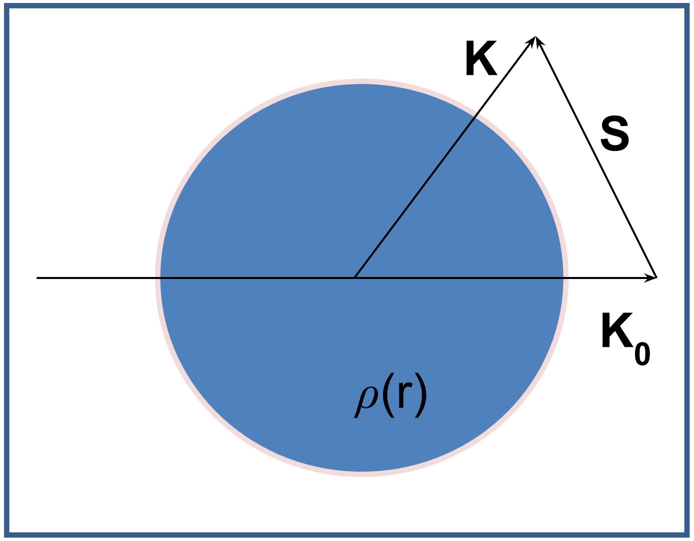
17. Атомный фактор рассеяния. Особенности рассеяния электронов и нейтронов. Какую информацию можно получать, используя различные типы излучений.

АТОМНЫЙ ФАКТОР РАССЕЯНИЯ

Рассеяние рентгеновских лучей на электронах в атомах



$$\left|\mathbf{E}(\mathbf{S})\right| = \left|\mathbf{E}_e(\mathbf{S})\right| \cdot f(\mathbf{S}) = \left|\mathbf{E}_e(\mathbf{S})\right| \cdot f(\theta, \lambda)$$

$$\boxed{\left|\mathbf{E}_e\right| = \left|\mathbf{E}_0\right| \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2}\right) \cdot \frac{1}{R} \left(\frac{1+\cos^2 2\theta}{2}\right)^{1/2}}$$

$$f(\theta, \lambda) = \frac{\left|\mathbf{E}(\mathbf{S})\right|}{\left|\mathbf{E_e}(\mathbf{S})\right|}$$

$\rho(\mathrm{r})$ - распределение электронной плотности в атоме

Атомный фактор рассеяния

$$\mathbf{S} = \mathbf{K} - \mathbf{K}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)$$

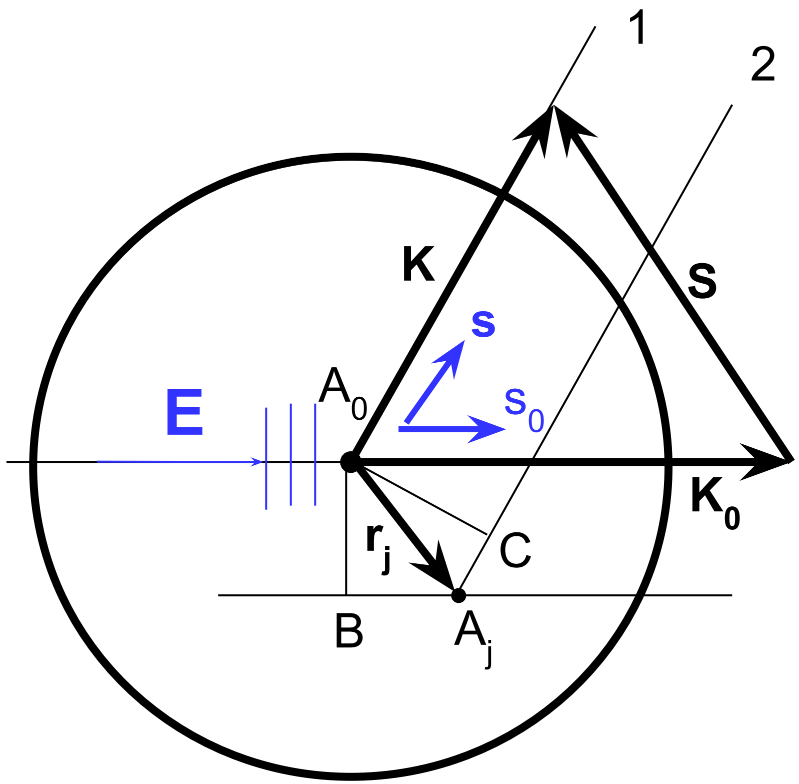
Для простоты расчетов будем считать распределение электронов в атоме сферически симметричной функцией. Тогда можно записать.

$$\rho(\mathbf{r}) \qquad z = \int_0^{\infty} \rho(r)\,dr$$

Здесь z – число электронов в атоме

Рассмотрим проекцию атома (сферы) на плоскость XY

Положим, что на атом падает плоская волна $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i(\omega t - \psi)}$



Пусть в начале координат т.е. в точке A_0 фаза волны равна нулю

$$\psi_0 = 0$$

Каждая точка атома (т.е. каждый электрон) под действием волны **E** начинает излучать сферическую волну. Электрон находящийся A_0 излучает волну

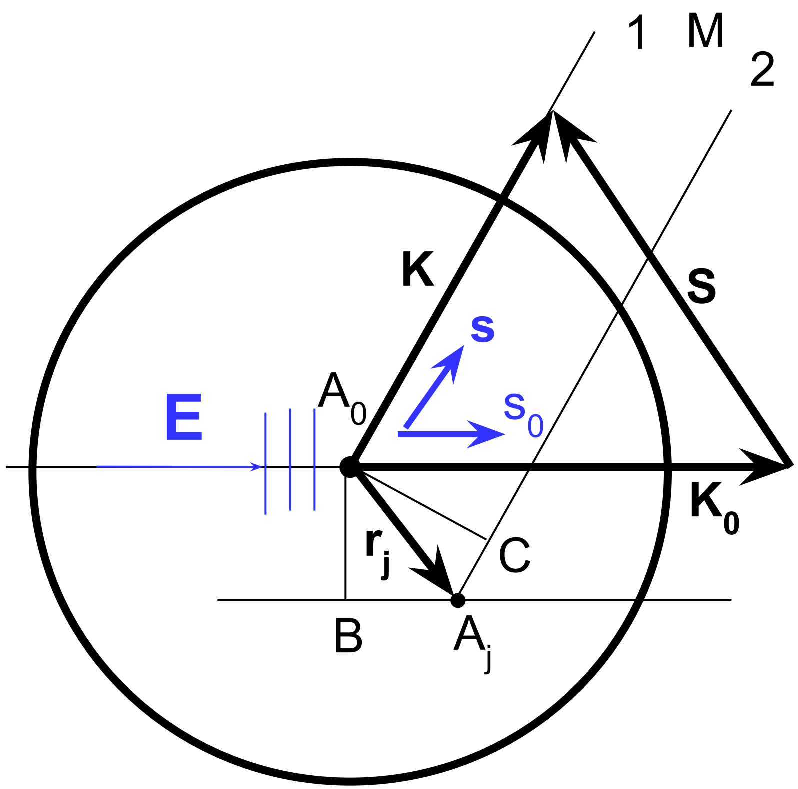
$$\mathbf{E}_{A_0} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t)}$$

Здесь *R* расстояние от точки A_0 до точки наблюдения M в направлении вектора s (линии 1 и 2).

Первичная плоская достигнет точки A_j имея фазу $\psi_j = k\left(\mathbf{s_0}, \mathbf{r_j}\right)$

Тогда вторичная сферическая волна 2 излучаемая электроном находящемся в точке A_j будет иметь вид

$$\mathbf{E}_{\mathbf{A_j}} = \frac{\mathbf{E_0}}{R} \cdot e^{i\left[\omega t - k\left(\mathbf{s_0}, \mathbf{r_j}\right)\right]}$$



Будем считать что $A_0M >> |\mathbf{r}_j|$

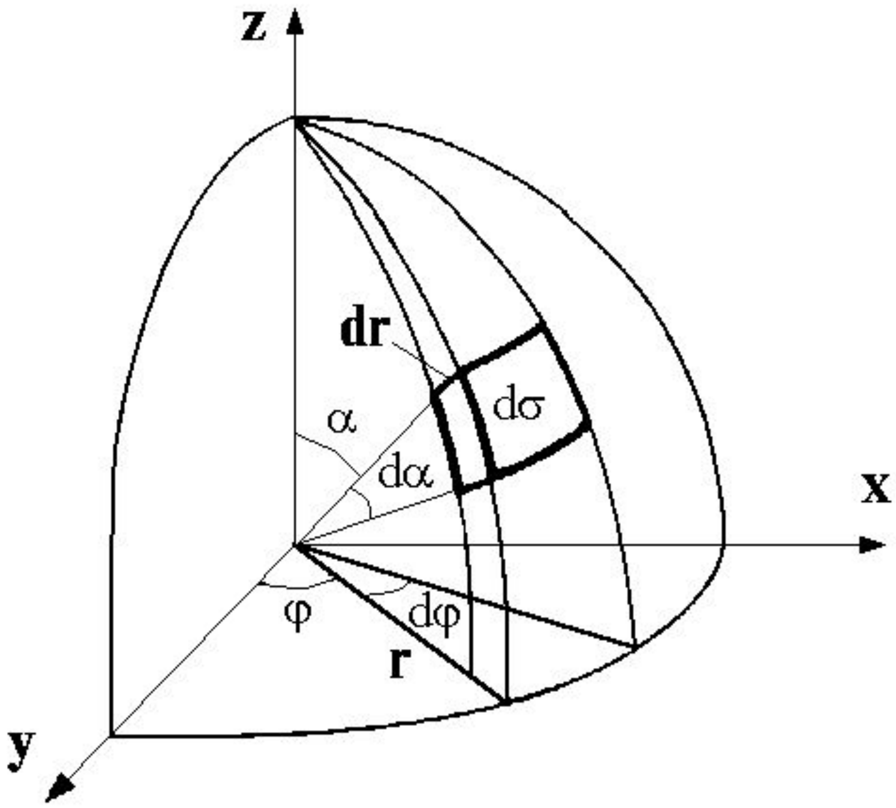
Волна 2 дойдет до точки наблюдения M с дополнительной фазой за счет отрезка пути $A_jC=(\mathbf{s},\mathbf{r}_j)$.Следовательно дополнительная фаза будет равна $k(\mathbf{s},\mathbf{r}_j)$

Тогда полная фаза волны 2 дошедшая до точки M будет иметь вид

$$\Delta\psi = k\left(\mathbf{s}, \mathbf{r_j}\right) - k\left(\mathbf{s_0}, \mathbf{r_j}\right) = \left(\mathbf{r_j K}\right) - \left(\mathbf{r_j K_0}\right) =$$

$$= \left(\left(\mathbf{K} - \mathbf{K_0}\right), \mathbf{r_j}\right) = \left(\mathbf{S}, \mathbf{r_j}\right)$$

$$\mathbf{E}^{\mathbf{M}}_{\mathbf{A_j}} = \frac{\mathbf{E_0}}{R} \cdot e^{i\left[\omega t + k\left(\mathbf{s} - \mathbf{s_0}, \mathbf{r_j}\right)\right]} = \frac{\mathbf{E_0}}{R} \cdot e^{i\omega t} \cdot e^{i\left(\mathbf{S r_j}\right)}$$



Пусть падающий пучок направлен вдоль оси X

Рассчитаем интенсивность рассеянную элементом объема dv

$$dv = d\sigma \cdot dr =$$

$$= r \cdot d\varphi \cdot r\sin\alpha \cdot d\alpha \cdot dr$$

Атом приближенно можно рассматривать как объем с непрерывным распределением заряда. Выделим в объеме атома элемент объема dv на расстоянии r от центра атома. Электронную плотность в этой точке обозначим через ρ(r). Амплитуда волны рассеянная элементом объема dv можно записана в виде. (Для упрощения записи опустим R)

$$d\mathbf{E} = \mathbf{E}_e \cdot \rho\left(\mathbf{r}\right) \cdot e^{ik\left(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0,\mathbf{r}\right)} dv = \mathbf{E}_e \cdot \rho\left(\mathbf{r}\right) \cdot e^{ik\left(\mathbf{S},\mathbf{r}\right)} dv$$

Подставим в это соотношение элемент объема в явном виде. Тогда суммарная амплитуда рассеянная всеми электронами атома будет равна интегралу по всему объему

$$\left|\mathbf{E}\right| = \left|\mathbf{E}_e\right| \cdot \int_V \rho\left(r\right) \cdot e^{iSr\cos\alpha} dv =$$

$$= \left|\mathbf{E}_e\right| \cdot \int_\varphi d\varphi \int_r \rho\left(r\right) \cdot r^2 dr \int_\alpha e^{iS\cos\alpha} \sin\alpha \cdot d\alpha$$

Вспоминая определение **атомного фактора рассеяния**

$$\left|\mathbf{E}(\mathbf{S})\right| = \left|\mathbf{E}_e(\mathbf{S})\right| \cdot f(\theta,\lambda)$$

$$f(S) = f(\theta,\lambda) = \frac{\left|\mathbf{E}(\mathbf{S})\right|}{\left|\mathbf{E}_\mathbf{e}(\mathbf{S})\right|}$$

можно переписать написанное выше выражение в виде

$$f(\mathbf{S}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho(r)\cdot r^2 dr \int_0^{\pi} e^{iS\cos\alpha} \sin\alpha \cdot d\alpha$$

Интеграл типа $\int e^{ia\cos x} \cdot \sin x \cdot dx$ нам уже знаком по предыдущему разделу

$$\int e^{ia\cos x} \cdot \sin x \cdot dx = \frac{\sin(ax)}{ax}$$

Интегрирование по α, ϕ и r приводит к выражению

$$f\left(\sin\theta/\lambda\right)=\int_0^\infty 4\pi r^2\rho(r)\cdot\frac{\sin(Sr)}{Sr}\cdot dr$$

Это и есть атомный фактор рассеяния. Он зависит от распределения электронной плотности внутри атома.

Исследуем поведение функции f(S). Если аргумент функции стремится к нулю, дробь стоящая под интегралом стремится к единице и следовательно

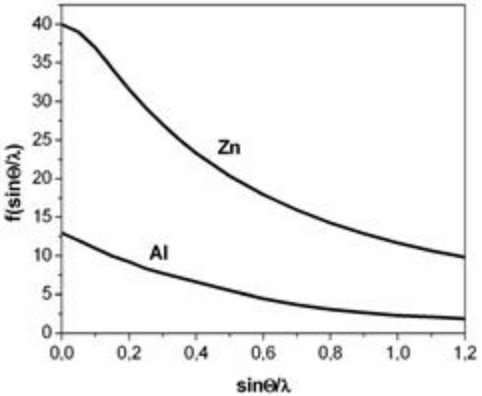
Исследуем поведение функции f(S). Если аргумент функции стремится к нулю, дробь стоящая под интегралом стремится к единице и следовательно f(S) приближается к величине Z/

$$s \to 0 \qquad \frac{\sin(Sr)}{Sr} \to 1 \qquad f(\sin\theta/\lambda) = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r)\cdot dr = z$$

$$f(\sin\theta/\lambda) \to Z$$

Если аргумент S растет функция f(S) убывает и стремится к нулю

$$S = 4\pi\cdot\frac{\sin\theta}{\lambda} \to \infty \qquad \frac{\sin(Sr)}{Sr} \to 0$$



$$f(\sin\theta/\lambda) \to 0$$

Вид зависимости атомной функции рассеяния от $\sin\theta/\lambda$ ***для нейтральных атомов Zn и Al. (Z для Zn=40 а для Al=13).***

Оценки, сделанные выше, выполнены при условии, что электроны в атоме практически свободны и уравнение движения электрона можно записать в виде $m\ddot{r} = eE$. Реальная ситуация сложнее - электроны в атомах движутся по своим орбитам и имеют собственные частоты колебаний и, следовательно необходимо рассматривать задачу движения связанного электрона под действием внешней периодической возмущающей силы при движении электрона т.е. $m\ddot{\mathbf{r}} + k\dot{\mathbf{r}} + \omega_0{}^2\mathbf{r} = e\mathbf{E}$. И это еще не все. Необходимо также учесть затухание при движении электронов. Тогда полное уравнение движения будет иметь вид

$$m\ddot{\mathbf{r}} + k\dot{\mathbf{r}} + \omega_0{}^2\mathbf{r} = e\mathbf{E}$$

В этом случае амплитуда волны, рассеянной на связанном электроне, может быть записана в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{\mathbf{e}} \cdot \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_0{}^2 - ik\omega}$$

или для всех электронов в атоме

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{e} \cdot \sum_n \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{0n}{}^2 - ik\omega}$$

Из написанного соотношения видно, что, во-первых, амплитуда рассеяния представляется комплексным числом и, следовательно, появляется дополнительное поглощение вблизи собственных резонансных частот, а, во-вторых, - амплитуда сильно зависит от частоты падающей волны, т.е. имеется дисперсия. Корректный учет этих поправок проведен в работах Лоренца.

Если длина волны падающего излучения достаточно далека от края полосы поглощения, атомный фактор попросту равен f_0 . Однако при приближении длины волны падающего излучения к краю полосы поглощения атомный фактор становится комплексной величиной и его следует записать в виде $f = f_0 + \Delta f' + i\Delta f''$ где f_0 является атомной функцией рассеяния, полученной в предположении свободных электронов атома, а $\Delta f'$ и $\Delta f''$ - дисперсионные поправки, первая из которых учитывает дополнительное рассеяние для случая связанных электронов, а вторая - дополнительное поглощение вблизи собственных частот колебаний электронов в атоме. Дисперсионные поправки зависят от длины волны и практически не зависят от $\sin\theta$. А так как f_0 уменьшается с ростом угла рассеяния, дисперсионные поправки начинают играть возрастающую роль при больших углах рассеяния.

Функции атомного рассеяния для случая свободных электронов в атоме в зависимости от величины $\sin\theta / \lambda$ и соответствующие дисперсионные поправки в зависимости от длины волны для всех элементов таблицы Менделеева приводятся обычно в виде таблиц. Наиболее точные значения этих величин даны в интернациональных таблицах. (International Tables for X-Ray Crystallography, vol.1-4, Birmingam, IDC, 1980)

Амплитуда атомного рассеяния электронов

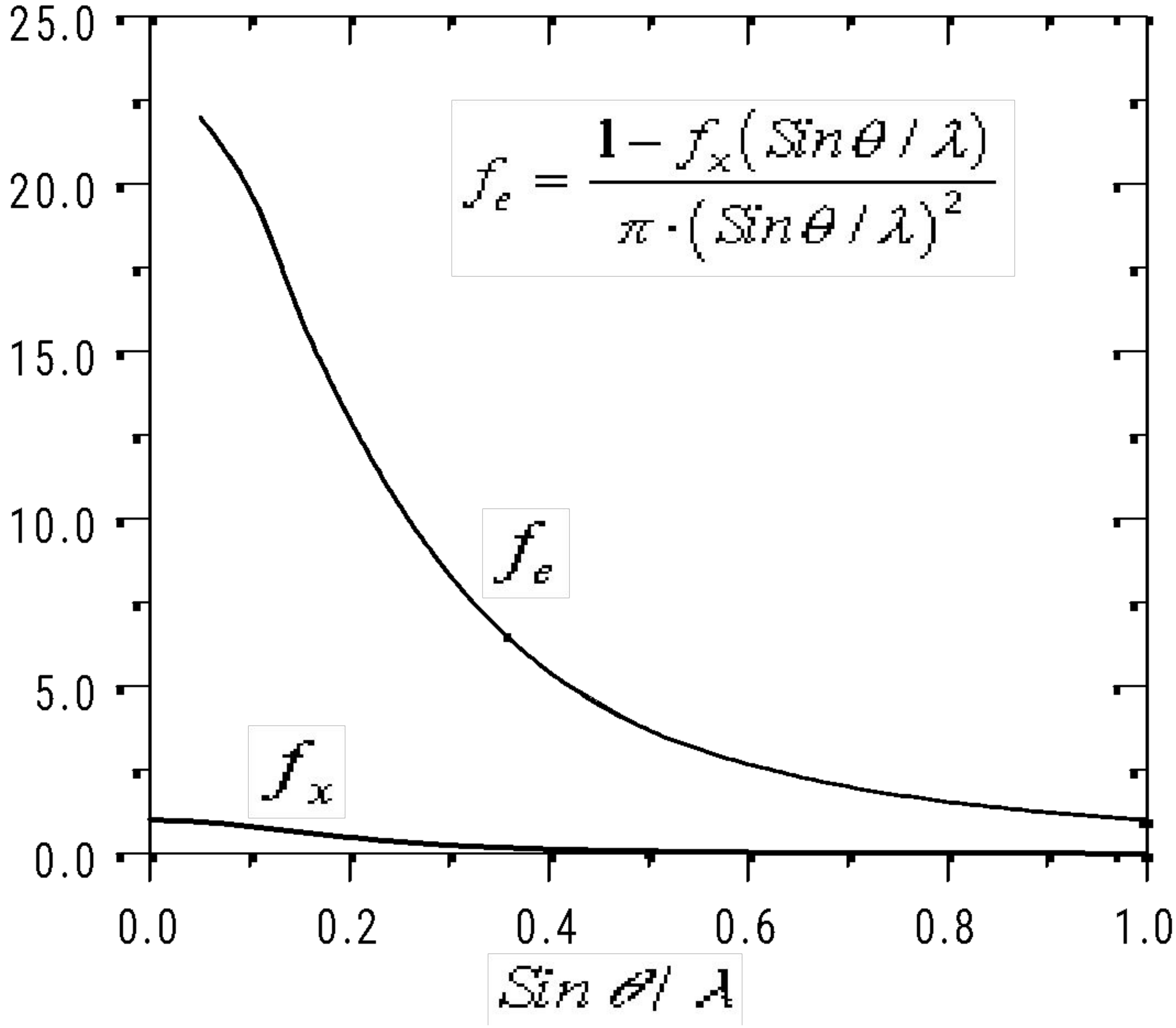
В дифракционных экспериментах наряду с рентгеновским излучением используются электроны с энергией от десятков до сотен кэв (электроны с энергией *50кэв* имеют длину волны *0.037Å*). Путем несложных выкладок можно показать, что амплитуда атомного рассеяния для электронов связана с амплитудой атомного рассеяния рентгеновских лучей следующим выражением

$$f_e(\sin\theta / \lambda) = \frac{Z - f_x(\sin\theta / \lambda)}{\pi(\sin\theta / \lambda)^2}$$

Анализ написанного выражения показывает, что при больших углах рассеяния, где f_x мало, $f_e > Z$ и уменьшается обратно пропорционально $(\sin\theta / \lambda)^2$. В электронографии и электронной микроскопии обычно используется величина, кратная амплитуде атомного рассеяния и входящая в первое Борновское приближение теории рассеяния электронов, а именно

$$f_{fb}(\sin\theta / \lambda) = \frac{2\pi me}{h^2} \cdot f_e(\sin\theta / \lambda)$$

Вид функций атомного рассеяния атома водорода для рентгеновских лучей и электронов, рассчитанный в первом Борновском приближении.



Оценки амплитуд атомного рассеяния электронов, сделанные выше, приводят к важным особенностям в применении рассеяния электронов по сравнению с рентгеновскими лучами. С одной стороны, более высокая амплитуда рассеяния электронов (на два-три порядка) заметно повышает светосилу дифракционной картины и наряду с возможностью фокусировки пучка падающих электронов позволяет исследовать весьма мелкие кристаллы в поликристаллических системах. С другой стороны, заметное поглощение электронов с энергией порядка нескольких десятков *кэв* открывает выгодную возможность изучения структуры тонких поверхностных слоев толщиной в 10^{-6}-10^{-7}см. Для сравнения в рентгенографии при оптимальных условиях регистрируется слой около 10^{-2}-10^{-4}см.

Более слабая зависимость атомной амплитуды рассеяния электронов по сравнению с рентгеновскими лучами от атомного номера позволяет проводить структурные исследования для легких атомов.

Наличие у электронов спина и магнитного момента открывает дополнительные возможности для изучения магнитной структуры материалов.

Функции атомного рассеяния для случая свободных электронов в атоме в зависимости от величины *sin*θ/λ и соответствующие дисперсионные поправки в зависимости от длины волны для всех элементов таблицы Менделеева приводятся обычно в виде таблиц. Наиболее точные значения этих величин даны в интернациональных таблицах. (International Tables forX-Ray Crystallography, vol.1-4, Birmingam, IDC, 1980)