблизи точки M (пересечения двух сфер распространения с плоскостью рассеяния) уравнения описывают гиперболу с асимптотами T_0 и T_1 , являющимися следами сфер распространения. Вблизи этой точки сферы мало отличаются от плоскостей, а их следы в плоскости рассеяния мало отличаются от прямых линий. Радиус сфер равен $k\sqrt{1+\chi_0}$, что соответствует распространению волн в однородной среде ($k \approx 10^8 \tilde{n}i^{-1}$) с показателем преломления $\sqrt{1+\chi} \approx 1 + \frac{\chi_0}{2}$. Так как $\chi_0 < 0, |\chi| \approx 10^{-6}$, кристалл для рентгеновских волн является менее плотной средой, чем вакуум. Показатель преломления для рентгеновских лучей всегда меньше единицы в отличие, например от оптики видимого света. Дело в том, что частоты электромагнитных колебаний для рентгеновского диапазона значительно больше частот собственных колебаний электронов в атомах и следовательно в формуле (без учета затухания) $n^2 - 1 = \frac{4\pi Ne^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}$ собственной частотой ω_0 можно

пренебречь и тогда соотношение дисперсии примет вид $n^2 = 1 - \frac{4\pi Ne^2}{m\omega^2}$. Так как

ω^2 - велико, отличие коэффициента преломления для рентгеновских лучей от единицы очень незначительно. Как показывают оценки это различие составляет величину порядка 10^{-6} . Эти рассуждения впервые были проведены одновременно Г.А.Лорентцом и Л.Лоренцом в 1880 году. Формула для коэффициента преломления приведенная выше носит имя формулы Лоренц-Лорентца.

На языке теории зон Бриллюэна каждой точке дисперсионной поверхности соответствует квазичастица, или, другими словами, блоховская

волна с заданным квазиимпульсом, распространяющимся вдоль нормали к дисперсионной поверхности. На границе зоны Бриллюэна благодаря сильному береговскому отражению дисперсионная поверхность расщепляется. Именно этот участок дисперсионной поверхности, похожий на гиперболический цилиндр, представляет интерес для анализа волновых полей в кристалле, находящемся вблизи береговского положения. Как и всякая изоэнергетическая поверхность в пространстве обратной решетки, дисперсионная поверхность перпендикулярна границе зоны Бриллюэна.

Двум листам дисперсионной поверхности соответствуют два типа блоховских волн (квазичастиц), различающихся знаком эффективной массы и величиной фазовой скорости. Разница в скоростях блоховских волн определяется величиной расщепления дисперсионной поверхности. Для точного береговского положения расщепление минимально и соответственно равно расстоянию между вершинами гипербол

$$\Delta k_{min} = |\mathbf{K} - \mathbf{K}'| \approx kC \sqrt{\chi_{-1}\chi_1} \cdot \sec\theta \quad (1.89)$$

Если $k \approx 10^8 \tilde{n}i^{-1}$, а $|\chi| \approx 10^{-5}$, величина расщепления оказывается порядка $\Delta k_{min} \approx 10^3 \tilde{n}i^{-1}$.

Распространение в кристалле двух типов блоховских волн с близкими волновыми векторами приводит к возникновению в суммарном волновом поле пространственных по глубине биений (аналогично биениям в системе двух связанных маятников) - на расстоянии $L = \frac{2\pi}{|\Delta\mathbf{K}|}$ в направлении нормали к

выходной поверхности происходит перекачка энергии из проходящей волны в дифрагированную и обратно. Это явление получило название "маятникового эффекта"; период L в динамической теории называется экстинкционной длиной и определяется величиной

$$L = \frac{2\pi}{|\Delta\mathbf{K}|} = \frac{\lambda \cdot \cos\theta}{c\sqrt{\chi_H\chi_H^-}} \quad (1.90)$$

Это явление было предсказано еще Эвальдом в 1917 году, но экспериментально было обнаружено только в 1959 году Като и Лангом в виде полос равной толщины на клиновидных кристаллах [1,4,5,19].

Блоховские волны, принадлежащие разным листам дисперсионной поверхности, имеют существенно различные коэффициенты поглощения. Физическая причина этого различия состоит в том, что пучности волн *1-ого типа* точно попадают на узлы кристаллической решетки, в то время как пучности волн *2-ого типа* скользят между узлами решетки. Величина коэффициентов поглощения определяется соотношением

$$\mu_{1,2} = \frac{\mu_0}{\cos\theta} \cdot \left(1 \pm C \cdot \frac{\chi_H''}{\chi_0''} \right) \quad (1.91)$$

Здесь $\mu_0 = |\mathbf{K}| \cdot \chi_0'' = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \chi_0''$ - фотоэлектрический коэффициент поглощения;

χ_0'', χ_H'' - мнимая часть Фурье компонент поляризуемости. Два знака относятся к волнам *1-ого* и *2-ого типа*. Это различие в поглощении лежит в основе явления аномального прохождения рентгеновских лучей, открытого Борманом в 1941 году ("эффект Бормана") [1,4,5].

Если на идеальный кристалл, находящийся в точном брегговском положении, падает плоская монохроматическая волна, как уже говорилось выше, внутри кристалла возбуждается волновое поле, являющееся суперпозицией двух блоховских волн. Это соответствует возбуждению двух связанных точек на дисперсионной поверхности. В симметричном лауэвском случае этими точками будут вершины гипербол. Отклонение кристалла от точного брегговского положения будет приводить к смещению точек возбуждения вдоль ветвей дисперсионной поверхности и соответствующим поворотам волновых векторов блоховских волн двух типов (см. рис.1.17).

Следует подчеркнуть, что незначительным по величине поворотам кристалла внутри области динамического отражения (на углы порядка единиц угловых секунд) соответствуют повороты вектора фазовой скорости блоховских волн на угол порядка 2θ внутри треугольника Бормана, т.е. при дифракции имеет место еще один чрезвычайно важный "эффект углового усиления" с коэффициентом порядка $10^4 \div 10^5$.

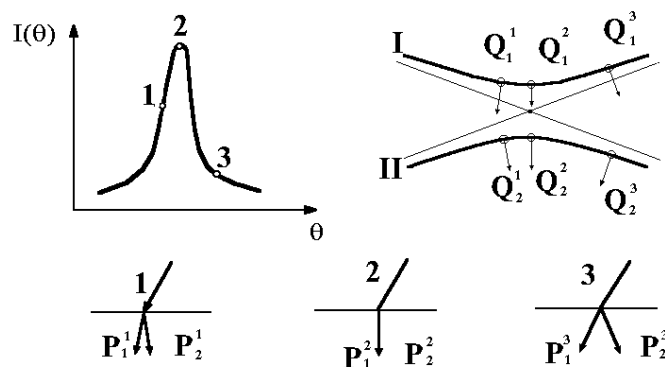


Рис.1.17.Схема, иллюстрирующая динамический эффект углового усиления. а)-кривая отражения, выделены рабочие точки 1,2,3 б)-дисперсионная поверхность, на которой показаны соответствующие точки возбуждения Q_1, Q_2, Q_3 ; в)-участки кристалла и соответствующие направления групповых скоростей блоховских волн, для точек 1,2,3.

1.4.4. ВОЛНОВОЕ ПОЛЕ В КРИСТАЛЛАХ С ИСКАЖЕНИЯМИ. УРАВНЕНИЯ ТАКАГИ - ТОПЕНА

Проведенный выше анализ уравнения (1.70) достаточно трудно обобщить на случай деформированного кристалла. Однако, как отмечалось выше в 1.4.1., С.Такаги [27,28] предложил способ преобразования уравнения (1.70) в систему дифференциальных уравнений первого порядка.

Характеристики среды в волновом уравнении можно учесть через функцию поляризуемости $\chi(\mathbf{r})$. Будем описывать искажения кристалла в виде некоторого поля смещения $\mathbf{U}(\mathbf{r})$, связанного с каким-либо дефектом, причем будем полагать, что искажения достаточно медленно меняются в пространстве, т.е. на расстояниях порядка экстинкционной длины, тогда вместо координаты \mathbf{r} необходимо записать $\mathbf{r}-\mathbf{U}(\mathbf{r})$, т.е.

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \chi_{hkl} \cdot e^{i(\mathbf{H}_{hkl} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{U}(\mathbf{r})))} = \sum_{hkl} \chi_{hkl} \cdot e^{i(\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{r})} \cdot e^{i(\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}))} \quad (1.92)$$

Первые два множителя, стоящие под знаком суммы, точно такие же, как и для идеального кристалла. Последний экспоненциальный множитель связан с полем смещений в искаженной решетке. Учитывая сказанное, решение уравнения для волнового поля в таком кристалле следует искать в виде [18-23]

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \sum_{hkl} \mathbf{D}_{hkl} \cdot e^{i\{(\mathbf{K}_{hkl} \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{r})\}} \quad (1.93)$$

Если искажения достаточно слабо меняются на расстоянии экстинкционной длины т.е. $\left| \frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right| \ll 1$, то после несложных, но достаточно громоздких преобразований уравнение (1.70) для случая двухволнового рассеяния, когда на сферу Эвальда попадает только два узла обратной решетки, примет вид

$$\begin{cases} -2i \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{D}_0 = \chi_{-1} \mathbf{C} \mathbf{D}_1 \\ -2i \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \mathbf{D}_1 = \chi_1 \mathbf{C} \mathbf{D}_0 - \alpha(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{D}_1 \end{cases}, \quad (1.94)$$

где $\alpha(\mathbf{r}) = \alpha_0 - 2 \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot (\mathbf{H}_{hkl}, \mathbf{U}(\mathbf{r}))$ - функция, описывающая локальные разориентации решетки, связанные с полем $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ дефекта. Полученную систему уравнений можно переписать в матричной форме

$$\begin{vmatrix} 2i \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) & \chi_{-1} \\ \chi_1 & 2i \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) - \alpha(\mathbf{r}) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{D}_0 \\ \mathbf{D}_1 \end{vmatrix} = 0, \quad (1.95)$$

или в форме телеграфного уравнения вида

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + j \frac{\alpha(\mathbf{r})}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\chi^2}{4} \right] \cdot \mathbf{D}_j = 0 \quad (1.96)$$

Эта система впервые была получена в 1969 году С.Такаги [27,28] и носит его имя. Для случая дифракции электронов проведенные выше рассуждения и выводы остаются в основном в силе с той лишь разницей, что исходными уравнениями будут не уравнения Максвелла, а уравнение Шредингера и в решении будут фигурировать волновые функции электронов. Существенным отличием для электронов будет очень малая величина дифракционного угла ($\theta \approx 10^{-2} \text{ рад}$), что приводит к возможности использования так называемого "колонкового приближения". Малость дифракционного угла позволяет пренебречь зависимостью волновых функций в задачах дифракции от координаты x (в установке принятой на стр.43). В этом приближении для решения задач о дифракции электронов в кристаллах содержащих дефекты могут быть выведены уравнения аналогичные уравнениям (1.94). Они имеют следующий вид

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} \Psi_0(z) \\ \Psi_1(z) \end{pmatrix} = \frac{i\pi}{\xi_g} \cdot \begin{pmatrix} -w & 1 \\ 1 & w \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_0(z) \\ \Psi_1(z) \end{pmatrix} \quad (1.97)$$

Параметр $w(\mathbf{r})$ описывает локальные разориентации кристаллической решетки связанные с дефектом и определяется выражением

$$w(\mathbf{r}) = \frac{\xi_g \mathbf{K}}{2\pi} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (1.98)$$

ξ_g - комплексная длина экстинкции $\frac{\pi}{\xi_g} = \frac{\pi}{\Lambda} + i\mu$. Эти уравнения аналогичны

уравнениям (1.94) для рентгеновского волнового поля и носят название уравнений Хови-Уэлана [16,31].

Уравнения Такаги (Хови-Уэлана) являются основой для расчетов изображения дефектов любого вида. Для большинства случаев дефектов кристаллической решетки решение этих уравнений может быть проведено лишь численно. Например, для случая упругого поля дислокаций функция $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ имеет достаточно сложный вид [37]

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \left\{ -\Omega \mathbf{b} - \frac{1-2\nu}{1-\nu} \cdot [\mathbf{t} \times \mathbf{b}] \cdot \ln|\mathbf{x}| + \frac{1}{1-\nu} \cdot [\mathbf{t} \times \mathbf{b}] \cdot \frac{|\mathbf{x}|}{|\mathbf{x}|^2} \mathbf{x} \right\} \quad (1.99)$$

Здесь \mathbf{x} - вектор, определяющий кратчайшее расстояние от оси дислокации до точки наблюдения r , Ω - телесный угол, под которым из точки r видна положительная сторона полуплоскости, границей которой является ось дислокации, \mathbf{t} - единичный вектор, определяющий ориентацию дислокации, \mathbf{b} - вектор Бюргерса дислокации, ν - коэффициент Пуассона. Для расчета дифракционного изображения какого-либо дефекта необходимо найти значения амплитуд поля \mathbf{D}_0 и \mathbf{D}_1 в узлах сетки (x_i, y_i) , на которую разбивается все поле дифракционной топограммы. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла для случая неполяризованного излучения будет определяться сложением интенсивностей для двух поляризаций

$$I(x, y) = \frac{1}{2} \cdot \left[|\mathbf{D}(x, y)|_{\sigma}^2 + |\mathbf{D}(x, y)|_{\pi}^2 \right] \quad (1.100)$$

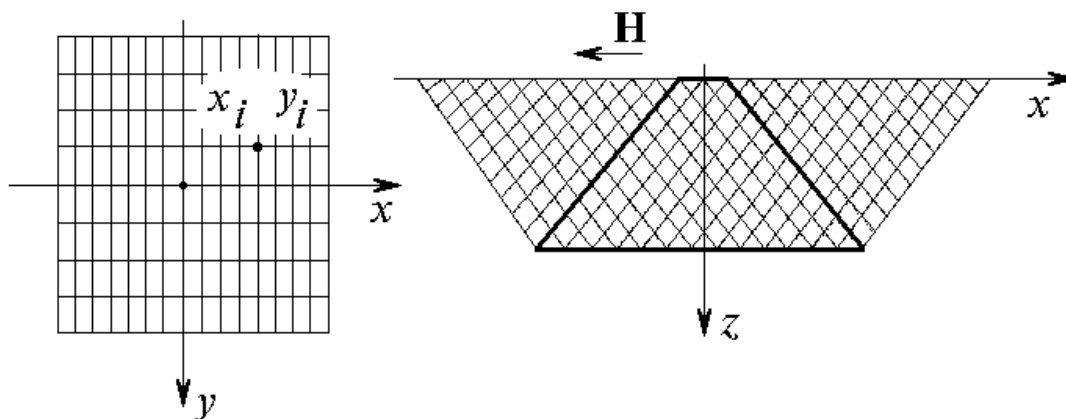


Рис.1.18. Сетка, в узлах которой вычисляется интенсивность на рентгеновской топограмме -а); сетка для проведения вычислений по методу конечных разностей в плоскости рассеяния -б).

Для решения уравнений подобного типа обычно используется метод конечных разностей [18-23]. Задача считается в точках сетки (x_i, y_i) для каждого фиксированного y_i , для двух значений поляризации, т.е. в каждом сечении, образованного дифракционными векторами $\mathbf{K}_0, \mathbf{K}_1$ (так называемого треугольника Бормана). На рис.1.18 показаны схемы разбиения дифракционного изображения на элементы для численного расчета методом конечных разностей.

ПРИЛОЖЕНИЕ 0
Спектр электромагнитных колебаний

γ-лучи	$10^{-11} - 10^{-9}$ см
X-ray	$10^{-10} - 10^{-9}$ см
УФ	$10^{-7} - 0.4 \cdot 10^{-4}$ см
Видимый свет	$0.4 \cdot 10^{-4} - 0.7 \cdot 10^{-4}$ см
ИК	$0.7 \cdot 10^{-4} - 0.01$ см
Радио волны	0.01 см – 3-4 км

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м} = 10^{-8} \text{ см} = 10^{-7} \text{ мм} = 10^{-4} \text{ мкм}$$

$$1 \text{ м} = 10^2 \text{ см} = 10^3 \text{ мм} = 10^6 \text{ мкм} = 10^9 \text{ нм} = 10^{10} \text{ \AA}$$

$$1 \mu = 10^{-6} \text{ м}$$

$$1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$$



Шкала электромагнитных волн.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1
Выход интерференционной функции Лауэ

Запишем еще раз выражение для суммарной амплитуды волн приходящих в точку наблюдения М.

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(t) \cdot \sum_{m=0}^N \sum_{n=0}^N \sum_{p=0}^N e^{ik[(s-s_0) \cdot (am+bn+cp)]} = \mathbf{E}(t) \cdot L(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0), \quad (1.9)$$

где $L(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0) = \prod_{a,b,c} \sum_{m=0}^N e^{ikm[(s-s_0) \cdot \mathbf{a}]}$. Введем обозначения удобные для последующих преобразований

$$\begin{aligned}\Psi_a &= \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] \\ \Psi_b &= \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] \\ \Psi_c &= \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}]\end{aligned}\quad (1.11)$$

Тогда выражение для суммарной амплитуды можно записать в виде

$$\mathbf{E} = E(t) \cdot L(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = E(t) \cdot \prod_{a,b,c} \sum_{m=0}^N e^{ikm[(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0), \mathbf{a}]} = E(t) \cdot \prod_{a,b,c} \sum_{m=0}^N e^{2im\Psi_a}$$

Здесь под знаком суммы стоит геометрическая прогрессия, причем первый член прогрессии $a_1 = 1$, а знаменатель прогрессии $q = e^{-ik[(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0), \mathbf{a}]} = e^{-2i\Psi_a}$, тогда сумма

членов такого ряда $S_n = \frac{a_1(1-q^n)}{1-q}$. Следовательно $\sum_0^N e^{2im\Psi_a} = \frac{1 - \exp(2iN\Psi_a)}{1 - \exp(2i\Psi_a)}$.

Для получения суммарной интенсивности необходимо значение амплитуды умножить на комплексно-сопряженное ее значение. В результате после несложных преобразований имеем

$$\begin{aligned}I = \mathbf{E} \times \mathbf{E}^* &= \left[\frac{1 - \exp(2iN\Psi_a)}{1 - \exp(2i\Psi_a)} \cdot \frac{1 - \exp(-2iN\Psi_a)}{1 - \exp(-2i\Psi_a)} \right] = \\ &= \frac{1 - \exp(-2iN\Psi_a) - \exp(2iN\Psi_a) + 1}{1 - \exp(-2i\Psi_a) - \exp(2i\Psi_a) + 1} = \\ &= \frac{2[1 - \cos 2N\Psi_a]}{2[1 - \cos 2\Psi_a]} = \frac{2\sin^2(N\Psi_a)}{2\sin^2(\Psi_a)} = \frac{\sin^2(N\Psi_a)}{\sin^2(\Psi_a)}\end{aligned}$$

Вспоминая соответствующие формулы Эйлера и соотношения из тригонометрии

$$\begin{aligned}\frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} &= \cos x & 2\cos^2 \frac{\alpha}{2} &= 1 + \cos \alpha \\ \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2} &= \sin x & 2\sin^2 \frac{\alpha}{2} &= 1 - \cos \alpha\end{aligned}$$

и суммируя по всем трем направлениям получаем

$$I = \left(\frac{\mathbf{E}}{R} \right)^2 \cdot \prod_{a,b,c} \frac{\sin^2(N\Psi_a)}{\sin^2(\Psi_a)} \quad (1.13)$$

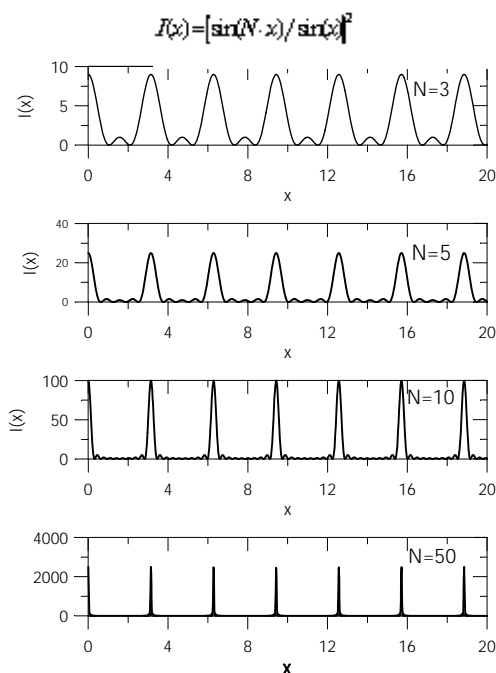
Анализ полученной функции показывает, что положения главных максимумов определяется при $\Psi_1 = \pi h, \Psi_2 = \pi k, \Psi_3 = \pi l$, где h, k, l - целые числа т.е. Функция стоящая под знаком произведения получила название **Интерференционной**

функции Лауэ. Величина главных максимумов равна $I_{max} = \left(\frac{E}{R} \right)^2 \cdot (N^3)^2$.

Положения главных максимумов определяются уравнениями Лауэ

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] = \pi h, \\ \Psi_2 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] = \pi k, \\ \Psi_3 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] = \pi l \end{array} \right. \quad (1.14)$$

Положения попочных максимумов определяются при $\Psi_1 = h \pm \frac{3}{2N}, h \pm \frac{5}{2N}$, и соответственно $\Psi_2 = h \pm \frac{3}{2N}, h \pm \frac{5}{2N}$ и $\Psi_3 = h \pm \frac{3}{2N}, h \pm \frac{5}{2N}$.



ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Индексы Миллера. Обратная решетка. Её свойства.

Пусть $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ - элементарные векторы прямой (атомной) решетки. Они описывают элементарную ячейку кристалла. Вектор $\mathbf{T} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ - трансляционный вектор прямой решетки. Здесь m, n, p - целые числа. Тогда положение любого узла атомной решетки будет описывается вектором трансляции \mathbf{T} .

Вначале введем понятие индексов Миллера. Это общепринятые обозначения плоскости в прямой решетки. Введем в атомной решетке систему координат X, Y, Z . В зависимости от типа атомной решетки это необязательно должна быть прямоугольная решетка. Запишем уравнение любой плоскости в виде уравнения в отрезках отсекаемых этой плоскостью на осях координат x_1, y_1, z_1 .

$$\frac{x}{x_1} + \frac{y}{y_1} + \frac{z}{z_1} = 1 \quad (1)$$

Это уравнение можно переписать, если записать все координаты в относительных единицах через вектора элементарной ячейки $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$.

$$\frac{x/a}{x_1/a} + \frac{y/b}{y_1/b} + \frac{z/c}{z_1/c} = 1 \quad (2)$$

введем новые обозначения

$$\begin{cases} h = \frac{a}{x_1} \cdot r \\ k = \frac{b}{y_1} \cdot r \\ l = \frac{c}{z_1} \cdot r \end{cases} \quad (3)$$

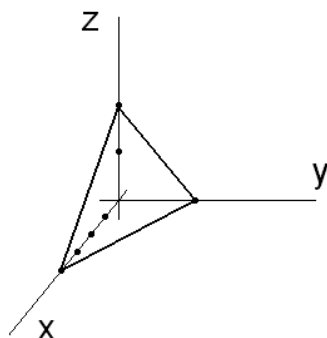
Здесь r целое число. Тогда уравнение плоскости можно переписать в виде

$$\frac{x}{a} \cdot h + \frac{y}{b} \cdot k + \frac{z}{c} \cdot l = r \quad (4)$$

или заменяя абсолютные (x/a , y/b , z/c) координаты на относительные (x' , y' , z') получим

$$x' \cdot h + y' \cdot k + z' \cdot l = r \quad (5)$$

Если $r=0$ плоскость проходит через начало координат, если $r=1$ это ближайшая к началу координат плоскость. Набор индексов (h,k,l) полностью характеризует положение плоскости в пространстве системы координат XYZ. Эти индексы получили название в литературе индексов Миллера.



Рассмотрим такой пример. Пусть плоскость отсекает на осях координат отрезки $[[400]]$, $[[010]]$, $[[020]]$. Возьмем обратные величины этих отрезков $\left(\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{2}\right)$ и умножим эти числа на 4, чтобы

получить наименьшие целые значения (142). Это и будут индексы Миллера для этой системы плоскостей. Причем все плоскости параллельные этой плоскости и проходящие через узлы

кристаллической решетки будут описываться этой тройкой индексов. Эти плоскости будут различаться только порядковым номером плоскости, который входит в уравнение плоскости в виде параметра r .

Обратная решетка.

Введем новую решетку с элементарными векторами \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* и назовем ее обратной решеткой. Обратная решетка является чисто математическим образом. Любой узел обратной решетки будет описываться вектором трансляции $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$. Здесь h, k, l – тоже целые числа. Введем условия, которым будут удовлетворять элементарные вектора новой решетки.

$$\begin{cases} (\mathbf{a}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{c}^*) = 1 \\ (\mathbf{a}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{a}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{b}^*) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

Например, равенство $(\mathbf{a}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{b}^*) = 0$ говорит о том, что вектор \mathbf{b}^* перпендикулярен к плоскости, в которой лежат вектора \mathbf{a} и \mathbf{c} . Соответственно равенство $(\mathbf{a}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{c}^*) = 0$ указывает на то, что вектор \mathbf{c}^* перпендикулярен к

плоскости, в которой лежат вектора, \mathbf{a} и \mathbf{b} . Ну а равенство $(\mathbf{b}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{a}^*) = 0$ свидетельствует о том, что вектор \mathbf{a}^* - перпендикулярен к плоскости, в которой лежат вектора \mathbf{b} и \mathbf{c} . Следовательно, можно записать

$$\begin{cases} \mathbf{a}^* = \alpha_1 [\mathbf{bc}] \\ \mathbf{b}^* = \alpha_2 [\mathbf{ca}] \\ \mathbf{c}^* = \alpha_3 [\mathbf{ab}] \end{cases} \quad (7)$$

Здесь $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ неизвестные коэффициенты пропорциональности. Воспользуемся первым условием выражения (6). Подставим в него значения векторов обратной решетки $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ из (7).

$$(\mathbf{a}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{a}, \alpha_1 [\mathbf{bc}]) = (\mathbf{b}, \alpha_2 [\mathbf{ca}]) = (\mathbf{c}, \alpha_3 [\mathbf{ab}]) = 1 \quad (8)$$

Последние три равенства можно переписать так

$$\alpha_1 (\mathbf{a}, [\mathbf{bc}]) = \alpha_2 (\mathbf{b}, [\mathbf{ca}]) = \alpha_3 (\mathbf{c}, [\mathbf{ab}]) = 1 \quad (9)$$

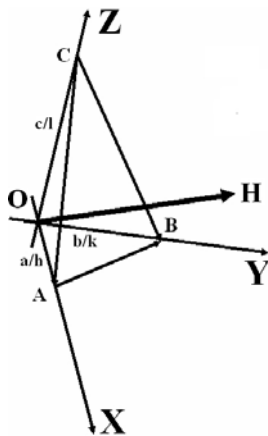
Однако из векторной алгебры известно, что смешанное произведения трех векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ образующих параллелепипед равно объему этого параллелепипеда. Т.е.

$$V = (\mathbf{a} [\mathbf{bc}]) = (\mathbf{b} [\mathbf{ca}]) = (\mathbf{c} [\mathbf{ab}]). \quad (10)$$

Тогда $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{V}$. Следовательно, выражение (7) можно переписать в виде

$$\begin{cases} \mathbf{a}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{bc}] \\ \mathbf{b}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{ca}] \\ \mathbf{c}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{ab}] \end{cases} \quad (11)$$

Основные свойства вектора обратной решетки.

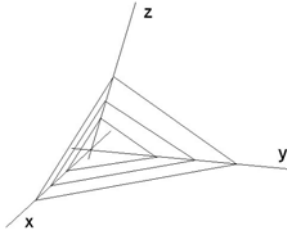


Введем в обратной решетке вектор $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$. Этот вектор обладает чрезвычайно важным свойством – он всегда перпендикулярен плоскости прямой решетки с индексами (hkl) . Рассмотрим, например плоскость ABC (см. рис1) в прямой решетке с индексами (hkl) . Если вектор \mathbf{H} перпендикулярен к этой плоскости (hkl) , то скалярное произведение любого вектора лежащего в этой плоскости будет равно нулю. Возьмем, для простоты рассмотрения вектор \mathbf{AB} . Он будет определяться как разность двух других векторов $\mathbf{AB} = \mathbf{OB} - \mathbf{OA} = \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h}$. Если вектор \mathbf{H}

перпендикулярен этой плоскости, скалярные произведения $(\mathbf{H}, \mathbf{AB})$, $(\mathbf{H}, \mathbf{AC})$, $(\mathbf{H}, \mathbf{CB})$ должны быть равны нулю.

$$\left(\mathbf{H}, \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h} \right) = \left(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*, \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h} \right) = 1 - 1 = 0 \quad (12)$$

Аналогичное рассмотрение можно провести и для любой другой прямой лежащей в плоскости ABC.



Другим важнейшим свойством вектора \mathbf{H} является то, что его модуль всегда равен обратной величине межплоскостного расстояния $|\mathbf{H}| = \frac{1}{d_{hkl}}$ для

плоскостей с индексами (hkl) .

Атомную решетку любой симметрии можно представить как семейство параллельных плоскостей с индексами (hkl) . Причем расстояния между этими плоскостями и расстояние от начала координат должно быть кратно межплоскостному расстоянию d_{hkl} . Если вектор $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$, текущий радиус-вектор точек одной из этих

плоскостей, то уравнение такой плоскости можно записать в виде $\left(\mathbf{R}, \frac{\mathbf{H}}{|\mathbf{H}|} \right) = sd$.

Здесь d межплоскостное расстояние для этой системы плоскостей, s – целое число (например, для плоскости проходящей через начало координат $s=0$), а вектор $\frac{\mathbf{H}}{|\mathbf{H}|}$ это единичный вектор нормали к плоскости.

$$sd = \frac{1}{|\mathbf{H}|} (\mathbf{R}, \mathbf{H}) = \frac{1}{|\mathbf{H}|} (m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}, h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = \frac{1}{|\mathbf{H}|} (mh + nk + pl) \quad (13)$$

Вспоминая, что $(mh + nk + pl) = s$ это уравнение плоскости, получим $d = \frac{1}{|\mathbf{H}|}$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3 Уравнения Лауэ

Запишем условия Лауэ

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] = \pi h, \\ \Psi_2 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] = \pi k, \\ \Psi_3 = \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] = \pi l \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] = \pi h, \\ \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] = \pi k, \\ \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] = \pi l \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda], \mathbf{a}] = h, \\ [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda], \mathbf{b}] = k, \\ [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda], \mathbf{c}] = l \end{array} \right. \quad (1)$$

Докажем вначале векторное тождество. Пусть $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ векторы атомной решетки, а $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ – векторы обратной решетки. Тогда для любого вектора \mathbf{r} можно написать следующее тождество

$$\mathbf{a}^* (\mathbf{r}, \mathbf{a}) + \mathbf{b}^* (\mathbf{r}, \mathbf{b}) + \mathbf{c}^* (\mathbf{r}, \mathbf{c}) \equiv \mathbf{r} \quad (2)$$

Действительно, запишем вектор \mathbf{r} в пространстве обратной решетки $\mathbf{r} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$. Умножая скалярно этот вектор последовательно на $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ получим $(\mathbf{a}, \mathbf{r}) = h$, $(\mathbf{b}, \mathbf{r}) = k$, $(\mathbf{c}, \mathbf{r}) = l$, что и доказывает написанное тождество (2).

Теперь вернемся к условиям Лауэ. Умножим соответственно векторные равенства (1) на векторы $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ и сложим их.

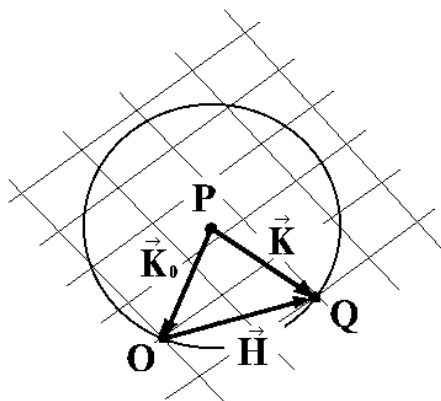
$$[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda, \mathbf{a}] = h,$$

$$[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda, \mathbf{b}] = k,$$

$$[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda, \mathbf{c}] = l$$

$$\mathbf{a}^* (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda, \mathbf{a}) + \mathbf{b}^* (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda, \mathbf{b}) + \mathbf{c}^* (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda, \mathbf{c}) = \mathbf{a}^* h + \mathbf{b}^* k + \mathbf{c}^* l = \mathbf{H}$$

Сравнивая с тождеством (2) можно записать $\mathbf{s} - \mathbf{s}_0 / \lambda = \mathbf{H}$ или $\mathbf{K} - \mathbf{K}_0 = \mathbf{H}$



Последнее выражение есть не что иное как уравнение Брегга в векторной форме.

Рассматривая приведенный рисунок легко записать скалярную форму уравнения Вульфа-Брегга.

$$2d \cdot \sin \theta = \lambda$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Законы погасания для примитивной, гранецентрированной и объемцентрированной решеток

	$N_p = h^2 + k^2 + l^2$	$N_F = h^2 + k^2 + l^2$	$N_I = h^2 + k^2 + l^2$
1	1	-	-
2	2	-	2
3	3	3	-
4	4	4	4
5	5	-	-
6	6	-	6
7	-	-	-
8	8	8	8
9	9	-	-
10	10	-	10
11	11	11	-
12	12	12	12
13	13	-	-

14	14	-	14
15	-	-	-
16	16	16	16
17	17	-	-
18	18	-	18
19	19	19	-
20	20	20	20
21	21	-	-
22	22	-	22
23	-	-	-
24	24	24	24
25	25	-	-
26	26	-	26
27	27	27	-
28	-	-	-
29	29	-	-
30	30	-	30
31	-	-	-
32	32	32	32

ПРИЛОЖЕНИЕ 5

Вывод системы дисперсионных уравнений для многоволнового случая

Рассмотрим решение системы (1.70) в виде набора волн типа

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_0 + \mathbf{H}, \mathbf{r})]} = \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_m, \mathbf{r})]} = e^{i\omega t} \cdot \sum_m \mathbf{D}_m \cdot e^{i(\mathbf{K}_m, \mathbf{r})}, \quad (1.76)$$

Если среда представляет собой кристаллическую решетку и следовательно распределение электронной плотности имеет трехмерную периодичность уравнение (1.70) можно преобразовать не решая его до конца и получить очень важные законы поведения волнового поля в кристалле.

Произведение $\chi \mathbf{D}$ можно записать, используя полученные выше соотношения для χ и \mathbf{D}

$$\chi \mathbf{D} = \sum_H \sum_m \chi_H \cdot \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_m + \mathbf{H}, \mathbf{r})]} \quad (1.77)$$

Введя новый индекс суммирования $n = m + H$ и заменив вектор $\mathbf{K}_m + \mathbf{H} = \mathbf{K}_n$, получим

$$\chi \mathbf{D} = \sum_m \sum_n \chi_{n-m} \cdot \mathbf{D}_m \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} \quad (1.78)$$

Если обозначить $(\chi \mathbf{D})_n = \sum_m \chi_{n-m} \cdot \mathbf{D}_m$, предыдущая формула примет вид

$$\chi \mathbf{D} = \sum_n (\chi \mathbf{D})_n \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]}. \quad (1.79)$$

Напомним некоторые соотношения векторной алгебры. Если вектор $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ имеет вид плоской волны $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A} \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}, \mathbf{r})]}$, можно легко получить следующие векторные соотношения-заготовки:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) &= -i(\mathbf{K}, \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)); \operatorname{rot} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = -i[\mathbf{K} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]; \\ \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)) &= |\mathbf{K}|^2 \cdot \mathbf{U}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{K} \cdot (\mathbf{K}, \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)) = |\mathbf{K}|^2 \cdot [\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{K}}, \end{aligned} \quad (1.80)$$

где $[\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{K}}$ - компонента вектора $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$, перпендикулярная вектору \mathbf{K} . Подставляя полученные выражения для $\chi \mathbf{D}$ и \mathbf{D} , а также только что приведенные теоремы из векторной алгебры в уравнение (1.70), получим

$$\begin{aligned} -|\mathbf{K}_n|^2 \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i[\omega t - (\mathbf{K}_n, \mathbf{r})]} = \\ = -|\mathbf{K}_n|^2 \cdot \sum_H \chi_H \cdot e^{i(\mathbf{H}, \mathbf{r})} \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i(\mathbf{K}_n, \mathbf{r})} \end{aligned} \quad (1.81)$$

После несложных преобразований, исключая временную зависимость, уравнение будет иметь вид

$$\frac{\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_n^2} \cdot \sum_n \mathbf{D}_n \cdot e^{i(\mathbf{K}_n, \mathbf{r})} = \sum_m \sum_n \chi_{m-n} \cdot \mathbf{D}_n \cdot e^{-i(\mathbf{K}_n, \mathbf{r})} \quad (1.82)$$

Условием для выполнения этого равенства является тождественное равенство коэффициентов при соответствующих экспонентах, т.е.

$$\frac{\mathbf{K}_n^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{K}_n^2} \cdot \mathbf{D}_n = \sum_m \chi_{n-m} \cdot (\mathbf{D}_m)_n \quad (1.83)$$

Это и есть система дисперсионных уравнений связывающая волновые вектора и их амплитуды.

1.5. ЛИТЕРАТУРА

- 1 . Дж.Каули, Физика дифракции, Москва, Мир, 1976, с.432
2. А.А.Харкевич, Спектры и анализ, Москва, ГИ Физ.Мат.Лит.1962, с.234
3. Г.Пейн Физика колебаний и волн, Москва, Мир, 1979, с.390
4. Azaroff L.V. X-ray Diffraction, 1974, McGraw-Hill Book Company, New York, p.665
5. Р.Джеймс, Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, Москва, ИЛ, 1950, с.572
6. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич, Теория рассеяния рентгеновских лучей, Москва, МГУ, 1978, с.278
7. Г.С.Жданов, Основы рентгеноструктурного анализа, Москва, Гостехиздат, 1940, с.446
8. А.М.Гинье, Рентгенография кристаллов, Москва, Физматгиз, 1961, с.604
9. Б.Я.Пинес Лекции по структурному анализу, Харьков, ХГУ, 1957, с.476
10. У.Вустер, Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах, Москва, ИЛ, 1963, с.
- 11 . Я.С.Уманский, Рентгенография металлов, Москва, Metallurgia, 1967, с.236
12. А.Ф.Скрышевский, Структурный анализ жидкостей, Москва, Мир, 1976, с.256
13. М.А.Кривоглаз Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах, Киев, Наукова думка, 1983, с.251
14. З.Г.Пинскер, Рентгеновская кристаллооптика, Москва, Наука, 1982, с.390
15. Batterman B.W., Cole H. Dynamical Diffraction of X-ray by Perfect Crystals, Rev.Mod.Phys., 1964, 36, 3, 681-717
16. James R.W. The Dynamical Theory of X-ray Diffraction, Solid Stat.Phys., 1963, 15, 55-220
17. M.Hart, Bragg reflection X-ray optics, Report on Progress in Physics 34, 5, 435-^90, (1971)
18. N.Kato Dynamical Theory of Electron Diffraction for a Finite Polyhedral Crystal, I.Fraunhofer Formula, J.Phys.Soc.Japan, 1951, 7, 406^414
19. N.Kato, R.Uyeda Dynamical Theory of Electron Diffraction for a Finite Polyhedral Crystal, II.Comparision with the Results of Kinematical Theory, Acta Cryst., 1951,4, 229-231
20. N.Kato Dynamical Theory of Electron Diffraction for a Finite Polyhedral Crystal, III.Fresnel Diffraction Formula, J.Phys.Soc.Japan, 1953, 8, 350-359
21. P.P.Ewald The Origin of the Dynamical Theory of X-ray Diffraction, J.Phys.Soc.Japan, suppl.B-II, 1962, 17, 48-52
22. P.P.Ewald Crystal Optics for Visible Light and X-ray Diffraction, Rev.Mod.Phys., 1956, 37, 46-56
23. N.Kato Wave-Optical Theory of Diffraction in Single Crystal, in G.N.Ramachanran (ed), Crystallography and Crystal Perfection, pp.153-173, Academic Press, Inc., New York, 1963
24. П.Хирш, А.Хови, Р.Николсон, Д.Пэшли, М.Уэлан Электронная микроскопия тонких кристаллов, Москва, МИР, 1968
25. Дифракционные и микроскопические методы в материаловедении, под редакцией С.Амелинка, 1984, с.502 Москва, Metallurgia, 1989, с.502
26. P.Pening, D. Polder, Anomalous Transmission of X-ray in Elastically Deformed

- Crystals, Philips.Res.Rep.16, 419-440, (1961)
27. S.Takagi, Dynamical Theory of Diffraction Application to Crystals with Any Kind of Small Distortion, Acta Cryst, 15, 1311-1312, (1962);
 28. S.Takagi, A Dynamical Theory of Diffraction for a Distorted Crystal, J.Phys.Soc.Japan.27, 1239-1253, (1969)
 29. N.Kato, Pendellosung Fringes in Distorted Crystals. I.Fermat's N.Kato, Pendellosung Fringes in Distorted Crystals. I.Fermat's Principle for Bloch Waves, J.Phys.Soc.Japan.12, 1.1785-1791, (1963);
 30. N.Kato, Pendellosung Fringes in Distorted Crystals. II.Application to Two-beam Cases, J.Phys.Soc.Japan.19, 67-77, (1964);
 31. N.Kato, Pendellosung Fringes in Distorted Crystals. III.Application to Homogeneously Bent Crystals, J.Phys.Soc.Japan.19, 971-985, (1964)
 32. D.Taupen, Prevision de Quelques Images de Dislocations Par Transmission des Rayons X (Cas de Laue Symetrique), Acta Cryst, 23, 25-35, (1967);
 33. D.Taupen, Theorie Dynamiquede la Diffraction des Rayons X par les Cristaux Deformes, Bull.Soc.Franc.Mineral.Crist., 87, 469-511, (1964)
 34. F.N.Chukhovskii, A.A.Shtolberg, On the Dynamical Theory of X-ray Images of Real Crystals, Phys.Stat.Sol.41, 815-825, (1970)
 35. В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуковский, Проблема изображения в рентгеновской оптике, УФН, 107, 2, 2292265, (1972)
 36. В.Л.Инденбом, В.М.Каганер, Дифракционная нейтронная оптика, Металлофизика, 1,1, 17-32, (1979)
 37. R.de Wit, Some Relations for Straight Dislocations, Phys.Stat.Sol. 20, 567, 1967
 38. Л.И.Миркин, Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов, ГИ Физ.-Мат.Лит., Москва, 1961
 39. С.С.Горелик, Л.Н.Расторгуев, Ю.А.Скаков, Рентгенографический и электроннооптический анализ, Издательство Metallurgy, Москва, 1990
 40. International Tables for X-Ray Crystallography, vol.1-4, Birmingham, IDC, 1980