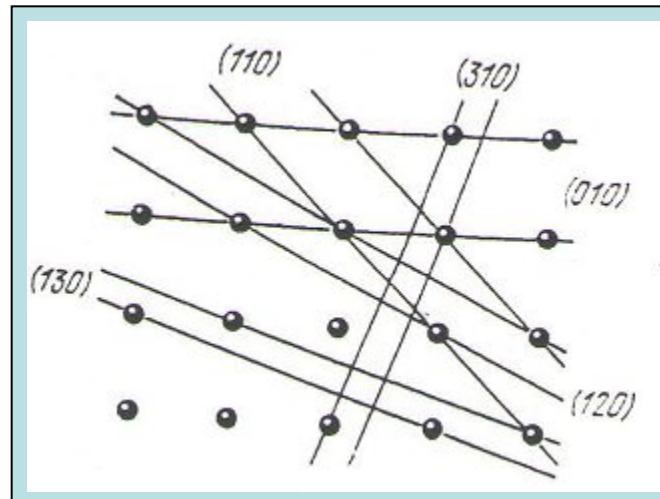
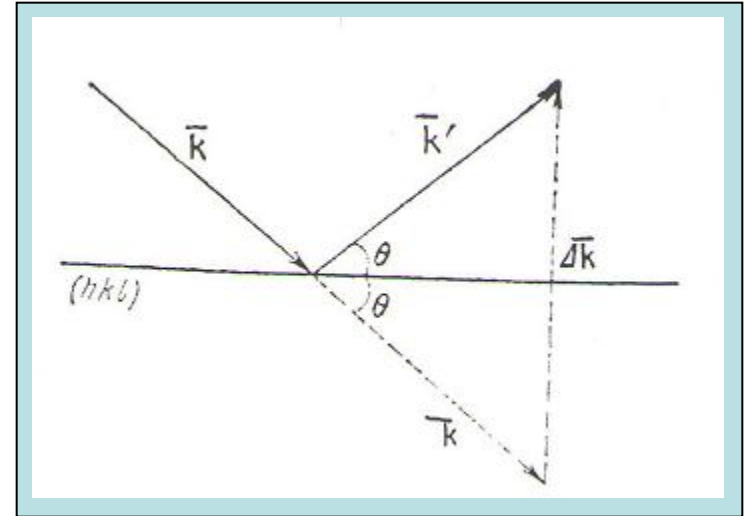
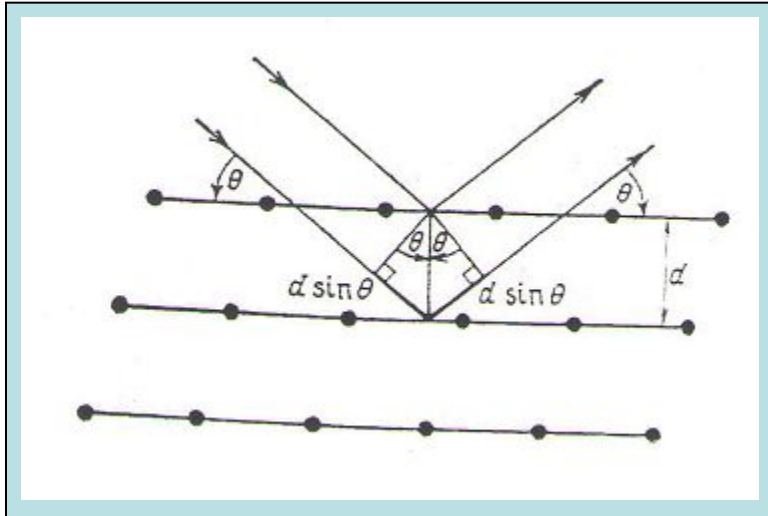


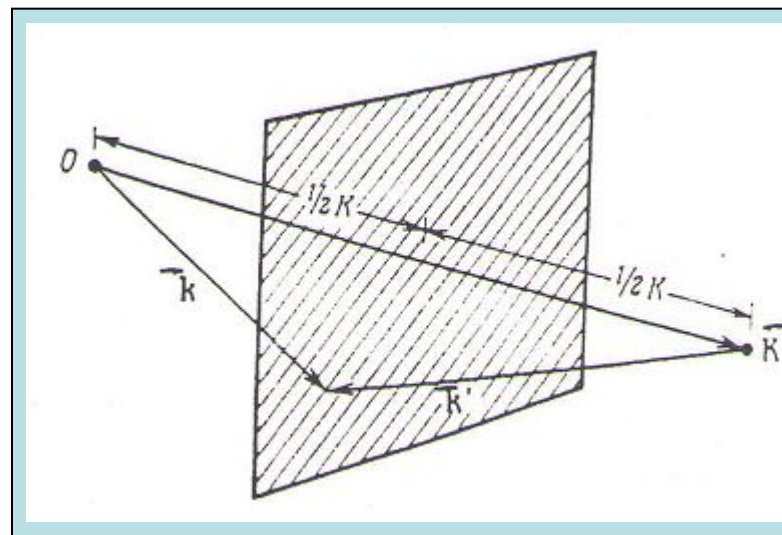
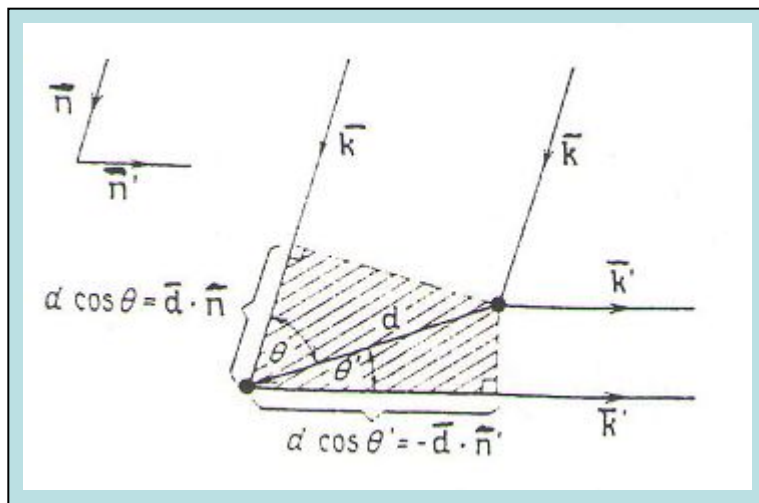
Дифракция в кристаллах

1. Условие дифракции Брэгга

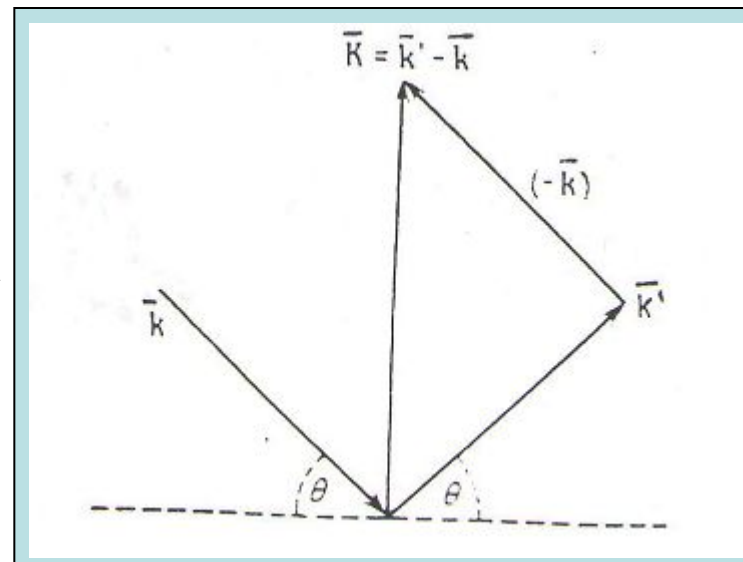


Дифракция в кристаллах

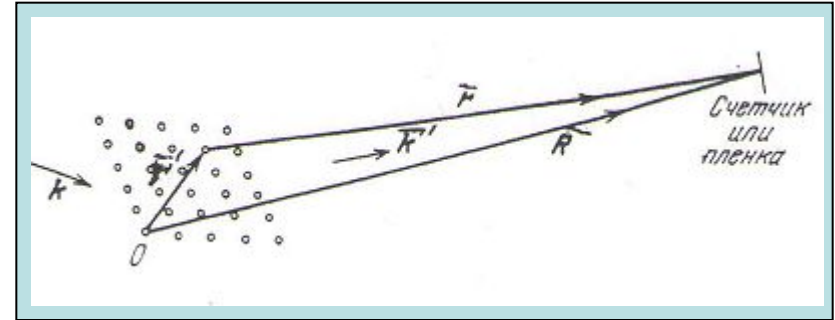
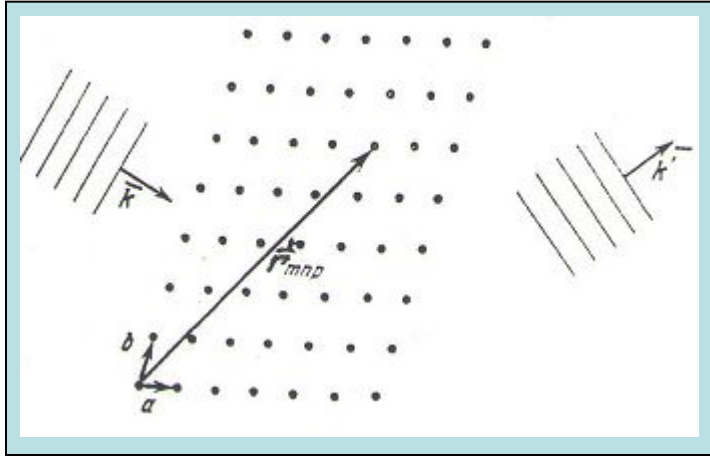
2. Условие дифракции Лауэ



3. Эквивалентность формулировок Брэгга и Лауэ

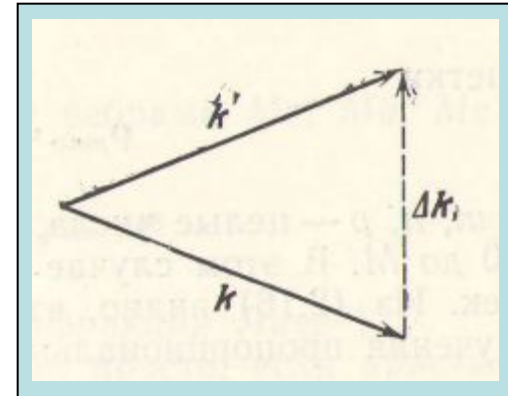


Уравнение Лауэ для амплитуды рассеяния

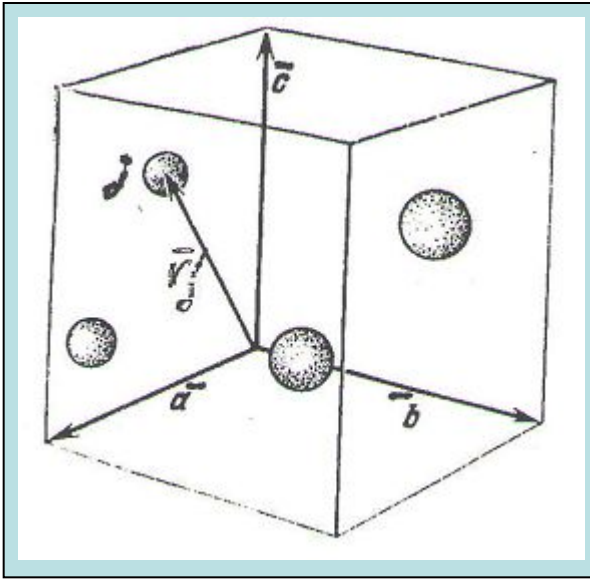


$$A_{\Delta k}^{\boxtimes} = \sum_{mnp} e^{-i\vec{r}_{mnp}^{\boxtimes} \Delta k^{\boxtimes}}$$

$$A_{\Delta k}^{\boxtimes} \sim \int dV n(\vec{r}') e^{-i\vec{r}'^{\boxtimes} \Delta k^{\boxtimes}}$$



Структурный фактор базиса

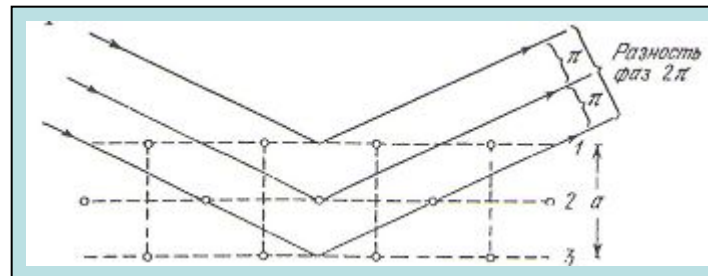


$$\vec{r}_j = x_j \bar{a}_1 + y_j \bar{a}_2 + z_j \bar{a}_3$$

$$\varphi_{\vec{K}} = \sum_j f_j \exp[-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)]$$

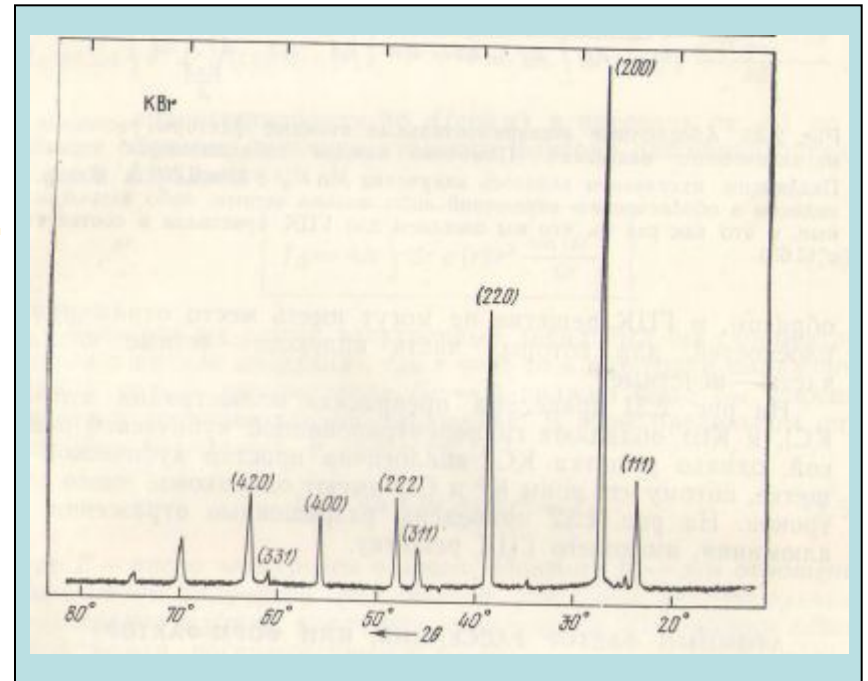
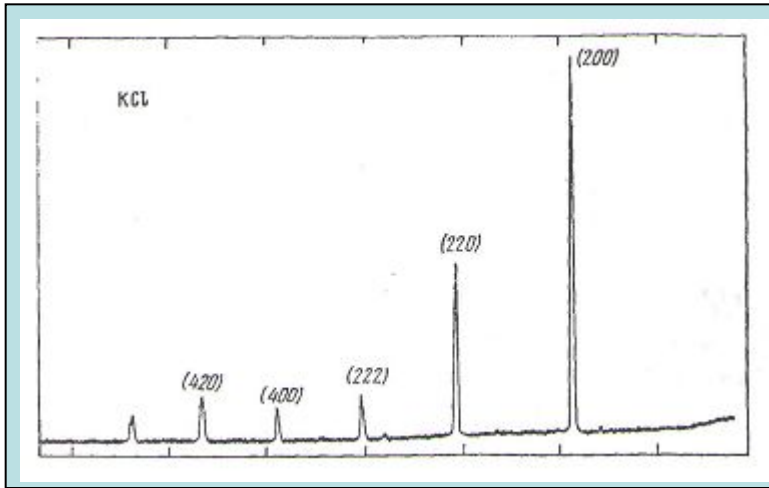
Структурный фактор ОЦК решетки

$$\varphi(hkl) = f \{1 + \exp[-i\pi(h + k + l)]\}$$



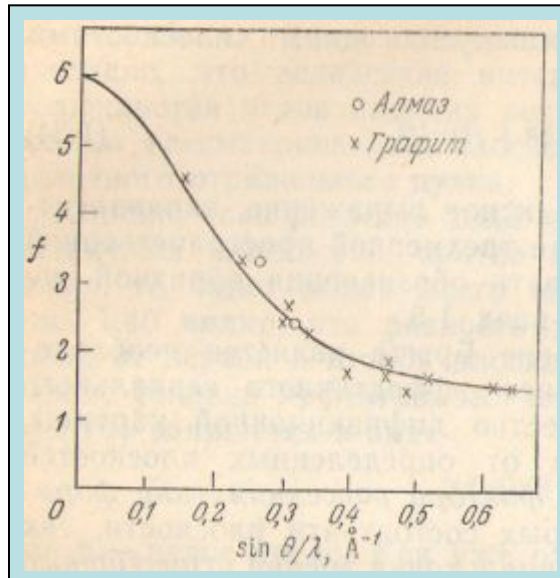
Структурный фактор ГЦК решетки

$$\varphi(hkl) = f \{ 1 + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(h+l)] + \exp[-i\pi(h+k)] \}$$

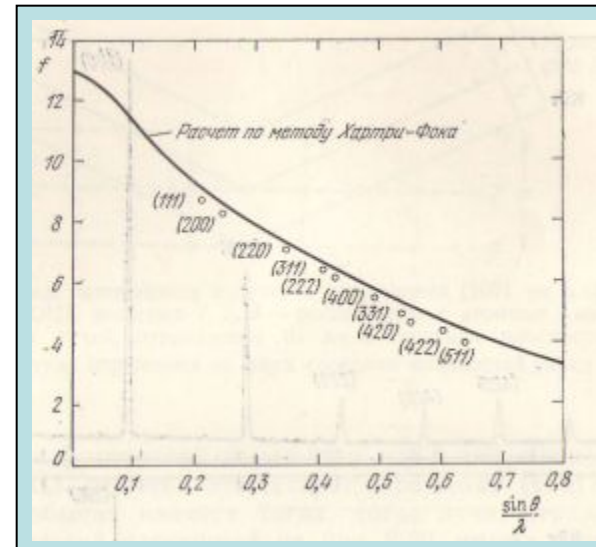


Атомный фактор рассеяния

$$f_j = \int dV c_j(\rho) \exp(-i\rho\Delta k)$$



**Форм-фактор
углерода**



**Форм-фактор
алюминия**

$$f = \sum_{n=1}^z \int_0^{\infty} \frac{4\pi r^2 \psi_n^2(r) \sin[4\pi r(\sin \theta) / \lambda] dr}{4\pi r(\sin \theta) / \lambda}$$

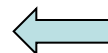
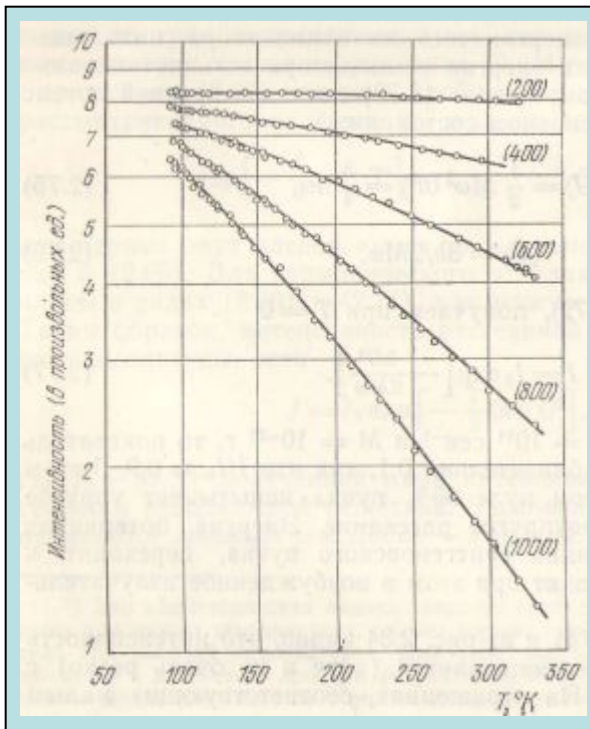
6

6

Температурная зависимость линий отражения

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle K^2\right)$$

Множитель Дебая-Уоллера $\exp\left(-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle K^2\right)$



Температурная зависимость
интенсивности дифракционных
максимумов (h00) для алюминия

Фактор поглощения

Рентгеновское излучение, рассеянное кристаллом, значительно поглощается в нем. Поглощение зависит от угла рассеяния θ , плотности вещества ρ и линейного коэффициента рассеяния μ . При расчете интенсивности поглощение учитывают, вводя в формулу множитель (фактор) поглощения $\Phi = \Phi(\theta, \mu, \rho)$.

Фактор повторяемости

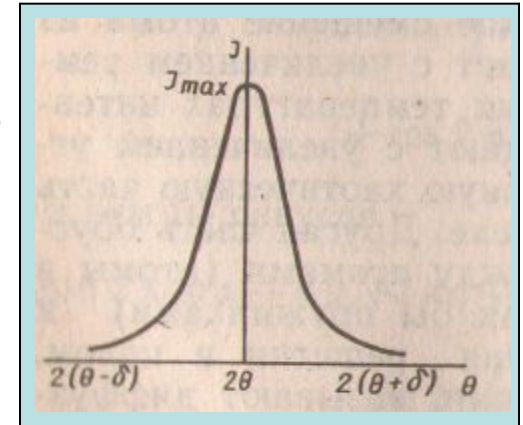
При получении рентгенограмм от поликристаллических образцов интенсивность дифракционных линий также зависит от вероятности нахождения кристаллитов в отражающем положении. Эта вероятность зависит от числа эквивалентных плоскостей $\{hkl\}$.

Число эквивалентных плоскостей p , называемое множителем (фактором) повторяемости, зависит от симметрии кристалла. Так, для кубического кристалла p имеет следующие значения: 12 — для $\{110\}$, 8 — для $\{111\}$ и 6 — для $\{100\}$.

6
6
6
6

Множитель Лорентца

Реальные кристаллы являются мозаичными, т. е. состоят из блоков, повернутых друг относительно друга на малые углы. По этой причине мозаичный кристалл отражает не только под брэгговским углом, но и в некотором угловом интервале $(\theta - \delta, \theta + \delta)$.



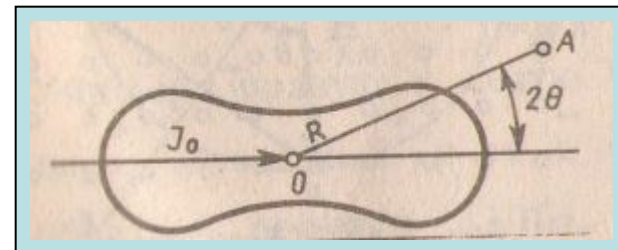
Для учета влияния на интенсивность отраженных лучей мозаичности кристалла, а также геометрии съемки в формулу интенсивности вводят множитель Лорентца:

$$L(\theta) = 1/\sin 2\theta \quad \text{- для монокристаллов,}$$

$$L(\theta) = 1/\sin^2 \theta \cos \theta \quad \text{- для поликристаллов}$$

Рассеяние рентгеновских лучей электронами

$$J_e = J_0 \frac{e^4}{m_e^2 c^4} \frac{1}{R^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$



Интегральная интенсивность дифракционных максимумов

С учетом всех факторов формулы интегральной интенсивности дифракционных максимумов для малых или мозаичных кристаллов имеют вид:

(для монокристаллов)



$$J = J_0 \frac{e^4}{m_e^2 c^4} \frac{1}{R^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin 2\theta} \exp\left(-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle K^2\right) \Phi(\theta \mu \rho) \varphi_{hkl}^2$$

(для поликристаллов)



$$J = J_0 \frac{e^4}{m_e^2 c^4} \frac{1}{R^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin^2 \theta \cos \theta} p \exp\left(-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle K^2\right) \Phi(\theta \mu \rho) \varphi_{hkl}^2$$

6

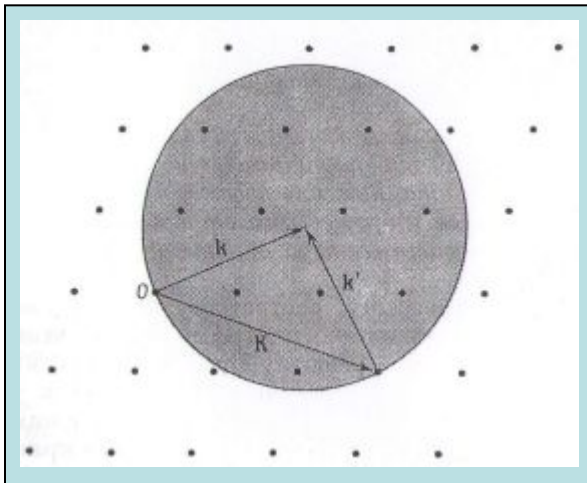
6

6

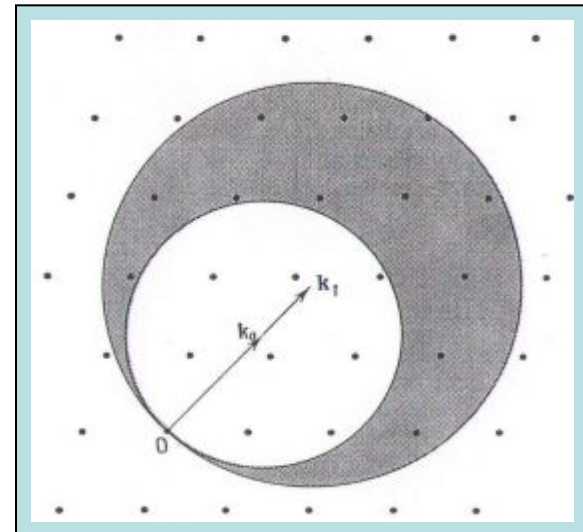
6

Экспериментальные методы рентгеновского спектроскопического анализа

Построение Эвальда



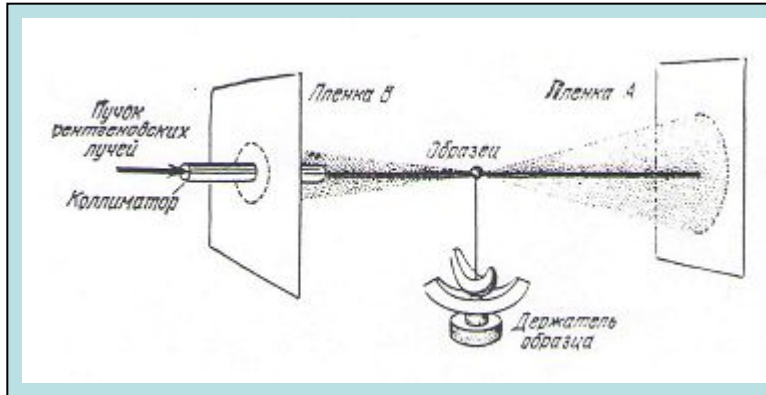
Монохроматическое
излучение ($\lambda = \text{const}$)



Немонохроматическое
излучение ($\lambda_1 \leq \lambda \leq \lambda_2$)

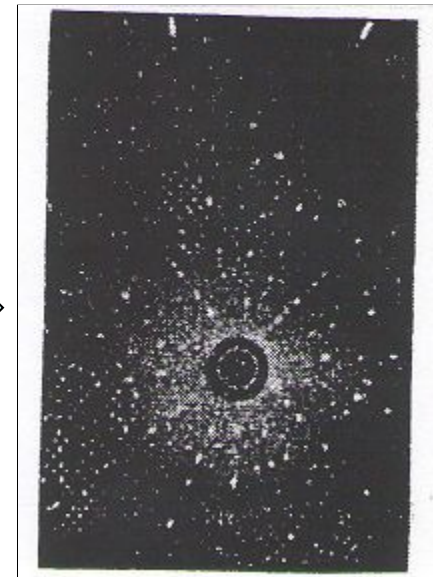
6
6
6
6

МЕТОД ЛАУЭ

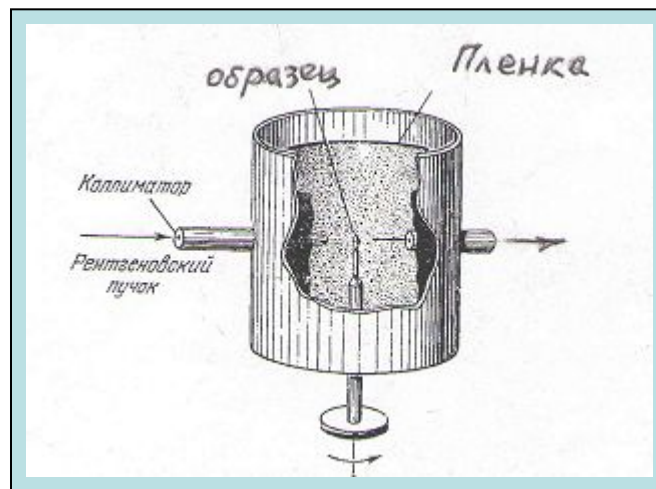


← Схема камеры Лауэ

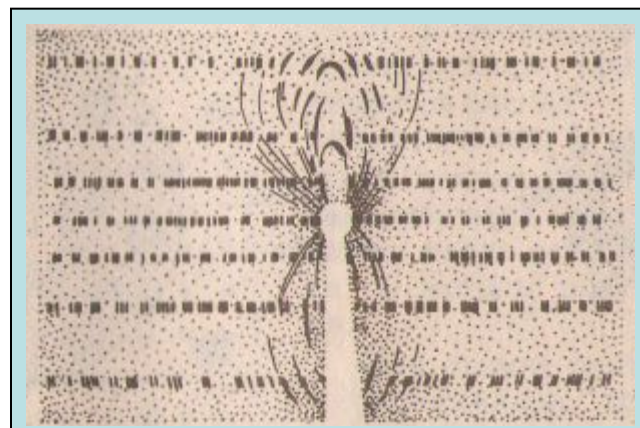
Дифракционная картина →



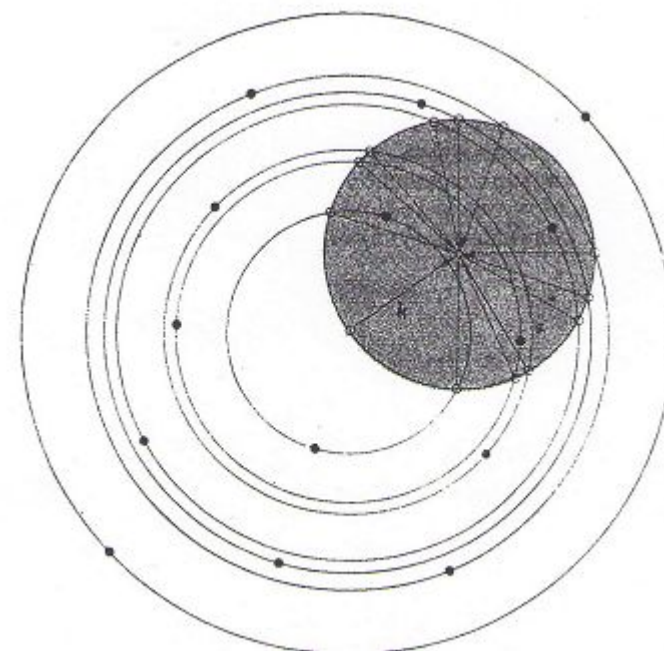
МЕТОД ВРАЩАЮЩЕГОСЯ КРИСТАЛЛА



← Схема камеры в методе вращающегося кристалла



↑
Типичная рентгенограмма при вращении кристалла



↑
Построение Эвальда для метода вращающегося кристалла

МЕТОД ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА

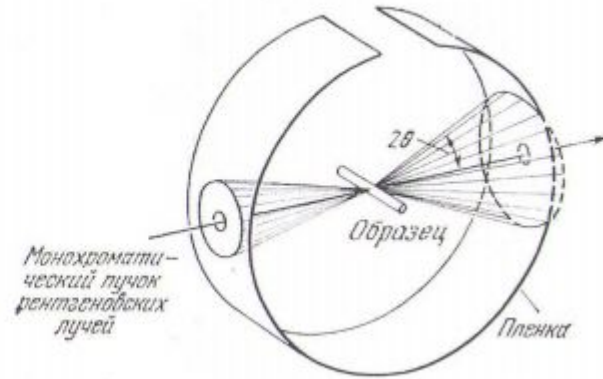
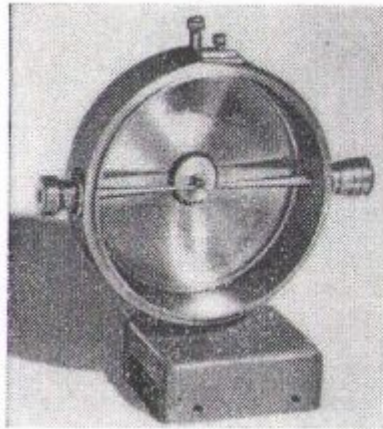
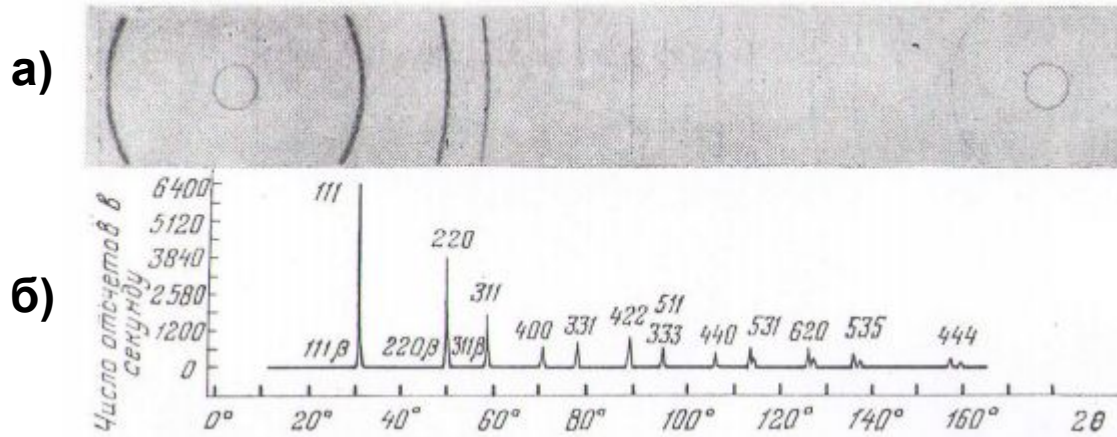
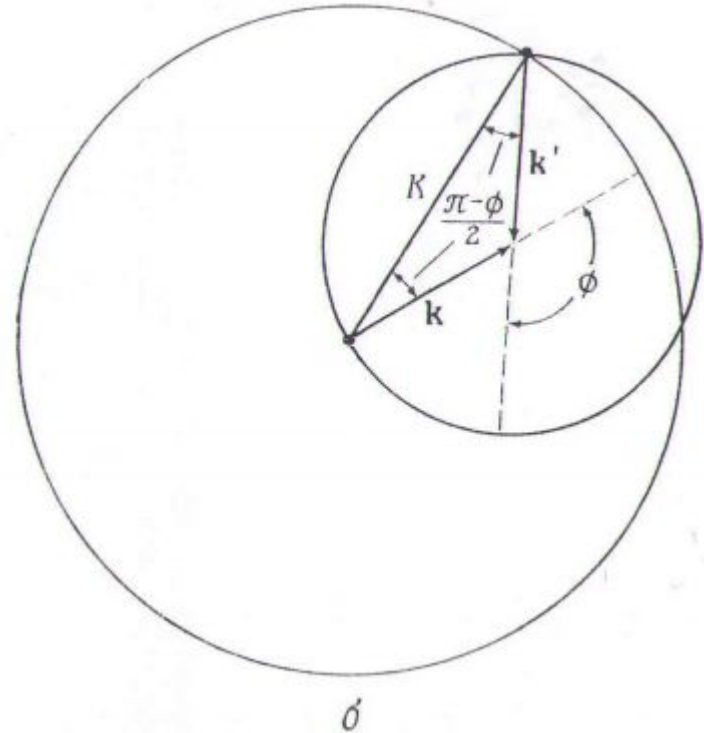
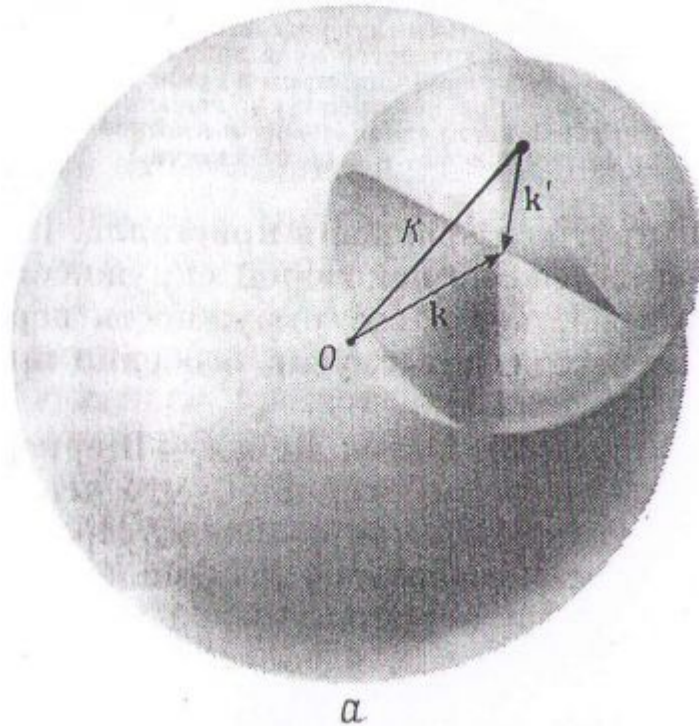


Схема камеры в методе Дебая-Шеррера



Рентгенограммы кремния, полученные методом Дебая-Шеррера: а) на пленке; б) с помощью счетчика

ПОСТРОЕНИЕ ЭВАЛЬДА ДЛЯ МЕТОДА ДЕБАЯ-ШЕРРЕРА



Каждый вектор \vec{K} обратной решетки производит сферу с радиусом K в начальной точке O (а); вектор, соединяющий точки этой окружности с концом вектора падающего излучения, есть волновой вектор рассеянного излучения. Каждый вектор обратной решетки дает конус рассеянного излучения, образующий угол ϕ с направлением падения.