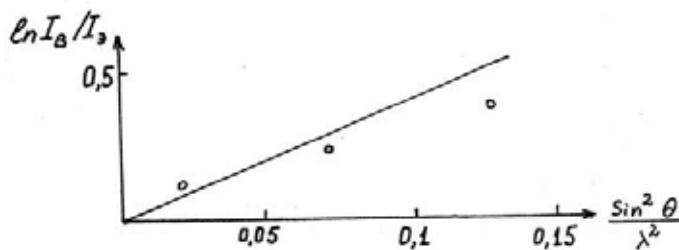


### 1.6.7 Влияние температуры на интенсивность Брэгговских отражений

Как можно было заметить из предыдущего рассмотрения, определяющим параметром в интенсивности наблюдаемых отражений от кристалла является разность фаз рассеянных атомами волн, складывающихся при интерференции. До сих пор мы полагали, что упругое рассеяние происходит в кристалле с неподвижными атомами. Но ясно, что даже при температуре вблизи абсолютного нуля в кристалле есть тепловые колебания атомов.

Амплитуда этих колебаний растет с увеличением температуры, а колеблющийся атом занимает уже больший объем пространства, чем атом неподвижный. Следствием этого является систематическое превышение вычисленных значений структурных амплитуд по сравнению с экспериментальными, увеличивающееся по мере роста угла рассеяния. Этот эффект тепловых колебаний можно учесть, умножая  $F_{\text{выч}}$  на величину  $\exp[-B \cdot (\sin^2 \Theta) / \lambda^2]$ , где температурный фактор  $B > 0$ . Соответственно, величина этого множителя (всей степени) меньше 1.



Принимая во внимание, что  $I \sim F^2$ ,  $\ln(I_3 / I_0) = -2B (\sin^2 \Theta) / \lambda^2$ , можно построить график **Рис.18**, на котором  $\text{tg} \alpha = 2B$ .

**Рис.18.** Зависимость  $\ln(I_3 / I_0)$  от  $(\sin^2 \Theta) / \lambda^2$

Температурный фактор  $B$ , связанный со среднеквадратичным отклонением каждого атома от своего равновесного положения ( $B = 8\pi^2 \langle u_j^2 \rangle$ , где  $u = [\Delta r_j]$ ), позволяет найти соответствие между теоретическими и экспериментальными величинами атомного фактора рассеяния:

$$f_3 = f_B \cdot e^{-B(\sin \Theta) / \lambda^2}. \quad (28)$$