

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Ivo Kraus

Fyzikální podstata teplotního difúzního rozptylu rentgenových paprsků

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 14 (1969), No. 3, 132--143

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139903>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1969

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

FYZIKÁLNÍ PODSTATA TEPLOTNÍHO DIFÚZNÍHO ROZPTYLU RENTGENOVÝCH PAPRSKŮ

IVO KRAUS, Praha

ÚVOD

Difrakční snímky krystalických látek získané pomocí rentgenových paprsků, elektronů nebo neutronů jsou tvořeny selektivními maximy a difúzním pozadím. Přestože dosud patří hlavní pozornost rentgenologů analýze normálních Laueových reflexí, vzrůstá poslední dvě desetiletí zájem i o teplotní difúzní rozptyl (dále jen difúzní rozptyl). Z rozdělení intenzity difúzně rozptýleného záření lze určit např. statické a dynamické poruchy struktury, koeficienty tenzoru elasticity i řadu dalších údajů o reálných krystalech. Teorie difúzního rozptylu, experimentální metody a aplikace jsou však podstatně méně známé než strukturní analýza využívající výsledků studia selektivních difrakcí.

První práce, které se velmi úzce dotýkaly difúzně rozptýlené části záření, uveřejnil v letech 1913—14 DEBYE [1]. Jeho hlavním cílem bylo však rozpracování teorie poklesu intenzity normálních rtg. reflexí vlivem tepelných kmitů atomů. Na dalším řešení tohoto problému pokračovali později FAXEN [2] a WALLER [3], kteří již zahrnuli do svých úvah elastickou anizotropii krystalů. Bylo ukázáno, že tepelné kmity atomů si lze při všech teplotách nad absolutní nulou představit jako superpozici velkého počtu elastických vln s různými frekvencemi a směry šíření. Pomocí tohoto předpokladu se podařilo kvantitativně vyjádřit snížení intenzit normálních Laueových (Braggových) reflexí.

Sérii prací zaměřených přímo k otázkám difúzního rozptylu zahájil v roce 1939 LAVAL [4]. O rok později doplnil Lavalovu teorii ZACHARIASEN [5], který ji také experimentálně prověřil na kamenné soli. V té době vznikl dlouholetý spor o fyzikální podstatu difúzního rozptylu v diamantu mezi indickou skupinou, jejímž představitelem byl RAMAN, a odpůrci reprezentovanými WALLEREM. Zatímco Wallerova teorie spojovala difúzní rozptyl s elastickými vlnami, které se neustále šíří krystalem, podle Ramana [6] jsou vlny vyvolávající difúzní rozptyl generovány teprve dopadajícími rtg. paprsky.

Poslední práce ukázaly, že efekt difúzního rozptylu je možno obecně rozdělit na dvě skupiny jevů. Efekty první grupy jsou vysvětlovány termicky vzbuzenými elastickými vlnami — jak předpokládal Waller, efekty druhé grupy mají původ v odchylkách statistického rozdělení atomů v krystalu. Rozpory, k nimž došlo při budování teorie rozptylu v diamantu, způsobila skutečnost, že zde přicházejí v úvahu oba druhy rozptylu. Na dalším rozvoji teorie teplotního difúzního rozptylu se podíleli např. BEGBIE a BORN [7].

Mezi první využívané aplikace tohoto typu rozptylu patří určování elastických

konstant monokrystalů (po uveřejnění Lavalovy práce v roce 1938) a studium spekter elastických kmitů Al, α -Fe, β -mosazi a Zn (od první poloviny padesátých let). V poslední době se využívá difúzního rozptylu také ke stanovení tvaru a orientace molekul v molekulárních krystalech.

Odpovědi na otázky týkající se tohoto odvětví rentgenografie nám dává zatím až na výjimky pouze zahraniční literatura, např. [8, 9, 10, 11] — nejpřístupnější formou je psána vynikající monografie WOOSTEROVA. Z našich autorů se difúzním rozptylem zabýval TOMAN [12] (podal teoretickou analýzu difúzních skvrn na rentgenogramech soustavy Al — 4% Cu) a SYNEČEK se SIMERSKOU [13], kteří odvodili jednoduchý vztah pro stanovení příspěvku difúzního rozptylu k integrálním intenzitám od monokrystalů.

FORMULACE ÚLOHY PRO ANALYTICKÉ VYJÁDRĚNÍ TEPLOTNÍHO DIFÚZNÍHO ROZPTYLU

Již od počátku strukturního výzkumu krystalů bylo zřejmé, že atomy mřížky nejsou v klidu, nýbrž kmitají kolem svých rovnovážných poloh; energie tohoto pohybu se zvětšuje s růstem teploty. Vliv kmitání atomů v krystalické mřížce na difrakci rtg. záření je analogický účinku rozšiřování vrypů difrakční mřížky na optická spektra. Debye a Waller ukázali, že intenzita reflektovaného rtg. záření je dána při teplotě T vztahem

$$I_T = I_0 e^{-2M}.$$

Symbol I_0 označuje intenzitu odpovídající pravidelnému stacionárnímu uložení atomů,

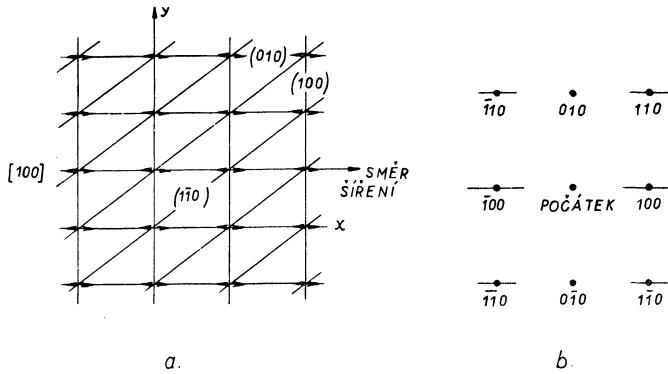
$$M = 8\pi^2 \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2} \bar{u}_x^2,$$

kde \bar{u}_x^2 je střední kvadratická výchylka atomů ve směru x (z ideální rovnovážné polohy), tj. ve směru kolmém k systému refl. rovin. Přestože se intenzita Laueových reflexí tepelnými kmity snižuje, celková rozptýlená energie zůstává konstantní. V recipročním prostoru se snížení rozptylové schopnosti určitého uzlu kompenzuje rozšířením reflexní schopnosti na oblast mimo uzly. Jak lze tento efekt vysvětlit? Tepelné kmity o frekvenci řádu 10^{13} sec^{-1} jsou ve srovnání s frekvencí rtg. paprsků (10^{18} sec^{-1}) velmi pomalé. Vzhledem k rtg. paprskům se tedy atomy mřížky jeví klidné, pouze vysunuté ze svých středních poloh. Krystal jako soubor kmitajících atomů můžeme popsat v libovolném okamžiku pomocí $3N$ stojatých vln, které se vzájemně překládají (N je počet atomů v krystalu). Sledujme jednu z těchto vln a zkoumejme, jaký vliv má na reflexi rtg. paprsků v různých rovinách.

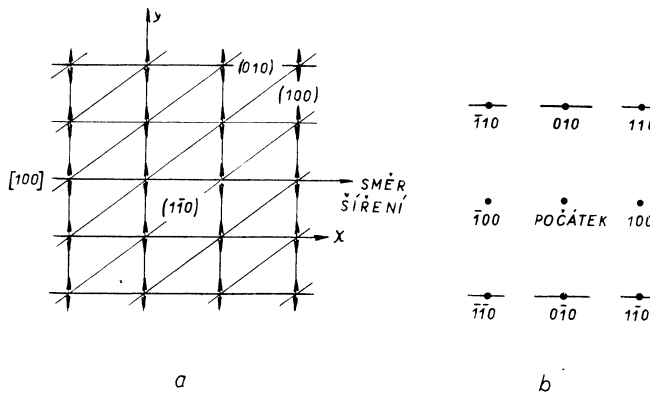
Existence vlny, kterou lze vzhledem k poměru frekvencí kmitů atomů a rtg. záření považovat za stojatou, způsobuje „rozmazání“ uzlu reciproké mřížky, rozšíření jeho

reflexní schopnosti ve směru postupu vlny. Jedné vlně však neodpovídá „spojité rozšíření uzlu“, ale pouze dvojice reflexních bodů nacházejících se po jednom na každé straně uzlu reciproké mřížky. Poloha těchto „mimořádných“ bodů vzhledem k normálním uzlům reciproké mřížky závisí na směru, v němž se elastická vlna šíří krystalem; jejich vzdálenost od uzlu je nepřímo úměrná příslušné vlnové délce (uzlu tedy náleží vlna nekonečné délky).

Pro ilustraci uvedeme 2 jednoduché konkrétní příklady. Na obr. 1 jsou znázorněny části vrstev krystalové a odpovídající reciproké mřížky pro ortorombický krystal (osa z míří kolmo k nákresu).



Obr. 1. Rozšíření reflexní oblasti v recipročném prostoru vlivem podélných kmitů. a) krystalová mřížka, b) reciproká mřížka.



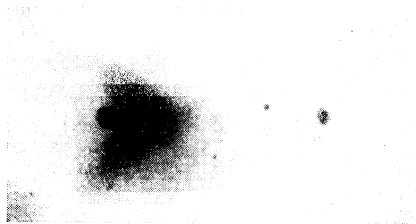
Obr. 2. Rozšíření reflexní oblasti v recipročném prostoru vlivem příčných kmitů. a) krystalová mřížka, b) reciproká mřížka.

Body dalších vrstev reciproké mřížky leží přesně nad body nebo pod body této vrstvy reciproké mřížky. Bod $hk1$ leží nad bodem $hk0$ a bod $hk\bar{1}$ těsně pod ním. Na obrázku je dále znázorněn efekt podélných vln o směru šíření $[100]$. V tomto směru, tedy kolmo k rovinám (100), nastává posun atomů; zůstanou-li atomy i při vysunutí

z rovnovážných poloh v téže rovině, reflektovaná intenzita se nezmění. Největší změnu intenzity vyvolají posunutí kolmé na reflexní rovinu. Vliv posunutí ve směru $[100]$ na intenzitu rozptylu bude tedy největší pro uzly $h00$ reciproké mřížky a nulový pro uzly $0k0$.

Na obr. 2 je znázorněn analogický případ s účinkem příčných vln šířících se ve směru $[100]$.

Působením $3N$ tepelných vln s různými polarizacemi, amplitudami a směry šíření na atomy v uzlových bodech krystalické struktury vznikne určitá „reflexní oblast“ kolem každého uzlu reciproké mřížky. Obecně se budou tvary těchto oblastí u jednotlivých uzlů lišit. Jak se projeví tyto změny na rentgenogramu? Místo reflexe vznikající pouze tehdy, jestliže se uzel reciproké mřížky nachází na reflexní kouli, dojde nyní k reflexi i v tom případě, prochází-li reflexní koule v takové blízkosti k uzlu reciproké mřížky, aby protínala body „reflexní oblasti“, která ho obklopuje. I když každá vlna nevede u všech difrakčních skvrn ke vzniku svého satelitu (např. uzly $0k0$ na obr. 1 nebo $h00$ na obr. 2), je přesto jejich počet na rentgenogramech reálných krystalů tak veliký, že splývají kolem Laueho difrakčních skvrn ve spojitou oblast difúzního rozptylu. Na obr. 3 je pro ilustraci uveden rentgenogram difúzního rozptylu, který odpovídá uzlu 400 reciproké mřížky monokrystalu Pb.



Obr. 3. Rentgenogram difúzního rozptylu, který odpovídá uzlu 400 reciproké mřížky monokrystalu Pb.

Jak bude ještě dále uvedeno, je intenzita příslušná jednotlivým bodům „reflexní oblasti“ podstatně menší než intenzita normálních Laueho reflexí.

Abychom mohli exaktně objasnit vznik uvedených satelitů, budeme stručně formulovat fyzikální podstatu tohoto úkolu tak, jak to učinil Wooster. Uvažujme nejprve dvě jednoduché úlohy:

1. Jaký vliv má čistě sinusoidální rozdělení hustoty prostředí na rozptyl rtg. paprsků.

2. Jaký vliv na toto první rozdělení bude mít další – opět sinusoidální – rozdělení, které se přes první překládá; vlnová délka druhého rozdělení je přitom velká vzhledem k délce vlny prvního rozdělení.

Tyto dvě úlohy vlastně ilustrují podstatu problému, který vzniká při studiu mřížky porušené elastickými vlnami, neboť elektronovou hustotu uvnitř základní buňky je možno vyjádřit harmonickou řadou.

Je tedy zřejmé, že

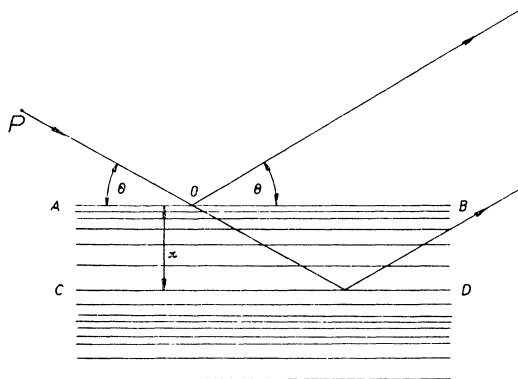
a) každá normální Laueova reflexe získaná z neporušeného krystalu odpovídá úloze 1,

b) Laueova reflexe obklopená satelity – získaná z mřížky krystalu, jímž se šíří elastické vlny – odpovídá úloze 2.

ODVOZENÍ ZÁKLADNÍCH ROVNIC TEPLITNÍHO DIFÚZNÍHO ROZPTYLU RENTGENOVÝCH PAPRSKŮ

a) *Difrakce na rovnoběžných rovinách, jejichž hustota je vyjádřena sinusoidálním rozdělením.*

Předpokládejme, že rtg. paprsky dopadají na soustavu rovnoběžných rovin rozptylujícího materiálu ve směru PO (obr. 4).



Obr. 4. Reflexe rentgenových paprsků na rovnoběžných rovinách, jejichž vzájemné vzdálenosti se mění sinusoidálně.

Dráhový rozdíl paprsků reflektovaných rovinami AB a CD je $2x \sin \vartheta$, příslušný fázový rozdíl se rovná $\delta = 2\pi/\lambda \cdot 2x \sin \vartheta$, kde λ je vlnová délka rtg. paprsků. Označme hustotu materiálu na hladině CD symbolem ϱ_x . Pak bude amplituda vlny rozptýlené na hladině CD vrstvou o síle dx úměrná $\varrho_x dx$.

Jestliže vyjádříme změnu hustoty rozptylujícího materiálu sinusoidálním zákonem, máme

$$(1) \quad \varrho_x = \varrho + \varrho_1 \cos \frac{2\pi x}{\lambda},$$

kde ϱ je střední elektronová hustota, ϱ_1, L, \dots amplituda, resp. délka vlny charakterizující změnu elektronové hustoty.

Utvoříme-li součin $\varrho_x dx \exp(i\delta)$, dostaneme amplitudu vlny rozptýlené na hladině

CD vrstvou materiálu o síle dx . Integrace tohoto součinu od $x = 0$ do $x = L$ dává amplitudu vlny rozptýlené vrstvou tloušťky L

$$(2) \quad \int_0^L \left(\varrho + \varrho_1 \cos 2\pi \frac{x}{L} \right) \exp(i\delta) dx = \varrho_1 \frac{L}{2}.$$

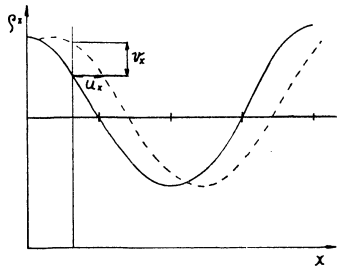
Toto řešení však dostáváme pouze v případě, když

$$(3) \quad 2L \sin \vartheta = \lambda.$$

Sinusoidální rozdělení hustoty rozptylujícího materiálu s danou periodou L vede tedy k rozptylu rtg. paprsků jenom při úhlu ϑ splňujícím podmínku (3). Ze vztahu (3) dále vyplývá, že na rozdíl od rozptylu na rovnoběžných rovinách, jejichž hustota je rozdělena rovnoměrně, nemohou při sinusoidálním rozptylu vznikat reflexe vyšších řádů.

b) Difrakce na rovnoběžných rovinách, jejichž hustota je dána sinusoidálním rozdělením porušeným podélnou vlnou s velkou vlnovou délkou.

Uvažujme sinusoidální rozdělení hustoty rozptylujícího materiálu, zavedené v předchozím odstavci, na které působí poruchová vlna s velkou délkou. Obě vlny mají vlnoplochy rovnoběžné s reflektujícím povrchem AB . Délku poruchové vlny označme λ , její amplitudu ϱ' . Jestliže tato vlna na prostředí nepůsobí, pak můžeme funkci $\varrho_x(x)$ znázornit plně vytaženou křivkou na obr. 5.



Obr. 5. Změna elektronové hustoty podél normály k vlnoploše při průchodu elastické vlny.

Účinek poruchové vlny se projevuje dvěma způsoby:

1. posunem rozdělení hustoty ϱ_x podél osy x do polohy zobrazené přerušovanou čarou,
2. roztážením nebo stlačením rozptylujícího materiálu.

První efekt změní hustotu o hodnotu $v_x = -u_x (\partial \varrho_0 / \partial x)$, kde u_x je posun objemového elementu (v hloubce x pod povrchem), k němuž dojde účinkem vlny s velkou délkou, $\varrho_0 \dots$ původní (neporušená) hustota v hloubce x . Druhý efekt změní hustotu

$(1 - \partial u_x / \partial x)$ krát. Hustota rovin v hloubce x je tedy dána vztahem

$$(4) \quad \varrho_x = \left(\varrho_0 - u_x \frac{\partial \varrho_0}{\partial x} \right) \left(1 - \frac{\partial u_x}{\partial x} \right).$$

Primární vlnu – charakterizující rozdělení hustoty reflexních rovin – lze podle (1) vyjádřit takto

$$(5) \quad \varrho_0 = \varrho + \varrho_1 \cos 2\pi \frac{x}{L},$$

kde ϱ je střední elektronová hustota.

Sekundární – poruchová – vlna je dána funkcí

$$(6) \quad u_x = \varrho' \cos 2\pi \frac{x}{\Lambda}$$

($\Lambda = k \cdot L$, kde k je celé číslo).

Derivací (5), (6) dostaneme vztahy

$$(7) \quad \frac{\partial \varrho_0}{\partial x} = -\varrho_1 \frac{2\pi}{L} \sin 2\pi \frac{x}{L},$$

$$(8) \quad \frac{\partial u_x}{\partial x} = -\varrho' \frac{2\pi}{\Lambda} \sin 2\pi \frac{x}{\Lambda}.$$

Dosazením (5), (6), (7), (8) do (4) máme

$$(9) \quad \varrho_x = \left(\varrho + \varrho_1 \cos 2\pi \frac{x}{L} + \varrho' \cos 2\pi \frac{x}{\Lambda} \varrho_1 \frac{2\pi}{L} \sin 2\pi \frac{x}{L} \right) \left(1 + \varrho' \frac{2\pi}{\Lambda} \sin 2\pi \frac{x}{\Lambda} \right).$$

Analogicky jako v případě diskutovaném v předchozím odstavci vyjádříme i nyní amplitudu vlny rozptýlené na tenké vrstvě v hloubce x vztahem $\varrho_x \exp(i\delta) dx$. Právě tak jako jsme dospěli integrací této amplitudy v mezích od $x = 0$ do $x = L$ k podmínce (3), dává nyní po dosazení za ϱ_x z (9) integrace

$$\int_0^L \varrho_x \exp(i\delta) dx$$

tyto nenulové členy

$$\int_0^L \varrho \varrho' \frac{2\pi}{\Lambda} \sin 2\pi \frac{x}{\Lambda} \cos \delta dx \neq 0 \quad \text{pro} \quad \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda} = \frac{1}{\Lambda},$$

$$\int_0^L \varrho_1 \cos 2\pi \frac{x}{L} \cos \delta dx \neq 0 \quad \text{pro} \quad \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda} = \frac{1}{L},$$

$$\int_0^A \varrho_1 \varrho' \frac{2\pi}{L} \cos \frac{2\pi x}{L} \sin 2\pi \frac{x}{A} \cos \delta \, dx \neq 0 \quad \text{pro} \quad \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda} = \left(\frac{1}{L} - \frac{1}{A} \right),$$

$$\int_0^A \varrho_1 \varrho' \frac{2\pi}{L} \cos 2\pi \frac{x}{A} \sin 2\pi \frac{x}{L} \cos \delta \, dx \neq 0 \quad \text{pro} \quad \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda} = \left(\frac{1}{L} + \frac{1}{A} \right).$$

Předpokládáme-li $A \gg L$, pak se podmínka $2 \sin \vartheta / \lambda = 1/A$ týká jen rozptylu pod malými úhly. (Pro velké A může nabývat ϑ pouze malých hodnot, neboť L i λ jsou stejného řádu.)

Podmínka $2 \sin \vartheta / \lambda = 1/L$ odpovídá normálnímu rozptylu. (Pro $L = d$ dostaneme Braggovu rovnici, v níž $n = 1$.)

Konečně hodnoty ϑ , pro něž platí

$$\frac{2 \sin \vartheta}{\lambda} = \begin{cases} \frac{1}{L} - \frac{1}{A} \\ \frac{1}{L} + \frac{1}{A} \end{cases}$$

náleží satelitním skvrnám nacházejícím se po obou stranách hlavního maxima.

c) Zobecnění na trojrozměrnou mřížku

Struktura krystalu je popsána mřížkou sestavenou ze základních vektorů \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , souřadnicemi atomů (x_r, y_r, z_r) obsažených v základní buňce a atomovými faktory f_r .

Místo představy diskrétního rozložení určitých atomů, které se opakuje v každé buňce, můžeme uvažovat také spojité rozdělení hmoty po celém krystalickém prostoru. Toto rozdělení je dáno v každém bodě elektronovou hustotou ϱ_0 , tj. počtem elektronů v jednotkovém objemu obsahujícím uvažovaný bod. Elektronovou hustotu vyjadřujeme jako spojitou funkci tří proměnných v souřadném systému, jehož osami jsou hrany základní buňky \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} . Jednotkovými délkami ve směru os jsou délky a , b , c .

Jelikož základní vlastností krystalické látky je periodicitu, musí být hustota $\varrho_0(X, Y, Z)$ periodickou funkcí třech proměnných s jednotkovou periodou vzhledem ke každé z těchto proměnných.

Pro takto popsaný krystal nyní vyjádříme strukturní amplitudu. Obvyklý vztah

$$(10) \quad F_{hkl} = \sum f_r \exp [-2\pi i(hx_r + ky_r + lz_r)]$$

nahradíme integrálem přes jednotkový objem V_c základní buňky

$$(11) \quad F_{hkl} = \int_{V_c} \varrho_0(XYZ) \exp [-2\pi i(hX + kY + lZ)] \, dv.$$

Z teorie Fourierových řad plyne, že elektronovou hustotu $\varrho_0(XYZ)$ trojnásobně periodickou vzhledem k X, Y, Z můžeme psát ve tvaru nekonečné řady členů typu

$$(12) \quad A_{pqr} \exp [2\pi i(pX + qY + rZ)],$$

kde p, q, r jsou celá čísla (kladná nebo záporná), A_{pqr} – koeficient (obecně komplexní) závislý na p, q, r .

Lze tedy napsat

$$(13) \quad \varrho_0(XYZ) = \sum_p \sum_q \sum_r A_{pqr} \exp [2\pi i(pX + qY + rZ)].$$

Strukturní amplituda F_{hkl} má nyní tvar

$$(14) \quad F_{hkl} = \sum_p \sum_q \sum_r \int_{V_c} A_{pqr} \exp [2\pi i(pX + qY + rZ)] \exp [-2\pi i(hX + kY + lZ)] dv.$$

Vyjádříme-li ještě element objemu dv pomocí souřadnic X, Y, Z

$$dv = V_c dX dY dZ,$$

bude

$$(15) \quad F_{hkl} = \sum_p \sum_q \sum_r V_c A_{pqr} \int_0^1 \exp [2\pi i(p - h) X] dX \cdot \\ \cdot \int_0^1 \exp [2\pi i(q - k) Y] dY \int_0^1 \exp [2\pi i(r - l) Z] dZ.$$

Každý z integrálů (15) až na případy $p = h, q = k, r = l$ je roven nule, takže platí

$$(16) \quad F_{hkl} = V_c A_{hkl}.$$

Použijeme-li dále přepisu

$$A_{hkl} = |A_{hkl}| \exp i\alpha_{hkl},$$

bude mít (13) v nových indexech hkl tvar

$$\varrho_0(XYZ) = \sum_h \sum_k \sum_l |A_{hkl}| \exp i[2\pi(hX + kY + lZ) + \alpha_{hkl}].$$

Protože hustota $\varrho_0(XYZ)$ je reálná veličina, máme

$$(17) \quad \varrho_0(XYZ) = \sum_h \sum_k \sum_l A_{hkl} \cos [2\pi(hX + kY + lZ) + \alpha_{hkl}]$$

(A_{hkl} je dále již reálné).

Je-li \mathbf{r} vektor spojující počátek krystalické mřížky s bodem XYZ a \mathbf{R}_m^* vektor reciproké mřížky spojující počátek souřadnic s uzlem $hkl \equiv m$ reciproké mřížky, pak

$$(18) \quad hX + kY + lZ = \mathbf{R}_m^* \mathbf{r},$$

takže pro elektronovou hustotu $\varrho_0(\mathbf{r})$ v bodě základní buňky, který je určen koncem vektoru \mathbf{r} vedeného z počátku souřadnic, dostáváme konečný tvar

$$(19) \quad \varrho_0(\mathbf{r}) = \sum_m A(m) \cos 2\pi(\mathbf{R}_m^* \mathbf{r} + \alpha_m),$$

kde $A(m)$ je amplituda vlny elektronové hustoty příslušná k uzlu m reciproké mřížky, α_m – fáze vlny elektronové hustoty; v dalším ji budeme považovat za nulovou, neboť se zaměříme pouze na středově symetrické krystaly.

Předpokládejme, že porucha rozdělení elektronů v krystalech, vyvolaná harmonickou vlnou, se projevuje posunutím elektronů ve směru normály k vlnoploše. Obecný výraz pro vektor posunutí \mathbf{u} rovinné monochromatické elastické vlny v krystalu může být napsán ve tvaru

$$(20) \quad \mathbf{u} = \xi \exp i(kr - \omega t).$$

ξ je zde vektor amplitudy vlny – konstantní vektor nezávislý na souřadnicích ani na směru.

Exponenciální výraz $\exp(i\varphi)$, kde $\varphi = kr - \omega t$ se nazývá fázový činitel, $\omega = 2\pi\nu \dots$ kruhová frekvence, $\nu \dots$ frekvence – počet kmitů vektoru posunutí za sec., $\mathbf{k} \dots$ vlnový vektor, $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$, kde λ je vlnová délka.

Zavedeme vektor \mathbf{K}^* reciprokého prostoru orientovaný ve směru normály k vlnoploše

$$\mathbf{K}^* = \mathbf{k}/2\pi, \quad |\mathbf{K}^*| = 1/\lambda.$$

Pro φ máme tedy $\varphi = 2\pi(\mathbf{K}^* \mathbf{r} - \nu t)$, takže $\mathbf{u} = \xi \exp 2\pi i(\mathbf{K}^* \mathbf{r} - \nu t)$.

Reálná část tohoto výrazu

$$(21) \quad \mathbf{u} = \xi \cos 2\pi(\mathbf{K}^* \mathbf{r} - \nu t)$$

popisuje posunutí \mathbf{u} vyvolané uvažovanou elastickou vlnou. Jak už bylo dříve uvedeno, působení vlny s velkou vlnovou délkou se projevuje celkovým posunem materiálu a změnou hustoty vlivem zhuštění (stlačení), resp. zředění ve vlně.

Změněnou hustotu vyjádřenou součinem členů charakterisujících celkový posun a zhuštění, zobecníme nyní takto

$$(22) \quad \varrho_0(\mathbf{r})' = \left(\varrho_0(\mathbf{r}) - u_1 \frac{\partial \varrho_0}{\partial x_1} - u_2 \frac{\partial \varrho_0}{\partial x_2} - u_3 \frac{\partial \varrho_0}{\partial x_3} \right) \left(1 - \frac{\partial u_1}{\partial x_1} - \frac{\partial u_2}{\partial x_2} - \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right),$$

kde u_1, u_2, u_3 jsou složky \mathbf{u} .

Provedeme-li ve výrazu (22) násobení, pak po zanedbání členů vyšších řádů máme

$$(23) \quad \varrho_0(\mathbf{r})' = \varrho_0 - \frac{\partial}{\partial x_1}(\varrho_0 u_1) - \frac{\partial}{\partial x_2}(\varrho_0 u_2) - \frac{\partial}{\partial x_3}(\varrho_0 u_3).$$

Použitím rovnic (19) a (21) nabude tento vztah tvaru

$$(24) \quad \varrho_0(\mathbf{r})' = \varrho_0(\mathbf{r}) + \pi \sum_m A(m) \{ \xi(\mathbf{R}_m^* + \mathbf{K}^*) \sin 2\pi[(\mathbf{R}_m^* + \mathbf{K}^*) \mathbf{r} - vt] + \\ + \xi(\mathbf{R}_m^* - \mathbf{K}^*) \sin 2\pi[(\mathbf{R}_m^* - \mathbf{K}^*) \mathbf{r} + vt] \}.$$

Zatímco $\varrho_0(\mathbf{r})$ je rozdělení hustoty, které odpovídá za normální Laueův rozptyl, vyjadřuje druhý člen sinusoidální rozdělení hustoty vyvolané elastickými vlnami, a náležející proto difúznímu rozptylu. Veličiny $\mathbf{R}_m^* + \mathbf{K}^*$, resp. $\mathbf{R}_m^* - \mathbf{K}^*$ nahrazují \mathbf{R}^* ve vztahu (19). Ukazuje se tedy, že existuje elektronová hustota příslušná bodům reciproké mřížky posunutým o hodnotu vektoru \mathbf{K}^* na některou stranu od libovolného uzlu reciproké mřížky popsaneho vektorem \mathbf{R}^* .

ZÁVĚR

Studium difúzních rentgenových reflexí, které započalo v souvislosti s rozbohem vlivu teploty na intenzitu normálních Laueových reflexí, vedlo k vytvoření teorie spojující difúzní rozptyl s elastickými vlastnostmi rozptylujícího prostředí.

Kmity krystalické mřížky představují soubor rovinných vln charakterizovaných vlnovým vektorem $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda$, kde λ je délka vlny, \mathbf{n} jednotkový vektor ve směru kolmém k vlnoploše. Přítomností rovinné vlny dojde v krystalu ke změně původní hustoty; na difrakčním obraze se tato skutečnost projeví existencí maxima ve směru \mathbf{n} od normální Laueovy reflexe a ve vzdálenosti nepřímě úměrné vlnové délce λ . Vzhledem k tomu, že se v krystalu vyskytují kmity s prakticky libovolnými vlnovými vektory, splývají reflexe odpovídající účinkům jednotlivých vln ve spojitou skvrnu difúzního rozptylu.

Potvrzení předpokladu, že difúzní rozptyl je způsoben tepelnými kmity atomů, lze prověřit pomocí rentgenogramů získaných v závislosti na teplotě studovaného vzorku. Za pokojové teploty je intenzita difúzního rozptylu ve srovnání s intenzitou normálních reflexí mnohem menší; při rostoucí teplotě a vyšších Millerových indexech to jsou však hodnoty stejného řádu [13]. Naproti tomu účinkem nízkých teplot se oblasti difúzního rozptylu zeslabují nebo zcela mizí, zatímco intenzita Laueových reflexí roste.

Podstatné rozdíly v intenzitě difúzního a Laueova rozptylu se při experimentální práci projevují zvláště dlouhou expoziční dobou a náročností vyhodnocování difúzních skvrn i jejich interpretace.

Literatura

- [1] DEBYE P.: Verh. deutsch. phys. Ges. 15 (1913), 678, 738, 857; Ann. d. Phys. 43 (1914), 49.
- [2] FAXEN H.: Z. f. Phys., 17 (1923), 266.
- [3] WALLER I.: Z. f. Phys. 17 (1923), 398, 51 (1928), 213.
- [4] LAVAL J.: Compt. Rend. 208 (1939), 1512.
- [5] ZACHARIASEN W. H.: Phys. Rev. 57 (1940), 597.
- [6] RAMAN C. V.: NILAKANTAN P., Proc. Ind. Acad. Sci., A 11 (1940), 379, A 12 (1940), 141, A 14 (1961), 317.
- [7] BEGBIE G. H.: Proc. Roy. Soc. A 188 (1947), 189.
BEGBIE G. H., BORN M.: Proc. Roy. Soc. A 188 (1947), 179.
- [8] WOOSTER W. A.: *Diffuse X-ray reflections from crystals*, Clarendon Press, Oxford 1962.
- [9] UMANSKIJ J. S.: *Rentgenografija metallov*, Metallurgija, Moskva 1967.
- [10] KRIVOGLAZ M. A.: *Teorija rassejanija rentgenovskich lučej i tēplovych nējtronov realnymi kristallami*, Nauka, Moskva 1967.
- [11] GUINIER A.: *Théorie et technique de la radiocristallographie*, Dunod, Paris 1956 (Ruský překlad: *Rentgenografija kristallov*, GIMFL, Moskva 1956).
- [12] TOMAN K., Acta cryst. 8 (1955), 578, Acta cryst. 10 (1957), 187.
- [13] SYNEČEK V., SIMERSKÁ M.: *Referát na Rozhovorech o aktuálních otázkách ve strukturní rentgenografii*, Praha, červen 1968.
- [14] PRASAD S. C., WOOSTER W. A.: Acta Cryst. 9 (1956), 38.

Poptávka po kvalifikovaných silách roste na celém světě rychleji než školy (hlavně vysoké) stačí nové odborníky vychovávat. Zde by měly pomoci hlavně rozvinuté země. Avšak tato pomoc má také druhou zápornou stránku, jež je známa v západních zemích pod označením „*brain drain*“ (tj. odsávání inteligence). Např. USA poskytují ročně asi sto tisíc míst zahraničním studentům ke zvýšení kvalifikace pro další činnost v mateřských zemích. Avšak přibližně 90% asijských studentů, 50% z Blízkého východu, Řecka či Egypta a ještě větší podíl z Afriky či Latinské Ameriky se už nikdy nevrací domů. Změna v imigrační politice USA z roku 1965 tento proces ještě urychluje tak, že např. počet odborníků, kteří se trvale přestěhovali za poslední rok z Indie do USA, vzrostl z dlouholetého průměru kolem 55 osob za rok na 1750. A tak mnohé státy se ptají, zda jde skutečně o pomoc. Obětmi nejsou jen zaostávající země, ale objevují se mezi nimi i Švýcarsko, Itálie, Holandsko a záp. Německo. Snad nejhorší situace je v Anglii, jež je zaplavena nabídkami ze zámoří a ztratila např. v roce 1964 téměř 6 tisíc učitelů, 4 tisíce inženýrů a přes tisíc lékařů. Ovšem současně získala 5 tisíc stejně kvalifikovaných sil z méně privilegovaných zemí. Francie stejným způsobem čerpá ze svých dřívějších kolonií. Kanada, jež ročně ztrácí kolem tisíce inženýrů odcházejících do USA, současně přijímá dvojnásobek tohoto počtu z jiných zemí. V mnoha případech jde o odchod jednotlivců, kteří si skutečně zvýší v lépe rozvinuté zemi kvalifikaci a po čase se vracejí s bohatými zkušenostmi. Avšak odcházejí i lidé, jejichž ztráta je téměř nenahraditelná. Rozbor důvodů ukazuje, že vedle zlepšení finančních poměrů často jde také o zlepšení pracovních podmínek. Američtí odborníci soudí, že situaci lze řešit jen urychleným rozvojem národních středisek a průmyslu s možností vyššího vzdělání i výdělků.