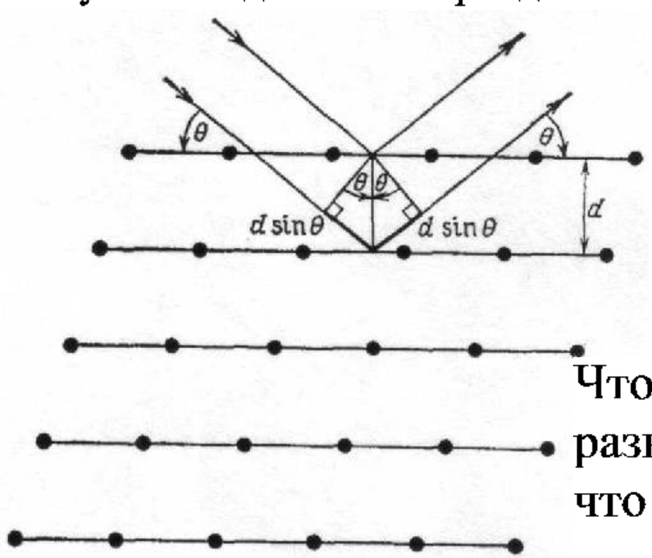
Формула Брэгга для дифракции рентгеновских лучей.

Типичные межатомные расстояния в твердом теле имеют порядок ангстрема (10^{-8} см). Следовательно, для электромагнитного зондирования микроскопической структуры твердых тел необходимо использовать излучение с длиной волны, не превышающей этого расстояния, и соответственно с энергиями порядка:

$$\hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{10^{-8}} \approx 12{,}3 \cdot 10^{3} \text{ эВ}$$

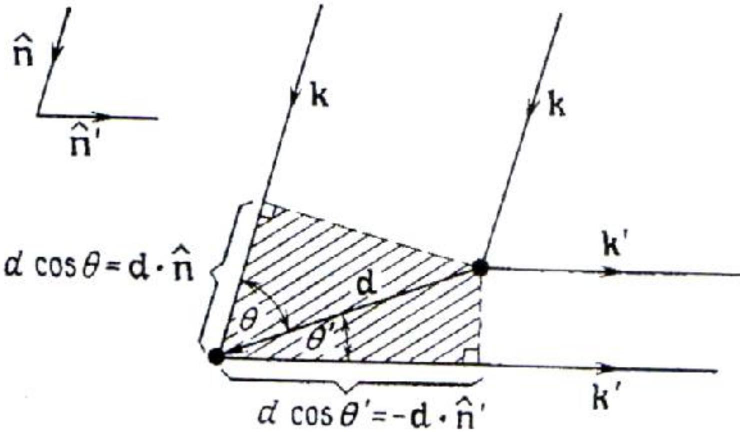
Подобными энергиями обладают рентгеновские лучи. Распределение рентгеновских лучей, рассеянных на жесткой периодической ионной решетке, позволяет определить положение ионов в этой структуре. Существуют два эквивалентных способа рассмотрения рассеяния рентгеновских лучей на идеальной периодической структуре, которые были предложены Брэггом и Лауэ.

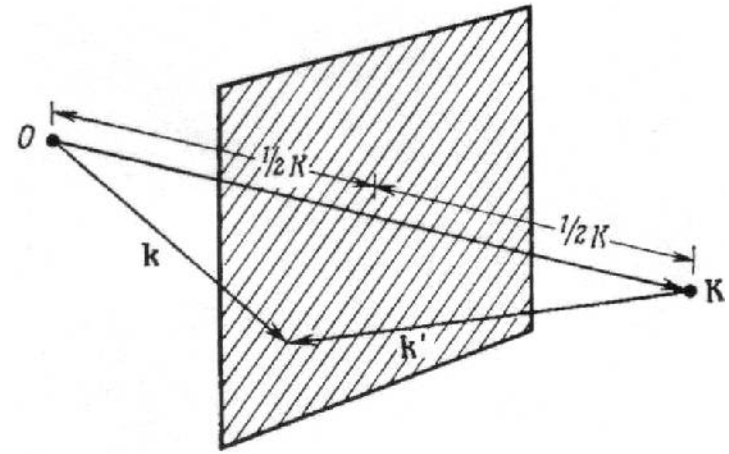


Чтобы лучи интерферировали с усилением, разность хода должна составлять целое число длин волн, что приводит к условию Брэгга (Брэгга — Вульфа):

$$n\lambda = 2\, d \sin \Theta.$$

Формулировка Лауэ дифракции рентгеновских лучей.

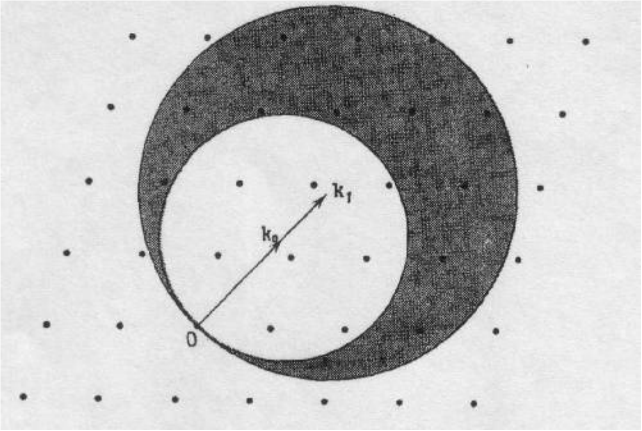




приходим к выводу Лауэ: ***для конструктивной интерференции необходимо, чтобы изменение волнового вектора $K = k' - k$ было равно одному из векторов обратной решетки.*** Используем далее волновой вектор **k** падающего луча. Если $k' - k$ — вектор обратной решетки, то им есть и $k - k'$. Обозначая его **K,** мы можем записать условие равенства длины векторов k и k' в виде: $k = \left| k - K \right|$. Возводя обе части выражения в квадрат, получаем условие: $k \cdot \hat{K} = \frac{1}{2} K$. Проекция волнового вектора **k** падающего луча на направление вектора **K** обратной решетки должна составлять половину от длины вектора **K.** Поэтому вектор **k** падающего луча удовлетворяет условию Лауэ, если конец этого вектора лежит в плоскости, перпендикулярной отрезку прямой, соединяющему начальную точку в **k**-пр-ве с точкой **K** обратной решетки, и делит его пополам (рис.2). Такие плоскости в **k**-пространстве называют ***брэгговскими плоскостями.***

Экспериментальные методы. Метод Лауэ.

Пусть по-прежнему рентгеновские лучи испытывают рассеяние на монокристалле, имеющем фиксированную ориентацию по отношению к заданному направлению падения **n**, но используемое рентгновское излучение не является монохроматическим, а содержит все длины волн от λ_1 до λ_0. В этом случае сфера Эвальда преобразуется в область, заключенную между двумя сферами, определяемыми векторами $\boldsymbol{\kappa_0} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda_0$ и $\boldsymbol{\kappa_1} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda_1$. Тогда должны наблюдаться брэгговские максимумы, которые соответствуют всем векторамπ обратной решетки, оказавшимся внутри этой области.



Построение Эвальда для метода Лауаэ. Положение кристалла и направление падающего рентгеновского луча фиксированы, а длина волны рентгеновских лучей меняется непрерывно, так что абсолютная величина соответствующих волновых векторов заключена между k_2 и k_1. Сферы Эвальда для всех волновых векторов падающего луча заполняют темную-область, расположенную между сферой с центром в конце вектора к„ и сферой с центром в конце вектора к,. Будут наблюдаться брэгговские максимумы, отвечающие всем точкам обратной решетки, лежащим внутри темной области.

Метод вращающегося кристалла

- В этом методе используется монохроматическое рентгеновское излучение, но переменный угол падения.
- Практически направление пучка рентгеновских лучей поддерживается постоянным, а изменяется ориентация кристалла.
- В методе вращающегося кристалла его поворачивают вокруг определенных фиксированных осей, регистрируя на фотопленке все брэгговские максимумы, возникающие при повороте.
- При вращении кристалла его обратная решетка поворачивается на тот же самый угол вокруг той же самой оси.
- Следовательно, сфера Эвальда (определяемая фиксированным волновым вектором к падающего луча) неподвижна в ***k***-пространстве, в то время как вся обратная решетка поворачивается вокруг оси вращения кристалла.
- При повороте каждая точка обратной решетки движется по некоторой окружности;

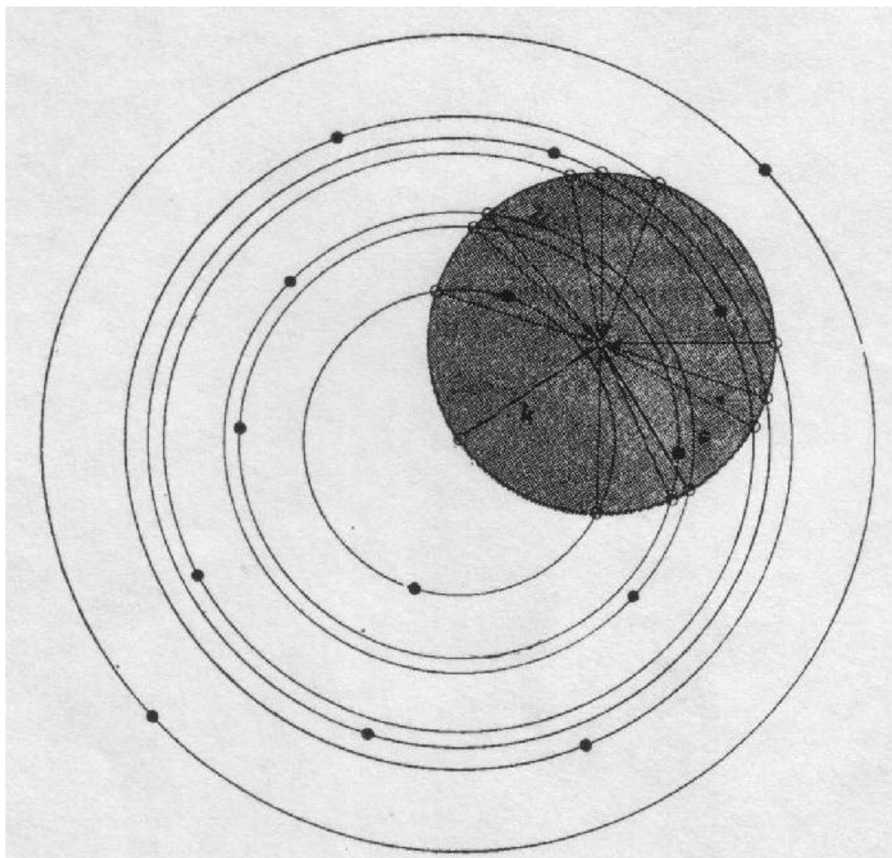
  \- брэгговское отражение происходит каждый раз, когда эта окружность пересекает сферу Эвальда.

Показан случай, когда волновой вектор падающего луча лежит в атомной плоскости, а ось вращения перпендикулярна этой плоскости.

Концентрические окружности— это орбиты, описываемые при вращении векторами обратной решетки, лежащими в плоскости, содержащей к и перпендикулярной оси вращения.

Каждая точка пересечения такой окружности со сферой Эвальда дает волновой

вектор отраженного брэгговского луча.

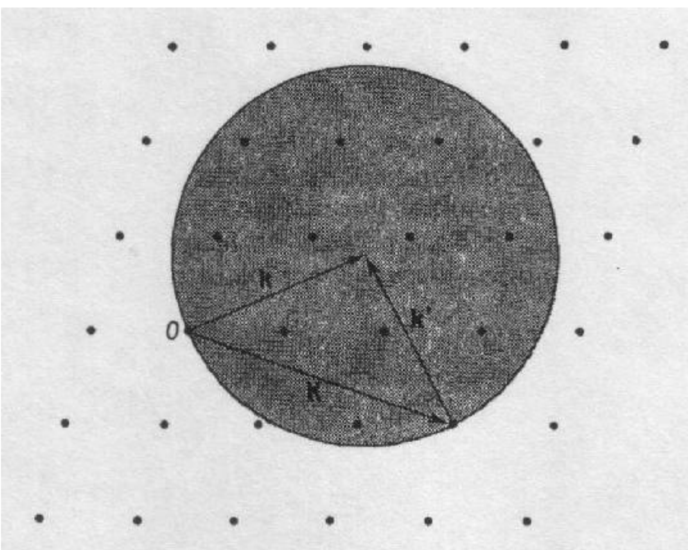


Построение Эвальда.

Эвальду принадлежит простое геометрическое построение, позволяющее наглядно представить различные экспериментальные методы и облегчающее восстановление структуры кристалла по обнаруженным максимумам. Построим в k-пространстве сферу с центром в конце волнового вектора **к** падающей волны и с радиусом k (так что она проходит через начало отсчета).

Легко видеть, что для *существования* волнового вектора **к'**, удовлетворяющего условию Лауэ, необходимо и достаточно, чтобы на поверхности сферы лежала одна из точек обратной решетки (кроме начальной).

При выполнении такого условия имеет место брэгговское отражение от семейства плоскостей прямой решетки, перпендикулярных этому вектору обратной решетки.



Для заданного волнового вектора ***к*** падающего луча построена сфера радиусом *к* и с центром в точке ***к***. Дифракционные максимумы, соответствующие векторам обратной решетки **К**, будут наблюдаться только в том случае, если **К** определяет точку обратной решетки, лежащую на поверхности сферы. Такой вектор обратной решетки показан на схеме наряду с волновым вектором ***к'*** отраженного луча. При произвольном волновом векторе падающего луча брэгговские максимумы отсутствуют.