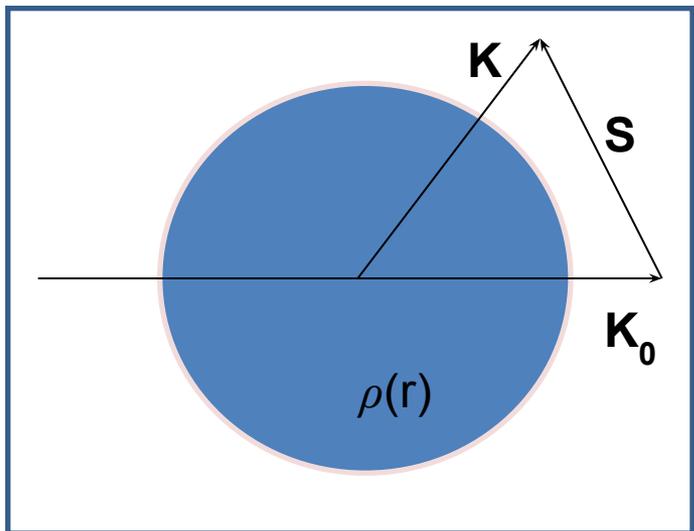


**17. Атомный фактор рассеяния. Особенности рассеяния электронов и нейтронов. Какую информацию можно получать, используя различные типы излучений.**

# АТОМНЫЙ ФАКТОР РАССЕЯНИЯ

Рассеяние рентгеновских лучей на электронах в атомах



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

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

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

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

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

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

**Атомный фактор рассеяния**

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

Здесь  $z$  – число электронов в атоме



Первичная плоская достигнет точки  $A_j$  имея фазу  $\psi_j = k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)$

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

$$\mathbf{E}_{A_j} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)]}$$

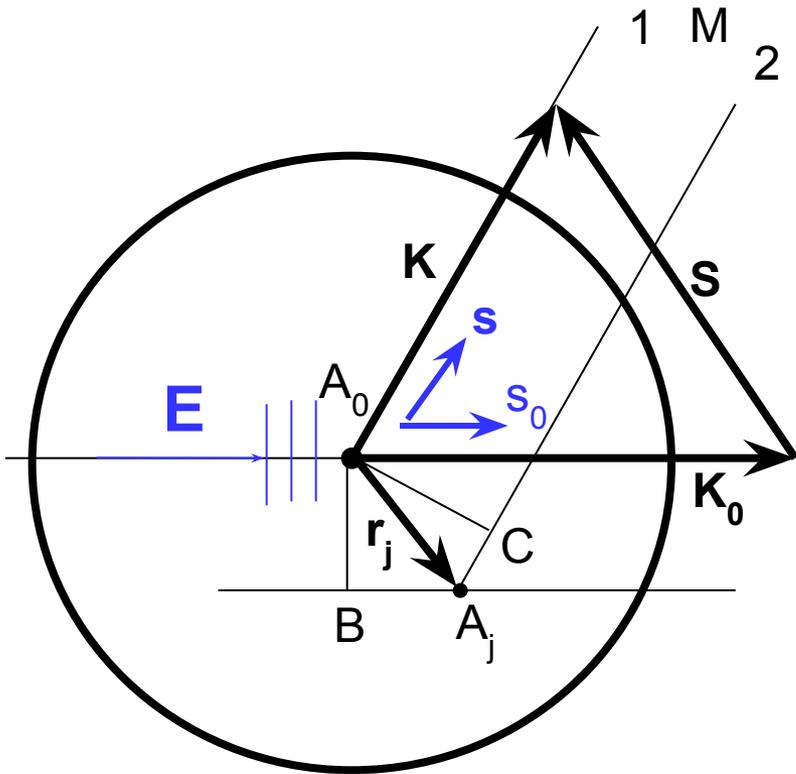
Будем считать что  $A_0 M \gg |r_j|$

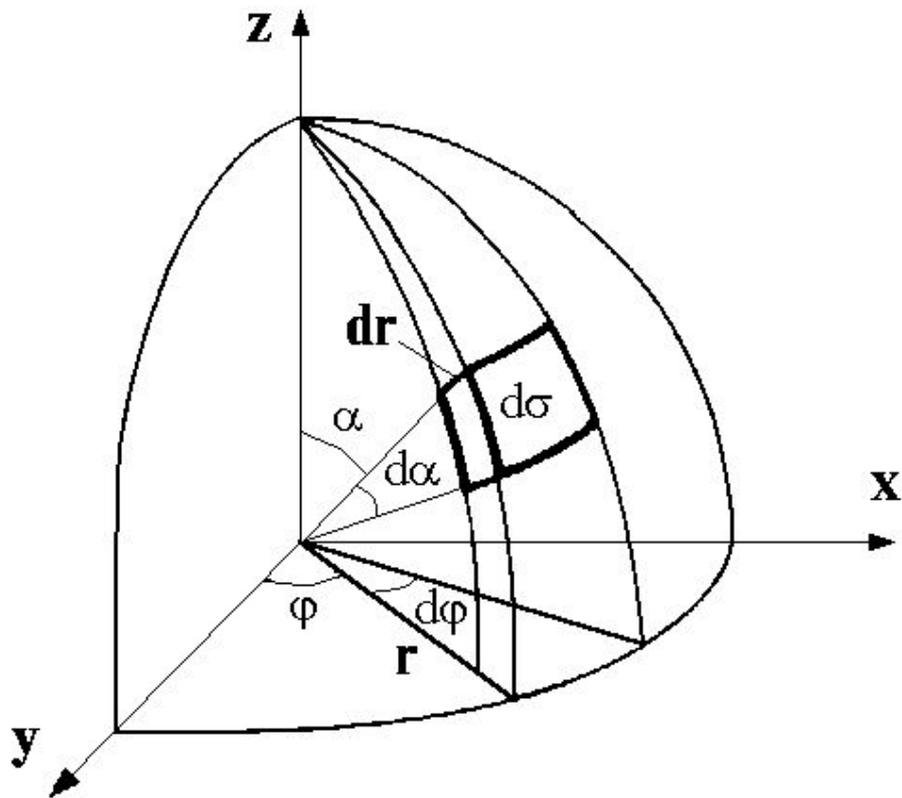
Волна 2 дойдет до точки наблюдения  $M$  с дополнительной фазой за счет отрезка пути  $A_j C = (\mathbf{s}, \mathbf{r}_j)$ . Следовательно дополнительная фаза будет равна  $k(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j)$

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

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= k(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j) - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j) = (\mathbf{r}_j \mathbf{K}) - (\mathbf{r}_j \mathbf{K}_0) = \\ &= ((\mathbf{K} - \mathbf{K}_0), \mathbf{r}_j) = (\mathbf{S}, \mathbf{r}_j) \end{aligned}$$

$$\mathbf{E}_{A_j}^M = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i[\omega t + k(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)]} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i\omega t} \cdot e^{i(\mathbf{S}, \mathbf{r}_j)}$$





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  $\rho(r)$ . Амплитуда волны рассеянная элементом объема  $dv$  можно записана в виде. (Для упрощения записи опустим  $R$ )

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

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

$$\begin{aligned} |\mathbf{E}| &= |\mathbf{E}_e| \cdot \int_V \rho(r) \cdot e^{iSr \cos \alpha} dv = \\ &= |\mathbf{E}_e| \cdot \int_{\varphi} d\varphi \int_r \rho(r) \cdot r^2 dr \int_{\alpha} e^{iS \cos \alpha} \sin \alpha \cdot d\alpha \end{aligned}$$

Вспоминая определение **атомного фактора рассеяния**

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

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  $\alpha$ ,  $\varphi$  и  $r$  приводит к выражению**

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

**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  $Z$

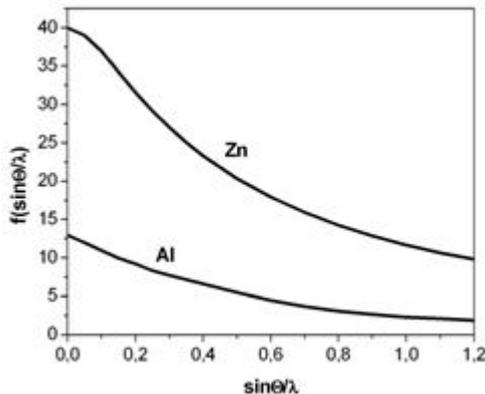
$$S \rightarrow 0 \quad \frac{\sin(Sr)}{Sr} \rightarrow 1 \quad f(\sin \theta / \lambda) = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) \cdot dr = Z$$

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

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

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

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



**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  $\dot{m}\mathbf{r} = e\mathbf{E}$ . 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.  $\ddot{m}\mathbf{r} + k\mathbf{r} + \omega_0^2\mathbf{r} = e\mathbf{E}$ . И это еще не все. Необходимо также учесть затухание при движении электронов. Тогда полное уравнение движения будет иметь вид

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

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

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e \cdot \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_0^2 - ik\omega} \quad \text{или для всех электронов в атоме} \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}^e \cdot \sum_n \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_{0n}^2 - ik\omega}$$

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, Birmingham, IDC, 1980**)

# Амплитуда атомного рассеяния электронов

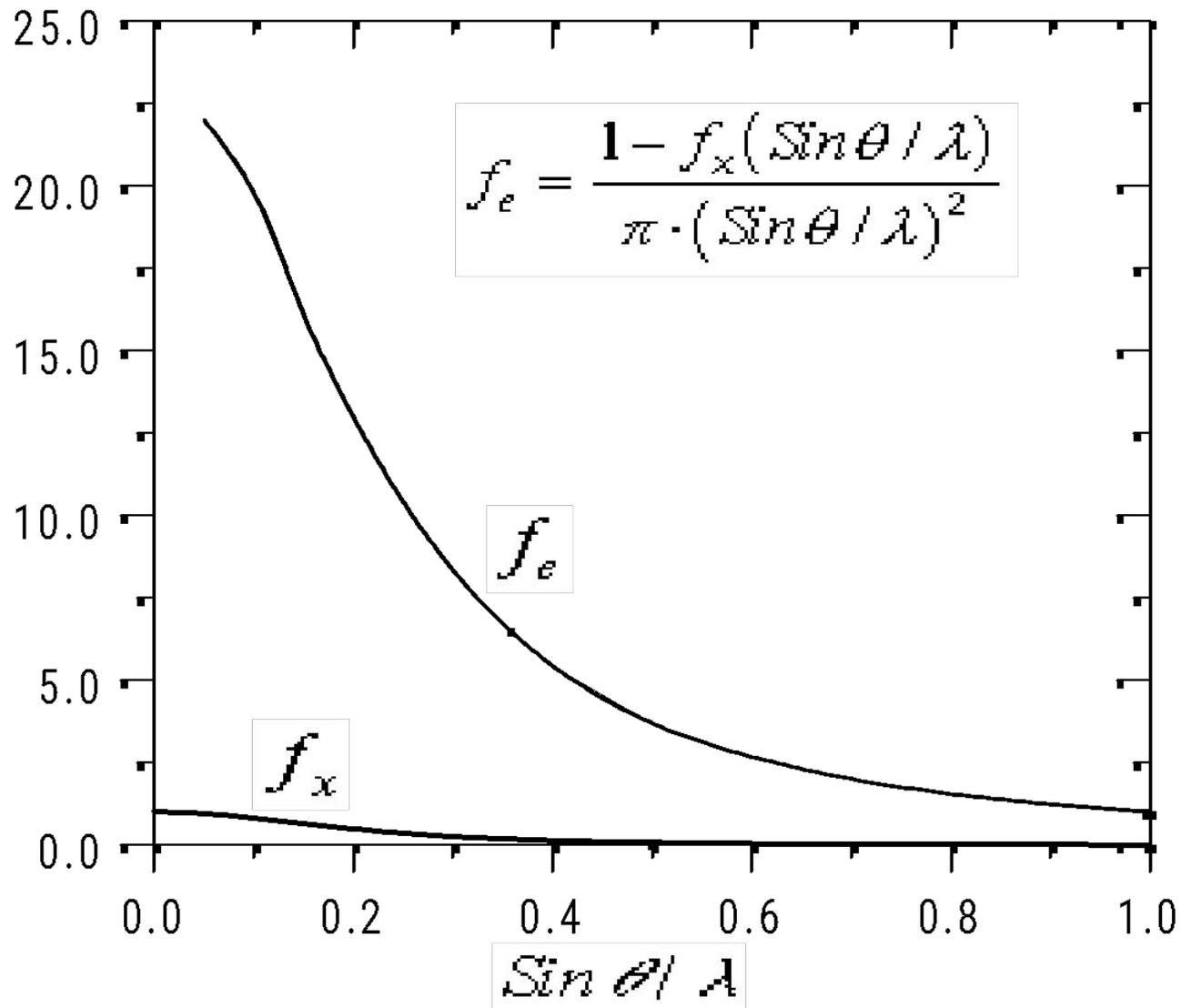
В дифракционных экспериментах наряду с рентгеновским излучением используются электроны с энергией от десятков до сотен кэВ (электроны с энергией 50 кэВ имеют длину волны  $0.037\text{\AA}$ ). Путем несложных выкладок можно показать, что амплитуда атомного рассеяния для электронов связана с амплитудой 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  $\sin\theta/\lambda$  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, Birmingham, IDC, 1980](#))**