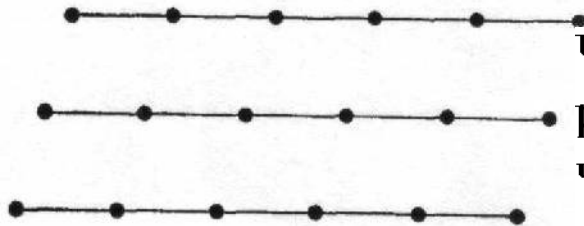
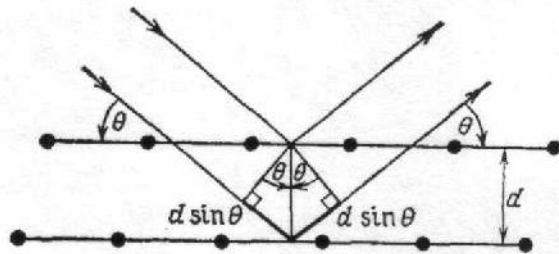


## Формула Брэгга для дифракции рентгеновских лучей.

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:

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

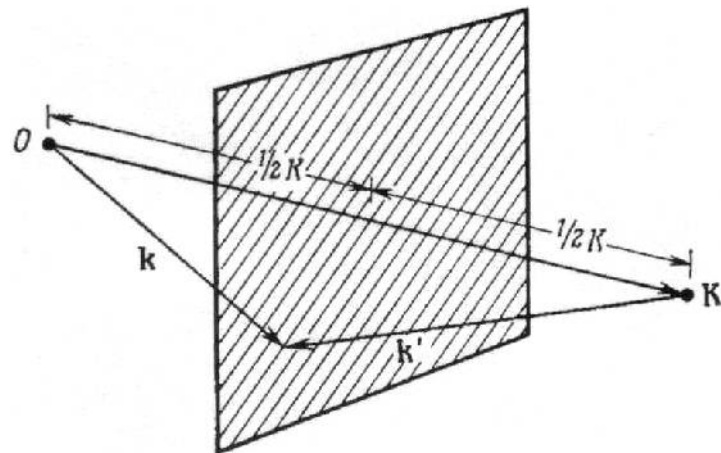
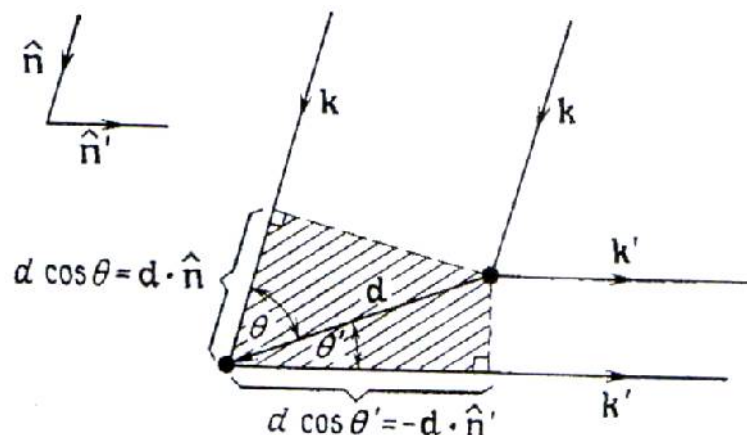
Подобными энергиями обладают рентгеновские лучи. Распределение рентгеновских лучей, рассеянных на жесткой периодической ионной решетке, позволяет определить положение ионов в этой структуре. Существуют два эквивалентных способа рассмотрения рассеяния рентгеновских лучей на идеальной периодической структуре, 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):

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

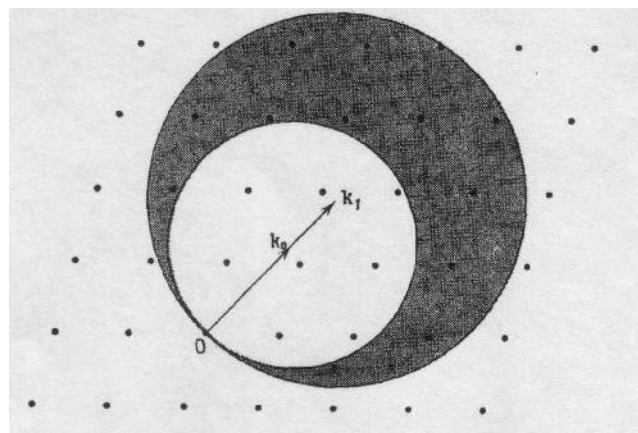
## Формулировка Лауэ дифракции рентгеновских лучей.



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:  $k = |k - K|$ . 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 **брегговскими плоскостями.**

## Экспериментальные методы. Метод Лауэ.

Пусть по-прежнему рентгеновские лучи испытывают рассеяние на монокристалле, имеющем фиксированную ориентацию по отношению к заданному направлению падения  $\mathbf{n}$ , но используемое рентгеновское излучение не является монохроматическим, а содержит все длины волн от  $\lambda_1$  до  $\lambda_0$ . В этом случае сфера Эвальда преобразуется в область, заключенную между двумя сферами, определяемыми векторами  $\mathbf{k}_0 = 2\pi\mathbf{n}/\lambda_0$  и  $\mathbf{k}_1 = 2\pi\mathbf{n}/\lambda_1$ . Тогда должны наблюдаться брэгговские максимумы, которые соответствуют всем векторам  $\mathbf{k}$  обратной решетки, оказавшимся внутри этой области.



Построение Эвальда для метода Лауэ. 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  $\mathbf{k}_2$  и сферой с центром в конце вектора  $\mathbf{k}_1$ . 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  $k$  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  $k$  и перпендикулярной оси вращения.

Каждая точка пересечения такой окружности со сферой Эвальда дает волновой вектор отраженного брэгговского луча.

