

1.7 Дифракция рентгеновских лучей

Дифракция рентгеновских лучей, рассеяние рентгеновских лучей кристаллами (или молекулами жидкостей и газов), при котором из начального пучка лучей возникают вторичные отклонённые пучки той же длины волны, появившиеся в результате взаимодействия первичных рентгеновских лучей с электронами вещества; направление и интенсивность вторичных пучков зависят от строения рассеивающего объекта.

Дифрагированные пучки составляют часть всего рассеянного веществом рентгеновского излучения. Наряду с рассеянием без изменения длины волны наблюдается рассеяние с изменением длины волны — так называемое комптоновское рассеяние. Явление дифракции рентгеновских лучей, доказывающее их волновую природу, впервые было экспериментально обнаружено на кристаллах немецкими физиками М.Лауэ, В. Фридрихом и П. Книппингом в 1912.

Кристалл является естественной трёхмерной дифракционной решеткой для рентгеновских лучей, т.к. расстояние между рассеивающими центрами (атомами) в кристалле одного порядка с длиной волны рентгеновских лучей ($\sim 1\text{Å} = 10^{-8}\text{ см}$). Дифракция рентгеновских лучей на кристаллах можно рассматривать как избирательное отражение рентгеновских лучей от систем атомных плоскостей кристаллической решётки (определяется условием Брэгга-Вульфа). Направление дифракционных максимумов удовлетворяет одновременно трём условиям:

$$a (\cos a - \cos a_0) = Hl,$$

$$b (\cos b - \cos b_0) = Kl,$$

$$c (\cos g - \cos g_0) = Ll.$$

Здесь a, b, c — периоды кристаллической решетки по трём её осям; a_0, b_0, g_0 — углы, образуемые падающим, а a, b, g — рассеянным лучами с осями кристалла; l — длина волны рентгеновских лучей, H, K, L — целые числа. Эти уравнения называются уравнениями Лауэ.

Дифракционная решётка, оптический прибор, представляющий собой совокупность большого числа параллельных, равноотстоящих друг от друга штрихов одинаковой формы, нанесённых на плоскую или вогнутую оптическую поверхность. Дифракционная решетка представляет собой периодическую структуру: штрихи с определённым и постоянным для данной решётки профилем повторяются через строго одинаковый промежуток d , называется периодом дифракционной решетки.

Брэгга — Вульфа условие, условие, определяющее положение интерференционных максимумов рентгеновских лучей, рассеянных кристаллом без изменения длины волны. Условие Брэгга-Вульфа установлено в 1913 независимо друг от друга английским учёным У. Л. Брэггом и русским учёным Г.В.Вульфом вскоре после открытия немецким учёным М. Лауэ и его сотрудниками дифракции рентгеновских лучей. Согласно теории Брэгга - Вульфа, максимумы возникают при отражении рентгеновских лучей от системы параллельных кристаллографических плоскостей, когда лучи, отражённые разными плоскостями этой системы, имеют разность хода, равную целому числу длин волн. Условие Брегга - Вульфа можно записать в следующем виде:

$$2d \sin J = ml, \quad (29)$$

где d — межплоскостное расстояние, J — угол скольжения, т. е. угол между отражающей плоскостью и падающим лучом, l — длина волны рентгеновского излучения и m — так называемый, порядок

отражения, т. е. положительное целое число (**Рис.19**).

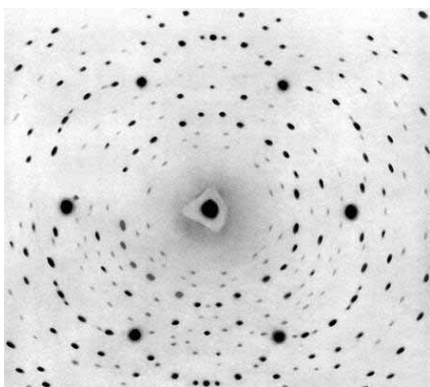
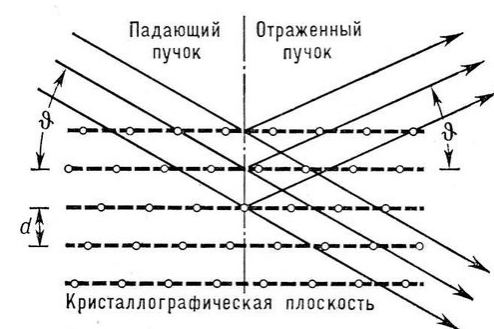
Условие Брегга-Вульфа выполняется при рассеянии кристаллами не только рентгеновских лучей, но также γ -лучей, при дифракции электронов, протонов и нейтронов.

Рис.19. Условие Брегга-Вульфа

Дифракционную картину получают либо от неподвижного кристалла с помощью рентгеновского излучения со сплошным спектром (так называемая лауэграмма; **Рис.20**), либо от вращающегося или колеблющегося кристалла (углы a_0, b_0 меняются, а g_0 остаётся постоянным), освещаемого монохроматическим рентгеновским излучением (l - постоянно), либо от поликристалла, освещаемого монохроматическим излучением. В последнем случае, благодаря тому что отдельные кристаллы в образце ориентированы произвольно, меняются углы a_0, b_0, g_0 .

Рис. 20. Лауэграмма берилла.

Интенсивность дифрагированного луча зависит в первую очередь от так называемого структурного фактора, который определяется атомными факторами атомов кристалла, их расположением внутри элементарной ячейки кристалла, а также характером тепловых колебаний атомов. Структурный фактор зависит от симметрии расположения атомов в элементарной



ячейке. Интенсивность дифрагированного луча зависит также от размеров и формы объекта, от совершенства кристалла и прочего.

Дифракция рентгеновских лучей от поликристаллических тел приводит к возникновению резко выраженных конусов вторичных лучей. Осью конуса является первичный луч, а угол раствора конуса равен $4J$ (J — угол между отражающей плоскостью и падающим лучом). Каждый конус соответствует определённому семейству кристаллических плоскостей. В создании конуса участвуют все кристаллики, семейство плоскостей которых расположено под углом J к падающему лучу. Если кристаллики малы и

их приходится очень большое количество на единицу объёма, то конус лучей будет сплошным. В случае текстуры, т. е. наличия предпочтительной ориентировки кристалликов, дифракционная картина (рентгенограмма) будет состоять из неравномерно зачернённых колец.

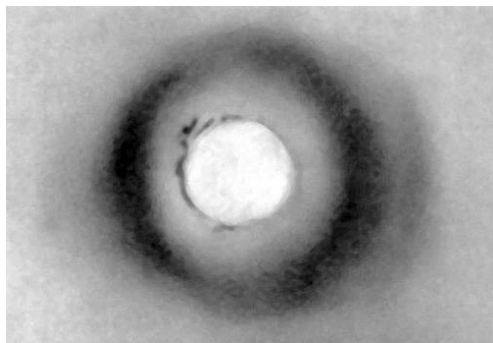


Рис. 21. Рентгенограмма воды.

Метод дифракции рентгеновских лучей на кристаллах дал возможность определять длину волны рентгеновских лучей, если известна структура кристаллической решётки, благодаря чему возникла рентгеновская спектроскопия, сыгравшая важную роль

при установлении строения атома. Наблюдения Дифракция рентгеновских лучей известной длины волны на кристалле неизвестной структуры позволяют установить характер этой структуры (расположение ионов, атомов и молекул, составляющих кристалл), что послужило основой рентгеновского структурного анализа.

Дифракция рентгеновских лучей наблюдается также при рассеянии их аморфными твёрдыми телами, жидкостями и газами. В этом случае на кривой зависимости интенсивности от угла рассеяния вокруг центрального пятна появляются широкие кольца типа гало (**Рис.21**). Положение этих колец (угол J) определяется средним расстоянием между молекулами или расстояниями между атомами в молекуле. Из зависимости интенсивности от угла рассеяния можно определить распределение плотности вещества.

Дифракцию рентгеновских лучей можно наблюдать также на обычной оптической дифракционной решётке при скользющем падении (меньше угла полного отражения) рентгеновских лучей на решётку. С помощью этого метода можно непосредственно и с большой точностью измерять длины волн рентгеновских лучей.