

электрона большой массой, они еще являются сложными системами, тогда как электрон (по-видимому) — элементарная частица. Таким образом, опыты показали, что атом в целом и молекула в целом обладают волновыми свойствами, и теперь нетрудно поверить, что в подходящих экспериментальных условиях макроскопическое тело тоже обнаружит свойства волны.

Значительно позднее была обнаружена дифракция очень медленных нейтронов от решетки кристалла, что привело к развитию новых методов изучения структуры кристаллов и молекул *).

Теория дифракции на периодических структурах **)

16. Рассмотрим более подробно дифракцию на одномерной, двумерной и трехмерной решетках. Периодические структуры



Рис. 16А. Линейная последовательность равноотстоящих атомов

такого типа можно создать, по крайней мере мысленно, многократным повторением *единичной ячейки*. Эту идею иллюстрируют рис. 16А — 16С.

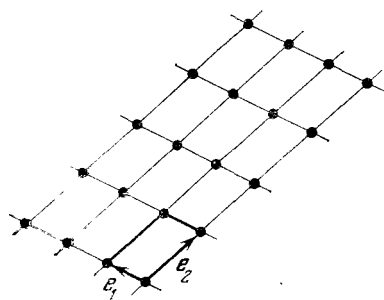


Рис. 16В. Двухмерная решетка. Единичная ячейка задается парой векторов e_1 и e_2 , показанных стрелками. Повторением единичной ячейки можно получить всю решетку

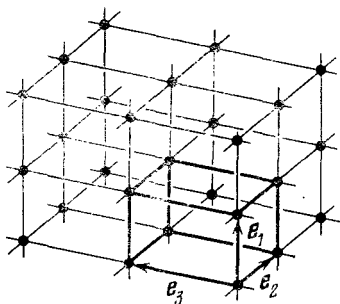


Рис. 16С. Трехмерная решетка. Границы единичной ячейки показаны жирными линиями. Вектор любой узловой точки решетки является линейной комбинацией (с целыми коэффициентами) векторов e_1 , e_2 , e_3 . Не обязательно, чтобы эти векторы были ортогональны

Для одномерной решетки единичной ячейкой является просто отрезок, для двухмерной — параллелограмм, а для трехмерной — параллелепипед. Допустим для простоты, что атомы (данного типа) расположены в каждом углу единичной ячейки. Положение всех атомов в ячейке определяется для линейной решетки выражением

$$\mathbf{x} = n_1 \mathbf{e}_1, \quad (16a)$$

*) Mitchell D. P., Powers P. N. Bragg Reflection of Slow Neutrons.— Phys. Rev., 1936, v. 50, p. 486; см. также: Wollan E. O., Shull C. G. Neutron Diffraction and Associated Studies.— Nucleonics, 1948, v. 3, p. 8.

***) При первом чтении п. 16—22 можно пропустить. Рассмотрите, однако, фотографии, приведенные в п. 22.

для плоской решетки выражением

$$\mathbf{x} = n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2, \quad (16b)$$

для трехмерной решетки выражением

$$\mathbf{x} = n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2 + n_3 \mathbf{e}_3. \quad (16c)$$

Величины n_1 , n_2 и n_3 — целые числа, а векторы \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 и \mathbf{e}_3 определяют, как показано на рис. 16А — 16С, единичные ячейки.

В дальнейшем мы будем считать, что решетка содержит конечное, но очень большое число атомов. Во избежание недоразумений заметим, что мы всегда рассматриваем одно-, двух- и трехмерные решетки в *трехмерном* пространстве и не имеем в виду, например, двумерные решетки в двумерном пространстве.

17. Рассмотрим ситуацию, схематически показанную на рис. 17А. Источник, расположенный в точке \mathbf{x}_i , испускает волну. Она дифрагирует на последовательности идентичных атомов. Дифрагировавшая, или *рассеянная*, волна наблюдается в точке \mathbf{x}_0 . Расположим

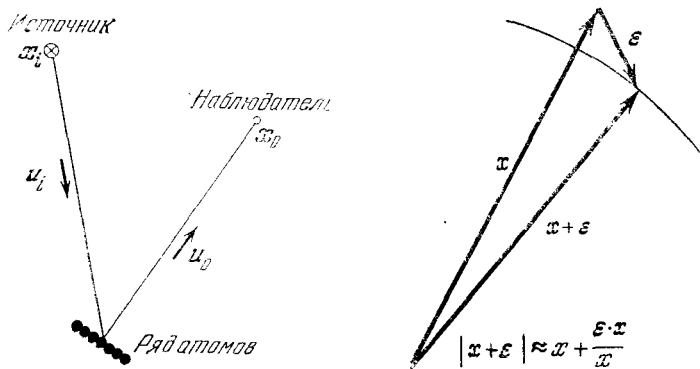


Рис. 17А. Дифракция от одномерной решетки. Предполагается, что расстояния от решетки до источника и до наблюдателя велики по сравнению с размерами решетки. Решетка содержит конечное, но очень большое число атомов. Единичные векторы \mathbf{u}_i и \mathbf{u}_0 указывают соответственно направления падающего на мишень и рассеянного ею излучения

Рис. 17В. Иллюстрация часто применяемого в физике приближения. Если вектор ϵ очень мал по сравнению с вектором \mathbf{x} , то последний почти параллелен вектору $\mathbf{x} + \epsilon$. Длина вектора $\mathbf{x} + \epsilon$ приблизительно равна сумме длины \mathbf{x} и проекции ϵ на направление \mathbf{x}

начало координат в центре нашей последовательности атомов (занятом одним из атомов). Пусть расстояния $x_i = |\mathbf{x}_i|$ и $x_0 = |\mathbf{x}_0|$ очень велики по сравнению с линейными размерами последовательности. Начнем с одномерной решетки. Рассеяние от двух- и трехмерной решетки можно рассмотреть аналогичным образом.

Длина пути от источника к наблюдателю (путь лежит через начало координат) равна $s_0 = x_i + x_0$. Пусть $s(n_1)$ — длина пути от источника до наблюдателя через атом, положение которого в последовательности определяется целым числом n_1 [см. формулу (16а)]. Тогда

$$s(n_1) = |\mathbf{x}_i - n_1 \mathbf{e}_1| + |\mathbf{x}_0 - n_1 \mathbf{e}_1|. \quad (17a)$$

Волны, приходящие в точку наблюдения от различных атомов, интерферируют друг с другом, и амплитуда результирующей волны равна сумме амплитуд волн от каждого атома. Чтобы образовался дифракционный максимум, все приходящие волны должны быть в фазе, иначе они погасят друг друга. Условие максимума требует, чтобы для каждого атома, т. е. для каждого целого n_1 , разность путей $s(n_1) - s_0$ была целым кратным длины волны λ .

Предположим, что размеры решетки очень малы по сравнению с расстояниями от нее до наблюдателя и до источника, т. е. что вектор $n_1 e_1$ гораздо меньше векторов x_i и x_0 . Тогда можно написать следующие приближенные выражения для обоих расстояний в правой части равенства (17a):

$$|x_i - n_1 e_1| \approx x_i - n_1 x_i \cdot e_1 / x_i, \quad (17b)$$

$$|x_0 - n_1 e_1| \approx x_0 - n_1 x_0 \cdot e_1 / x_0. \quad (17c)$$

Геометрический смысл такого приближения ясен из рис. 17B. Для разности путей получаем выражение

$$s(n_1) - s_0 \approx -n_1 e_1 \cdot \left(\frac{x_i}{x_i} + \frac{x_0}{x_0} \right). \quad (17d)$$

18. Обозначим через u_i и u_0 единичные векторы в направлении падающего на решетку и рассеянного пучка соответственно. Тогда имеем

$$u_i = -x_i / x_i, \quad u_0 = x_0 / x_0. \quad (18a)$$

При очень больших x_i и x_0 из (17d) получаем

$$s(n_1) - s_0 = n_1 e_1 \cdot (u_i - u_0), \quad (18b)$$

что дает условие дифракционного максимума

$$n_1 e_1 \cdot (u_i - u_0) / \lambda = n_1'. \quad (18c)$$

Здесь n_1' должно быть целым числом при любом выборе целого n_1 , что возможно лишь в случае

$$e_1 \cdot (u_i - u_0) / \lambda = m_1, \quad (18d)$$

где m_1 — целое число. Полученный результат можно было написать сразу. Волны от любой пары атомов приходят в фазе тогда и только тогда, если волны от двух *соседних* атомов приходят в фазе. Именно это утверждает равенство (18d).

Воспользовавшись соотношением де Бройля, придадим выражению (18d) физически более интересную форму. Пусть p_i — первичный импульс, p_0 — импульс в рассеянном пучке. Тогда

$$u_i / \lambda = p_i / h, \quad u_0 / \lambda = p_0 / h \quad (18e)$$

и условие (18d) принимает вид

$$e_1 \cdot (p_i - p_0) = e_1 \cdot q = m_1 h, \quad (18f)$$

где $q = p_i - p_0$ — импульс, переданный решетке. Для одномерной решетки условие дифракционного максимума означает, что ска-

лярное произведение переданного импульса \mathbf{q} на вектор \mathbf{e}_1 должно быть целым кратным h . Проекция переданного импульса на направление решетки «квантуется».

19. Мы молчаливо предполагали, что рассеяние является *упругим*; это означает, что энергия (или частота) рассеянной частицы равна энергии (частоте) падающей на решетку частицы. Отсюда косвенно следует, что импульсы в падающей и рассеянной волне одинаковы. Таким образом, положение дифракционного максимума определяется условиями

$$\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0) = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{q} = m_1 h, \quad (19a)$$

$$|\mathbf{p}_i| = |\mathbf{p}_0|, \quad (19b)$$

где m_1 — целое число. Для *бесконечной* решетки условия (19a) и (19b) выполняются точно. Если размеры решетки *конечны*, то мы будем наблюдать некоторое рассеяние также в направлениях, не следующих из написанных условий.

Острота дифракционного максимума (как функция угла) зависит от числа атомов в решетке. Предположим, что оно велико. Тогда направление рассеяния хорошо определено уравнениями (19a) и (19b). Эти уравнения дают последовательность конусов, определяемых целыми числами m_1 . На эти целые числа m_1 , естественно, наложено ограничение

$$|m_1| \leq 2 |\mathbf{e}_1| \cdot |\mathbf{p}_1| / h, \quad (19c)$$

означающее, что импульс, переданный решетке, не может быть больше двойного значения первичного импульса.

20. Нетрудно получить условия образования дифракционных максимумов для двухмерной ячейки. В этом случае условие (19a) должно выполняться для каждого направления решетки, т. е. для каждой линии, содержащей более одного атома. В частности, оно должно выполняться для направлений, определяющих единичную ячейку, и мы получаем условия

$$\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0) = m_1 h, \quad \mathbf{e}_2 \cdot (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0) = m_2 h, \quad (20a)$$

$$|\mathbf{p}_i| = |\mathbf{p}_0|, \quad (20b)$$

где m_1 и m_2 — целые числа. Снова можно сказать, что проекция переданного импульса на оси решетки «квантуется». Чтобы показать это с большей ясностью, зададим два вектора \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 в плоскости $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ условиями

$$\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{q}_1 = h, \quad \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{q}_1 = 0, \quad \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{q}_2 = 0, \quad \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{q}_2 = h. \quad (20c)$$

Написанные уравнения имеют единственное решение. Заметим, что направления векторов \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 совпадают с \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 лишь в случае прямоугольной решетки.

Условия (20a) теперь можно записать в виде

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0 = m_1 \mathbf{q}_1 + m_2 \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}^*, \quad (20d)$$

где m_1 и m_2 — целые числа; \mathbf{q}^* — произвольный вектор, перпендикулярный к плоскости решетки. «Квантуются» лишь составляю-

щие переданного импульса в плоскости решетки (но не перпендикулярная составляющая). Они определяются условием (20b), означаящим, что рассеяние упруго. Мы можем, таким образом, найти несколько решений уравнений (20a) и (20b), предположив, что первичный импульс не слишком мал (т. е. что длина волны не слишком велика). В этом случае рассеянные лучи испускаются

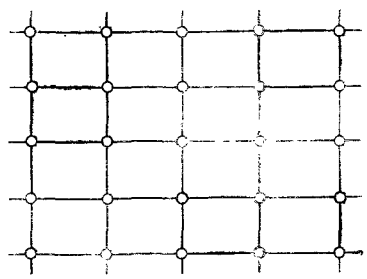
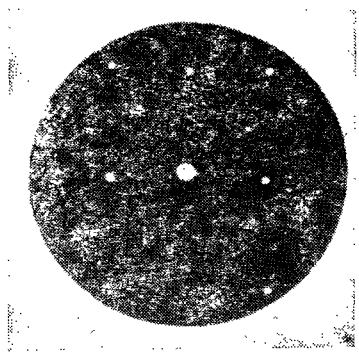


Рис. 20А. Дифракционная картина, образованная при обратном рассеянии электронов с энергией 76 эВ от поверхности кристалла никеля. Электроны падают перпендикулярно к поверхности кристалла. Это типичный случай дифракции от двумерной решетки

Рис. 20В. Плоская симметрия поверхности кристалла. Кружки соответствуют атомам никеля в поверхностном слое. Дифракционная картина обнаруживает аналогичную прямоугольную симметрию. Правильно ли ориентированы друг относительно друга оба рисунка? Не нужно ли один из них повернуть на 90°?

в строго определенных дискретных направлениях, а не по конусам, как это происходит в случае одномерной решетки.

В опыте Дэвиссона и Джермера энергия электронов была невелика и они не проникали глубоко в кристалл. Дифракция происходила на атомах, лежащих на поверхности, когда применима теория дифракции на двумерной решетке.

21. Для трехмерной решетки

$$e_1 \cdot (p_i - p_0) = m_1 h, \quad e_2 \cdot (p_i - p_0) = m_2 h, \quad e_3 \cdot (p_i - p_0) = m_3 h, \quad (21a)$$

$$|p_i| = |p_0|, \quad (21b)$$

где m_1, m_2 и m_3 — целые числа. По аналогии со сделанным в предыдущем пункте, определим три вектора q_1, q_2 и q_3 с помощью условий

$$\begin{aligned} e_1 \cdot q_1 &= h, & e_2 \cdot q_1 &= 0, & e_3 \cdot q_1 &= 0, \\ e_1 \cdot q_2 &= 0, & e_2 \cdot q_2 &= h, & e_3 \cdot q_2 &= 0, \\ e_1 \cdot q_3 &= 0, & e_2 \cdot q_3 &= 0, & e_3 \cdot q_3 &= h. \end{aligned} \quad (21c)$$

Эти уравнения всегда имеют единственное решение. Условия (21a) можно записать в виде

$$q = p_i - p_0 = m_1 q_1 + m_2 q_2 + m_3 q_3. \quad (21d)$$

Переданный импульс q «квантуется» в том смысле, что он должен быть линейной комбинацией (с целыми коэффициентами) трех

векторов \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 и \mathbf{q}_3 , определяемых геометрией решетки. Из уравнения (21d) следует, что возможные значения переданного импульса образуют **решетку** в пространстве импульсов. Эта решетка называется *обратной решеткой* кристалла.

Условиям (21d) и (21b) невозможно удовлетворить одновременно при любом значении первичного импульса. Уравнения (21a) и (21b) совместно образуют четыре уравнения для определения трех составляющих конечного импульса \mathbf{p}_0 . Их решение возможно лишь для соответствующим образом ориентированного кристалла.

22. Допустим теперь, что мы изучаем дифракцию на образце, который состоит из очень большого числа случайно ориентированных микрокристаллов. В нем всегда найдутся микрокристаллы, ориентированные так, чтобы удовлетворить уравнениям (21a) и (21b) (по крайней мере приблизительно). Для такого образца мы имеем два условия дифракционного максимума:

$$|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0| = |m_1 \mathbf{q}_1 + m_2 \mathbf{q}_2 + m_3 \mathbf{q}_3|, \quad (22a)$$

$$|\mathbf{p}_i| = |\mathbf{p}_0|, \quad (22b)$$

где m_1 , m_2 и m_3 — целые числа; \mathbf{q}_1 , \mathbf{q}_2 и \mathbf{q}_3 — векторы, рассмотренные в предыдущем пункте, соответствующие определенной ориентации решетки. Написанные уравнения имеют решение, и мы видим, что дифрагировавшие лучи распространяются по конусам, оси которых совпадают с направлением приходящей волны.

На рис. 14А показана схема дифракционного опыта, основанного на рассмотренной теории. При работе с рентгеновским излучением образец часто представляет собой тонкую пудру, состоящую из большого числа очень малых микрокристаллов. Дифракционная картина на рис. 14С получена именно с таким образцом. Дуги на снимке представляют собой пересечения конусов [определенных условиями (22a) и (22b)] с поверхностью фотопленки.

Легко понять, что если образец слишком мал (в том смысле, что он не содержит достаточно большого числа кристаллов), то распределение дифрагировавших лучей по поверхности конуса может оказаться весьма неравномерным. Вместо непрерывных дуг или окружностей мы увидим на фотографии отдельные точки. Это явление прекрасно иллюстрируется фотографиями, приведенными на рис. 22А и 22С, которые следует сравнить с рис. 14В; на них показана дифракция электронов с энергией 100 кэВ на кристаллах олова. В этом случае электронные волны полностью проникают в небольшие кристаллы. В качестве прибора для изучения дифракции был использован электронный микроскоп. Фотографии образцов, показанные на рис. 22В и 22D, были получены с тем же микроскопом.

Существует лишь одна постоянная Планка

23. Этот заголовок, вероятно, удивит читателя. Постоянная Планка единственна по определению. Что же в этом удивительного и что нетривиального хочет этим сказать автор?